文章编号：1000-5773(2011)01-0008-07

冲击作用下 HMX 晶体孔洞塌缩热点生成机制的细观数值模拟*

傅 华，赵 峰，谭多望，王文强，尚海林

（中国工程物理研究院流体物理研究所，冲击波物理与爆轰物理国防科技重点实验室，四川绵阳 621900）

摘要：热点的形成、点火以及成长过程是理解非均匀炸药冲击起爆的关键。采用离散元法，对冲击作用下含孔洞的 HMX 晶体进行了细观数值模拟。计算结果表明：在较低冲击作用下，孔洞边缘发生了较大的剪切变形，粘塑性功形成热点；而在较高冲击作用下，孔洞塌缩产生射流，汇聚流动，冲击下游炸药形成热点，并获得了孔洞塌缩和热点生成演化的细观过程。

关键词：离散元法；热点；孔洞塌缩；细观数值模拟

中图分类号：O347.1 **文献标识码**：A

1 引 言

随着现代高性能武器系统的飞速发展，对提高高能炸药在各种条件下安全性和可靠性的要求日益迫切。Campbell 等人[1]已从实验上揭示，均质与非均质凝聚炸药有着完全不同的冲击起爆机理。均质凝聚炸药冲击起爆的热爆炸模型已为人们普遍接受，但是实际应用的固态炸药一般都是非均质炸药，由于固态炸药的起爆特性受到炸药颗粒度、空腔尺寸和添加剂、粘结剂等的影响，使得对这一问题的研究，无论是从实验上还是理论上都变得十分复杂和困难。这类炸药的起爆机理目前大家所公认的是，由于冲击的作用在炸药中产生局部高温区，即在炸药中产生热点，然后是炸药分解，最后引起爆炸。热点的形成、点火以及成长过程成为理解非均匀炸药冲击起爆的关键。

目前，非均质炸药热点机制的细观数值模拟已成为爆轰物理研究的前沿课题。炸药热点形成的机制主要有以下几种：流体动力学、粘塑性孔洞的塌缩、剪切带、晶体的位错运动、晶粒间或闭合裂纹间的摩擦等[2-5]。在不同的加载问题中，不同的机制起主导作用[5-7]，如在较低能量水平刺激下炸药的起爆，可以较好地用闭合裂纹热点模型来描述，而其它机制都失效[5-6]；含孔洞炸药晶体的起爆则采用孔洞塌缩来描述[8]，而孔洞塌缩机制一般被认为是非均匀炸药在冲击波作用下形成热点的主要机制。由于细观结构的不均匀性，炸药热点的形成和演化是一个十分复杂的过程，由于缺少超快时间分辨的局部温度测量技术，目前还无法通过实验对炸药内部的热点形成过程进行细致的研究，因而细观尺度下的数值模拟就成为重要的研究手段。

非均质炸药复杂的细观结构和多样的热点机制对数值方法提出了很高的要求。对于一个特定的问题，到底是哪一种或几种热点机制起主导作用，应该由计算自动得到，这就要求计算方法能够统一处理孔洞塌缩、剪切带、闭合裂纹的摩擦、颗粒间的摩擦等机制。适合解决连续介质问题的有限差分、有限体

* **收稿日期**：2009-05-16；**修回日期**：2009-12-30

基金项目：中国工程物理研究院科学技术重大基金(2005Z0101)；国家自然科学基金(10772167)；国防科技重点实验室基金(9140C6709020907)

作者简介：傅 华(1979—)，男，硕士研究生，助理研究员，主要从事爆轰理论及应用研究. E-mail：fmyfuhua@163.com

积、有限元等传统计算方法难以统一解决上述机制,而离散元法是计算离散介质(如颗粒材料)的主流方法,适合于界面弱连接的非连续介质问题或连续体到非连续体转化的断裂、破碎等问题,有望在炸药热点机制的细观数值模拟研究方面发挥其算法优势。

本研究尝试采用源于非连续介质的离散元法,开展冲击作用下 HMX 晶体内微孔洞塌缩过程的细观模拟,获得了孔洞塌缩以及热点形成的过程,为开展非均质炸药热点生成机制研究以及细观反应模型的建立奠定了基础。

2　离散元作用力及温升计算

离散元法,又称 DEM(Discrete Element Method)法,它的基本思想是把不连续体或连续体离散为具有一定物理意义的独立"微元"或"粒子",相邻的单元之间存在一种或几种作用力,单元的运动受牛顿第二运动定律支配,用时步迭代的方法求解各单元的运动方程,通过研究离散元系统的整体运动形态得到模拟对象的力学、热学、物理和化学的状态分布和演化规律。

用离散元法计算单元的相互关系时,只有短程力起作用,即只有与此单元相邻的元(即邻居元)才会对此单元有作用力。邻居关系确定后,根据单元的当前位置、速度和系统演化历史,计算邻居元之间的相互作用力,离散元方法中的作用力模型相当于连续介质力学中本构关系的概念,它和材料性质有关。本研究考虑了 5 种作用力[9-12]:中心势作用力、法向和切向粘性摩擦力、干摩擦力、剪切力。

2.1　中心势作用力

中心势作用力 $\boldsymbol{F}^{ij}$ 采用准分子相互作用力模型,如 Lennard-Jones 势

$$\boldsymbol{F}^{ij}=\frac{\alpha^{ij}mn}{r_0^{ij}(n-m)}\left[\left(\frac{r^{ij}}{r_0^{ij}}\right)^{-(n+1)}-\left(\frac{r^{ij}}{r_0^{ij}}\right)^{-(m+1)}\right]\boldsymbol{n}^{ij} \tag{1}$$

式中:$\boldsymbol{n}^{ij}$ 为元 i 中心指向元 j 中心的单位矢量,r^{ij} 为两元的中心距离,α^{ij}、r_0^{ij}、m、n 为作用力参数。也可采用其它形式,如 Morse 势等。

2.2　粘性摩擦力

粘性摩擦力可分解为切向和法向两部分。

切向力

$$\boldsymbol{f}_{\mathrm{vt}}^{ij}=-\left[\eta_1^{ij}v_{\mathrm{t}}^{ij}+\eta_2^{ij}v_{\mathrm{t}}^{ij}\right]\frac{\boldsymbol{v}_{\mathrm{t}}^{ij}}{v_{\mathrm{t}}^{ij}} \tag{2}$$

法向力

$$\boldsymbol{f}_{\mathrm{vn}}^{ij}=-C_{\mathrm{n}}\boldsymbol{v}_{\mathrm{n}}^{ij} \tag{3}$$

式中:η_1^{ij}、η_2^{ij}、C_{n} 为粘性系数,$\boldsymbol{v}_{\mathrm{t}}^{ij}$、$\boldsymbol{v}_{\mathrm{n}}^{ij}$ 分别是在接触点 S 处元 i 相对于元 j 的切向和法向速度,如图 1 所示。法向粘性摩擦力可用于模拟邻居元之间的非弹性碰撞和抑制高频振荡。

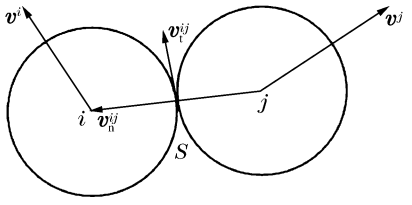


图 1　元 i 与元 j 的作用

Fig. 1　Interaction between element i and j

不考虑离散元的转动,在接触点 S 处元 i 相对于元 j 的速度 $\boldsymbol{v}_{\mathrm{S}}^{ij}$ 可表示为

$$\boldsymbol{v}_{\mathrm{S}}^{ij}=\boldsymbol{v}^i-\boldsymbol{v}^j \tag{4}$$

可导出接触点处相对的切向和法向速度为

$$\boldsymbol{v}_{\mathrm{t}}^{ij}=\boldsymbol{n}^{ij}\times\boldsymbol{v}_{\mathrm{S}}^{ij}\times\boldsymbol{n}^{ij} \tag{5}$$

$$\boldsymbol{v}_{\mathrm{n}}^{ij}=(\boldsymbol{v}_{\mathrm{S}}^{ij}\cdot\boldsymbol{n}^{ij})\boldsymbol{n}^{ij} \tag{6}$$

2.3　干摩擦力

假定只考虑动摩擦,则元 i 作用于元 j 的干摩擦力为

$$\boldsymbol{f}_{\mathrm{d}}^{ij}=-\mu^{ij}p^{ij}(\boldsymbol{v}_{\mathrm{t}}^{ij}/v_{\mathrm{t}}^{ij})\qquad p^{ij}>0\ \text{且}\ \boldsymbol{v}_{\mathrm{t}}^{ij}\neq 0 \tag{7}$$

式中:μ^{ij} 为 Coulomb 摩擦系数。

2.4 剪切力

剪切力仅仅发生于邻居单元之间，元 i 作用于邻居单元 j 的剪切力为

$$\boldsymbol{f}_{\mathrm{s}}^{ij} = -\overline{G}^{ij}\boldsymbol{\gamma}^{ij}A^{ij}\boldsymbol{t} \tag{8}$$

式中：$\overline{G}^{ij}$ 是有效剪切模量，γ^{ij} 是两单元间的距离，A^{ij} 是有效接触面积，$\boldsymbol{t}$ 为切向矢量。

2.5 温升计算

离散元的塑性变形、摩擦、粘性将引起能量耗散，从而导致离散单元温度的升高。在一个时间步长内邻居单元间的耗散能增量为

$$\mathrm{d}e^{i} = \sum_{j=1}^{n}\mathrm{d}e_{\mathrm{vn}}^{ij} + \mathrm{d}e_{\mathrm{vt}}^{ij} + \mathrm{d}e_{\mathrm{d}}^{ij} + \mathrm{d}e_{\mathrm{s}}^{ij} \tag{9}$$

式中：下标 vn、vt、d、s 分别表示法向粘性摩擦、切向粘性摩擦、干摩擦、塑性剪切变形。(9)式各项可用下式表达

$$\begin{aligned} \mathrm{d}e_{\mathrm{vn}}^{ij} &= C_{\mathrm{vn}}\left|f_{\mathrm{vn}}^{ij}\cdot v_{\mathrm{n}}^{ij}\right|\Delta t\ , \qquad \mathrm{d}e_{\mathrm{vt}}^{ij} = C_{\mathrm{vt}}\left|f_{\mathrm{vt}}^{ij}\cdot v_{\mathrm{t}}^{ij}\right|\Delta t \\ \mathrm{d}e_{\mathrm{d}}^{ij} &= C_{\mathrm{d}}\left|f_{\mathrm{d}}^{ij}\cdot v_{\mathrm{t}}^{ij}\right|\Delta t, \qquad \mathrm{d}e_{\mathrm{s}}^{ij} = C_{\mathrm{s}}\left|f_{\mathrm{s}}^{ij}\cdot\Delta\gamma^{ij}\right| \end{aligned} \tag{10}$$

式中：C_{vn}、C_{vt}、C_{d}、C_{s} 是元 i 对元 j 耗散能的分配系数。理论上讲，耗散量的分配原则与质量、物理过程、热动力学有关。一般认为摩擦耗散能全部转化为热，90％塑性变形转化为热，即有

$$C_{\mathrm{vn}} = C_{\mathrm{vt}} = C_{\mathrm{d}} = 0.5, \qquad C_{\mathrm{s}} = 0.45 \tag{11}$$

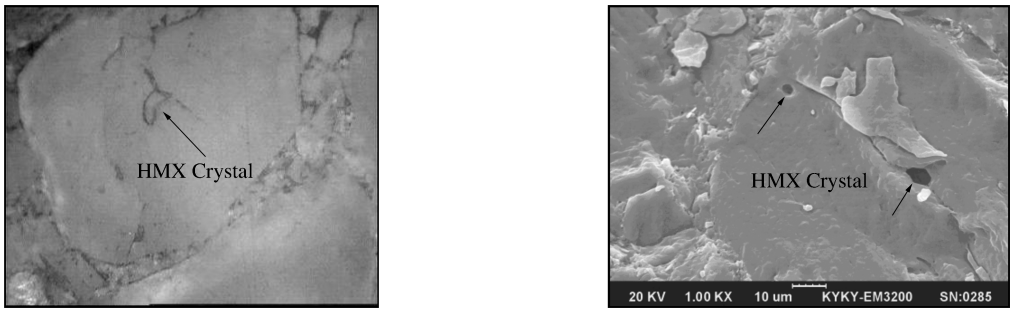
由于加载过程为瞬态过程，一个时间步长内单元间相互作用为绝热过程，那么

$$\Delta T^{i} = \mathrm{d}e^{i}/c_{V}^{i}\,m^{i} \tag{12}$$

式中：c_{V}^{i} 为单元 i 的比热，m^{i} 为单元质量。

3 数值模拟

对确定的炸药配方而言，炸药的细观结构特征，如炸药颗粒的尺寸及分布、颗粒间的空隙尺寸、炸药晶体的缺陷及尺寸等，对炸药热点的生成有较大的影响，特别是炸药晶体表面的粗糙度、孔洞尺寸及数目对炸药的感度影响尤为明显。在炸药结晶过程和响应初期，晶体内部均有可能产生孔洞，图 2 所示为 PBX 类炸药的细观图像，箭头所指为晶体内部孔洞。在冲击作用下，这些孔洞塌缩可能形成局部温升区域，形成热点，虽然导致炸药生成热点的机制在特定条件可能各不相同，但一般认为，孔洞塌缩是非均匀炸药在冲击波作用下形成热点的主要机制，是开展非均质炸药热点机制研究的重点。



(a) Optical micrograph (350×)　　(b) SEM micrograph (1 000×)

图 2 HMX 晶体内部孔洞

Fig. 2 Microstructures of the cavity in HMX

3.1 计算模型

为了简单起见，计算模型将晶体内的孔洞简化为圆形，不考虑孔洞内气体的压缩加热与晶体熔化作用。受冲击作用的孔洞塌缩计算模型如图 3 所示，HMX 晶体长 100 μm，宽 70 μm，半圆形孔洞半径为

15 μm;二维离散单元为圆盘形,总数目为 12 613 个,元半径 0.4 μm。飞片以速度 v 冲击加载,材料为黄铜,厚度足以使孔洞受较长脉宽加载,直至完全塌缩闭合,模型上下为滑移边界,其余为自由边界条件。为了便于对塌缩过程进行说明,图中数字 1、2、3 表示孔洞周围 3 个典型区域。

HMX 晶体与 Cu 飞片的离散元参数见表 1,其中 ρ 为密度,c_V 为定容比热,α^{ij}、m、n 为中心势作用力参数,μ^{ij} 为 Coulomb 摩擦系数,G 为剪切模量,C_n 和 η 分别为法向、切向粘性系数,ε_y 为屈服应变,ε_b 为法向断裂应变。

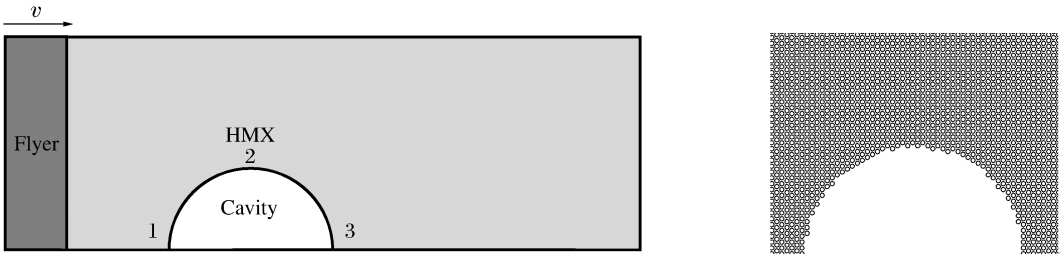


图 3　计算模型以及孔洞周围区域离散单元

Fig. 3　Simulation model and discrete elements around the cavity

表 1　HMX 和 Cu 材料的离散元参数

Table 1　DEM parameters of HMX and Cu

Material	ρ /(g/cm^3)	c_V /[J/(g·K)]	a_{ij} /(GPa)	m	n	μ^{ij}	G /(GPa)	C_n	η	ε_y	ε_b
HMX	1.89	1.003	1.85	1.0	3.0	0.01	10.74	301	0.1	0.02	0.005
Cu	8.93	0.383	7.8	1.0	2.0	0.01	46.0	200	0	5	3

3.2　计算结果

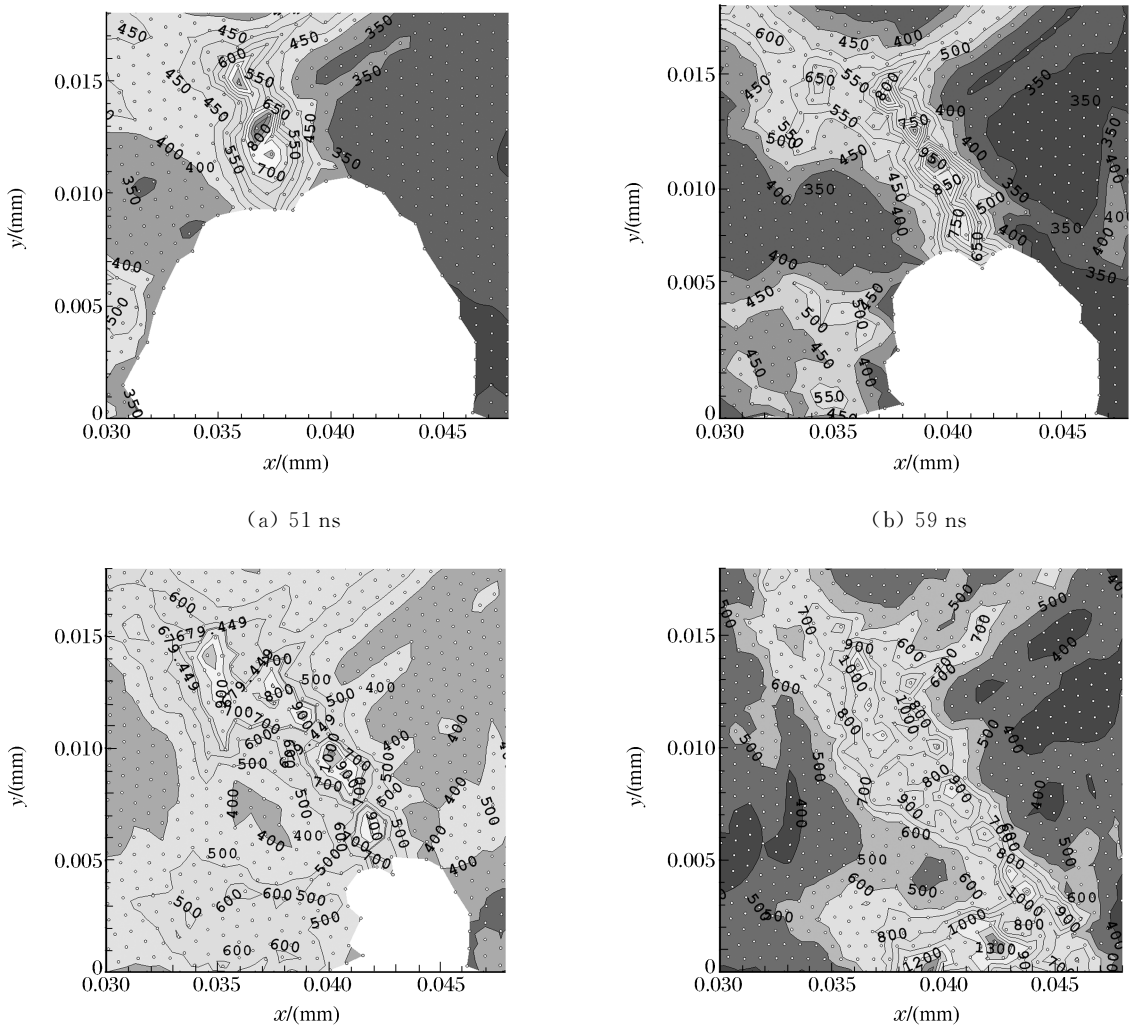
图 4 是飞片以 300 m/s 速度加载时孔洞的塌缩过程及温度等值图。当飞片撞击 HMX 晶体时,在晶体内部产生一冲击波,波阵面到达孔洞区域 1 后,首先发生沿着波传播方向的形变,区域 2 在 51 ns 时刻发生剪切变形,出现明显温升(图 4(a)),随着波的传播孔洞内壁发生较大的塑性变形,圆形孔洞逐渐被压扁,区域 2 的曲率半径最小,应变速率最高,致使温度进一步升高(见图 4(b)和图 4(c)),变形增大后的晶体逐渐向孔洞中心塌缩,塌缩后的晶体颗粒充满整个孔洞,继续发生塑性流动、摩擦等,直至与区域 3 完全闭合,温度进一步升高,最高温度达 1 300 K(图 4(d)),形成可能激发化学反应的热点。

图 5 是 51、65 ns 时刻的孔洞塌缩过程的粒子速度场分布。图 5 中的圆形标识是发生较大剪切变形与孔洞闭合的区域。

图 6 是飞片以 500 m/s 速度加载时不同时刻孔洞周围的温度等值图。当飞片速度较高时,在孔洞区域 2 还没发生较大剪切变形时,冲击波首先达到区域 1,在此区域由于受到孔洞内壁表面稀疏作用而产生较大的形变,应变超过断裂应变后发生断裂,在 42 ns 形成微射流(如图 6(a)所示),由于射流区域主要是由断裂的单元组成,加上稀疏作用,因而温升效果不显著,约 500 K,但粒子速度较之其它区域高。随着冲击波的传播,孔洞继续塌缩,射流汇聚流动,在 44 ns 时刻冲击区域 3,导致碰撞区域温度迅速上升(如图 6(b)所示),最高温度达 1 800 K。孔洞闭合后,由下游区域 3 传入上游区域 1 一个反射波,使得区域 1 的温度进一步升高。

图 7 是 42、44 ns 时刻孔洞塌缩过程的粒子速度场。从图 7(a)中可见,区域 1 处的粒子速度明显高于其它区域,而在区域 2 却并没有发生较大的剪切变形,图 7(b)是射流冲击下游内壁的速度场分布。

图 8 是半径为 15 μm 圆形孔洞内部塌缩轮廓图。从图 8 可见孔洞塌缩过程中微射流的形成、发展、冲击下游内壁,直至整个孔洞闭合的全过程。

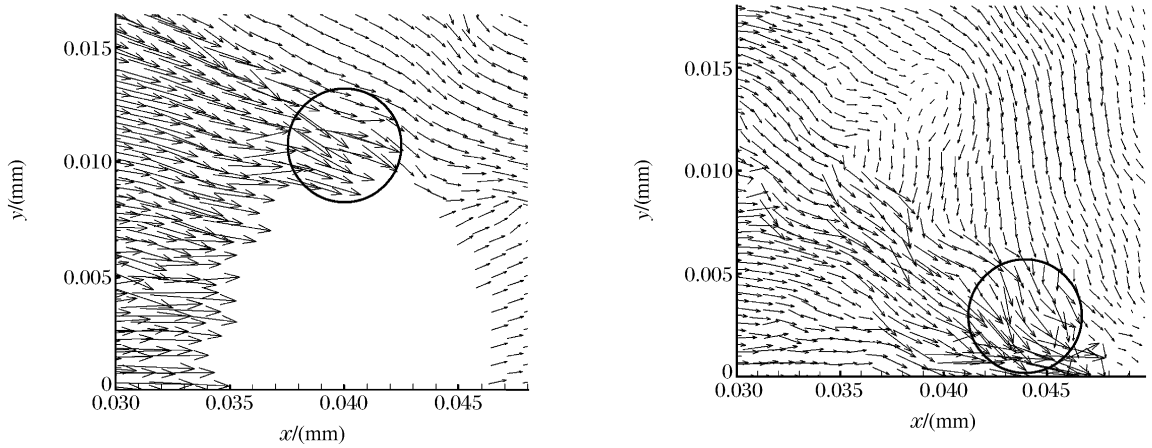


(a) 51 ns (b) 59 ns

(c) 61 ns (d) 65 ns

图 4 孔洞塌缩过程及温度等值图

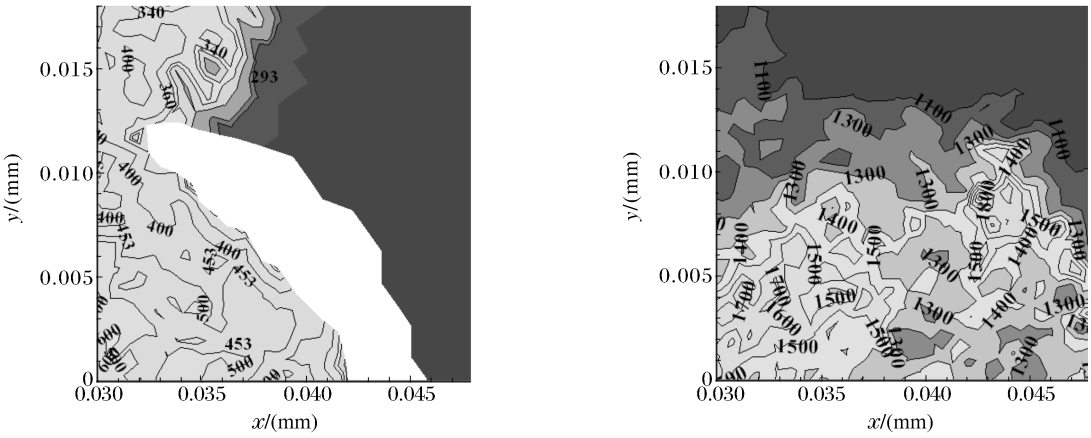
Fig. 4 Cavity collapse and temperature isoline



(a) 51 ns (b) 65 ns

图 5 孔洞塌缩过程的粒子速度场分布

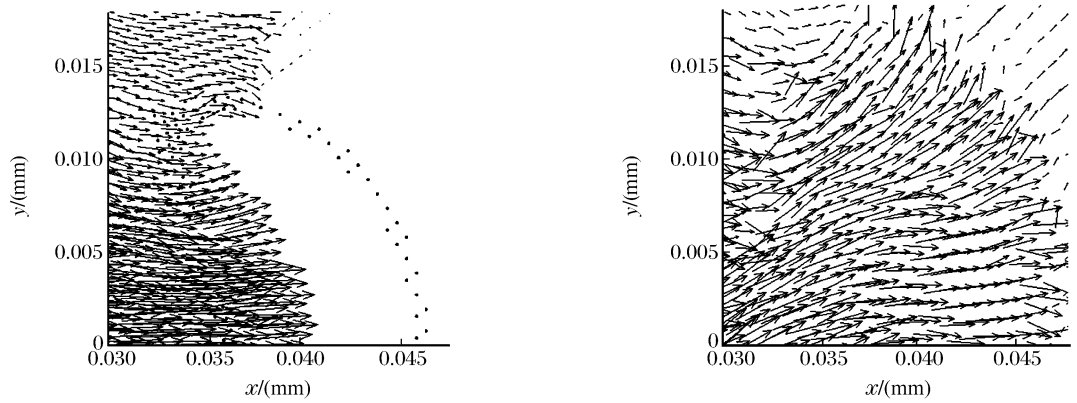
Fig. 5 The velocity field of the process of cavity collapse



(a) 42 ns　　(b) 44 ns

图 6　孔洞温度等值图

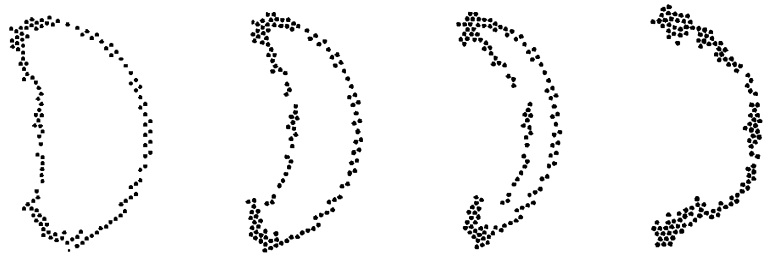
Fig. 6　Temperature isoline around cavity



(a) 42 ns　　(b) 44 ns

图 7　孔洞塌缩过程的粒子速度场分布

Fig. 7　The velocity field of the process of cavity collapse



38 ns　　40 ns　　42 ns　　44 ns

图 8　孔洞塌缩过程

Fig. 8　The process of cavity collapse

4　结　论

利用离散元法开展了冲击作用下 HMX 晶体内孔洞塌缩过程的细观模拟,获得了孔洞塌缩和热点生成演化的细观过程。模拟结果初步表明,在较低冲击作用下,HMX 晶体内在孔洞边缘发生了较大的剪切变形,粘塑性功形成热点;而在较高冲击作用下,孔洞塌缩产生射流,汇聚流动,冲击下游炸药形成热点。由模拟结果还发现,离散元法可以统一处理孔洞塌缩过程中的大变形、摩擦、断裂等问题,适合于

非均质炸药热点形成的数值模拟。

非均质炸药作为一类多组分的混合材料,其细观响应及其描述方法至今没有很好解决,细观尺度对研究手段的高精度要求,使得细观实验研究进展不大,大多停留在定性研究层面上。炸药热点的形成、反应、起爆涉及物理、化学等一系列复杂问题,当前只能分阶段进行研究。由于缺乏详细实验数据的支持,本研究的数值结果是初步和定性的,计算程序有待进一步改进和完善。为获取更直接全面的量化信息,需开展炸药在冲击作用下的细观响应以及局部温升测量的实验工作,构建合理的细观反应模型,最终建立与炸药起爆的关联机制。

References:

[1] Campell A W, Davis W G, Travis J R. Shock Initiation of Detonation in Liquid Explosives [J]. Physics of Fluids, 1961, 4(4): 498.

[2] Zhang G R, Chen D N. The Initiation Dynamics in Condensed Explosives [M]. Beijing: National Defense Industry Press, 1991. (in Chinese)
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.

[3] Sun J S, Zhu J S. Theory Detonation Physics [M]. Beijing: National Defense Industry Press, 1995. (in Chinese)
孙锦山,朱建士. 理论爆轰物理 [M]. 北京:国防工业出版社,1995.

[4] Sun C W, Wei Y Z, Zhou Z K. Application Detonation Physics [M]. Beijing: Science Press, 2000. (in Chinese)
孙承伟,卫玉章,周之奎. 应用爆轰物理 [M]. 北京:科学出版社,2000.

[5] Dienes J K, Middleditch J, Kershner J D, et al. Progress in Statistical Crack Mechanics: An Approach to Initiation [A]//Proceedings of the 12th Symposium (International) on Detonation [C]. San Diego, 2002.

[6] DienesJ K, Kershner J D. Multiple-Shock Initiation via Statistical Crack Mechanics [A]//Proceedings of the 11th Symposium (International) on Detonation [C]. Colorado, 1998: 717-724.

[7] Dey T N, Kamm J R. Numerical Modeling of Shear Band Formation in PBX-9501 [A]//Proceedings of the 11th Symposium (International) on Detonation [C]. Colorado, 1998: 725-734 .

[8] Chitanvis S M. Hotspot Mechanisms in Shock-Melted Explosives [J]. AIP Conf Proc, 2004, 706: 319-322.

[9] Tang Z P, Horie Y, Psakhie S G. Discrete Meso-Element Dynamic Simulation of Shock Response of Reactive Porous Solids [J]. AIP Conf Proc, 1996, 370: 657-660.

[10] Tang Z P, Horie Y, Psakhie S G. Discrete Meso-Element Modeling of Shock Processes in Powders [A]//High-Pressure Shock Compression of Solids Ⅳ [C]. New York: Springer-Verlag, 1997: 143-176.

[11] Tang Z P, Horie Y, Psakhie S G. Discrete Meso-Element Modeling of Shock Processes in Powders, Vol. 1—Theory and Model Calculations [R]. Hefei: NCSU, 1995:

[12] Wang W Q. The Discrete Element Method and Its Application in Material and Structure Mechanics [D]. Hefei: USTC, 2000. (in Chinese)
王文强. 离散元方法及其在材料和结构力学响应分析中的应用 [D]. 合肥:中国科学技术大学,2000.

Mesoscale Simulation of Cavity Collapse Hot Spot Mechanism in HMX under Shock Loading

FU Hua, ZHAO Feng, TAN Duo-Wang, WANG Wen-Qiang, SHANG Hai-Lin

(*National Key Laboratory of Shock Wave and Detonation Physics, Institute of Fluid Physics, CAEP, Mianyang* 621900, *China*)

Abstract: The origin, ignition, growth of hot spot are the factors to understand shock initiation in heterogeneous explosive. The process of cavity collapse in HMX under shock loading was simulated using discrete element method. The results showed that the visco-plastic deformation formed hot spot mechanism and there was serious shear distortion around cavity under low impact. It was also found that the micro-jetting formed hot spot under high impact. The mesoscale process of hot spot formation and cavity collapse were gained.

Key words: discrete element method; hot spot; cavity collapse; mesoscale simulation