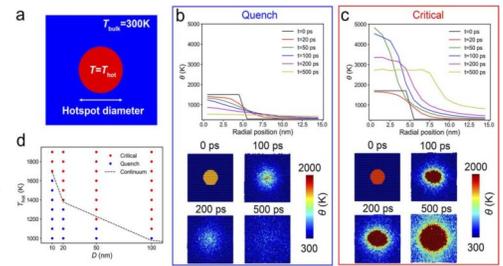


普渡大学报道了应用于RDX的粗粒化反应模型

高能炸药在极端条件下的热、化学和力学响应的预测对其性能 and 安全性非常重要。普渡大学研究团队介绍了一种应用于1,3,5-三硝基-1,3,5-三嗪(RDX)的基于粒子的反应性模型,该模型采用反应性广义能量守恒耗散粒子动力学,具有分子分辨率,参数从分子动力学模拟及量子力学计算获得,因此连接了原子尺度过程和包括微结构和缺陷在内的介观尺度行为。与原子模拟相比,可准确捕捉到RDX在一系列热载荷下的响应。此外,该模型在过驱动状态下的Hugoniot响应与原子模拟和实验结果相当吻合。基于该模型的高计算效率,对具有数百万个分子的介观体系进行模拟,研究了RDX中热点的尺寸依赖临界性。该模型为微结构和缺陷在冲击-爆燃转变中的作用等介观尺度现象研究提供了一种工具。

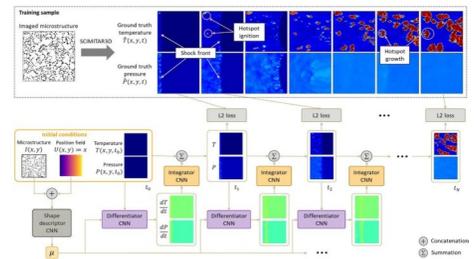
源自: Lee B H, Sakano M N, Larentzos J P, et al. A coarse-grain reactive model of RDX: Molecular resolution at the μm scale[J]. The Journal of Chemical Physics, 2023, 158(2): 024702.



弗吉尼亚大学提出物理感知的递归卷积(PARC)神经网络研究含能材料的介观尺度响应

微结构严重影响冲击起爆下含能材料的热力响应,因此在“材料设计”框架下设计含能材料的微结构很重要。然而,需要大量的模拟来构建复杂的含能材料结构-性能-行为关系限制了目前的设计实践进程。弗吉尼亚大学研究团队提出了基于深度学习算法的物理感知递归卷积(PARC)神经网络,能够从少量具有高分辨率的直接数值模拟(DNS)中学习含能材料的介观尺度热力学行为。研究结果表明,PARC能够预测冲击下含能材料的热力响应,预测精度与DNS相当,但计算时间明显更少。此外,PARC中的人工神经元可以揭示含能材料热力学响应的重要特征,可为含能材料热力响应提供新见解。

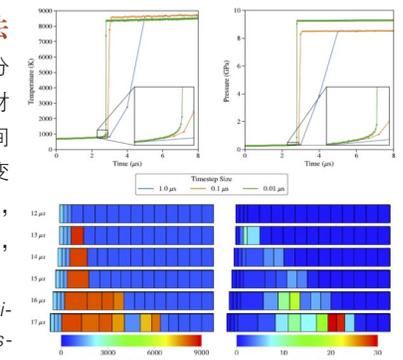
源自: Nguyen P C H, Nguyen Y T, Choi J B, et al. PARC: Physics-aware recurrent convolutional neural networks to assimilate meso scale reactive mechanics of energetic materials[J]. Science advances, 2023, 9(17): eadd6868.



美国陆军研究实验室提出描述含能材料多时间尺度化学反应的异质多尺度方法

含能材料一般具有复杂的分子结构,而且组成成分不均匀,其化学分解和能量释放发生在分子尺度,且与宏观尺度的材料特性和爆轰响应息息相关,因此多尺度模型对精确描述含能材料行为至关重要。美国陆军研究实验室提出了一种异质多尺度方法(HMM)来描述不同时间尺度上的化学反应。通过直接耦合基于粒子的微观粗粒化化学模型与宏观连续有限元形变模型,该宏观模型可获得不同边界条件下的物质状态方程和瞬态化学反应速率。进一步地,通过对含能材料1,3,5-三硝基-1,3,5-三嗪(RDX)慢烤以及缩比热爆炸(STEX)实验的模拟,验证了该模型的有效性。

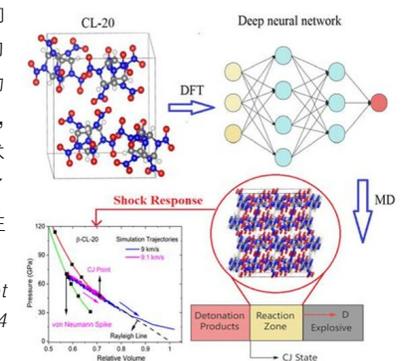
源自: Leiter K W, Larentzos J P, Barnes B C, et al. Temporal scale-bridging of chemistry in a multi-scale model: Application to reactivity of an energetic material[J]. Journal of Computational Physics, 2023, 472: 111682.



北京理工大学开发了描述含能材料Chapman-Jouguet爆轰性能的分子动力学深度神经网络势函数

含能材料的爆轰性能对军事应用至关重要,然而对爆轰过程的具体细节和机理还缺乏深入的认识。北京理工大学研究团队基于深度势模型,开发了首个用于含能材料冲击爆轰分子动力学模拟的深度神经网络势函数NNP_Shock,该势函数具有DFT的计算精度,但计算效率为DFT的 10^6 倍。进一步地,利用此势函数对高能含能材料2,4,6,8,10,12-六硝基-2,4,6,8,10,12-六氮杂异伍兹烷(CL-20)开展了冲击爆轰分子动力学模拟,首次通过多尺度冲击技术(MSST)获得了理论Chapman-Jouguet(C-J)爆速和爆压,且与实验结果吻合较好,并获得了Hugoniot曲线和初始反应机理。因此,NNP_Shock势函数可成功用于研究CL-20的爆轰性能和冲击感度,并可用于其他种类含能材料的研究中。

源自: Zhang J, Guo W, Yao Y. Deep Potential Molecular Dynamics Study of Chapman-Jouguet Detonation Events of Energetic Materials[J]. The Journal of Physical Chemistry Letters, 2023, 14(32): 7141-7148.



(武汉大学 黄小娜 编译)