

文章编号: 1006-9941(2012)02-0141-05

高能不敏感 PBX 炸药非线性优化设计方法(II)

黄亨建, 黄 辉, 聂福德, 刘世俊, 詹春红

(中国工程物理研究院化工材料研究所, 四川 绵阳 621900)

摘 要: 为探索高能不敏感高聚物粘结炸药(PBX)配方设计理论和方法, 基于 PBX 炸药构效关系研究, 提出了高能不敏感 PBX 配方设计多目标非线性优化设计的一般数学模型。针对 HMX/TATB//F2314/F2311 体系, 在实验研究获得感度-组成函数关系的基础上, 建立了以圆筒比动能、特性落高、冲击波感度为多目标函数, 以能量水平、感度水平以及组分含量范围为约束条件的具体数学模型, 据此设计了 8 种能量水平的 10 个 PBX 配方, 并给出了相应的能量和冲击波感度预估值。选择了其中 4 种配方进行实验验证, 结果表明, 设计模型给出的能量和冲击波感度预估值与实测值偏差分别在 5% 和 6% 以内, 特性落高预估值与实测结果则在同一水平。

关键词: 应用化学; 高聚物粘结炸药(PBX); 配方设计; 非线性优化

中图分类号: TJ55; O69

文献标识码: A

DOI: 10.3969/j.issn.1006-9941.2012.02.001

1 引 言

实现高效毁伤和满足钝感弹药标准是现代兵器发展对弹药的要求, 为满足这一要求, 研制高能不敏感 PBX 炸药成为重要的技术途径之一。由于炸药能量与感度之间存在矛盾, 研制既高能又不敏感的 PBX 炸药难度较大, 如何对炸药的的能量和感度进行匹配设计, 成为炸药工作者关注的热点之一。本研究在 PBX 炸药构效关系研究的基础上, 探索匹配设计 PBX 炸药的能、感度、力学等性能的优化设计方法。

近年来, 优化设计方法在工业混合炸药配方设计方面得到了较好运用。如, 唐健军^[1-2]、陆明^[3-5]、王海芳^[6]等建立了铵油炸药、乳化炸药等工业炸药的线性约束优化设计数学模型, 可以对工业混合炸药的爆热、氧平衡和价格进行优化匹配设计。这些模型没有考虑安全性、力学性能, 而这恰恰是高能不敏感炸药配方设计不能忽视的问题, 更是其难点和关键所在。为此, 笔者基于文献数据挖掘, 于 2009 年基本建立了以能量为目标函数、感度为约束函数的单目标非线性优化设计数学模型, 能够对圆筒比动能和特性落高进行较好的匹配设计^[7]。为更好地对混合炸药的能、感度、力学性能等进行优化匹配设计, 本文基于实验研究, 探索建立多目标非线性优化设计数学模型。

收稿日期: 2011-02-17; 修回日期: 2011-05-24

作者简介: 黄亨建(1968-), 男, 研究员, 从事含能材料设计与应用研究。e-mail: hhenry0816@sina.com

2 高能不敏感 PBX 配方设计的一般数学模型

混合炸药配方设计就是使设计的配方在满足一定性能指标的前提下, 选择组分、确定其含量, 并进行合理的结构设计。不同用途的炸药配方设计关注的性能不尽相同, 如工业混合炸药配方设计主要关注爆热、氧平衡和成本等, 而高能不敏感 PBX 配方设计不仅关注能量指标(如爆热、圆筒比动能、爆速、爆压等), 还要关注安全性指标和力学性能指标。由于炸药的能、安全性、力学性能之间存在相互矛盾、相互制约的关系, 如何进行合理的匹配设计, 使设计的配方既达到较高的能量水平, 又达到较高的安全水平或者较低的感度, 并具有合适的力学性能, 是高能不敏感 PBX 配方设计的难点和关键。从数学角度来看, 高能不敏感 PBX 配方设计, 属于以三大性能为目标, 以组分为上下界、感度和能量指标为约束条件的多目标非线性优化问题, 可在配方设计准则和构效关系研究的基础上, 建立相应的数学模型, 进行优化设计。

假设待设计的配方由 n 种物质构成, 其含量为 x_i , $i=1, 2, \dots, n$ 。如果关注待设计配方的能、感度、力学、氧平衡等性能, 并且存在性能-组成函数关系, 那么, 可利用多目标非线性规划对待设计配方的几大性能进行优化匹配设计, 在某一合适的约束条件下, 存在一个优化解。其数学模型如下:

$$\min \{P_m(x_i)\} \quad m=1, 2, \dots, k; i=1, 2, \dots, n \quad (1)$$

$$s. t. \begin{cases} H_{50}(x_i) \geq H_g & i=1, 2 \dots n \\ \text{or } G_{50}(x_i) \leq G_g & i=1, 2 \dots n \\ E_L \leq E(x_i) \leq E_H & i=1, 2 \dots n \\ \Sigma x_i = 100 & i=1, 2 \dots n \\ a_i \leq x_i \leq b_i & i=1, 2 \dots n \end{cases} \quad (2)$$

式(1)为性能目标函数。 $P_m(x_i)$ 为第 m 种性能对组分含量 x_i 的函数,如 $P_1(x_i) = -E(x_i)$ 为能量的相反数对组分含量 x_i 的函数, $P_2(x_i) = -H_{50}(x_i)$ 为特性落高的相反数对组分含量 x_i 的函数; $P_3(x_i) = G_{50}(x_i)$ 为 50% 爆炸概率下隔板厚度对组分含量 x_i 的函数。

式(2)为约束条件。 E_L 和 E_H 分别为待设计配方的能量下限和上限,即能量水平; $H_{50}(x_i)$; $G_{50}(x_i)$ 分别为待设计配方的特性落高和冲击波感度对组分含量 x_i 的函数关系; H_g 和 G_g 分别为待设计配方的机械感度和冲击波感度的目标值; a_i 、 b_i 分别为组分含量的下界和上界,一般由经验确定。

3 设计实例

为证明非线性优化应用于高能不敏感 PBX 配方设计的可行性以及上述一般数学模型的正确性,下面针对由 HMX、TATB、F2314 和 F2311 四种组分构成的配方体系(设 x_1 、 x_2 、 x_3 、 x_4 分别表示四种组分的体积分数),利用上述数学模型设计几种能量水平的高能不敏感 PBX 配方。

3.1 数学模型的建立

假定目前只关注能量和感度进行优化设计,首先在构效关系研究的基础上,获得性能-组成函数关系,然后确定目标函数、约束条件,进而建立优化设计数学模型。

3.1.1 目标函数

以能量、机械感度和冲击波感度为目标函数。

能量可用圆筒比动能、飞片比动能、猛度等表征,也可用爆热、爆速、爆压等爆轰性能表征,这里以圆筒比动能构建目标函数。对以 HMX 为主炸药的混合炸药的圆筒比动能可以由以下的线性关系式与添加剂的体积百分含量相关联^[8]:

$$E = E_{\text{HMX}}(1 - \Sigma S_i x_i) \quad (3)$$

式中, E 为配方的圆筒比动能; E_{HMX} 为纯 HMX 的圆筒比动能,其值为 1.752(圆筒壁膨胀到 19 mm 时); S_i 为每种添加剂的特征能量衰减因子; x_i 为每种添加剂的体积分数。

根据式(3)和配方体系中各组分的能量衰减因子 S_i (表 1)和体积分数 x_i ,得到能量目标函数:

$$P_1(x_i) = -E(x_i) = 0.006132x_2 + 0.01752x_3 + 0.01752x_4 - 1.752 \quad (4)$$

表 1 配方中几种组分的能量衰减因子

Table 1 Characteristic energy decrement from pure HMX for ingredients in compositions

materials	theoretical density /g · cm ⁻³	energy attenuation factor
HMX	1.905	0
TATB	1.938	0.35
F2314	2.02	1.0
F2311	1.85	1.0

为建立感度目标函数,必须先获得感度-组成函数。但是,迄今为止感度的估算仍然是世界难题,尽管不少学者试图寻找感度与炸药组成结构的定量关系,但往往事与愿违,仅获得一些结构类似的炸药的相关规律^[9-10]。不过,在混合炸药配方设计时,可以通过对特定体系配方感度进行研究,获得预估配方感度的经验公式^[11-12],这对于配方设计有着重要的参考价值。为此,固定粘结剂含量总和为 4%(质量分数),只变化 HMX/TATB 的比例设计系列模型配方,制备造型粉,并压制成相对密度为 98.5% 的 $\Phi 20$ mm × 20 mm 药柱。按 GJB772A-1997 方法 601.3 撞击感度 12 型工具测得各配方在 5 kg 落锤下的 H_{50} ,按照 GJB772A-1997 方法 605.1 隔板试验方法测得各配方的 G_{50} 。实验结果与 TATB 含量的关系见图 1 和图 2。据此拟合分别得到 H_{50} 和 G_{50} 与 TATB 质量分数 x_1 的函数关系:

$$H_{50} = 31.24 + 1.23e^{x_1'^2/20.73} \quad (5)$$

$$G_{50} = \frac{28.50x_1'}{39.62 + x_1'} + \frac{14.72x_1'}{x_1' - 2.13} - 0.26x_1' \quad (6)$$

从而得到机械感度和冲击波感度的目标函数分别为:

$$P_2(x_i) = -H_{50} = -31.24 - 1.23e^{\frac{1.938x_2}{39.49x_1 + 20.17x_2 + 41.87x_3 + 38.35x_4}} \quad (7)$$

$$P_3(x_i) = \frac{5523.3x_2}{75.48x_1 + 270.58x_2 + 80.03x_3 + 73.3x_4} + \frac{2804.3x_2}{189.61x_1 - 4.06x_2 - 4.3x_3 - 3.94x_4} - \frac{50.4x_2}{1.905x_1 + 1.938x_2 + 2.02x_3 + 1.85x_4} \quad (8)$$

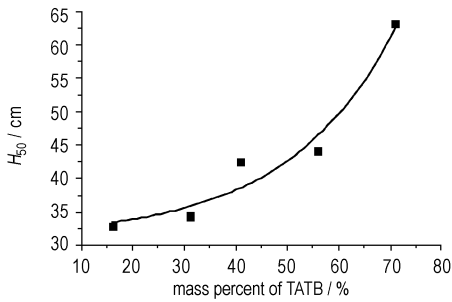


图 1 HMX 基 PBX 炸药特性落高与 TATB 含量的关系

Fig. 1 H₅₀ versus TATB content of HMX based PBX formulations

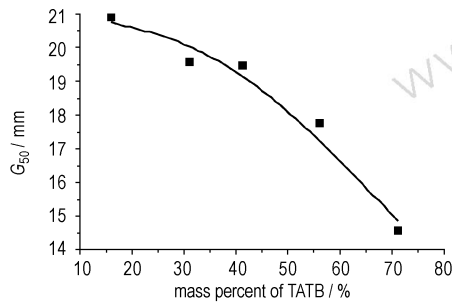


图 2 HMX 基 PBX 炸药 G₅₀ 与 TATB 含量的关系

Fig. 2 G₅₀ versus TATB content of HMX based PBX formulations

3.1.2 约束条件

前已述及,高能不敏感 PBX 炸药的配方设计必须考虑安全性问题,因此以感度-组成函数作为非线性约束条件之一。感度-组成函数既可以选择式(5)所示的函数关系,也可以选择式(6)所示的函数关系,这里选择前者。

为使设计的配方保持较高的能量水平,同时以能

$$\min \left\{ \begin{aligned} P_1(x_i) &= -E(x_i) = 0.006132x_2 + 0.01752x_3 + 0.01752x_4 - 1.752 \\ P_2(x_i) &= -H_{50}(x_2) = -31.24 - 1.23e^{\frac{193.8x_2}{39.49x_1 + 40.17x_2 + 41.87x_3 + 38.35x_4}} \\ P_3(x_i) &= \frac{5523.3x_2}{75.48x_1 + 270.58x_2 + 80.03x_3 + 73.3x_4} + \frac{2804.3x_2}{189.61x_1 - 4.06x_2 - 4.3x_3 - 3.94x_4} - \frac{50.4x_2}{1.905x_1 + 1.938x_2 + 2.02x_3 + 1.85x_4} \end{aligned} \right. \quad (9)$$

$$s. t. \left\{ \begin{aligned} H_g - 31.24 - 1.23e^{\frac{193.8x_2}{39.49x_1 + 40.17x_2 + 41.87x_3 + 38.35x_4}} &\leq 0, \quad i=1, 2, \dots, n-1 \\ E_L \leq 1.752 - 0.006132x_2 - 0.01752x_3 - 0.01752x_4 &\leq E_H, \quad i=1, 2, \dots, n \\ \sum x_i &= 100, \quad i=1, 2, \dots, n \\ 0 &\leq x_1 \leq 97 \\ 0 &\leq x_2 \leq 97 \\ 1.5 &\leq x_3 \leq 10 \\ 1.5 &\leq x_4 \leq 10 \end{aligned} \right. \quad (10)$$

量水平和组分的上下界含量作为线性约束条件。

3.1.3 数学模型

根据上述分析,参照式(1)和式(2),建立 HMX/TATB/F2314/F2311 体系配方设计的非线性约束最优化数学模型(见式(9)和式(10))。

3.2 优化设计结果

利用 MATLAB (V6.1) 软件中优化工具中的 fminimax 函数对上述数学模型求解,获得在不同能量水平和特性落高设计值的约束下,配方组成的最优解,结果列于表 2。

从表 2 可知,利用基于实验建立的非线性优化设计数学模型,不仅可以设计出配方的组分配比,还可以给出配方的能量、感度等性能。此外,从表 2 还注意到如下现象:(1) 设计配方的能量基本等于能量水平的下限,这是因为炸药的能量与感度存在矛盾,要使配方的安全性也达到优化,能量在限定范围内越低越好;(2) 组分含量尤其是粘结剂含量的下限对设计结果有重要影响,在同一能量水平下,设计配方粘结剂的含量等于约束条件中粘结剂含量的下限值,这是因为设计模型是以能量最大化为目标之一,而粘结剂属于惰性组分(含能粘结剂除外),对能量几乎没贡献(或者贡献很小),因此其含量越少,配方的能量越高。

3.3 设计验证

为验证上述设计结果,从表 2 中选取代号为 PBX-3、PBX-4、PBX-7 和 PBX-10 的设计配方进行实验验证,为方便实验,个别组分根据设计结果作了适当微调,实验结果见表 3。

表 2 不同设计指标约束下配方组成的最优解及其性能

Table 2 The optimal solutions of compositions and their properties subjected to different G

compositions	design input		content bound	design output				properties		
	H_g	$E_L \sim E_H$		volume percent $x_i/\%$				E_{cyl} /MJ · kg ⁻¹	H_{50} /cm	G_{50} /mm
				HMX	TATB	F2314	F2311			
PBX-1	40	1.00 ~ 1.20	$0 \leq x_1 \leq 97, 0 \leq x_2 \leq 97$ $1.5 \leq x_3 \leq 10, 0 \leq x_4 \leq 10$	0	97.00	1.50	1.50	1.1046	>163.8	9.80
PBX-2	40	1.00 ~ 1.20	$0 \leq x_1 \leq 93, 0 \leq x_2 \leq 93$ $1.5 \leq x_3 \leq 10, 0 \leq x_4 \leq 10$	0	93.00	1.50	5.50	1.0591	>141.4	10.58
PBX-3	40	1.00 ~ 1.20	$0 \leq x_2 \leq 93, x_1 = x_4 = 0$ $1.5 \leq x_3 \leq 10$	0	93.00	7.0	0	1.0591	>139.1	10.67
PBX-4	40	1.22 ~ 1.30	$0 \leq x_1 \leq 93, 0 \leq x_2 \leq 93$ $3 \leq x_3 \leq 10, 1 \leq x_4 \leq 10$	20.67	75.33	3.00	1.00	1.22	>78.3	13.95
PBX-5	40	1.25 ~ 1.30	$0 \leq x_1 \leq 93, 0 \leq x_2 \leq 93$ $1.5 \leq x_3 \leq 10, 0 \leq x_4 \leq 10$	20.92	77.58	1.50	0	1.25	>83.7	13.53
PBX-6	40	1.31 ~ 1.40	$0 \leq x_1 \leq 93, 0 \leq x_2 \leq 93$ $2.5 \leq x_3 \leq 10, 2 \leq x_4 \leq 10$	36.28	59.22	2.50	2.00	1.31	>53.0	16.63
PBX-7	40	1.40 ~ 1.48	$0 \leq x_1 \leq 93, 0 \leq x_2 \leq 93$ $1.5 \leq x_3 \leq 10, 1.5 \leq x_4 \leq 10$	48.17	48.83	1.50	1.50	1.4	>44.5	18.11
PBX-8	30	1.50 ~ 1.60	$0 \leq x_1 \leq 93, 0 \leq x_2 \leq 93$ $1.5 \leq x_3 \leq 10, 1.5 \leq x_4 \leq 10$	64.48	32.52	1.50	1.50	1.5	>37.3	19.85
PBX-9	30	1.56 ~ 1.60	$0 \leq x_1 \leq 93, 0 \leq x_2 \leq 93$ $4 \leq x_3 \leq 10, 4 \leq x_4 \leq 10$	83.55	8.45	4.00	4.00	1.56	>33.1	22.10
PBX-10	30	1.60 ~ 1.70	$0 \leq x_1 \leq 93, 0 \leq x_2 \leq 93$ $13 \leq x_3 \leq 10, 3 \leq x_4 \leq 10$	86.35	7.65	3.00	3.00	1.60	>33.0	22.61

表 3 几种 PBX 配方性能设计与实验结果比较

Table 3 Comparison of design results of performances with its experiment results for several PBX formulations

compositions		composition/%				properties				
		HMX	TATB	F2314	F2311	ρ_{TMD} /g · cm ⁻³	ρ_0 /g · cm ⁻³	E_{cyl} /MJ · kg ⁻¹	H_{50} /cm	G_{50} /mm
PBX-3	design value	0	93.00	7.00	0	1.944	—	1.06(-0.9%)	>139	10.67(4.6%)
	experimental value	0	93.00	7.00	0	1.944	1.908	1.07	>130	10.20
PBX-4	design value	20.67	75.33	3.00	1.00	1.933	—	1.22(-2.5%)	>78.3	13.95(2.1%)
	experimental value	21.00	75.00	3.00	1.00	1.933	1.895	1.25	82.0	13.66
PBX-7	design value	48.17	48.83	1.50	1.50	1.922	—	1.40(4.5%)	>44.5	18.11(-5.8%)
	experimental value	48.00	49.00	1.50	1.50	1.922	1.884	1.34	56.0	19.23
PBX-10	design value	86.35	7.65	3.00	3.00	1.909	—	1.60(2.6%)	>33.0	22.61(-0.3%)
	experimental value	86.00	8.00	3.00	3.00	1.909	1.872	1.56	33.6	23.4

从表 3 所列结果看出,设计值和实验值符合得较好。设计模型给出的能量预估值与实测值的偏差在 5% 以内,给出的冲击波感度预估值与实测值的偏差在 6% 以内,给出的特性落高预估值与实测结果在同一水平,说明该模型能够设计出满足要求的 PBX 配方。

4 结 论

对 HMX/TATB/F2314/F2311 配方体系,采用本文建立的多目标非线性优化设计模型设计的配方的圆筒比动能、特性落高、冲击波感度均与实验结果一致。表明在获得特定配方体系的性能-组成函数的基础上,

可以建立多目标非线性优化设计数学模型,实现能量、感度等性能优化匹配设计,得到符合要求的高能不敏感 PBX 炸药配方。这说明本文提出的高能不敏感 PBX 配方设计的一般数学模型具有可行性,从而改变混合炸药配方设计的“配方调整 \leftrightarrow 性能验证”的传统循环模式,实现高能不敏感 PBX 炸药配方的理论设计。

参考文献:

- [1] 唐健军,白文娟. 多元混合炸药的配方设计及最优化问题[J]. 爆破器材,1992,21(5): 1-5.
TANG Jian-jun, BAI Wen-juan. Prescription design and optimization of the multi-component mixed explosives[J]. *Explosive Materials*,1992,21(5): 1-5.
- [2] 韦秉旭,唐健军,吴雄. 乳化炸药的配方设计及 BKW 状态方程的应用[J]. 矿冶工程,2002,22(3): 29-31.
WEI Bing-xu, TANG Jian-jun, WU Xiong. Formulation design of emulsion explosives and application of BKW state equation[J]. *Mining and Metallurgical Engineering*,2002,22(3): 29-31.
- [3] 陆明,吕春绪. 粉状工业炸药配方设计的数学模型[J]. 爆炸与冲击,2001,21(3): 200-214.
LU Ming, Lü Chun-xu. The mathematical model for the prescription design of powdery commercial explosives[J]. *Explosion and Shock Waves*,2001,21(3): 200-214.
- [4] 陆明,吕春绪. 乳化炸药配方设计的数学模型研究[J]. 爆炸与冲击,2002,22(4): 338-342.
LU Ming, Lü Chun-xu. The mathematical model for the formulation design of emulsion explosive [J]. *Explosion and Shock Waves*,2002,22(4): 338-342.
- [5] 陆明,吕春绪. 乳化炸药配方设计的数学方法[J]. 爆破器材,2003,32(4): 1-4.
LU Ming, Lü Chun-xu. The mathematical method for formulation design of emulsion explosive [J]. *Explosive Materials*,2003,32(4): 1-4.
- [6] 王海芳,刘天生,王凤英. 数学模型法在混合炸药配方设计中的应用[J]. 火炸药学报,2004,27(3): 55-57.
WANG Hai-fang, LIU Tian-sheng, WANG Feng-ying. Application of the mathematic model method in the formulation design of composite explosive[J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*,2004,27(3): 55-57.
- [7] Huang Heng-jian, Huang Hui, Nie Fu-de, et al. Nonlinear optimum design method for high energy insensitive polymer bonded explosives(I) [C] // 2009 International Autumn Seminar on Propellants, Explosives and Pyrotechnics. Kunming, Yunnan, China. 2009.
- [8] Kury J W, Horing R C, Lee E L, et al. Metal Acceleration by Chemical Explosives [C] // Proc. 4th Symp. (Int.) on Detonation. Washington, DC, USA. 1965.
- [9] Zeman S, Miloslav Krupka. New aspects of the impact reactivity of polynitro compounds. part III. impact sensitivity as a function of the intermolecular interactions [J]. *Propellants Explosives and Pyrotechnics*,2003,28(6): 301-307.
- [10] Zeman S. New aspects of the impact reactivity of polynitro compounds. part IV. allocation of polynitro compounds on the basis of their impact sensitivities [J]. *Propellants Explosives and Pyrotechnics*,2003,28(6): 308-313.
- [11] 黄亨建,董海山,张明,等. 添加剂与 RDX 的界面作用及其对撞击感度的影响研究 [J]. 爆炸与冲击,2003,23(2): 169-172.
HUANG Heng-jian, DONG Hai-shan, ZHANG Ming, et al. A study on the interface action between RDX and desensitizers and related effects on impact sensitivity [J]. *Explosion and Shock Waves*,2003,23(2): 169-172.
- [12] Huang Heng-jian, Dong Hai-shan, Hua Cheng. A quasi-theoretic method for the selection of desensitizers in the designs of explosive formulations [C] // 2003 International Autumn Seminar on Propellants, Explosives and Pyrotechnics. Guilin, Guangxi, China. 2003.

Nonlinear Optimum Design Method for High Energy Insensitive PBXs(II)

HUANG Heng-jian, HUANG Hui, NIE Fu-de, LIU Shi-jun, ZHAN Chun-hong

(Institute of Chemical Materials, CAEP, Mianyang 621900, China)

Abstract: In order to explore formulation design theory and methods for high energy insensitive polymer bonded explosives (PBXs), the general mathematical model of multi-objective nonlinear optimization design for high energy insensitive PBX formulations was proposed, based on the investigation of structure-property relationship for PBXs. The empirical functions of sensitivities versus compositions of TATB/HMX-based PBX formulations were acquired from experimental data. And a specific mathematical model for HMX/TATB based PBXs was set up accordingly, using the cylinder specific kinetic energy function, impact sensitivity function and shock sensitivity function as multiple objective functions, with the energy level, sensitivity level and the content bounds as constraint conditions. Ten PBX compositions of 8 energy levels were designed and their energies as well as sensitivities were predicted according to the specific mathematical model. Four of the 10 compositions were selected to be tested. As a result, the error of the prediction values for energies and shock sensitivities according to the design model deviates within 5% and 6% respectively, while the prediction values of impact sensitivities are in the same level with experimental results.

Key words: applied chemistry; polymer bonded explosive (PBX); formulation design; nonlinear optimum

CLC number: TJ55; O69

Document code: A

DOI: 10.3969/j.issn.1006-9941.2012.02.001