

文章编号:1006-9941(XXXX)XX-0001-09

PBX炸药热分解参数的预测模型构建与应用

曹落霞¹,王浩¹,周天宇²,黄谦¹,吕子剑¹,周阳¹

(1. 中国工程物理研究院化工材料研究所, 四川 绵阳 621999; 2. 重庆邮电大学先进制造工程学院, 重庆市 南岸区 400065)

摘要: 为实现慢烤模型在炸药配方与装药行为全链条预测,并消除点火后温度场数值“奇点”问题,采用多组分参数拟合模型,对聚合物粘结炸药PBX-9501、PBX-9502及新型PBX-4的热分解响应与慢烤特性进行了系统性研究。通过构建组分参数驱动的全过程模拟框架,建立基于Arrhenius反应动力学与JWL产物气体状态方程的多物理场耦合模型,实现从炸药热分解初态到壳体破裂终态的全过程数值表征。研究表明:PBX-9501和PBX-9502的点火时间模拟值与已有实验数据误差分别为3.4%和5.7%,验证了模型的可靠性;PBX-4的爆响时间预测值与验证实验均值误差仅为2.3%,验证了模型的泛化能力。通过动态调控产物气体状态参数,成功将爆炸温度稳定在3328~3502 K的合理区间,解决了已有纯固体烤燃模型中的点火后温度场“奇点”问题。

关键词: 聚合物粘结炸药(PBX);烤燃实验;数值模拟;点火;产物膨胀

中图分类号: TJ55;O389

文献标志码: A

DOI:10.11943/CJEM2025014

0 引言

武器弹药在储存、运输以及使用的过程中,有遭受意外火灾的风险。在持续的热载荷作用下,弹药可能发生燃烧、爆炸甚至殉爆等事故。目前对弹药的安全性研究主要有烤燃试验和数值模拟两种手段。慢烤试验作为烤燃试验的一种特定形式,对装药在缓慢热刺激下的宏观响应特性进行直接观测,从而对弹药的热安全性进行评估。数值模拟克服了慢烤试验成本高、周期长、系统数据难以全面准确测量的缺点。因此,发展弹药慢烤的数值模拟评估方法,为合理评估炸药热安全性提供理论依据,是目前国内外工程界和科研界的热点课题。作为弹药主装药,聚合物粘结炸药(PBX)的慢烤特性是弹药热安全性的关键控制因素,国内外已开展系统性研究。1981年,McGuire和Tarver等^[1]提出了单质炸药和PBX慢烤过程的化学分

解模型和热传导模型。美国劳伦斯·利弗莫尔实验室开发的含能材料热化学模块CHEETAH,通过嵌入ALE3D等有限元或流体动力学软件中,实现了含能材料慢烤的升温与产物驱动壳体膨胀破碎的全过程模拟^[2]。在国内,北京理工大学对黑索今(RDX)、三硝基甲苯(TNT)以及PBX等多种炸药的慢烤试验进行了数值模拟研究^[3-4],中国工程物理研究院以及西安近代化学研究所等机构也建立了PBX的慢烤试验数值模拟方法^[5-7],对慢烤模拟计算的发展有着重要的指导意义。

目前慢烤实验的数值模拟研究仍存在一些不足,国外的CHEETAH等热化学模块模拟PBX时仍依赖实验标定的宏观参数,暂时无法从组分特性反演材料行为,且模拟结果在点火后的高温高压区存在较大误差。国内目前的研究方法不能实现从配方到装药的慢烤特性预测,从而无法指导PBX的配方设计;且目前使用的炸药反应速率模型和升温模型不能解决装药局部点火后出现的温度“奇点”问题。

基于以上问题,本研究开展了PBX慢烤全过程模拟框架的建立工作,采用PBX-9501和PBX-9502对该框架进行了数值模拟验证,并针对新配方的PBX-4进行了实验和模拟结果对比分析,旨在为PBX慢烤特性预测提供有价值的研究思路、计算模型和模拟方法,实

收稿日期:2025-01-15;修回日期:2025-03-16

网络出版日期:2025-04-08

基金项目:国家自然科学基金(12202415,12472371)

作者简介:曹落霞(1987-),男,助理研究员,主要从事含能材料爆轰安全模型研究。e-mail:lcao@caep.cn

通信联系人:周阳(1980-),男,研究员,主要从事含能材料爆轰安全基础研究。e-mail:zhouy@caep.cn

引用本文:曹落霞,王浩,周天宇,等. PBX炸药热分解参数的预测模型构建与应用[J]. 含能材料, DOI:10.11943/CJEM2025014.

CAO Luo-xia, WANG Hao, ZHOU Tian-yu, et al. Development and Application of a Prediction Model for Thermal Decomposition Parameters of PBX Explosives[J]. Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao), DOI:10.11943/CJEM2025014.

现PBX慢烤实验的全过程仿真。

1 计算模型

1.1 模型基本假设

本研究基于连续介质力学与反应动力学理论,构建了PBX组分参数驱动的跨尺度仿真模型。模型建立遵循以下理论约束与实验规律:首先,基于PBX体系各组分在非冲击条件下的热响应特性,建立宏观性能与微观组分的参数映射关系;其次,通过热-力-化耦合作用分析,确定主导烤燃过程的关键物理场;最后,结合JWL状态方程与壳体失效判据^[8],构建全链条仿真流程。具体采用以下基本假设:

(1)线性混合法则适用性:PBX体系密度、热容等热物理参数满足线性混合关系^[1];

(2)组分相互作用简化:忽略化学催化效应,仅考虑温度场与热流传递引发的组分间热耦合作用(适用于不含敏化/钝化剂的PBX体系)^[8];

(3)反应路径简化:基于烤燃过程特征温度范围,假设PBX中各组分的相变等中间反应过程可忽略,可采用单步Arrhenius反应模型描述热分解^[1];

(4)气固界面平衡:反应产物与未反应炸药界面处满足动态压力平衡与温度连续条件^[9];

(5)产物状态限定:气体产物状态服从JWL方程,不考虑二次分解引起的物性参数时变效应^[9];

(6)热耗散忽略:不考虑金属壳体向外部环境的耗散,仅关注含能材料内部的热量累积与传递。

1.2 模型构建

当组分参数和比例已知时,对于 n 种组分的PBX,由质量守恒可得理论最大密度为:

$$\rho_{\text{TMD}} = \frac{1}{\sum_{i=1}^n \frac{w_i}{\rho_i}} \quad (1)$$

式中, ρ_{TMD} 为PBX的理论最大密度, $\text{kg}\cdot\text{cm}^{-3}$; w_i 为各组分的质量比,无量纲; ρ_i 为对应组分的密度, $\text{kg}\cdot\text{cm}^{-3}$ 。

考虑到PBX在压制过程中通常无法完全压密实,从而不能达到理论密度,故加入密实度参数,则实际密度为:

$$\rho = r\rho_{\text{TMD}} \quad (2)$$

式中, ρ 为PBX的实际密度, $\text{kg}\cdot\text{cm}^{-3}$; r 为密实度,无量纲。

根据能量守恒可得,PBX体系的单位质量分解热和热容分别为:

$$Q = \sum_{i=1}^n (w_i Q_i) \quad (3)$$

$$C_v = \sum_{i=1}^n (w_i C_{v,i}) \quad (4)$$

式中, Q 为PBX的单位质量分解热, $\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}$; Q_i 为各组分的单位质量分解热, $\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}$; C_v 为PBX的热容, $\text{J}\cdot(\text{kg}\cdot\text{K})^{-1}$; $C_{v,i}$ 为各组分的单位质量分解热, $\text{J}\cdot(\text{kg}\cdot\text{K})^{-1}$ 。

PBX体系的平均热导率近似满足体积平均关系:

$$k = \sum_{i=1}^n k_i w_i \frac{r}{\rho_i} \frac{1}{\sum_{i=1}^n \frac{w_i}{\rho_i}} \quad (5)$$

式中, k 为PBX的热导率, $\text{W}\cdot(\text{m}\cdot\text{K})^{-1}$; k_i 为对应组分的密度, $\text{W}\cdot(\text{m}\cdot\text{K})^{-1}$ 。

PBX各组分的分解速率为:

$$\frac{d\lambda_i}{dt} = Z_{r,i} \exp\left(-\frac{E_{a,i}}{RT_i}\right) \quad (6)$$

式中, λ_i 为各组分的反应度,无量纲; t 为时间, s ; $Z_{r,i}$ 为各组分的指前因子, s^{-1} ; $E_{a,i}$ 为各组分的活化能, $\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$; R 为摩尔气体常数, $8.314 \text{ J}\cdot(\text{mol}\cdot\text{K})^{-1}$ 。

当反应程度较低时,可近似认为 w_i 不随时间 t 变化,且局部范围内的温度近似平衡,故整体反应速率可近似为:

$$\frac{d\lambda}{dt} = \sum_{i=1}^n w_i Z_{r,i} \exp\left(-\frac{E_{a,i}}{RT}\right) \quad (7)$$

式中, λ 为PBX的反应度,无量纲; T 为PBX的温度, K 。

考虑采用Arrhenius形式的温度函数拟合PBX混合体系的反应速率,使得:

$$Z_r \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \approx \sum_{i=1}^n w_i Z_{r,i} \exp\left(-\frac{E_{a,i}}{RT}\right) \quad (8)$$

式中, Z_r 为PBX的指前因子, s^{-1} ; E_a 为PBX的活化能, $\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$ 。由于PBX组分的分解温度大多为数百K,而活化能的量级通常为 $10^5 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}$,故可近似认为 $RT_0 \ll E_a$,得到PBX指前因子和活化能的近似值为:

$$Z_r = \sum_{i=1}^n (w_i Z_{r,i}) \quad (9)$$

$$E_a = \exp\left[\sum_{i=1}^n (w_i \ln E_{a,i})\right] \quad (10)$$

已有的烤燃实验数值模拟^[2-7]仅能获得点火前的温度分布与点火时间,整个结构仍全部视为固体,因此既不能描述产物膨胀的后续效应,同时点火后的温度场也会立刻出现计算温度迅速升高至数万K甚至更高的奇点。基于已有方法的不足,本研究在已有的慢烤模型基础上,增加了基于JWL形式的状态方程描述炸

药分解后的气体反应产物状态:

$$p = A \left(1 - \frac{\omega}{R_1 v} \right) \exp(-R_1 v) + B \left(1 - \frac{\omega}{R_2 v} \right) \exp(-R_2 v) + \frac{w \varepsilon_0}{v} \quad (11)$$

式中, A 和 B 为压力量纲的常数, GPa; R_1 、 R_2 和 ω 为无量纲常数; ε_0 为单位体积初始比内能, GPa; v 为相对体积, 无量纲。反应区中混合物的比内能定义为:

$$\varepsilon = (1 - \lambda) \varepsilon_s + \lambda \varepsilon_g + (1 - \lambda) Q \quad (12)$$

体系温度变化受体积压缩和化学反应两部分影响, 故体系温度增量可表示为:

$$C_{v,m} dT = d\varepsilon - J dv + H d\lambda \quad (13)$$

其中 $C_{v,m}$ 是等效热容, $J \cdot (kg \cdot K)^{-1}$, 满足:

$$C_{v,m} = (1 - \lambda) C_{v,s} + \lambda C_{v,g} \quad (14)$$

J 和 H 均为温度计算求解过程的中间变量:

$$J = (1 - \lambda) \left. \frac{d\varepsilon_s}{dv} \right|_{T,\lambda} + \lambda \left. \frac{d\varepsilon_g}{dv} \right|_{T,\lambda} \quad (15)$$

$$H = \varepsilon_s - \varepsilon_g + q - (1 - \lambda) \left. \frac{d\varepsilon_s}{d\lambda} \right|_{T,v} - \lambda \left. \frac{d\varepsilon_g}{d\lambda} \right|_{T,v} \quad (16)$$

与已有烤燃模型相比, 本模型认为点火后炸药的气体产物状态以及固体质量的减少对温度的影响不可忽略, 模型对应的程序通过在每个计算步内对产物气体及固体炸药的压力和温度进行反复迭代, 直至界面

单元的气体与固体压力与温度达到平衡。以上模型改进了传统烤燃模型将体系视为固体所带来的点火后温度奇点与计算中断问题。模型的组分基础参数来自小尺寸一维热爆炸(ODTX)试验标定, 如表1所示。

1.3 模型验证

为验证模型的可靠性, 进行了以下两步工作:

(1) 利用表1的组分基础参数, 采用公式(1)~(10)计算了传统 HMX 基炸药 PBX-9501、传统 TATB 基炸药 PBX-9502 以及一种新配方 HMX/TATB 混合基炸药 PBX-4 的热化学参数, 其中 PBX-9501 的组分质量比为 95% HMX、2.5% Estane 5703 和 2.5% 双(2, 2-二硝基丙醇)缩乙醛/双(2, 2-二硝基丙醇)缩甲醛(BDNPA/F)^[21-23], PBX-9502 的组分质量比为 95% TATB 和 5% Kel-F 800^[22, 24], PBX-4 的组分的质量比为 87% HMX、7.8% TATB、2.7% 氟橡胶(fluoropolymer)、1.5% 石蜡(wax)和 1.0% As-Gr。美国军用含能材料测试标准 MIL-STD-1751^[21]认为, 压装 PBX 的密实度通常在 0.98 ± 0.01 , 故模拟将压装 PBX 的密实度 r 设置为 0.98。模型得到的热化学参数结果如表2所示。

(2) 建立如图1所示的有限元仿真模型, 采用表2的热化学参数, 在传统慢烤模型^[2-7]的基础上, 结合公式(11)~(16)和表3给出的产物状态方程参数(其中

表1 PBX各组分材料热化学参数

Table 1 Thermal-chemical parameters of PBX components

component	$\rho / \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	$C_v / \text{J} \cdot (\text{kg} \cdot \text{K})^{-1}$	$k / \text{W} \cdot (\text{m} \cdot \text{K})^{-1}$	$Q / \text{J} \cdot \text{kg}^{-1}$	Z_r / s^{-1}	$E_a / \text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$
HMX ^[10-12]	1905	1004.62	0.456	5.615×10^6	1.5984×10^{12}	1.4322×10^5
TATB ^[10, 12-13]	1930	1088.33	0.536	2.94×10^6	4.356×10^{11}	1.4196×10^5
Estane 5703 ^[14-16]	1197	1155	0.02	-3.98×10^6	7.896×10^{13}	1.6118×10^5
BDNPA/F ^[15-17]	1411	1315	0.325	2.825×10^3	2.1464×10^{14}	1.6383×10^5
Kel-F 800 ^[12, 15]	2020	1000.43	0.0527	-5.871×10^4	9.9349×10^{17}	2.7233×10^5
fluoropolymer ^[18-19]	1941	1000.41	0.053	-5.263×10^4	2.692×10^{20}	2.9476×10^5
wax ^[15, 20]	915	2190.00	0.21	2.2×10^5	1.91×10^{10}	9.2397×10^4
As-Gr ^[14-15]	6000	330.00	50.2	6.0×10^6	1.5×10^{12}	5.0×10^5
Al6601-T6 ^[14]	2700	896	167	/	/	/
steel ^[14]	8030	1611.0	51.0	/	/	/

Note: ρ is density, C_v is specific heat; k is thermal conductivity; Q is decomposition heat per unit mass; Z_r is pre-exponential factor and E_a is activation energy.

表2 PBX-9501和PBX-9502慢烤试验的数值模拟材料参数

Table 2 PBX model parameters for slow-cook off simulations

charge	r	$\rho / \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	$C_v / \text{J} \cdot (\text{kg} \cdot \text{K})^{-1}$	$k / \text{W} \cdot (\text{m} \cdot \text{K})^{-1}$	$Q / \text{J} \cdot \text{kg}^{-1}$	Z_r / s^{-1}	$E_a / \text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$
PBX-9501	0.98	1842	1016.14	0.4260	5.334×10^6	8.858×10^{12}	1.441×10^5
PBX-9502	0.98	1896	1083.94	0.5026	2.793×10^6	4.967×10^{16}	1.467×10^5
PBX-4	0.98	1852	1022.07	0.5886	5.178×10^6	7.268×10^{18}	1.468×10^5

Note: r is compactness (actual density to theoretical maximum density).

表3 PBX-9501和PBX-9502产物的JWL状态方程参数

Table 3 JWL model parameters of PBX products

charge	$C_{v,g} / \text{J} \cdot (\text{kg} \cdot \text{K})^{-1}$	A / GPa	B / GPa	R_1	R_2	ω	E_0 / GPa
PBX-9501 ^[14]	1000	852.4	18.02	4.55	1.3	0.38	10.2
PBX-9502 ^[14]	1000	460.3	9.544	4.0	1.7	0.48	7.07
PBX-4	1000	652.7	9.678	4.3	1.1	0.35	9.8

Note: $C_{v,g}$ is gas specific heat; A , B , R_1 , R_2 and ω are JWL model constants and E_0 is detonation energy density.

PBX-9501和PBX-9502的产物状态方程参数来自参数手册^[14],PBX-4的产物状态方程参数则通过圆筒实验标定),对PBX-9501和PBX-9502样品的桑迪亚仪器化热点火(SITI)的慢烤试验^[23-25]进行数值仿真:将PBX样品放置于如图1(a)所示的Al6601-T6铝壳中并对壳体侧表面加热,以模拟图1(b)所示的真实慢烤实验,并将仿真得到的升温速率曲线与Hobbs等^[23-24]的

实验结果进行对比;对PBX-4进行恒定加热速率的慢烤试验仿真:将PBX-4样品放置于如图2(a)所示的Q235钢壳体中并对壳体侧表面加热,其升温速率为 $3 \text{ K} \cdot \text{min}^{-1}$ 。为验证仿真结果的可靠性,本文采用图2(b)所示的装置对真实PBX-4样品开展了五次慢烤实验,其实验样品的组分、加热弹构型与材料以及外壳升温速率均与数值仿真保持一致。

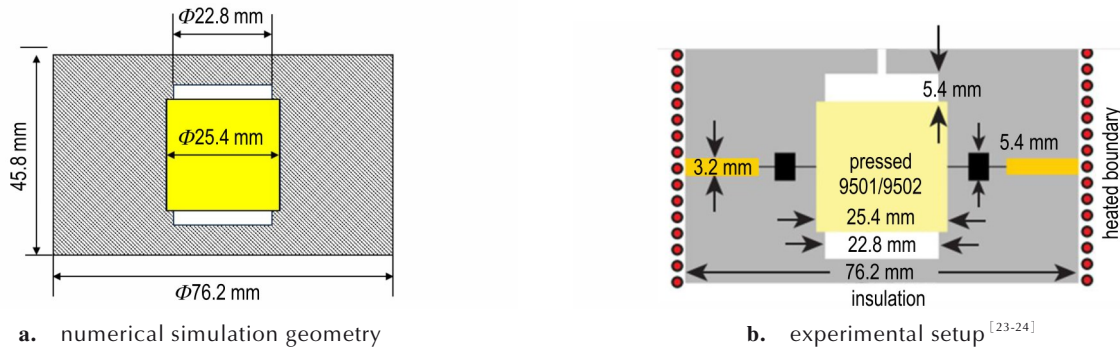


图1 PBX-9501和PBX-9502的SITI慢烤仿真模型与实验装置示意图

Fig.1 Diagrams of the SITI simulations and experiments for PBX-9501 and PBX-9502

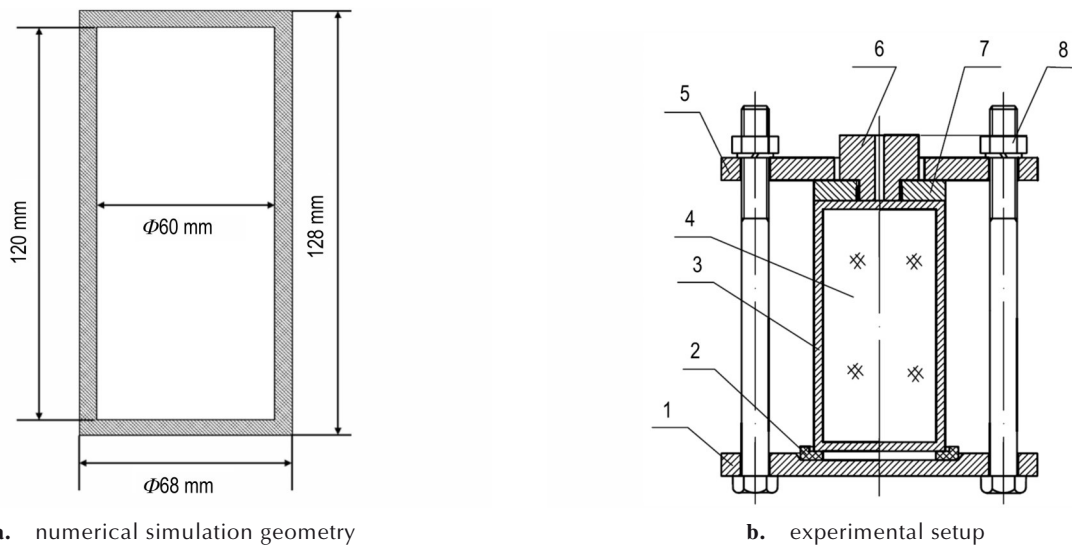


图2 PBX-4的慢烤仿真模型与实验装置示意图

1—下夹板,2—支座垫圈,3—壳体,4—PBX-4,5—上夹板,6—开孔螺栓,7—顶盖,8—螺栓

Fig.2 Diagrams of the slow cook-off simulations and experiments for PBX-4

1—lower clamp plate,2—support washer,3—housing shell,4—PBX-4,5—upper clamp plate,6—drilled bolt,7—top cover,8—bolt

2 结果与讨论

2.1 PBX-9501和PBX-9502的SITI仿真结果

表4给出了使用本研究的拟合模型得到的PBX-9501和PBX-9502热参数进行SITI慢烤试验仿真的结果,并将PBX-9501和PBX-9502的仿真结果与文献实验结果^[23-25]进行了对比。

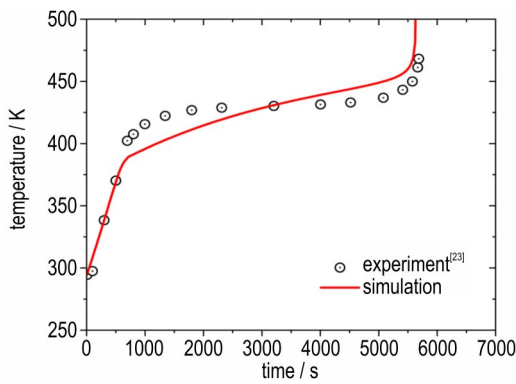
从表4可知,使用本研究的拟合模型对PBX-9501和PBX-9502的点火时间模拟值分别为5493 s(与试验相差3.4%)和2372 s(试验相差5.7%),点火温度模拟值分别为459 K(与试验相差3.6%)和546 K(与试验相差1.1%),模拟得到的温度曲线也与文献实验曲线趋势一致,如图3(a)和图3(b)所示。模拟显示PBX在点火后迅速分解导致了产物气体的迅速增加,慢烤装置的壳体受到产物膨胀的压力作用而发生,进而在

壳体顶部薄弱处产生裂纹,最终壳体发生破碎并形成破片,如图4所示,其裂纹产生的位置与文献报道一致^[23-24]。本模型进行SITI试验进行数值仿真得到PBX-9501的爆炸温度为3328 K,PBX-9502的爆炸温度为3502 K,与爆轰温度的试验测量值^[25]在量级上一致,证实本模型可以有效描述PBX点火后的产物膨胀,避免模拟点火后出现温度畸高的奇点。

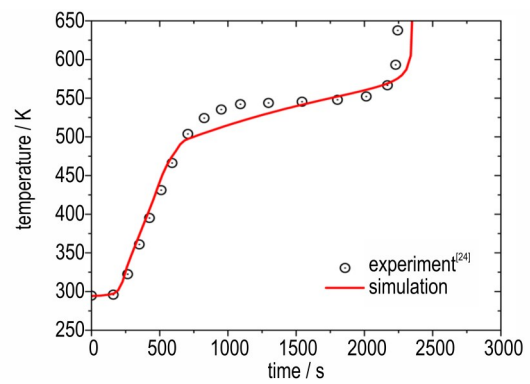
表4 各装药的点火时间和爆炸温度

Table 4 Ignition time and blast temperature of each sample charge

charge		time to ignition / s	ignition temperature / K	explode temperature / K
PBX-9501	simulation	5493	459	3328
	experiment ^[23, 25]	5685	443	2364-2853
PBX-9502	simulation	2372	546	3502
	experiment ^[24-25]	2244	540	1887-2477



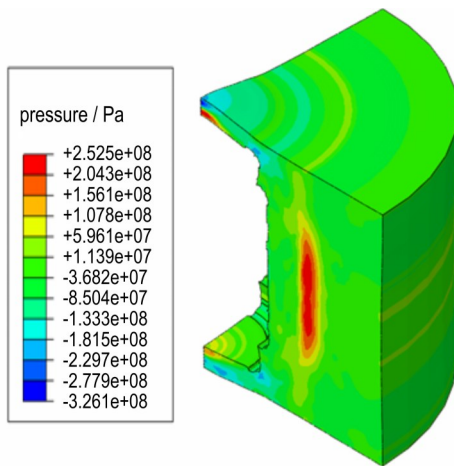
a. PBX-9501



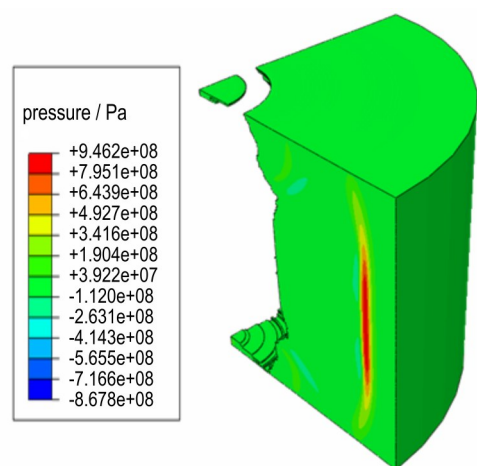
b. PBX-9502

图3 实验和模拟得到的PBX样品中心温度随时间变化曲线

Fig.3 Experimental and simulation temperature vs. time curves measured at the PBX sample center



a. pressure distribution of the PBX-9501 shell



b. pressure distribution of the PBX-9502 shell

图4 PBX-9501和PBX-9502点火后的壳体破碎模拟结果

Fig.4 Simulation results of the shell fracture of PBX-9501 and PBX-9502 after ignition

2.2 PBX-4的慢烤仿真与实验结果

将PBX-4的仿真结果与慢烤验证实验结果进行了对比,图3(c)给出了PBX-4的慢烤模拟温度曲线与五次实验的平均温度曲线,二者具有较好的一致性。表4给出了使用本研究的拟合模型得到的PBX-4热参数进行慢烤试验的仿真结果和五次实验的平均结果,表5给出了五次实验的具体结果。PBX-4点火前的模拟结果显示,当加热至4953 s时,炸药温度陡然上升,证明此时发生了点火,炸药的点火位置为上下端面边缘,点火温度为538 K;实验得到的平均点火时间为5068 s,点火时壳体平均温度为528 K。模拟预测得到的PBX-4的点火爆响时间与五次试验平均值的误差为2.3%;模拟预测得到的点火温度与五次试验平均值

的误差为1.9%。

PBX-4点火后的模拟结果显示,点火后10 μ s内炸药迅速分解,导致产物剧烈膨胀并撕裂壳体发生爆响。图5(a)为模拟得到的爆响时刻PBX-4产物温度分布,点火后的爆响温度(点火至爆响过程中PBX的局部最高温度)为3398 K,与HMX/TATB基炸药爆轰温度的经验结果在量级上一致。图5(b)为模拟得到的爆响时刻PBX-4产物膨胀撕裂壳体的图像,产物膨胀导致壳体首先在上下端面边缘的拐角附近产生应力集中,从而壳体在该位置首先发生拉伸断裂;实验得到PBX-4爆响时的反应烈度为爆燃或爆炸,爆响后上下夹板凸起变形,底盖脱落,壳体破裂形成数个较大破片,端盖膨胀变形,如图6所示。模拟得到的壳体破坏

表5 PBX-4慢烤实验现象

Table 5 Experimental results of PBX-4 slow cook-off tests

experiment No.	$\rho / \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	explode temperature / K	time to explode / s	overpressure / kPa	TNT equivalent / g	reaction type
1	1846	539	5040	20.7	26	deflagration
2	1842	534	5160	17.8	19	deflagration
3	1.851	526	5120	21.1	27	deflagration
4	1.843	515	5160	24.9	38	explosion
5	1.845	527	4860	21.6	29	deflagration

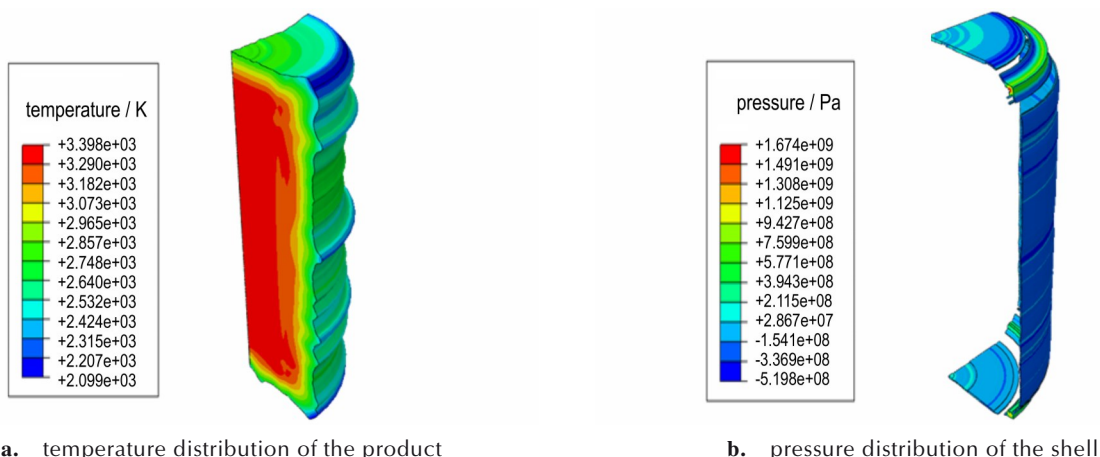


图5 PBX-4点火后的产物温度分布和壳体破碎模拟结果

Fig.5 Simulation results of the product temperature distribution and shell fracture of PBX-4 after ignition



图6 爆响后回收工装及样品照片

Fig.6 Recovered shells and samples after explode reaction

形式与实验结果基本一致。由此可见,本研究建立的参数预测方法与数值模拟方法都是可靠的。

3 结论

针对目前国内烤燃实验的数值模拟研究存在的不足,本研究开展了基于配方预测宏观性能的PBX慢烤全过程模拟研究,初步实现了从配方到装药的热力学行为预测,同时解决装药局部点火后出现的温度“奇点”问题,计算了PBX烤燃点火至爆炸过程中的装药爆炸温度,具体结论如下:

(1)在已知组分参数时,通过质量守恒与能量守恒,推导了PBX的整体密度与热参数;将Arrhenius形式的反应速率函数对进行近似与泰勒级数形式的拟合,得到了Arrhenius形式的PBX整体化学反应速率模型参数,该模型适用于不含敏化/钝化剂的PBX体系,其组分间仅存在热力学耦合效应,暂不涉及催化反应动力学过程,为常规配方PBX的烤燃安全评估提供了普适性框架。

(2)使用拟合得到的PBX整体热化学参数,可以有效模拟PBX慢烤升温过程,三种PBX的模拟点火时间与真实慢烤实验结果吻合较好,其模拟点火温度为564~619 K,与实验结果的误差小于5.7%;而实验直接测得的PBX热化学参数严重依赖于实验状态,所得结果差异性较大。

(3)结合反应产物的状态方程,可以有效模拟PBX慢烤至点火后的产物膨胀过程,解决了纯固体烤燃计算模型在点火后出现极高的温度“奇点”问题,三种PBX的模拟爆炸温度为3328~3502 K,与经验结果在量级一致。

参考文献:

- [1] MCGUIRE R, TARVER C M. Chemical-decomposition models for the thermal explosion of confined HMX, TATB, RDX and TNT Explosives[R]. Processing of 7th Symposium (International) on Detonation UCRL-84986, 1981.
- [2] NICHOLS A L. Improved Cook-off modeling of multi-component cast explosives[R]. Proceeding of 20th Biennial Conference of the APS Topical Group on Shock Compression of Condensed Matter LLNL-CONF-737694, 2017.
- [3] 冯长根, 张蕊, 陈朗. RDX炸药热烤实验及数值模拟[J]. 含能材料, 2004, 12(4): 193-198.
FENG Chang-gen, ZHANG Rui, CHEN Lang. Hot baking experiment and numerical simulation of RDX explosive[J]. *Chinese Journal of Energetic materials(Hanneng Cailiao)*, 2004, 12(4): 193-198.
- [4] 陈朗, 王沛, 冯长根. 考虑相变的炸药烤燃数值模拟计算[J]. 含能材料, 2009, 17(5): 568-573.
CHEN Lang, WANG Pei, FENG Chang-gen. Numerical simulation of explosive burning considering phase change [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials(Hanneng Cailiao)*, 2009, 17(5): 568-573.
- [5] 陈科全, 黄亨建, 路中华, 等. 基于ABAQUS的PBX炸药烤燃试验数值计算[J]. 火炸药学报, 2014, 37(2): 31-36.
CHEN Ke-quan, HUANG Heng-jian, LU Zhong-hua, et al. Numerical calculation of PBX explosive cutoff test based on ABAQUS [J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2014, 37(2): 31-36.
- [6] 蒲翰涛. 典型炸药烤燃试验中多步化学反应动力学研究[D]. 中国工程物理研究院硕士论文, 2016.
PU Han-tao. Study on multi-step chemical reaction kinetics in Typical explosive Burning Test [D]. Master Thesis of China Academy of Engineering Physics, 2016.
- [7] 邓海, 李刚, 任新联, 等. 某含能黏结剂PBX炸药烤燃特性的数值模拟与实验研究[J]. 兵器装备工程学报, 2022, 43(8): 7-12.
DENG Hai, LI Gang, REN Xin-lian, et al. Numerical simulation and experimental study on slow cook-off characteristics of energetic binder PBX explosive [J]. *Journal of Ordnance Equipment Engineering*, 2022, 43(8): 7-12.
- [8] 周阳, 龙新平, 舒远杰. 均聚类含能黏结剂的研究进展[J]. 含能材料, 2010, 18(1): 115-120.
ZHOU Yang, LONG Xin-ping, SHU Yuan-jie. Review on Homopolymer of Energetic Binders[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials(Hanneng Cailiao)*, 2010, 18(1): 115-120.
- [9] LEE E L, TARVER C M. Phenomenological model of shock initiation in heterogeneous explosives[J]. *Physics of Fluids*, 1980, 23(12): 2362-2372.
- [10] GIBBS T R, POPOLATO A. LASL Explosive property data [M]. University of California Press, 1980.
- [11] 马欣, 陈朗. HMX基混合炸药烤燃特性及多步热反应计算[J]. 兵工学报, 2015, 36(Suppl. 1): 334-342.
MA Xin, CHEN Lang. Calculation of burning characteristics and multi-step thermal reaction of HMX-based mixed explosive[J]. *Ordnance Engineering journal*, 2015, 36(Suppl.1): 334-342.
- [12] 马欣, 陈朗, 鲁峰, 等. HMX烤燃条件下HMX/TATB基混合炸药多步热分解反应计算[J]. 爆炸与冲击, 2014, 34(1): 67-74.
MA Xin, CHEN Lang, LU Feng, et al. Calculation of multi-step thermal decomposition reaction of HMX/TATB based mixed explosive under HMX burning condition [J]. *Explosion and Shock*, 2014, 34(1): 67-74.
- [13] FAN, H, LONG Y, DING L, et al. A theoretical study of elastic anisotropy and thermal conductivity for TATB under pressure [J]. *Computational Materials Science*, 2017, 131: 321-332.
- [14] 辛春亮, 薛再清, 涂建, 等. 有限元分析常用材料参数手册[M]. 机械工业出版社, 2019.
XIN Chun-liang, XUE Zai-qing, TU Jian, et al. Parameter Manual of commonly used materials for Finite Element Analysis [M]. China Machine Press, 2019.
- [15] 张杏芬. 国外火炸药原材料性能手册[M]. 兵器工业出版社, 1991.
ZHANG Xing-fen. Foreign explosive Material Properties Manual [M]. Ordnance Industry Press, 1991.
- [16] EDGAR A, YANG J, CHAVEZ M, et al. Physical characterization of Bis(2, 2-dinitropropyl) acetal and Bis(2, 2-dinitropro-

- pyl) formal[J]. *Journal of Energetic Materials*, 2020, 38(4): 483-503.
- [17] TARVER C M, TRAN T D. Thermal decomposition models for HMX-based plastic bonded explosives [J]. *Combustion and Flame*, 2004, 137: 50-62.
- [18] 高大元, 何碧, 何松伟, 等. 氟橡胶 F2314 黏结剂的热分解动力学[J]. *火炸药学报*, 2006, 29(5): 29-31.
GAO Da-yuan, HE Bi, HE Song-wei, et al. Thermal Decomposition Kinetics of F2314 Bonder[J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2006, 29(5): 29-31.
- [19] 何志伟, 王洋, 刘锋, 等. 2,6-二氨基-3,5-二硝基吡啶-1-氧化物基 PBX 的热安全性研究[J]. *火炸药学报*, 2020, 43(2): 173-179.
HE Zhi-wei, WANG Yang, LIU Feng, et al. Thermal Safety of 2, 6-Diamino-3, 5-dinitropyridine-1-oxide Based PBX [J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2020, 43(2): 173-179.
- [20] KRAIEM M, KARKRI M, FOIS M, et al. Thermophysical characterization of paraffins versus temperature for thermal energy storage[J]. *Buildings*. 2023, 13(4): 877.
- [21] Department of Defense. MIL-STD-1751 (USAF): Safety and performance tests for Qualification of explosives[S], Washington DC: Military Standard, 1982.
- [22] POPOLATO A, RUMINER J J, VIGIL A S. Thermal response of explosives subjected to external heating[R]. Los Alamos National Lab., 1979.
- [23] HOBBS M L, KANESHIGE M J, ERIKSON W W. Modeling the measured effect of a nitroplasticizer (BDNPA/F) on cookoff of a plastic bonded explosive (PBX 9501)[J]. *Combustion and Flame*, 2016, 173: 132-150.
- [24] HOBBS M L, KANESHIGE M J. Ignition experiments and models of a plastic bonded explosive (PBX 9502)[J]. *Journal of Chemical Physics*, 2014, 140: 124203.
- [25] DOBRATZ B M, LLNL Explosives Handbook: Properties of Chemical Explosives and Explosive Simulants[M]. University of California Press, 1985.

Development and Application of a Prediction Model for Thermal Decomposition Parameters of PBX Explosives

CAO Luo-xia¹, WANG Hao¹, ZHOU Tian-yu², HUANG Qian¹, LV Zi-jain¹, ZHOU Yang¹

(1. Institute of Chemical Materials, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621999, China; 2. School of Advanced Manufacturing Engineering, Chongqing University of Posts and Telecommunications, Chongqing 400065, China)

Abstract: To overcome the limitations of conventional cook-off models in full-chain prediction of explosive formulations and charge behaviors while eliminating post-ignition temperature field singularities, a multi-component parameter fitting model was systematically applied to investigate the thermal decomposition response and cook-off characteristics of polymer-bonded explosives (PBX-9501, PBX-9502, and novel PBX-4). A component parameter-driven full-process simulation framework was established through coupled multi-physics modeling integrating Arrhenius reaction kinetics with the JWL product gas equation of state, enabling numerical characterization from initial thermal decomposition to final casing rupture. Validation results demonstrated that ignition time prediction errors for PBX-9501 and PBX-9502 were 3.4% and 5.7% respectively compared with experimental data. Ignition time deviation for PBX-4 prediction reached 2.3% against validation experiments. Dynamic regulation of product gas parameters stabilized explosion temperatures within 3328-3502 K, effectively resolving temperature singularity issues inherent in traditional solid-phase cook-off models.

Key words: Polymer-bonded explosives (PBX); Cook-off tests; Numerical simulations; Ignition; Product expansion

CLC number: TJ55;O389

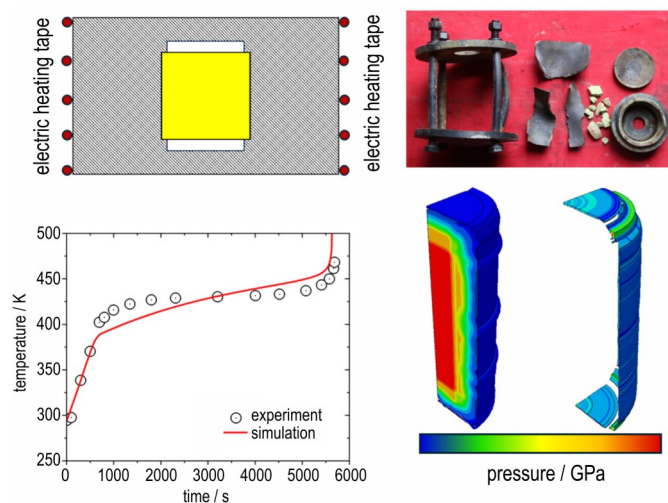
Document code: A

DOI: 10.11943/CJEM2025014

Grant support: National Natural Science Foundation of China (Nos. 12202415, 12472371)

(责编:高毅)

图文摘要:



A fitting model to predict PBX thermochemical parameters from its components is raised in this work, achieving the goal of PBX density and macroscopic thermochemical parameters forecast by given formula. By coupling Arrhenius reaction rate equation and product gas equation of state, the full process simulation of explosive from heating to ignition, reaction product expansion and tearing of the shell during the cook-off process is realized. The work provides a valuable research idea to estimate the thermal performance of PBX through its components, which is important for PBX formula design related to thermal safety concerns. Moreover, computational difficulties of temperature singularity and post-ignition process related to gas products expansion in cook-off simulations are solved by the model.