

文章编号: 1006-9941(2013)04-0469-04

炸药有效弹性性能的细观尺度仿真预估

贾宪振, 王浩, 王建灵

(西安近代化学研究所, 陕西 西安 710065)

摘要: 采用 ANSYS 程序 APDL 参数化设计语言, 建立了炸药力学性能细观尺度仿真模型, 选取 B 炸药作为验证对象, 计算了其弹性模量和泊松比, 结果与文献相吻合。在此基础上, 进一步研究了炸药颗粒的粒径变化对于其有效弹性性能的影响。结果表明: 即使不考虑炸药颗粒的详细粒径分布, 也能得到满足工程精度的计算结果。

关键词: 材料力学; 炸药; 配方设计; 力学性能; 细观尺度; 数值仿真

中图分类号: TJ55; O341

文献标识码: A

DOI: 10.3969/j.issn.1006-9941.2013.04.013

1 引言

传统的炸药配方设计以试验为主, 需要大量的炸药性能试验确定配方, 设计成本高, 周期长。近年来, 虚拟设计技术发展迅速, 其本质是以计算机支持的模拟仿真技术为前提, 在产品阶段实时预测产品的性能, 从而提高产品的一次成功率。虚拟设计技术已在炸药配方设计领域得到了应用, 包括爆轰性能、力学性能等炸药基本性能的预估^[1-7]。

在炸药有效弹性性能的虚拟仿真设计方面, 国内主要采用分子动力学(MD)方法^[2], 而国外则较多地采用细观尺度数值仿真的方法, Biswajit Banerjee 和 E. M. Mas 采用细观尺度仿真模型计算了 PBX 炸药的有效弹性性能^[4-6], S. Ravi Annapragada 计算了 B 炸药的弹性模量和泊松比等有效弹性性能^[7]。国外的研究中, 细观尺度计算模型的建立多基于实际炸药粒径的分布, 即仿真预估前已经得到了炸药样品, 并进行了粒度测试。然而在炸药配方虚拟设计阶段没有炸药试样, 无炸药粒径分布的准确数据, 不能采用上述细观尺度仿真的方法来预估配方的有效弹性性能。

鉴于此, 我们建立了 B 炸药有效弹性性能的细观尺度仿真模型, 并根据文献^[7]的数据对其进行了验证。在此基础上, 进一步研究了粒径分布对计算结果的影响。结果表明: 即使没有准确的炸药粒度分布数

据, 也能准确预估 B 炸药的有效弹性性能, 可以应用于炸药配方虚拟设计。

2 仿真模型

数值仿真采用有限元方法, 通过构建细观尺度的炸药代表体积元(RVE), 计算静力加载下炸药 RVE 的弹性响应, 进而求出弹性模量和泊松比。

2.1 RVE 建模方法^[5-7]

在平面应变假设下建立二维的计算模型, RVE 为正方形, 炸药分散相颗粒的形状作圆形简化, 圆形颗粒填充在炸药连续相基体中。RVE 建模分为以下步骤:

(1) 设定 RVE 的边长 L , 生成 RVE 的基体模型。 L 的确定主要根据炸药分散相颗粒的最大粒径 d_{\max} , 并结合计算硬件条件进行设定。根据相关研究, L 可以小于 d_{\max} , 也可以为 d_{\max} 的几倍。 L 越大, 包含的分散相颗粒越多, 计算规模越大, 因此 L 不宜太大, 在满足计算精度的前提下尽量小一些。

(2) 在得到分散相颗粒的粒径分布的前提下, 按照粒径从大到小的顺序在基体上填充颗粒。首先填充直径最大的颗粒, 填充过程中满足以下条件: (a) 圆心坐标随机生成; (b) 颗粒之间不能重叠; (c) 通过设置各颗粒之间的距离的上下限来控制颗粒的团聚程度; (d) 颗粒不能全部位于基体以外, 如果颗粒越过了基体边界, 那么须满足循环边界条件; (e) 预先设定颗粒的体积分数, 等达到预先设定的体积分数时, 完成第一批颗粒的填充。

(3) 按照上述填充方法, 依次进行不同粒径颗粒的填充, 当所有的颗粒的体积分数等于炸药分散相体

收稿日期: 2012-01-04; 修回日期: 2013-01-24

作者简介: 贾宪振(1982-), 男, 博士, 主要从事混合炸药性能评估研究。e-mail: jiazx027@163.com

积分数时, 填充过程结束。

按照上述思路, 在 ANSYS 程序中采用 APDL 参数化语言编制了相应的建模程序, 用于生成 RVE 几何模型。

RVE 应具有循环对称边界, 设已经填充的颗粒的圆心坐标为 (x_i, y_i) , 半径为 r_i , 待填入颗粒的圆心坐标为 (x_j, y_j) , 半径为 r_j , 颗粒间距为 Δl 。图 1 为不越过边界的情形, 对此进行颗粒填充时须满足:

$$\begin{cases} \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2} > r_i + r_j + \Delta l, \\ (i = 1, 2, \dots, j = 2, 3, \dots, i + 1) \end{cases} \quad (1)$$

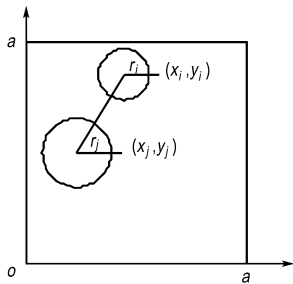


图 1 不越过边界
Fig.1 Not over the boundary

图 2 为越过右侧边界的情形, 对此要在模型左侧补充另一个颗粒以保证循环边界条件, 此时须满足:

$$\begin{cases} \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2} > r_i + r_j + \Delta l \\ \sqrt{(x_i - a - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2} > r_i + r_j + \Delta l \\ (i = 1, 2, \dots, j = 2, 3, \dots, i + 1) \end{cases} \quad (2)$$

颗粒越过单侧边界的其他情况可以参照(2)式处理。如果颗粒同时越过两个边界(如图 3 所示), 此时应满足:

$$\begin{cases} \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2} > r_i + r_j + \Delta l \\ \sqrt{(x_i - a - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2} > r_i + r_j + \Delta l \\ \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i + a - y_j)^2} > r_i + r_j + \Delta l \\ \sqrt{(x_i - a - x_j)^2 + (y_i + a - y_j)^2} > r_i + r_j + \Delta l \\ (i = 1, 2, \dots, j = 2, 3, \dots, i + 1) \end{cases} \quad (3)$$

同样地, 颗粒同时越过两个边界的其他情况可以参照(3)式处理, 在此不再赘述。

2.2 边界条件和载荷

计算过程包括设置材料参数、边界条件和载荷, 划分网格和执行计算。计算所需的材料参数是混合炸药各单质组分的有效弹性性能参数。

根据 2.1 所述方法建立典型 RVE 模型(见图 4), 其边长为 0.75 mm, RVE 中颗粒共有三种, 直径分别为

0.25, 0.13, 0.05 mm, 体积分率分别为 0.276, 0.183, 0.141, 全部颗粒的总体积分数为 0.6。图 4 同时给出了计算时 RVE 边界条件和载荷, 并满足下式:

$$\begin{cases} u_x(x, y) = 0 & \text{on } x = 0 \\ u_y(x, y) = 0 & \text{on } y = 0 \\ \varepsilon = 0.01 & \text{on } y = L \end{cases} \quad (4)$$

式中, u_x 和 u_y 分别为 x 方向和 y 方向的位移。

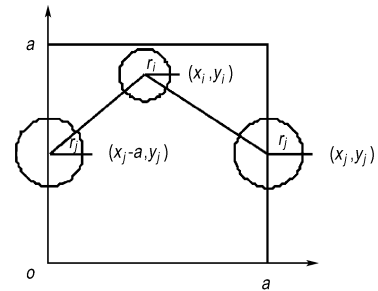


图 2 越过右侧边界
Fig.2 Over the right boundary

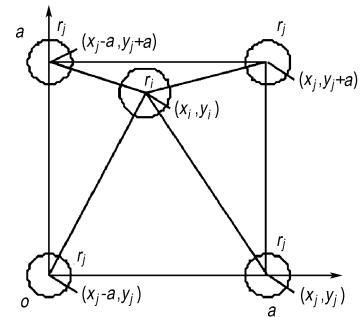


图 3 越过两侧边界
Fig.3 Over two boundaries

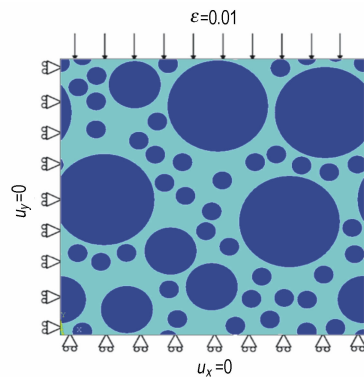


图 4 RVE 及边界条件和载荷
Fig.4 RVE and its boundary condition and load

2.3 有效弹性性能计算公式

按照下式计算炸药的弹性模量和泊松比^[5]:

$$\begin{cases} E_{\text{eff}}^{2D} = E_x = \frac{F_x}{u_x}, \nu_{\text{eff}}^{2D} = -\frac{u_y}{u_x} \\ u_x = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m u_{xi}, u_y = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^m u_{yi} \end{cases} \quad (5)$$

式中, E_{eff}^{2D} 和 ν_{eff}^{2D} 分别为二维弹性模量和泊松比, F_x 为 x 方向反应力, m, n 分别是模型在 x 和 y 方向的节点数, u_{xi} 和 u_{yi} 分别是边界节点在 x 方向和 y 方向的位移。

由于上述结果是基于平面应变假设而得到, 所以还要将二维计算结果换算到三维当中, 即:

$$\begin{cases} \nu_{\text{eff}}^{3D} = \frac{\nu_{\text{eff}}^{2D}}{1 + \nu_{\text{eff}}^{2D}} \\ E_{\text{eff}}^{3D} = E_{\text{eff}}^{2D} (1 - (\nu_{\text{eff}}^{2D})^2) \end{cases} \quad (6)$$

式中, E_{eff}^{3D} 和 ν_{eff}^{3D} 为三维弹性模量和泊松比。

3 仿真模型验证

选取 B 炸药验证上述仿真模型的精度。如同文献[7], 本研究中选取三种粒径 RDX 颗粒: 50, 130, 250 μm , 三种 RDX 颗粒在 B 炸药中所占的体积分数分别为 13.3%, 17.2%, 26.0%。本研究中 RVE 的边长为 1 mm, B 炸药二维 RVE 模型如图 5 所示。划分网格时单元的边长为 5 μm , 共生成 90152 个计算单元。计算时输入的材料参数见表 1。

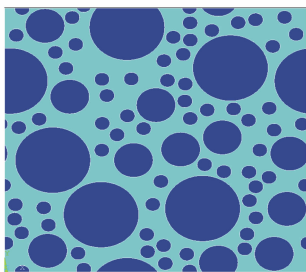


图 5 B 炸药 RVE 模型
Fig. 5 RVE model of explosive B

表 1 计算所需的材料参数^[7]

Table 1 Material parameters for calculation

materials	RDX	TNT
E / GPa	18	5.4
ν	0.22	0.33

Note: E is elastic modulus, ν is Poisson ratio.

图 6 是 RVE 模型的等效应力分布云图, 根据图 6 可以看出, RDX 颗粒的等效应力比 TNT 基体的等效应力大, 这是由于 RDX 的弹性模量较大, 导致在相同应变下的应力较大。根据计算得到边界处的节点位移和反

应力, 基于公式(5)和(6), 计算得到了 B 炸药的弹性模量和泊松比, 并与文献[7]中给出的试验结果进行了对比, 结果见表 2。由表 2 可见, 弹性模量和泊松比的计算值与实验值的误差分别为 8.26% 和 3.44%, 都在 10% 以内, 满足工程预估精度要求。这说明采用 RVE 方法可以准确计算出混合炸药的有效弹性性能, 只要能够获得准确的混合炸药单质组分的力学性能, 就能通过 RVE 方法准确预测混合炸药的有效弹性性能。

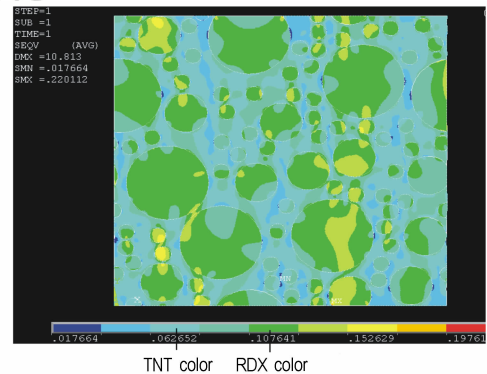


图 6 TNT 基体和 RDX 颗粒的等效应力分布

Fig. 6 Equivalent stress contour of TNT matrix and RDX particles

表 2 计算结果与试验结果对比

Table 2 Comparison of calculated results and experimental results

property	experimental ^[7]	calculated	error/%
E / GPa	10.9	10.0	8.26
ν	0.29 ± 0.04	0.28	3.44

4 粒径分布对有效弹性性能的影响

本研究 RVE 的建模过程中使用了炸药颗粒的粒径分布数据, 然而在炸药配方虚拟设计阶段, 尚无法得到炸药的粒径分布。因此, 需要研究颗粒的粒径分布对于计算结果的影响。仍以 B 炸药作为研究对象, 建模时不考虑 RDX 颗粒的详细粒径分布, 假设各个 RDX 颗粒的粒径都相等。设定 RVE 的边长为 1 mm, RVE 中 RDX 颗粒的数量分别为 8, 12, 20, 40 个, 分别得到了相应的 RVE 模型, 如图 7。

根据公式(5)和(6)计算出了 B 炸药的弹性模量和泊松比, 结果见表 3。由表 3 可知: 在 RVE 建模时不考虑 RDX 的粒径分布, 同样能得到准确的有效弹性性能结果, 计算值与试验值的误差不超过 10%。这说明基于有限元的 RVE 方法并不受限于炸药颗粒的粒径分布, 也就是说, 在混合炸药配方设计阶段, 即使没

有掌握详细的粒径分布数据,也可以采用 RVE 方法预估混合炸的有效弹性性能。

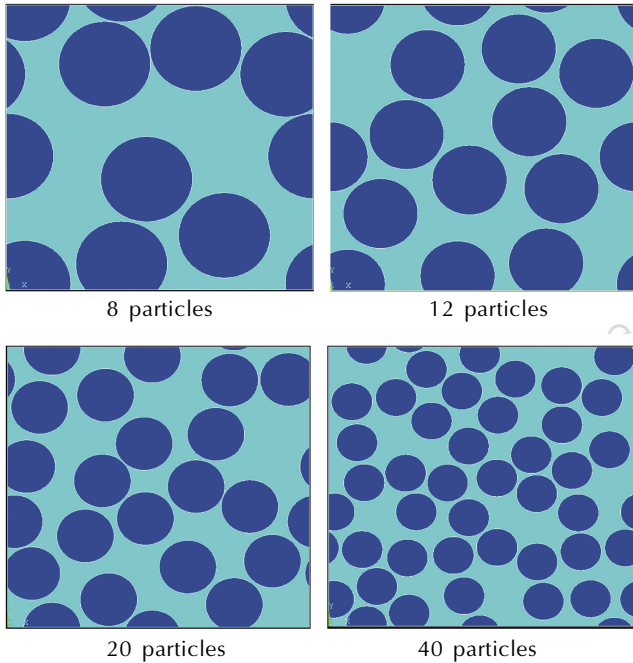


图7 不同 RDX 颗粒数量所对应的 RVE 模型

Fig.7 RVE model of increasing numbers of RDX particles

表3 不同 RDX 颗粒数量下 B 炸药有效弹性性能计算结果及与实验结果的对比

Table 3 Effective elastic properties of explosive B calculated with different numbers of RDX particles

property	experimental	calculated results with different RDX particles numbers			
		8	12	20	40
E/GPa	10.9	10.1	10.1	10.0	10.0
error of $E/\%$		-7.34	-7.34	-8.26	-8.26
ν	0.29	0.279	0.284	0.285	0.281
error of $\nu/\%$		-3.79	-2.07	-1.72	-3.10

Note: RDX particles assumed same diameter.

5 结论

采用 ANSYS 程序 APDL 参数化编程语言编制了炸药细观尺度 RVE 建模程序,并以 B 炸药为研究对象计算了其有效弹性性能,计算结果与文献结果吻合良好。在此基础上进一步研究了炸药颗粒粒径分布对于计算结果的影响,结果表明:不详细考虑炸药颗粒的粒径分布,预估结果也有较高的精度,有效弹性性能的计算误差不超过 10%,这说明本文的方法可以应用到炸药配方仿真设计阶段的力学性能预估。

参考文献:

- [1] LU Jing-ping. Evaluation of the thermochemical code-CHEETAH 2.0 for modeling explosives performance[R]. DSTO Aeronautical and Maritime Research Laboratory, 2001.
- [2] 肖鹤鸣, 许晓娟, 邱玲. 高能量密度材料的理论设计[M]. 北京: 科学出版社, 2008.
XIAO He-ming, XU Xiao-juan, QIU Ling. Theoretic design of high-energy density material[M]. Bei jing: Science Press, 2008.
- [3] 敬仕明, 李明, 龙新平. PBX 有效弹性性能研究进展[J]. 含能材料, 2009, 17(1): 119-123.
JING Shi-ming, LI Ming, LONG Xin-ping. Progress in predicting the effective elastic properties of PBX[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2009, 17(1): 119-123.
- [4] Mas E M, Clements B E, George D C. Direct numerical simulations of PBX 9501 [C]// Shock Compression of Condensed Matter, 2003, edited by Furnish M D, Gupta Y M, Forbes J W, AIP Press, 2004: 389-392.
- [5] Biswajit Banerjee, Carl M Cady, Daniel O Adams. Micromechanics simulation of glass-estane mock polymer bonded explosives[J]. *Modeling and Simulation in Material Science and Engineering*, 2003, 11(4): 457-475.
- [6] Biswajit Banerjee, Daniel O Adams. Micromechanics-based determination of effective elastic properties of polymer bonded explosives[J]. *Physica B*, 2003, 338(1-4): 8-15.
- [7] Annapragada S Ravi, Sun Dawei, Garimella Suresh V. Prediction of effective thermo-mechanical properties of particulate composites[J]. *Computational Materials Science*, 2007, 40: 255-266.

Mesoscale Simulation of Effective Elastic Properties of Explosive

JIA Xian-zhen, WANG Hao, WANG Jian-ling

(Xi'an Modern Chemistry Research Institute, Xi'an 710065, China)

Abstract: The ANSYS parametric design language was used to established the mesoscale representative volume element (RVE) model to estimate effective elastic properties including elastic modulus and Poisson's ratio of explosive B. Results show that the calculated results agree with that from the literature. The influence of particle size distribution on effective elastic properties was also studied, and it can be inferred that the model can predict the effective elastic properties without the particle distribution, and the error between the calculation results and the experimental results is less than 10%.

Key words: material mechanics; explosive; formulation; mechanical property; mesoscale; numerical simulation

CLC number: TJ55; O341

Document code: A

DOI: 10.3969/j.issn.1006-9941.2013.04.013