DOI: 10.11883/1001-1455(2016)06-0745-07

高能炸药摩擦感度的数值模拟*

林文洲,洪 滔
(北京应用物理与计算数学研究所,北京 100094)

摘要: 为了研究炸药摩擦安全性,利用熔化摩擦模型对几种高能炸药的摩擦感度进行了数值模拟,结果符合实验,并根据热分解反应速率分析了感度规律。由于炸药熔点一般低于点火温度,所以基于一个考虑熔化现象的炸药摩擦模型,在炸药感度实验条件下进行了一维数值模拟,给出了炸药熔化结果和摩擦点火的时间:4 种摩擦感度较弱的炸药包括 DATB、NQ、TATB 和 TNT 的点火时间的顺序即感度顺序符合实验结果,说明摩擦点火模型适应性。进一步结合炸药热分解反应速率的大小顺序,数值模拟证明,在一定摩擦强度下,点火顺序会发生交换,说明摩擦感度实验不能完全说明炸药摩擦感度强弱顺序。

关键词: 爆炸力学;摩擦感度;摩擦点火模型;高能炸药;熔化;热分解反应速率
中图分类号: O381 **国标学科代码**: 1303510 **文献标志码**: A

近年来,炸药安全性受到了学者的重视。在多起意外事故中,炸药在运输途中跌落、钻孔操作时及与地面滑动等情况下发生爆炸[1],虽然尚未确定事故中准确机制,但摩擦很可能是最主要的点火机制。目前炸药摩擦一般是指狭义上的摩擦[2],在炸药摩擦过程中,伴随着众多的复杂现象,如塑性变形、相变、带电现象、化学反应、熔化和微动损伤等,而研究主要集中在热力学方面,即摩擦热带来的效应:摩擦将热量限制在移动的摩擦表面之间或在两表面之间的存在杂质的位置。当摩擦刺激达到足够的强度,温度将升到一定高度,这个温度足以使放热反应发生并超过放热过程,那么点火将可能发生,如存在约束条件也可能进一步转变成爆轰,对炸药安全性带来威胁。

为发展炸药摩擦安全性的评估方法,对炸药摩擦点火开展了许多相关研究。J. G. Glenn 等[3]将炸药放置在圆柱管内,用活塞装置推动炸药使之在钢管内滑动,产生摩擦,称为 IPFT(intense pressure and friction test)实验。在相同条件下,改变钢管内表面的光洁度,炸药发生了不同程度的反应。IPFT 实验提供了摩擦点火的可重复实验。他们还建立了炸药与钢管摩擦放热的数学模型,并应用 SPH 方法模拟了动摩擦过程。A. Birk 等[4]将 COMP-B 炸药约束在不同厚度的钢管中,活塞以不同的速率对它进行加载,使它发生反应。如果载荷速率较小,炸药点火经常在压力衰减至 100 MPa 开始,即在点火发生之前实际上只有很小的载荷,他们认为这表明是炸药与管壁的摩擦导致点火,实验显示摩擦效应是炸药点火的重要机制。在摩擦的数值模拟中,J. K. Dienes[5]假设摩擦面的温度达到熔点后就不再升高。D. Hoffman 等[6]针对 LX-04 炸药-钢界面开展了摩擦系数测量,实验结果表明,由于摩擦热的生成,炸药表面会出现塑化和层间融化现象,形成摩擦弱化现象,即炸药-金属界面的摩擦系数随温度上升有减小现象,这个实验结果对安全性的数值模拟有效性有重要意义。Y. Q. Wu 等[7]对 HMX、RDX 和 PETN 进行了摩擦实验和模拟,测量了各种晶体间摩擦的摩擦系数,给出升温公式,而且在实验图像中也发现了局部熔化区域。

我们考虑炸药的熔化效应,建立了一个炸药摩擦模型,对敏感炸药的摩擦感度进行了模拟研究[8-9]。本文中,对几种感度较弱炸药的摩擦感度进行数值模拟,以证明此模型的合理性和较广的适用性,并结合炸药活化能分析炸药在不同摩擦条件下感度的变化规律,以期能够为炸药摩擦安全性研究提供参考。

* **收稿日期**: 2015-02-10; **修回日期**: 2015-07-24
基金项目: 国家自然科学基金项目(11372051);中国工程物理研究院科学技术发展基金项目(2012A0101004);
中国工程物理研究院院长基金项目(2014-1-042)
第一作者: 林文洲(1980—),男,博士,副研究员,a3238wen@hotmail.com。

1 摩擦点火模型

由于实验中观察到炸药的熔化现象，且许多炸药是低熔点（如 TNT、DATB 和 NQ 等炸药）[10]，一般低于炸药的点火温度，所以建立的摩擦数学模型有必要加入熔化效应。参照文献[3]的炸药摩擦模型，建立了一维炸药摩擦点火模型[8-9]：摩擦功转换成热传入两个摩擦界面，保证摩擦面上温度相同，炸药点火应用经典的热爆炸理论[11]，引入 Arrhenius 反应速率计算炸药化学反应热。忽略摩擦作用引起的炸药整体塑性变形导致炸药的升温。具体数学描述如下。

如图 1，炸药与某种材料介质之间有速度差，发生摩擦，炸药热反应扩散方程、材料热传导方程、在摩擦面上的条件分别为：

$$\frac{\partial T_1}{\partial t}=a_1\frac{\partial^2 T_1}{\partial x^2}+\frac{Q}{c_1}Z\mathrm{e}^{-\frac{E_a}{RT}} \tag{1}$$

$$\frac{\partial T_2}{\partial t}=a_2\frac{\partial^2 T_2}{\partial x^2} \tag{2}$$

$$x=L,\qquad q_1+q_2=q,\qquad T_1=T_2 \tag{3}$$

式中：T 为温度，ρ 为密度，c 为比热，Q 为单位质量炸药的化学反应产生的热，$a=k/\rho c$。Z 为指前因子，E_a 为活化能。q 为在摩擦界面上产生的总热量，q_1 和 q_2 分别为传入炸药和钢的热量。摩擦形成的总热量 $q=\mu pv$，其中 μ 为动摩擦系数，p 为炸药中的压力，v 为钢与炸药之间的相对速度。

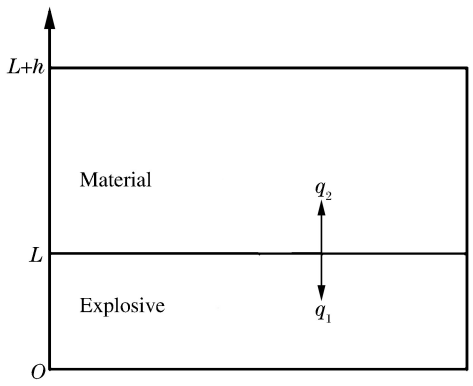

图 1 炸药与材料摩擦示意图

Fig. 1 Illustration of friction between explosive and material

在摩擦模型中，加入熔化效应：在摩擦的开始阶段即未发生熔化阶段，摩擦力按照库伦摩擦定律计算。当摩擦持续造成炸药发生熔化时，根据热导理论，计算熔化界面移动，变为液体的炸药材质参数发生改变，但热导中不考虑液态炸药的对流效应。类似润滑效应，炸药摩擦系数会随着摩擦界面的温度升高而减小，可以认为摩擦系数随温度线性变化：

$$\mu=\begin{cases}(\mu_0-\mu_\mathrm{m})\dfrac{T_\mathrm{m}-T}{T_\mathrm{m}-T_0}+\mu_\mathrm{m} & T_\mathrm{s}\leqslant T_\mathrm{m}\\ \mu_\mathrm{m} & T_\mathrm{s}>T_\mathrm{m}\end{cases} \tag{4}$$

式中：μ_0 为初始温度下的摩擦系数，T_m 为炸药的熔点。摩擦感度实验中，对炸药施加了一定的压力，金属与炸药为密实接触，因此 $\mu_0=1$。μ_m 为炸药发生熔化后的摩擦系数。炸药熔化后，炸药中出现液体与固体的分界面。随着摩擦界面温度的升高，液体与固体的分界面向炸药内部移动。忽略由于相变引起的炸药密度的变化，相变的分界面方程为[12]：

$$k_\mathrm{l}\frac{\partial T_\mathrm{l}}{\partial x}-k_\mathrm{s}\frac{\partial T_\mathrm{s}}{\partial x}=\rho L\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t} \tag{5}$$

式中：下标 l 表示液体，s 表示固体。S 是相变分界面，L 是熔化潜热。需要补充说明的是，当炸药熔化后，一部分是液态，可认为两个摩擦面的温度不再相同。至此，建立了考虑熔化效应的一维炸药摩擦点火模型。

此模型还可以描述多种材料之间的炸药摩擦点火。如果摩擦时炸药外层加入其他材料（如黏合剂等），再与摩擦材料发生摩擦，如果中间的材料具有低熔点，同样也需要考虑测此材料的熔化效应。编制了一维炸药摩擦点火热传导程序，采用模块化设计，能够计算多种物质的热传导和熔化问题，通过了正确性验证，可以应用于多介质的炸药摩擦感度实验的数值模拟研究。

2　数值模拟

2.1　数值模拟结果与实验对比

为了比较炸药感度强弱顺序，建立了炸药摩擦感度实验来测量炸药感度。炸药摩擦感度实验[10]的通常做法是，将炸药放在实验装置的两个滑柱中，用摆锤击打上滑柱，炸药与金属滑柱发生摩擦，观察是否发生爆炸（含燃烧，分解），以发生爆炸的概率表示摩擦感度。实验测量的结果，见表 1。

表 1　单质炸药的摩擦感度[10]

Table 1　Friction sensitivity of simple explosive

炸药	η/%	炸药	η/%
HMX	92～100	TNT	4～6
PETN	92，100	TATB	0～4
RDX	76±8	DATB	0～4
Tetryl	12	NQ	0

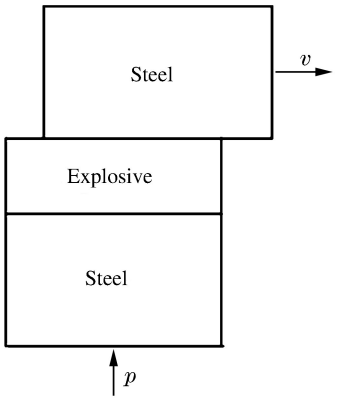

图 2　炸药摩擦感度实验简图

Fig. 2　Illustration of explosive friction sensitivity experiment

图 2 为简化的炸药摩擦感度实验图。由于炸药摩擦点火过程很短且建立的是一维模型，可以忽略炸药变形和滑动过程炸药自身制备形式对摩擦的影响效应，认为炸药处在两个金属块中间。上边的金属块有相对速度 3.8 m/s 和位移，并施加了一定的压力 390 MPa（由于实验中滑柱直径是炸药直径的 10 倍，所以炸药受到压力为表压的 100 倍）。由于实验中炸药与金属之间的位移远小于滑柱的直径，可以忽略侧向边界的热传导效应。由于炸药够厚，可以忽略下方金属块影响。至此，用一维摩擦点火数值模拟程序对 4 种摩擦感度较弱的炸药进行计算，炸药和金属摩擦参数见表 2。

表 2　材料参数[10,13]

Table 2　Material parameters

材料	ρ/(kg·m^{-3})	c/(J·kg^{-1}·K^{-1})	k/(J·m^{-1}·s^{-1}·K^{-1})	k_m/(J·m^{-1}·s^{-1}·K^{-1})	
TNT	1 654	1 062.76	0.260 3	0.266 20	
DATB	1 834	1 092.05	0.259 0	0.259 70	
TATB	1 930	899.58	0.543 9	0.182 34	
NQ	1 690	1 125.52	0.410 0	0.626 40	
Fe	7 840	465	49.8	—	
材料	Q/(MJ·kg^{-1})	E_a/(kJ·mol^{-1})	Z/s^{-1}	L/(kJ·kg^{-1})	T_m/K
TNT	1.26	144	2.51×10^{11}	521	353.9
DATB	1.26	194	1.17×10^{15}	344	559.0
TATB	2.51	251	3.18×10^{19}	652	721.0
NQ	2.09	87.4	2.87×10^{7}	402	518.0
Fe	—	—	—	—	—

由于部分炸药（如 TATB 和 NQ）往往单个文献中的熔化后的参数（如熔化潜热）不全，因此结合两个文献资料的数据，所以可能存在部分矛盾，如熔点在不同的实验测量中结果不一致。本文中数值模拟尽量保证取同一资料的参数。

炸药熔化后，热传导系数发生改变，熔化后的热传导系数通过液体分子理论公式近似计算得到[14]。熔化后的摩擦系数 μ_m 难于确定，4 种炸药 TNT、DATB、TATB 和 NQ 的摩擦系数分别取为 0.15、0.15、0.13 和 0.15，进行了计算。初始时，炸药和钢的温度均取为 300 K。

图 3 是 4 种炸药和钢摩擦界面上的温度随时间的变化曲线图。从图中可以看出，4 种炸药温度随着时间增长而不断升高，到达某个时间后温度曲线会发生转折，急剧上升，接近垂直，温度达到极大值，可认为炸药发生了点火，此时就是点火时间(转折处的温度即为点火的最低温度)。4 种炸药的点火温度不相同：TATB 和 DATB 较低，NQ 和 TNT 较高。从图 4 可以看到，4 种炸药由于不同的热学性能，温度上升曲线的斜率均不相同。点火最低温度均大于炸药的熔点，所以 4 种炸药均先于点火发生了熔化：熔化后物质吸热，炸药物态参数(仅考虑热传导系数)发生了变化，所以温度上升速率会发生变化，温度曲线在各自熔点附近有变化或转折。模型假设摩擦系数随时间线性变化，所以模拟结果中温度曲线表现为随时间较平顺的变化，是符合物理规律的。由计算结果可知，4 种炸药点火时间分别为：0.65 ms(TNT)、0.77 ms(TATB)、0.83 ms(DATB)和 1.37 ms(NQ)，炸药的点火时间越短，则感度越强，所以摩擦感度的强弱顺序应为：η(TNT)＞η(TATB)≈η(DATB)＞η(NQ)。实验结果(见表 1)中，点火概率越高，越容易点火，感度越强。计算结果与实验结果的炸药强弱顺序相同，两者符合较好。这

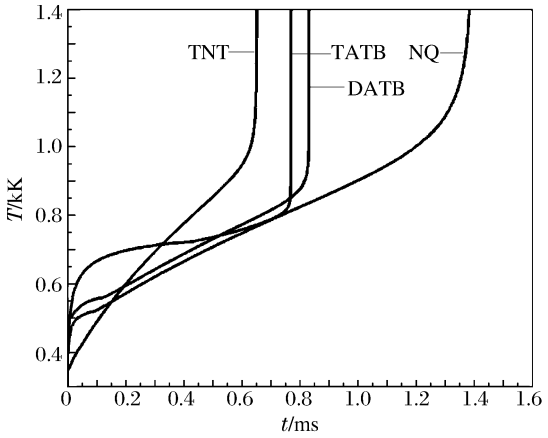

图 3 炸药摩擦界面的温度

Fig. 3 Explosive's temperatures on friction interfaces

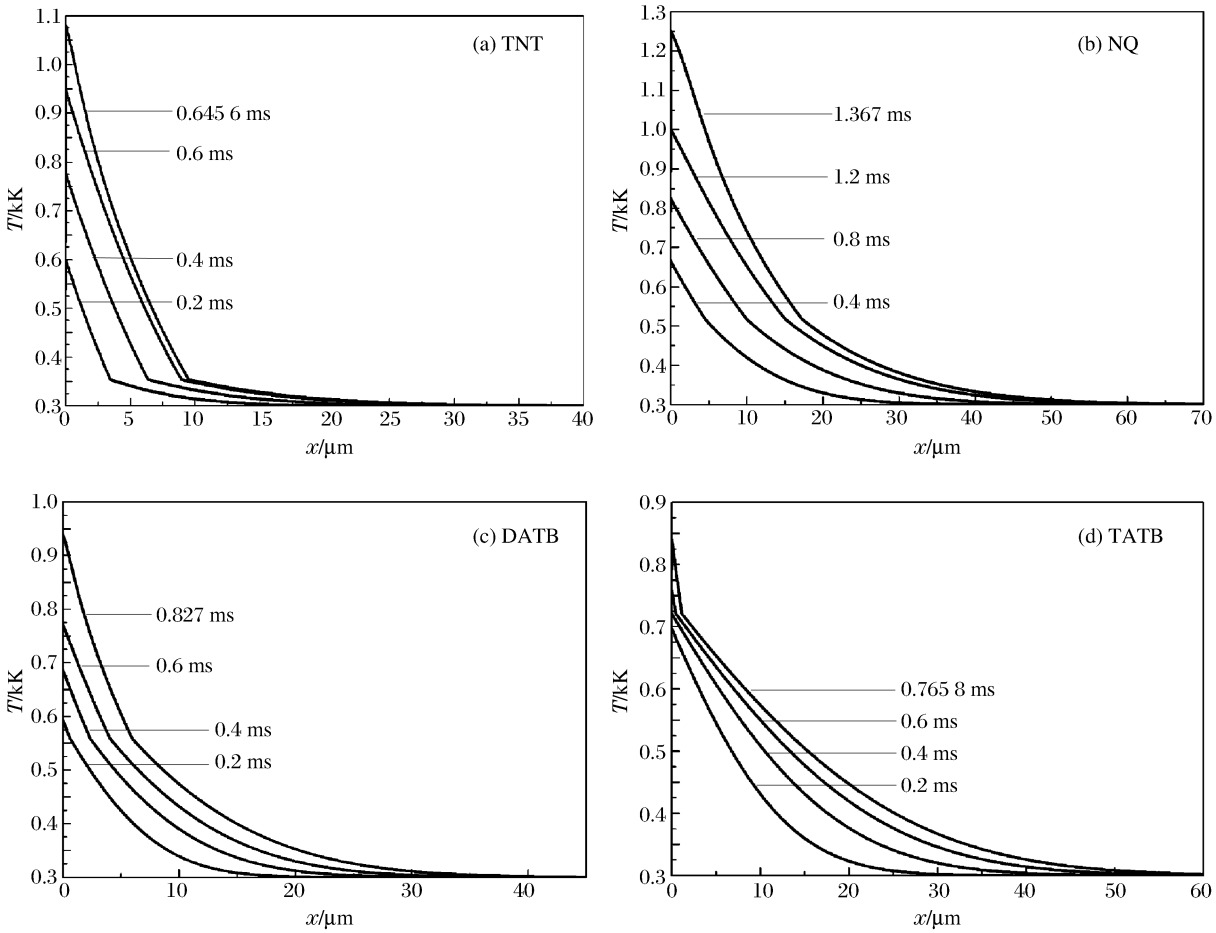

图 4 炸药中的温度分布

Fig. 4 Explosive's temperature distribution

说明了此摩擦点火模型能够较好模拟感度较低的 4 种炸药的感度实验，而以往模拟得到 4 种炸药的点火时间分别为：0.25 ms(PETN)、0.40 ms(HMX)、0.42 ms(RDX)和 0.46 ms(Tetryl)，感度强弱顺序也符合实验结果，这 8 种炸药的计算结果证明了摩擦模型的正确性和较广的适应性。而从图 4 可以看出，4 种炸药的温度分布曲线在熔点处均出现转折，根据模型假设，转折幅度主要取决于固态和液态炸药的热传导系数之差以及熔化潜热。模型假设摩擦系数随时间线性变化，模拟结果中温度随时间较平顺变化，符合物理规律。从图 4 还可以看到，发生点火时，熔化界面已经向炸药内部推进了一定距离，熔化区的厚度(摩擦面到熔化面的距离)也有区别，熔点高的薄(TATB 的为 1.07 μm)，熔点低的厚(NQ 的为 17.76 μm)，说明不同炸药熔化面移动速度也不同，影响因素可能包括了热传导系数和熔化潜热。

模型中可调的参数为熔化后的摩擦系数 μ_m(无实验数据)，4 种炸药中仅 TATB 略小，其他均相同，说明模型对此参数依赖较小，模型具有较好的参数适应性。

2.2　数值模拟结果分析

由于炸药摩擦的带源项热传导方程无解析解，炸药的活化能反映了炸药反应的快慢，所以利用源项中包含活化能的炸药热分解反应速率 $k=Ze^{-\frac{E_a}{RT}}$，来分析炸药点火时间快慢因素。图 5 为 8 种常用炸药的热分解速率，由图可见，热分解速率对数与时间倒数，呈线性关系。

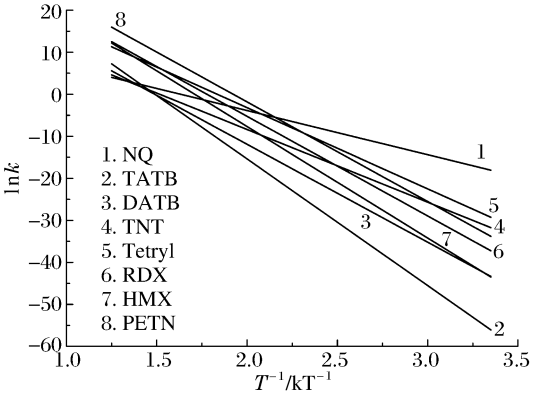

图 5 高能炸药的热分解速率

Fig. 5 Explosive's rate of thermal decomposition

8 种炸药可以根据速率大小分为两组：第 1 组为 HMX、RDX、PETN 和 Tetryl，温度越高其反应速度较快，第 2 组为 TNT、TATB、DATB 和 NQ，温度越高其反应速度较慢。这种分组也符合摩擦实验的结果。第 2 组炸药速率对数直线在高温时有交点，速率大小顺序出现变化：NQ 在温度低时速率快，温度高时速率慢；TATB 温度低时速率慢，温度高时速率快；DATB 处于二者之间。由于摩擦点火可能在不同的高温下发生，所以认为 3 种炸药在强度不同的摩擦条件下可能会出现点火顺序发生交换的情况，需要经过数值模拟验证。

利用炸药摩擦点火模型程序计算了 3 种炸药 TATB、DATB 和 NQ 在 4 种摩擦(压力为 400、40、4 和 0.4 MPa，摩擦速度 4 m/s)下的点火时间、点火温度和熔化区厚度，如图 6 所示，具体数值见表 3。

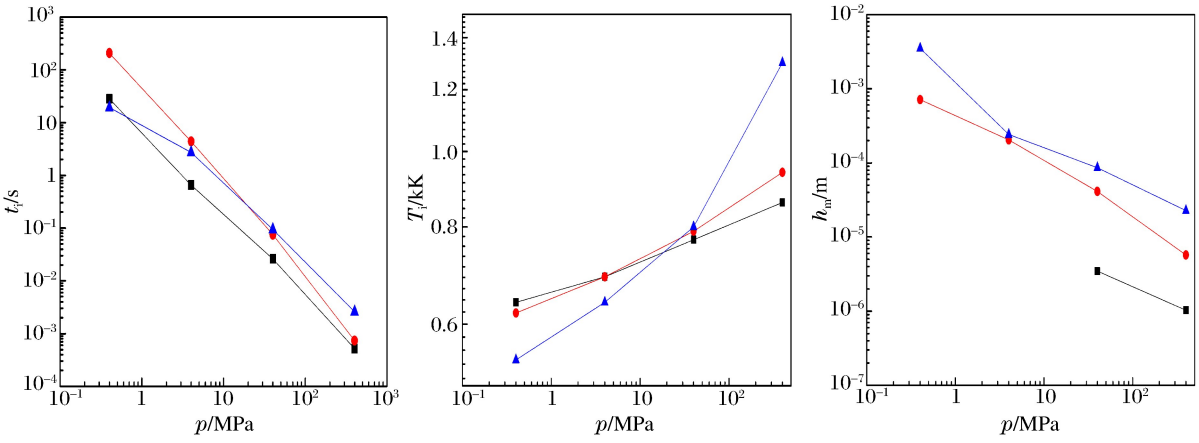

图 6 3 种炸药的点火时间、点火温度和熔化区厚度

Fig. 6 Ignition time, temperature and molten zone thickness for three explosives

表 3 3 种炸药的点火时间、点火温度和熔化区厚度

Table 3 Ignition time, temperature and molten zone thickness for three explosives

炸药	p/MPa	t_i/s	T_i/K	h_m/μm
TATB	400	0.52×10^{-3}	860	1.03
	40	0.026	770	3.48
	4	0.65	690	0
	0.4	28	640	0
DATB	400	0.74×10^{-3}	940	5.71
	40	0.075	790	4.11
	4	4.4	690	203.5
	0.4	206	620	712.1
NQ	400	2.6	1 300	22.71
	40	0.095	800	85.87
	4	2.7	640	242.4
	0.4	19	540	3 517.3

通过以上数据可看出:在高压下,TATB 点火最快,其次是 DATB,而 NQ 点火最慢;反之,在低压下,DATB 最快,TATB 居中,而 NQ 反而最快了。点火顺序随着摩擦强度变化,点火顺序发生了交换,证实了以上假设。同时,考察点火温度和熔化区厚度,发现 TATB 与 DATB 点火温度接近,随着压力减少而降低,而 NQ 的随着压力降低下降更快,主要是因为其反应速率随压力下降较快。有趣的是,3 种炸药的熔化区厚度基本呈一个平行的状态,而不是交叉的关系,考察其原因,不仅受反应速率影响,还受到熔点和熔化吸能的影响。以上结果说明,炸药摩擦感度强弱顺序可能会受到摩擦条件的影响,目前的摩擦感度实验尚不能完全说明各种炸药的摩擦感度。

3 结 论

利用摩擦点火模型,对炸药的摩擦感度实验中摩擦感度较低的 4 种炸药进行了数值模拟。数值模拟结果中的点火时间快慢顺序代表摩擦感度强弱顺序,与实验结果符合较好,说明此理论模型考虑了炸药熔化及摩擦系数随温度变化是合理的,此模型能够适应广范围的炸药,具有较强的适应性,期望将来能对更多炸药适用,如混合炸药改进模型。

分析 3 种炸药热分解反应速率,发现在不同温度下,热分解反应速率顺序会发生交换,而数值模拟验证了此观点:在不同摩擦条件下,点火时间发生交换,即摩擦感度顺序发生交换,由此说明摩擦感度实验无法完全表示炸药感度强弱的顺序,即摩擦感度受到摩擦强度影响。

参考文献:

[1] Asay B W. Shock wave science and technology reference library: Non-shock initiation of explosives[M]. Springer, 2010:537-554.

[2] 戴振东.摩擦体系热力学引论[M].北京:国防工业出版社,2002:1-4.

[3] Glenn J G, Foster J C, Gunger M. A test method and model to determine the thermal initiation properties of an energetic material in a low pressure long duration event[C]// Proceedings of Twelfth Symposium (International) on Detonation. San Diego, California, 2002:299-307.

[4] Birk A, Baker P, Kooker D E. Nondetonative explosions and burning of composition-B explosive[C]// Proceedings of Seventh twelfth Symposium (International) on Detonation. San Diego, California, 2002:248-257.

[5] Diens J K. A fractional hot-spot theory for peopellant sensitivity[C]// Proceedings of Second JANNAF Propulsion Syetems Hazards Meeting. China Lake, California, 1982:200-208.

[6] Hoffman D, Chandler J. Aspects of the tribology of the plastic bonded explosive LX-04[J]. Propellants, Explo-

sives, Pyrotechnics, 2004,29(6):368-373.

[7] Wu Yanqing, Huang Fenglei. Frictional properties of explosive single crystals of HMX, RDX and PETN and a model of impact ignition by frictional heating[C]// Proceedings of Fourteenth Symposium (International) on Detonation. Coeur d'Alene, Idaho, 2010:324-333.

[8] 林文洲，洪滔. 高能炸药摩擦感度理论初步研究[J]. 含能材料，2007,15(1):12-15.
Lin Wenzhou, Hong Tao. Theoretical analysis on friction sensitivity of high explosive[J]. Chinese Journal of Energetic Materials, 2007,15(1):12-15.

[9] 林文洲. 摩擦条件下的炸药热爆炸问题的研究[D]. 北京：中国工程物理研究院研究生部，2007.

[10] 董海山，周芬芬. 高能炸药及相关物性能[M]. 北京：科学出版社，1989:107-109.

[11] 孙锦山，朱建士. 理论爆轰物理[M]. 北京：国防科技出版社，1995:325-327.

[12] 陶文铨. 数值传热学[M]. 西安：西安交通大学出版社，1988:590-592.

[13] Gibbs T R, Popolato A. LASL explosive property data[M]. USA: University of California Press, 1980:37-176.

[14] Hirsehfelder J O, Curtis C F, Bird R B. Molecular theory of gases and liquids[M]. USA: University of Wisconsin Press, 1954:100-101.

Numerical simulation of friction sensitivity of high explosives

Lin Wenzhou, Hong Tao

(*Institute of Applied physics and Computational Mathematics, Beijing* 100094, *China*)

Abstract: In order to study the explosive friction safety, a numerical simulation of high explosive friction sensitivity experiment was performed based on a melting friction model. The numerical results agree with the experiment results. The law of friction sensitivity was then analyzed based on the thermal decomposition rate. As the melting temperature is usually lower than the ignition temperature, a one-dimension numerical simulation of sensitivity experiment was conducted using a model that took account of melting, and the ignition times and melting results were obtained. The order of four explosives' ignition time including DATB, NQ, TATB and TNT meet agree with the experiment results, proving the applicability of the model. Furthermore, based on the order of the thermal decomposition rate, the numerical results have proved that, when the friction strength reaches certain degrees, the order of ignition time will change, which means that the sensitivity experiment cannot fully describe the order of the explosive sensitivity.

Key words: mechanics of explosion; friction sensitivity; friction ignition model; high explosive; melt; thermal decomposition rate

(责任编辑　丁　峰)