含粘结剂的非均质凝聚炸药细观数值模拟

浣　石，陶为俊

（广州大学土木工程防护研究中心，广州　510006）

摘要：球壳塌缩热点形成机制被认为是非均质凝聚炸药在冲击波作用下的主要机制。研究采用LS-DYNA软件，对冲击作用下非均质凝聚炸药颗粒进行细观数值模拟。计算结果表明：冲击波在颗粒中2次反射后塑性应变迅速增大，靠近孔隙位置升高最快，外半径升高最慢；粘结剂有效地延长了初始阶段炸药的升温时间。

关键词：爆炸力学；炸药颗粒；细观；数值模拟；孔隙

中图分类号：O831　　**文献标识码**：A　　**文章编号**：1674-2850(2014)15-1519-06

Meso-level numerical simulation of heterogeneous condensed explosive with binder

HUAN Shi，TAO Weijun

(*Civil Engineering Protection Research Center*，*Guangzhou University*，*Guangzhou*　510006，*China*)

Abstract：Pore-collapse hot-spot mechanism is considered the main mechanism of shock initiation. Based on LS-DYNA program，the meso-level numerical simulation was carried out on the heterogeneous condensed explosives under impact. The numerical simulation showed that the effective plastic strain at the pore radii raised rapidly after two reflections，but the outer radii raised slowly. And the binder effectively extended the hot-spot formation time of the initial stage.

Key words：explosion mechanics；explosive particle；meso-level；numerical simulation；pore

0　引言

非均质凝聚炸药与均质凝聚炸药相比，具有更大的冲击波起爆感度，而且它们在冲击波起爆现象上有着定性的不同[1]。因此，研究均质凝聚炸药的传统方法、状态方程等，并不能很好地描述非均质凝聚炸药冲击起爆过程。

细观数值模拟从20世纪90年代开始发展，主要由美国核武器实验室和其他相关科研机构的研究人员对炸药在冲击波作用下的细观响应特征进行了一系列的细观数值模拟研究。CONLEY等[2]研究了各种不同参量比对热点形成以及演化过程的影响。MENIKOFF等[3~5]用CONLEY等[2]建立的计算程序模拟了奥克托金（HMX）颗粒炸药中的压实波，并研究了HMX炸药在冲击波作用下孔洞塌缩后热点温度分布与计算精度以及耗散机制的关系。REAUGH[6]用ALE-3D研究了HMX炸药在不同尺度下力学、热学和化学响应。BAER[7]用三维流体动力学欧拉程序（CTH）模拟了HMX颗粒炸药和以高聚物粘结剂为对象的炸药，研究了冲击波作用下多孔材料的细观压实、变形和反应过程。数值模拟结果清晰再现了由于冲击波的汇聚和塑性功等作用下以及晶体内空腔弹塑性塌缩等产生热点的细观物理图像。FU等[8]对在冲击波作用下的高聚物粘结剂炸药细观变形特征开展了初步的数值模拟，获得了炸药在细观尺度下动态响应的初步认识。并且用二维离散元和有限元相结合的方法模拟了高聚物粘结剂炸药的温度分布情况。

目前，非均质炸药冲击起爆过程是多种物理机制共同作用在炸药中，局部产生热点，形成反应的

基金项目：国家自然科学基金（10972060）；高等学校博士学科点专项科研基金（20104410110003）

作者简介：浣石（1954—），男，研究员，主要研究方向：爆炸、冲击动力学. E-mail：huanshi@gzhu.edu.cn

起源。KIM[9]建立了细观反应速率模型，该模型可以解释炸药颗粒度和孔隙度对炸药冲击起爆过程的影响。研究在前人工作的基础上，建立数值模型，将结果与理论进行对比，得到了粘结剂对炸药热点形成过程的影响。

1 含有粘结剂的球壳塌缩理论

典型的塑料粘结炸药细观结构模型如图 1 所示，该模型是 KIM[9]以经典的塑料粘结炸药为研究对象建立的球壳塌缩模型，球壳塌缩模型中主要考虑 3 个组成部分：A 为炸药颗粒；B 为粘结剂；C 为空穴。由于无法对图 1 所示炸药的不规则构造建立定量的数值模型，为便于数学描述，又不失热点的基本特征，将图 1 中虚线部分 D 作为研究对象，则图 1 的构造即可以简化成如图 2 所示的球壳塌缩模型，其中，模型的空穴半径为 r_0，粘结剂和炸药界面处的半径为 r_1，外半径 r_2 等于典型的炸药颗粒半径。该形式的结构模型考虑了炸药细观结构，因此称为细观模型。球壳外半径 c 处所受的冲击波压力为 p_0；空穴内的气体压力为 p_g；切向应力为 σ_θ；径向应力为 σ_r.

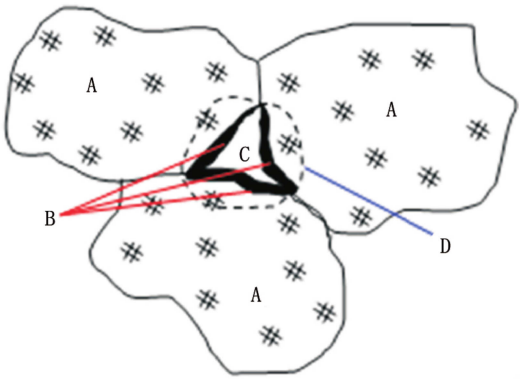


图 1 塑料粘结炸药的细观结构
Fig. 1 Meso-structure of plastic bonded explosives

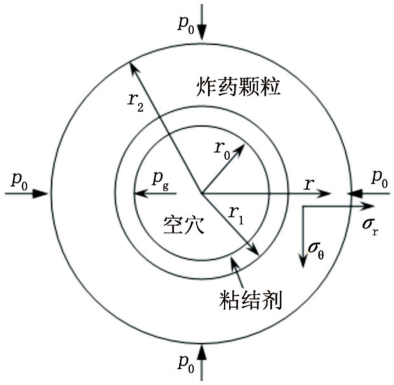


图 2 炸药塌缩模型
Fig. 2 Collapse model of explosives

以经典的塑料粘结炸药为研究对象的球壳塌缩模型又称为点火-燃烧细观反应模型。KIM[9]对其进行了详细的描述，即当这个细观反应模型结构受到冲击压缩时， 空穴和粘结剂附近的炸药会发生较大变形，温度上升，在小范围内形成高温区。高温区按 Arrhenius 定律发生反应，高温反应产物气体点燃周围炸药，出现向外传播的层流燃烧。当燃烧发展到一定程度时，高温高压气体渗透到炸药颗粒之间的缝隙中，又出现从炸药颗粒外表面向内传播的层流燃烧。KIM[9]的理论模型并未考虑粘结剂，文献[10]建立了双球壳模型，将炸药与粘结剂均看作弹黏塑性材料。假设粘结剂和炸药均不可压缩，忽略惯性效应，建立控制方程组并进行求解，根据理论求解得到由力学变形引起的温度变化率关系：

$$\left(\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}t}\right)_1=\left(\frac{3\gamma_e\gamma_b^2k_e}{2\rho c_p}\right)\frac{\left(p_0-p_g-2\sqrt{3}k_b\ln\dfrac{r_1}{c}-2\sqrt{3}k_e\ln\dfrac{r_2}{r_1}\right)^2}{\left[(r_2^{-3}-r_1^{-3})\gamma_bk_e+(r_1^{-3}-r_0^{-3})\gamma_ek_b\right]^2r^6}. \tag{1}$$

在炸药介质中，紧随力学变形引起的温度上升，同时存在另外 2 个过程，即热传导和化学反应。这2 个过程都依赖于炸药中温度的分布，同时又改变这个分布。因此，球壳模型内总的温度变化可用下列方程描述[8]：

$$\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}t}=\left(\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}t}\right)_1+\frac{1}{\rho c_p}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2k^*\frac{\partial T}{\partial r}\right)+\frac{Q}{\rho c_p}\frac{\mathrm{d}\Lambda}{\mathrm{d}t}, \tag{2}$$

$$T=T_0(r,x,t)+\int_0^t\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}t}(r,x,t)\mathrm{d}t, \tag{3}$$

根据 Arrhenius 反应律，对球壳胞元内温升进行计算，可得到球壳胞元内的局部反应速率：

$$\frac{\mathrm{d}\Lambda(r,x,t)}{\mathrm{d}t}=(1-\Lambda)Z\exp\left(-\frac{T^*}{T(r,x,t)}\right), \tag{4}$$

其中，γ_e，γ_b 为常数；k_e，k_b 分别为炸药和粘结剂的剪切屈服强度；$\Lambda(r,x,t)$ 为局部反应度；Z 是 Arrhenius 反应律中的频率因子；T^* 是活化温度；T_0 是初始温度；ρ 是密度；k^* 是热传导系数；c_p 是定压热容；Q 是反应热。在式（2）中，第一项是由力学变形引起的温度变化，第二项是热传导引起的温度变化，第三项是化学反应引起的温度变化。

2 数值模型

理论模型是验证数值模型正确性的一个重要方法，因此，建立上述含有粘结剂的细观炸药颗粒模型，模型中炸药的材料采用弹黏塑性本构关系，具体的材料参数来源于文献[9]，如表 1 所示。将粘结剂模型作为模型的一部分对模型进行模拟，为进一步建立任意的细观炸药模型奠定基础。

表 1 KIM 反应速率方程中用到的部分参数值[9]

Tab. 1 Some parameter values used in KIM reaction rate equation[9]

$Z/\mu s^{-1}$	T^*/K	$T_0/(m\cdot s^{-1})$	$c_p/(cm^2\cdot\mu s^{-1}\cdot K^{-1})$	k_e/100 GPa	$Q/(cm^2\cdot\mu s^{-2})$	$k^*/(cm\cdot\mu s^{-1}\cdot K^{-1})$	r_0/cm	r_1/cm	r_2/cm
5e13	26 500	300	1.4e-5	8e-5	5.439e-2	8.0e-14	0.003 0	0.010 0	0.003 9

模型内半径 $r_0=0.003\ 9$ cm，外半径 $r_1=0.010\ 0$ cm. 为简化计算，这里只作二维模拟，炸药颗粒径向网格数为 100 个，环向网格数为 400 个，采用四边形单元，炸药颗粒总单元数为 40 000 个。模型如图 3 所示。其外部作用均布压力为 2 GPa 和 3 GPa. 粘结剂模型的内径为 $r_0=0.003\ 0$ cm，外径为 $r_2=0.003\ 9$ cm. 径向网格数为 10 个，环向网格数为 400 个，采用四边形单元，粘结剂总单元数为 4 000 个，整个模型的单元数为 44 000 个，如图 3 所示。利用 LS-DYNA 软件中的结构热耦合分析模块。在该分析模块中，由于程序中热分析的计算时间步长与结构计算的时间步长无关，因此，这里需要定义 * CONTROL_THERMAL_TIMESTEP 关键字来使两者同步，并设置相应的参数值。其材料本构模型使用 * MAT_ELASTIC_VISCOPLASTIC_THERMAL 关键字，在 LS-DYNA 程序中，该材料本构模型的定义带有热膨胀系数特性[11]。

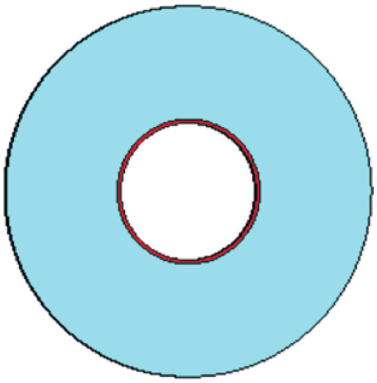


图 3 含有粘结剂的数值模型

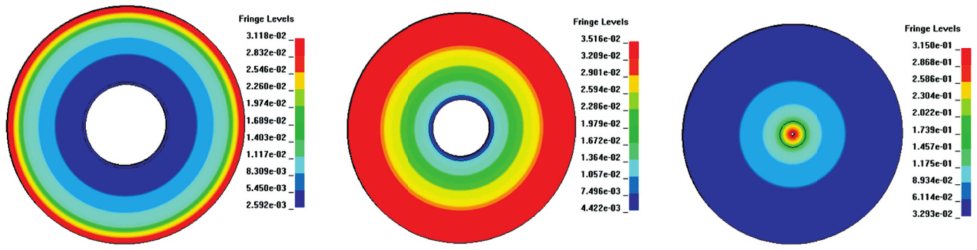
Fig. 3 Numerical model with binder

3 模拟结果与讨论

根据上述方法所建立的含有粘结剂的球壳塌缩数值模型，利用 LS-DYNA 软件对该有限元模型进行数值模拟，总的模型模拟计算时间设置为 0.040 μs，计算时间步长设置为 0.001 μs. 以下分别列出 0.010，0.020，0.030 μs 时模型的压强和温度等值图，分别如图 4 和图 5 所示。

图 4 为各个时刻的压强等值分布图，由图 4a～图 4c 对比可以看出：随着冲击波不断向空穴内部传播，压强不断增大，且同一位置处的压强随时间增加不断增大。空穴半径在冲击波作用下随时间逐渐减小，大约 0.030 μs 时，空穴基本闭合，而且其压强的分布在空穴附近最大，并沿径向其压强分布逐渐减小，在外半径的大片区域中，压强与初始加载压强大小相当。由图 4 可以明显看到：大部分区域的压强呈现相同的蓝色，即等于一个常值 3.23 GPa，略大于初始压强 3.00 GPa.

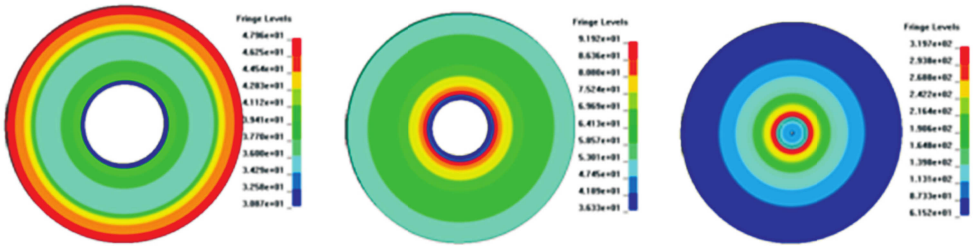
图 5 为各个时刻的温度等值分布图，由图 5a～图 5c 对比可以看出：由于在冲击波作用下，材料压缩产生塑性变形，从而使内部温度迅速上升。冲击波开始从塌缩模型外半径向内半径传播。在大约



a—0.010 μs　　b—0.020 μs　　c—0.030 μs

图 4　压强等值图

Fig. 4　Contours of pressure



a—0.010 μs　　b—0.020 μs　　c—0.030 μs

图 5　温度等值图

图 5　Contours of temperature

0.010 μs 时，冲击波传播到达炸药内径位置附近（如图 5a 所示），且此时变形最大，由此引起的温度上升最快。此时模型内部粘结剂层的温度增加大约 10 K. 在 0.020 μs 时，冲击波第二次反射回来，使该位置处变形进一步加大，温度也进一步升高。在 0.030 μs 时，空穴开始闭合，由于空穴闭合导致该位置处温度升高，且其温度主要集中在模型中心一小段范围内。对炸药而言，沿径向方向从内径到外径，其温度逐渐降低，在距离外径一大片区域，其温度基本保持一个恒定值。对内部粘结剂层来说，仍旧是内径温度高于外径温度，这说明粘结剂的温度主要由冲击波压缩作用产生，而不是来源于炸药的热传导能量。

图 6 为炸药颗粒模型中各个径向位置处温度分布时程曲线。由图 6 可以看出：冲击波进入炸药颗粒后，冲击波所到达的位置温度有一个小幅度的升高（由曲线可以看出大约为 20 K 左右），然后又开始下降，下降与上升的斜率相比较为缓慢，之后又出现了一定幅度的上升，紧接着又开始下降。整个过程中模型的温度变化并不是非常大，基本都在 50 K 以内。大约至 0.025 μs 后，空穴开始闭合，模型中温度迅速升高，但在其外径位置处温度升高仍然很慢，只有内径升温非常迅速。与未考虑粘结剂层的空穴塌缩模型相比，其温度上升的时间明显延长[11]。

图 7 为炸药颗粒模型中各个径向位置处压强分布时程曲线，由图 7 可以看出：冲击波进入炸药颗粒后，冲击波所到达的位置温度有一定幅度的升高，大约达到入射冲击波幅值 3.0 GPa. 整个时程曲线图中有 2 个明显的波峰，这是由波在其中来回反射 2 次造成，之后空穴闭合，则其内部压力迅速增加，内径压力增加的幅度最大，从内径到外径，其压力增加的幅度逐渐减小。通过分析，反射的次数与入射压力、模型尺寸、塌缩模型材料的弹塑性本构关系有关。压力越大，材料越容易进入塑性阶段。很少的反射次数温度即可以迅速上升。对于塌缩材料模型来说，其越容易达到塑性，则反射次数也会减小。同理，相反的话，其反射次数将增多。

图 8 为炸药颗粒模型有效塑性应变时程曲线。从有效塑性应变来看，其应变均逐渐增大，内径有效塑性应变的增加速度最快，外径的增加速度较为缓慢。从内径到外径，其增加速度逐渐降低。由曲线可以明显看出其降低速度慢慢减小，即在内径降低最快。

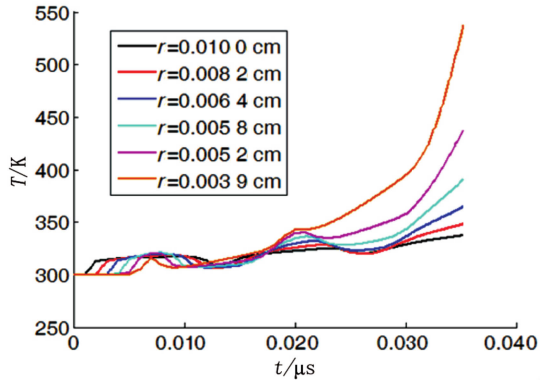


图 6 各个位置处温度时程曲线
Fig. 6 Temperature-time curves at each position

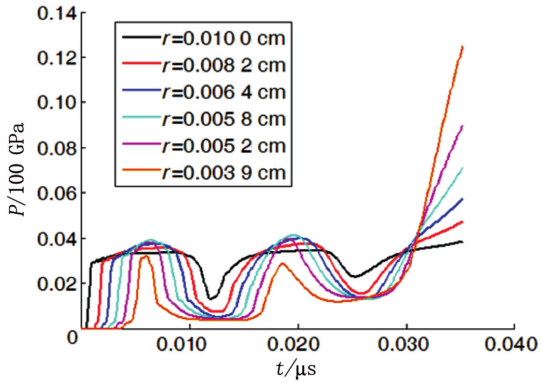


图 7 各个位置处压强时程曲线
Fig. 7 Pressure-time curves at each position

将未考虑粘结剂层的数值模拟结果与考虑粘结剂层的数值模拟结果进行对比，其对比结果如图 9 所示。由图 9 可知：两者模拟结果的图像外形一致，考虑粘结剂层模型在 0.030 μs 时温度与未考虑粘结剂层模型在 0.010 μs 时温度基本吻合，说明考虑粘结剂层后，模型温度上升有明显的延迟，延迟大约为 0.020 μs. 考虑粘结剂层模型在 0.035 μs 时的温度分布与未考虑粘结剂层模型在 0.020 μs 时温度分布基本吻合，延迟时间大约为 0.015 μs. 通过 2 个时间对比发现，考虑粘结剂层后模型温度上升比未考虑粘结剂层时有明显延迟，但考虑粘结剂层模型在开始升温后的速度反而又要快于未考虑粘结剂层的模型。

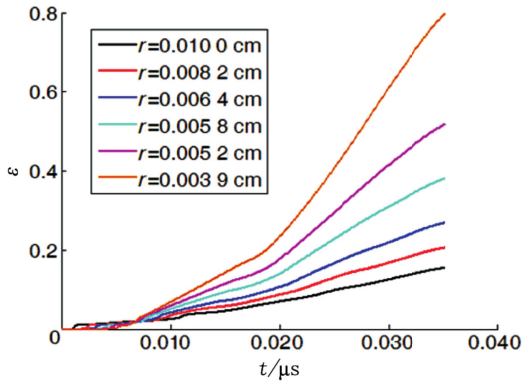


图 8 有效塑性应变时程曲线
Fig. 8 Effective plastic strain vs. time

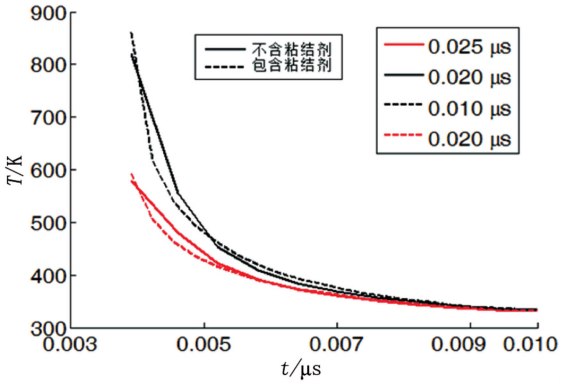


图 9 球壳内温度分布曲线
Fig. 9 Temperature profiles in pore

4 结论

在 KIM 弹黏塑性球壳塌缩模型的基础上，考虑粘结剂效应，建立含有粘结剂的球壳塌缩热点反应模型，通过所建立的模型，给出球壳模型在冲击波作用下的压强、温度、有效塑性应变等的变化关系。所建立的数值模型不仅可以反应颗粒度和孔隙度对炸药热点反应机制的影响，还可以比较好地描述粘结剂对炸药冲击起爆感度的影响，为进一步模拟任意的炸药颗粒模型以及冲击起爆提供依据。

[参考文献] (References)

[1] 章冠人，陈大年. 凝聚炸药起爆动力学[M]. 北京：国防工业出版社，1991.
ZHANG G R, CHEN D N. Condensed explosives detonation dynamics[M]. Beijing: National Defense Industry Press, 1991. (in Chinese)

[2] CONLEY P A, BENSON D J. Microstructural effects in shock initiation[C]//Proceedings of the 11th International

Detonation Symposium, United States., 1998: 768-780.

[3] MENIKOFF R, KOBER E. Compaction waves in granular HMX[C]//FURNISH M D, CHHABIDAS L C, HIXSON R S. AIP Conference Proceedings of Shock Compression of Condensed Matter 1999. New York: AIP Publishing, 1999: 1241-1248.

[4] MENIKOFF R. Granular explosives and initiation sensitivity[R]. Los Alamos: Los Alamos National Laboratory, 1999.

[5] MENIKOFF R. Pore collapse and hot spots in HMX[C]//FURNISH M D, CHHABIDAS L C, HIXSON R S. Proceedings of the Conference of the American Physical Society Topical Group on Shock Compression of Condensed Matter. New York: AIP Publishing, 2004, 706: 393-396.

[6] REAUGH J E. Multi-scale computer simulations to study the reaction zone of solid explosives[R]. Norfolk, VA: Lawrence Livermore National Laboratory, 2006.

[7] BAER M R. Modeling heterogeneous energetic materials at the mesoscale[J]. Themechanical Acta, 2002, 384(1-2): 315-367.

[8] FU H, LIU C L, WANG W Q, et al. A combined discrete/finite element method applied to energetic materials at the meso-scale simulation under shock loading[C]//Presedings of the 13th International Detonation Symposium. United States: 2006: 874-880.

[9] KIM K. Development of a model of reaction rates in shocked composite explosives[C]//Proceedings of the 9th International Detonation Symposium. United States: 1989: 593-603.

[10] 温丽晶，段卓平，张震宇，等. 弹粘塑性双球壳塌缩热点反应模型[J]. 高压物理学报，2011，25 (6)：493-500.
WEN L J, DUAN Z P, ZHANG Z Y, et al. An elastic/viscoplastic pore collapse model of double-layered hollow sphere for hot-spot ignition in shocked explosives[J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2011, 25(6): 493-500. (in Chinese)

[11] 陶为俊，浣石，蒋国平. 非均质凝聚炸药颗粒细观数值模拟研究[J]. 广州大学学报：自然科学版，2013，12 (4)：91-94.
TAO W J, HUAN S, JIANG G P. Meso-level numerical simulation study on heterogeneous condensed explosive particles[J]. Journal of Guangzhou University: Natural Science Edition, 2013, 12(4): 91-94. (in Chinese)