DOI: 10.11883/1001-1455(2015)06-0807-05

基于微裂纹界面摩擦生热的点火模型*

楼建锋,张延耿,洪　滔,周婷婷,郭少冬
(北京应用物理与计算数学研究所,北京 100094)

摘要:开展了基于微裂纹界面摩擦生热的细观点火模型研究,采用有限元方法对包含化学反应放热和摩擦生热的热传递方程进行了离散求解,计算模型中考虑了炸药颗粒熔化对升温过程的影响。着重分析了点火模型中主要参数(热点尺度、应变率和界面压力)对炸药点火的影响规律。数值研究表明,随着热点尺度的增大,热点的温度上升越快,越容易发生点火;应变率越大或者界面压力越高,热量积累越快,炸药越容易点火。

关键词:爆炸力学;点火模型;有限元方法;微裂纹;摩擦;热点尺度;应变率
中图分类号:O389　　**国标学科代码**:13035　　**文献标志码**:A

开展炸药非冲击点火机制及预测方法的研究,建立复合炸药细观尺度上的点火模型,对弹药安全评估和指导弹药设计都有重要意义。

能激发炸药反应、燃烧或者爆炸的外界能量形式很多,主要有热、机械、冲击波、电和激光等[1]。在这些形式中,热引燃是最基本的形式,其他各种形式都以此为基础。炸药在运输和使用过程中,最普遍的一种刺激形式是摩擦,由摩擦产生的热不断积累常常会导致灾难性的事故。

早期对炸药摩擦点火机制的研究工作主要集中在炸药与约束物之间的摩擦生热及其温升模型等方面。典型的工作主要有,F. P. Bowden 等[2-3]共同提出了著名的"热点"理论,推导出了炸药与非金属摩擦形成热点的温升公式。前苏联 A. P. Amosov 等[4-5]基于热点火理论和热传导方程,建立了半无限空间金属与炸药以及炸药之间的摩擦模型,该模型考虑了炸药化学反应释放热量。D. A. Wiegand 等[6-8]研究了塑性黏结炸药内部裂纹之间的摩擦,认为炸药裂纹之间的摩擦生热可能引起炸药点火,推导出裂纹间摩擦因数的计算式。陈文[9]给出了侵彻过程中弹体内壁与装药之间的摩擦温升计算式,但没有考虑侵彻过程中装药弹塑性变形以及塑性功转热引起的温升对装药局部温升的贡献。V. Boyle 等[10]、R. B. Frey[11]基于热传导方程,采用线黏塑性材料本构方程和阿累尼乌斯(Arrhenius)化学动力学方程,建立了发生在剪切带内的或者滑移面处的准稳态模型,用于描述炸药剪切温升和点火。

近些年,随着炸药细观损伤模型的发展,点火模型的研究也逐渐深入。目前武器中常用的 PBX 炸药,是以粉状高能炸药为主体,添加黏结剂、增塑剂及钝感剂等辅助材料制成的混合炸药。在压制成形过程中或外界载荷作用下,颗粒会发生破碎,产生大量微裂纹,炸药内微裂纹界面的摩擦会引起局部温升产生热点。由于热点尺寸一般为 0.1～10 μm,延续时间为 0.01～1 ms,使得热点的研究难度很大,通常需要建立合理的温升点火模型,采用数值模拟方法进行研究,然后与实验进行对比来揭示点火机理。J. K. Dienes 等[12-14]在微裂纹摩擦方面进行了理论研究,认为以非常低的速度撞击炸药,炸药内部闭合裂纹的界面摩擦可能占据主导机制而形成热点,逐步完善了统计裂纹力学模型(SCRAM),其中包含了描述微裂纹演化扩展的细观损伤本构模型和带有化学反应的点火模型,能够模拟冲击载荷作用下 PBX 炸药的动态损伤力学响应行为和模拟点火过程。J. G. Bennett 等[15]在 SCRAM 模型基础上提出了黏弹性统计裂纹力学模型(visco-SCRAM)和细观热点模型,建立了一套比较完整的理论框架。

* **收稿日期**:2014-04-22;**修回日期**:2014-07-24
基金项目:国家自然科学基金项目(11302031,11372053,11402031);
中国工程物理研究院科学技术发展基金项目(2012A0101004,2014B0101014,2014A0201008)
第一作者:楼建锋(1980—　),男,博士,副研究员;**通讯作者**:张延耿,zhang_yangeng@iapcm.ac.cn。

本文中在 J. K. Dienes 和 J. G. Bennett 等的工作基础上，进一步开展基于微裂纹界面摩擦生热的点火模型研究，分析点火模型中主要参数对炸药点火的影响规律，为揭示炸药微裂纹损伤引起的热点点火机理提供参考。

1 点火模型

在低速撞击情况下，炸药内闭合微裂纹界面间的摩擦生热效应是形成“热点”的重要因素。图 1 显示了在外载荷作用下炸药晶体颗粒内产生的微裂纹以及裂纹面摩擦热点模型示意图，一个任意取向的微裂纹上同时承受压力和剪应力作用。假设微裂纹总是垂直于每个单元中最大主应变率的方向，而最大主应变率和方向可以由应变率张量确定。当裂纹面上的最大剪应力 $\tau_{\max}$ 超过 $\mu_s p$（μ_s 为静摩擦因数，p 为压力。如果 p 为正，裂纹张开，不产生热量），裂纹产生滑动，产生热量，速率为 $\mu p\ \partial v_x/\partial y$（$\mu$ 为动摩擦因数，y 表示与裂纹面的距离，v_x 为平行于裂纹面的粒子速度）。

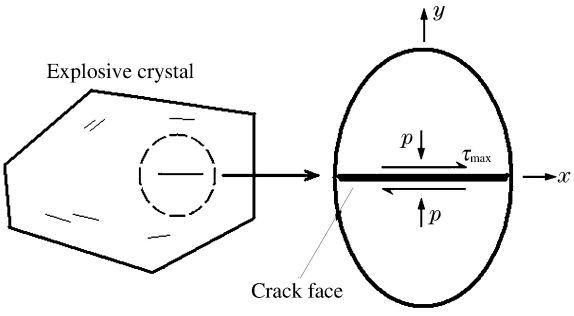


图 1 微裂纹面热点模型示意图

Fig. 1 Configuration of hot-spot model showing friction generated heat

对于炸药材料而言，温度上升会引起炸药化学反应放热，通常以阿累尼乌斯（Arrhenius）方程描述炸药化学反应放热。炸药在单元时间内因发生化学反应而放出的热量为 $\rho\tilde{Q}Z\mathrm{e}^{-\frac{E}{RT}}$，其中 ρ 为炸药密度，$\tilde{Q}$ 是单位质量炸药反应放出的热量，Z 是指前因子，E 是炸药的活化能，R 是气体常数，T 为炸药温度。

点火模型由 2 部分组成。假设热点空间尺寸为 $2l_f$，那么裂纹面一侧的厚度为 l_f，在热点区域内，将微裂纹界面摩擦产生的热量与炸药颗粒化学反应的生成热叠加作为热传递方程的热源项，建立新的热传递能量平衡方程；而在热点之外，热源项只有炸药化学反应放热。方程如下：

$$\frac{\partial}{\partial y}\left(k_f\frac{\partial T}{\partial y}\right)+\rho_f\tilde{Q}Z\mathrm{e}^{-\frac{E}{RT}}+\mu p\frac{\partial v_x}{\partial y}=\rho_f c_f\frac{\partial T}{\partial t}\qquad 0\leqslant y\leqslant l_f \tag{1}$$

$$\frac{\partial}{\partial y}\left(k_s\frac{\partial T}{\partial y}\right)+\rho_s\tilde{Q}Z\mathrm{e}^{-\frac{E}{RT}}=\rho_s c_s\frac{\partial T}{\partial t}\qquad l_f<y \tag{2}$$

式中：k_f、k_s 和 c_f、c_s 分别表示材料的热传导系数和比热容，下标 f 和 s 分别表示液相和固相。由于 $\partial v_x/\partial y$ 实际上描述的就是偏应变率，在分析模型参数影响的计算中，通常直接用应变率代替。压力和应变率等物理量通过宏观有限元计算结果获取。此外，求解过程中考虑炸药颗粒熔化对升温过程的影响。

采用有限元方法对含复杂源项的热传递方程进行离散，求解上述炸药热点点火模型。局部坐标系下，一维热传递单元如图 2 所示，温度变化可以表示成：

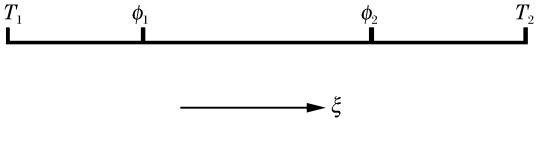


图 2 一维热传递单元

Fig. 2 The one dimensional heat transfer element

$$T=H_1T_1+H_2\phi_1+H_3\phi_2+H_4T_2 \tag{3}$$

式中：T_1 和 T_2 是节点温度，ϕ_1 和 ϕ_2 是中间插值点（$\xi=\pm1/2$）的温度，H_1、H_2、H_3 和 H_4 是插值形函数，这里假设为三次多项式的形式：

$$\begin{cases}H_1=-\dfrac{1}{6}+\dfrac{1}{6}\xi+\dfrac{2}{3}\xi^2-\dfrac{2}{3}\xi^3, & H_2=\dfrac{2}{3}-\dfrac{4}{3}\xi-\dfrac{2}{3}\xi^2+\dfrac{4}{3}\xi^3,\\ H_3=\dfrac{2}{3}+\dfrac{4}{3}\xi-\dfrac{2}{3}\xi^2-\dfrac{4}{3}\xi^3, & H_4=-\dfrac{1}{6}-\dfrac{1}{6}\xi+\dfrac{2}{3}\xi^2+\dfrac{2}{3}\xi^3\end{cases} \tag{4}$$

几何坐标采用线性形函数描述，即

$$y=N_1Y_1+N_2Y_2 \tag{5}$$

式中：Y_1 和 Y_2 是节点坐标，形函数分别是 $N_1=(1-\xi)/2$ 和 $N_2=(1+\xi)/2$。

方程(1)～(2)可以写成统一的形式：

$$\frac{\partial}{\partial y}\left(k\frac{\partial T}{\partial y}\right)+\dot{Q}=\rho c\frac{\partial T}{\partial t} \tag{6}$$

式中：$\dot{Q}$ 是单位体积内产生的热量(摩擦生热或者化学反应热)。

将公式(3)代入方程(6)，利用加权残数法可以得到有限元模型，方程组写成矩阵形式：

$$\rho c\left[\int_y H_J H_I \mathrm{d}y\right]\begin{pmatrix}\dot{T}_1\\ \dot{\phi}_1\\ \dot{\phi}_2\\ \dot{T}_2\end{pmatrix}-\left[\int_y H_J\frac{\partial}{\partial y}k\frac{\partial H_I}{\partial y}\mathrm{d}y\right]\begin{pmatrix}T_1\\ \phi_1\\ \phi_2\\ T_2\end{pmatrix}-\int_y H_J N_K\dot{Q}_K\mathrm{d}y=0 \tag{7}$$

式中：$I,J=1,2,3,4$；$K=1,2$。编写 FORTRAN 程序，对上式进行求解。

2 点火模型中主要参数的影响分析

通过上述点火模型来探讨引起炸药点火反应的物理机制和规律，首先需要分析模型中主要参数的影响，例如，热点特征尺度、应变率、压力等。本文中针对 PBX-9501 炸药对上述参数进行讨论，炸药密度 1.81 g/cm^3，热传导系数 0.5 W/(m·K)，比热容 1.5 kJ/(kg·K)，初始温度 300 K，熔点温度 519 K，动摩擦因数 0.25，反应热 5.5 MJ/kg，指前因子 5.0×10^{19} s^{-1}，活化能 220 kJ/mol；炸药熔化后，热传导系数变为 0.4 W/(m·K)，比热容变为 1.7 kJ/(kg·K)。

2.1 热点尺度对点火时间的影响

热点特征尺度 $2l_f$ 通常需由实验测定，在热点点火模型中，用热点尺度划分界面摩擦的作用范围。这里假设裂纹界面上压力为 1 000 MPa，应变率为 1.47×10^5 s^{-1}，考察热点尺度为 3、4、5、6 μm的情况，计算炸药热点中心的温升变化过程，如图 3 所示。可以看到，热点尺度从 3 μm 增大到6 μm时，点火时间从 94 μs 缩短到 72 μs，即随着热点尺度的增大，热点中心的温度上升越快，越容易发生点火。从任意一条热点中心的温升曲线看，由于微裂纹界面的摩擦生热引起炸药发生热化学反应，两者共同作用使热点的温度不断上升，达到熔点温度后发生固相到液相的相变，随着时间推移，摩擦生热和反应放热继续增加，当这些热量超过炸药熔化吸收的潜热后，热点温度将继续增加，直至超过点火温度，发生点火。

根据 A. Linan 等的理论[16]，在恒定的能量释放率 $\dot{q}$ 的作用下，反应材料点火的临界温度为

$$T_c=\frac{E}{R}\frac{1}{\ln(\rho\tilde{Q}ZkT_i/\dot{q}^2)} \tag{8}$$

式中：T_i是初始温度。在 $\dot{q}=130$ MJ/(m^2·s)，$T_i=300$ K 的条件下，HMX 炸药的点火温度约755 K。

针对热点尺度为 6 μm 的情况，考察了热点区域内不同时刻的温度分布，如图 4 所示。由于热点中心微裂纹面上的摩擦生热，微裂纹界面上的温度比远处的高，在热传导作用下热量逐渐向周围扩散。热点区域温度升高加剧了炸药反应放热，随着时间的推移，由于摩擦生热和化学反应放热远远超过了热量的传导扩散，使得微裂纹面上的热量逐渐累积，热点中心温度越来越高，逐渐超过点火温度，发生点火。

2.2 应变率对点火时间的影响

点火模型中，微裂纹界面粒子滑移速度及其在界面法向上的梯度都将对摩擦生热产生影响，在计算分析中通常用应变率代替。为了考察应变率对点火时间的影响，固定模型中其他参数，界面压力取 1 000 MPa，计算了应变率分别为 5.0×10^4、6.5×10^4、7.5×10^4、1.0×10^5、1.5×10^5、2.0×10^5、2.5×10^5、3.0×10^5 s^{-1}几种情况的点火时间，如图 5 所示。可以看到，随着应变率的增加，点火时间逐渐减小，对应于应变率是 5.0×10^4、7.5×10^4、2.5×10^5 s^{-1}的点火时间分别是 3 163、401、33 μs，即应变率越大，相同时间内热量积累越多，越容易发生点火。

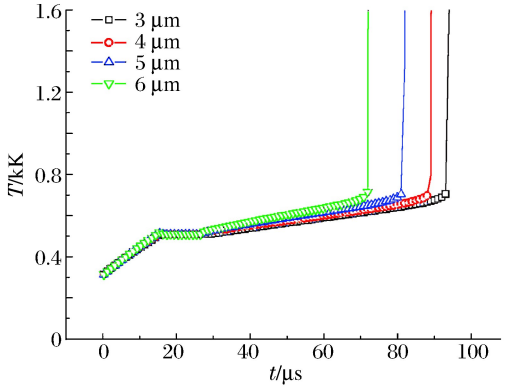


图 3 不同热点尺度情况下热点中心温度随时间的变化

Fig. 3 Temperature at center of hot-spot vs. time for the cases of different hot-spot sizes

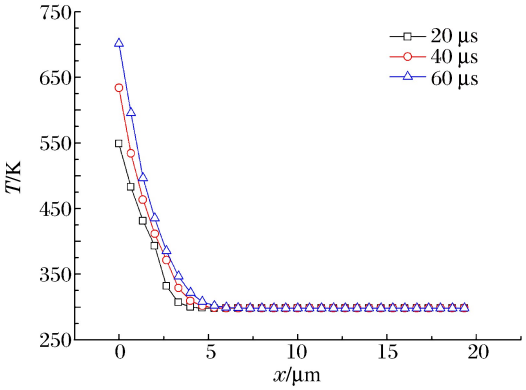


图 4 不同时刻距离裂纹面不同位置的温度分布

Fig. 4 Temperature distribution vs. distance from crack face at various times

2.3 界面压力对点火时间的影响

点火模型的摩擦生热项中，界面压力也是一个重要因素。为了考察压力对点火时间的影响，同样固定模型中其他参数，应变率分别取为 1.0×10^5、1.5×10^5、2.0×10^5 s^{-1}，计算了压力分别是 600、800、1 000、1 200、1 400 MPa 几种情况的点火时间，如图 6 所示。可以看到，在相同的应变率下，随着界面压力的增加，点火时间逐渐减小。例如，应变率是 1.0×10^5 s^{-1} 时，对应于压力 600、800、1 200 MPa 的点火时间分别是 1 083、317、107 μs，也就是说，界面压力越高，热量积累也越快，炸药越容易发生点火。

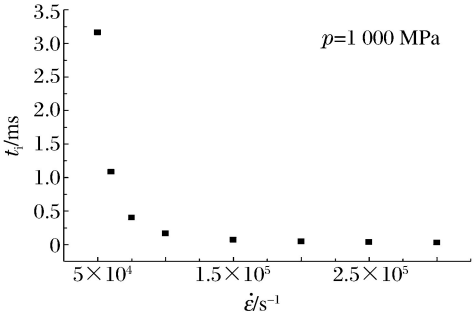


图 5 不同应变率下点火时间的比较

Fig. 5 Effect of strain rate on ignition time for a constant pressure

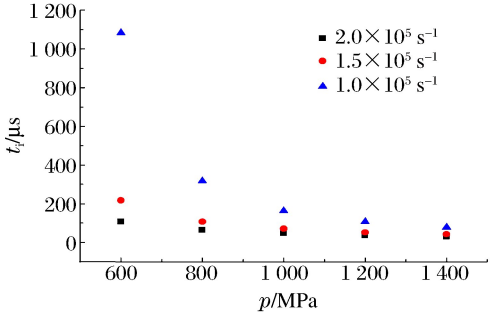


图 6 不同界面压力下点火时间的比较

Fig. 6 Effect of pressure on ignition time for a constant strain rate

3 小 结

针对低速撞击条件下，炸药内部微裂纹界面摩擦生热引起的局部温升问题，开展了细观点火模型研究，建立了包含化学反应放热和摩擦生热的热传递方程，采用有限元方法进行了离散求解，获得了热点内部的温度分布与升温规律。为进一步探讨炸药点火反应的物理机制和规律，对细观模型中影响炸药点火的主要因素进行了系统的分析。数值研究表明，随着热点尺度的增大，热点的温度上升越快，越容易发生点火；应变率越大或者界面压力越高，热量积累也越快，炸药也越容易点火。这些工作可以为分析炸药微裂纹损伤引起的热点点火机理提供参考。

参考文献：

[1] Asay Blaine W. Non-shock initiation of explosives[M]. Heidelberg: Springer-Verlag, 2010:15-18.

[2] Bowden F P, Yoffe A D. Initiation and growth of explosives in liquids and solids[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1952.

[3] Bowden F P, Yoffe A D. Hot spots on rubbing surfaces and the detonation of explosives by friction[J]. Proceedings of the Royal Society of London, Series A: Mathematical & Physical Sciences, 1947,188(10):329-349.
[4] Amosov A P, Bostandzhiyan S A, Kozlov V S. Ignition of solid explosives by the heat of dry friction[J]. Fizika Goreniya i Vzryva, 1972,8(3):362-368.
[5] Amosov A P, Bostandzhiyan S A, Kozlov V S, et al. Mechanism of heating up and ignition of solid explosives due to external friction as a result of mechanical stimulations[J]. Fizika Goreniya i Vzryva, 1976,12(5):699-703.
[6] Wiegand D A, Redingius B, Ellis K, et al. Pressure and friction dependent mechanical strength—cracks and plastic flow[J]. International Journal of Solids and Structures, 2011,48(11/12):1617-1629.
[7] Wiegand D A, Redingius B, Ellis K, et al. Evidence for fricgtion between crack surfaces during deformation of dcomposite plastic bonded explosives[C]// Elert M L, Buttle W T, Furnish M D, et al. Proceedings of Shock Compression of Condensed Matter—2009. Nashville, Tennessee, 2009:349-352.
[8] Wiegand D A, Redingius B. The role of friction in the mechanical failure properties of a polymer particulate composite[C]// APS March Meeting. New Orleans, 2008.
[9] 陈文.高速侵彻条件下战斗部装药安全性研究[D].北京:北京理工大学,2009.
[10] Boyle V, Frey R, Blake O. Combined pressure shear ignition of explosive[C]// Lee E L, Short J M. Proceedings of the 9th International Detonation Symposium. Oregon, Portland, 1989:3-17.
[11] Frey R B. The initiation of explosive charges by rapid shear[C]// Proceedings of the 7th International Detonation Symposium. Annapolis, Maryland, 1981:36-42.
[12] Dienes J K. A unified theory of flow, hot spots, and fragmentation with an application to explosive sensitivity [M]. New York: Springer, 1996:366-398.
[13] Dienes J K, Kershner J D. Multiple-shock initiation via statistical crack mechanics[C]// Short J M, Kennedy J E. Proceeding of the 11th International Detonation Symposium. Snowmass, Colorado, 1998:717-724.
[14] Dienes J K, Kershner J D. Crack dynamics and explosive burn via generalized coordinates[J]. Journal of Computer—Aided Materials Design, 2000,7(3):217-237.
[15] Bennett J G, Haberman K S, Johnson J N, et al. A constitutive model for the non-shock ignition and mechanical response of high explosives[J]. Journal of Mechanical Physical Solids, 1998,46(12):2303-2322.
[16] Linan A, Williams F A. Theory of ignition of a reactive solid by constant energy flux[J]. Combustion Science and Technology, 1971,3(2):91-98.

Study on the model of hot-spot ignition based on friction generated heat on the microcrack face

Lou Jian-feng, Zhang Yan-geng, Hong Tao, Zhou Ting-ting, Guo Shao-dong
(*Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing* 100094, *China*)

Abstract: A hot-spot ignition model based on friction generated heat on microcrack face was established. In this model, the heat conduction equation including chemical reaction and friction was solved by implicit finite element method. Furthermore, the latent heat resulting from particle melting was also taken into account in this model. The effects of such key parameters hot-spot size, strain rate, and interface pressure on explosive ignition were detected and analyzed in detail. It is found that the temperature of the hot-spot rises more quickly and the response occurs earlier in time with the increase of the hot-spot size. The accumulation of heat is faster and the explosive is more likely to be ignited where the strain rate is larger or the pressure is higher.

Key words: mechanics of explosion; ignition model; FEM; microcrack; friction; hot-spot size; strain rate

(责任编辑　曾月蓉)