

关于 PBX 正向设计的初步思考

1. 正向设计的概念及其在材料研发中的应用

正向设计(Forward Design)是一种系统化的设计方法论,其核心在于从用户需求和预期功能出发,通过综合考虑性能、成本、制造工艺等因素,自上而下地进行产品设计和材料选择。这种方法强调在设计初期就对产品的整体性能和各个组成部分进行综合考虑,以确保最终产品能够满足预定的性能标准和市场需求。与传统的逆向工程或试错法相比,正向设计更侧重于创新和优化,力求在设计阶段就实现对产品性能的精确控制和预测。目前,正向设计广泛应用于工程设计、材料科学、生物医学工程、能源系统设计等多个学科(Yu et al, *J Mater. Process. Tech*, 2022, 302: 117497; Hold et al, *Nat Commun*, 2016, 7:12971)。

一个完整的正向设计过程可以用 V 模型(田彬. 飞机复杂系统基于功能的正向设计[J]. 科技资讯, 2015(29): 73-75)表示(图 1),即,左侧的设计过程与右侧的实践过程;同时二者间通过不断迭代地预测与修正,最终获得满足要求的产品。其中,仿真模拟是正向设计的核心,从图 1 可以看出,对一系列设计的合理性首先通过系统化的模拟仿真来验证,仿真模拟基于可靠定量构效关系实现,确保设计产品的组成与结构同其功能预期一致;其次,通过求解包括学科方程、退化方程、裕量方程和度量方程等,正向设计能够合理设置和优化设计裕量,实现产品可靠性设计,确保产品能够在预期使用寿命内或不确定性条件下可靠地执行其功能。

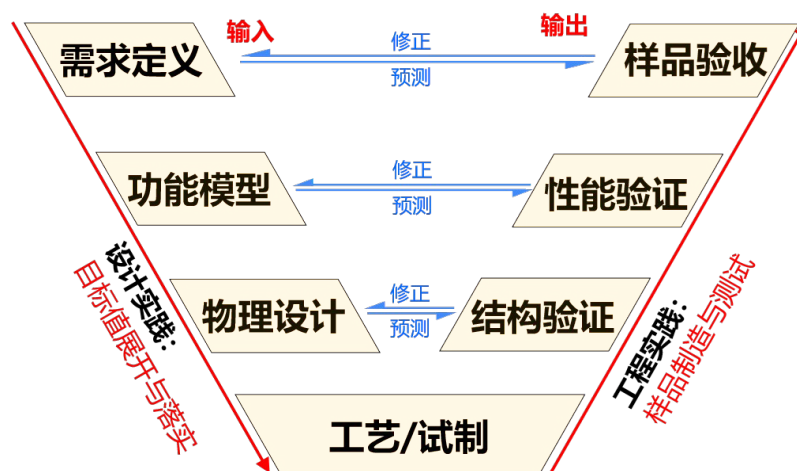


图 1 正向设计研发模式——V 模型

Fig.1 V——model representing forward design research & development mode

2. 关于 PBX 正向设计的初步思考

正向设计是一种解决复杂的多输入与多输出问题的高效模式。PBX(聚合物粘接炸药)由炸药晶体颗粒、高分子粘结剂和功能添加剂等粘结而成,属于高固相颗粒填充型聚合物基复合材料;其设计必须严格兼顾满足能

量、安全性、力学、相容性、环境适应性与抗老化性能等。因此, PBX研发属于典型复杂的多输入与多输出问题, 而正向设计正是实现其高效研发的理想途径。图2刻画了基于正向设计的PBX研发策略, 其具体步骤大致包括如下方面:

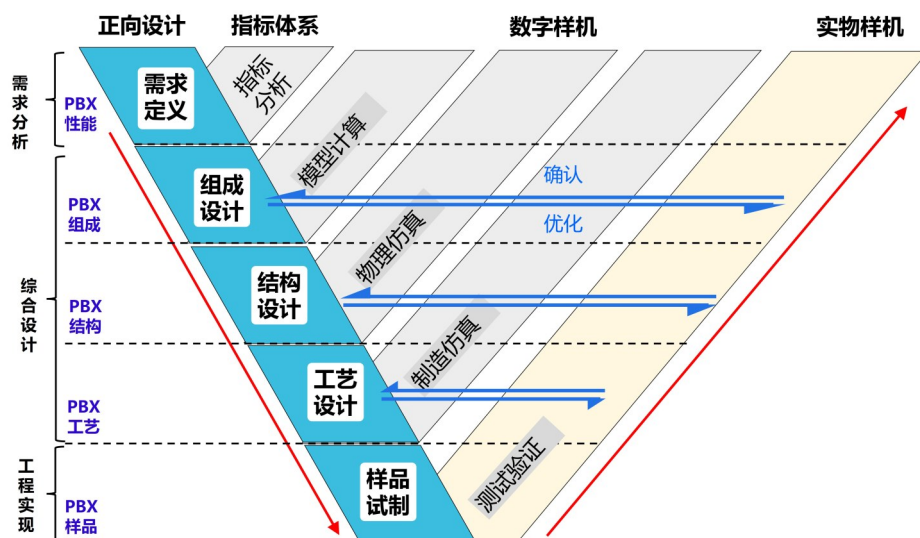


图2 正向设计应用于PBX研发的设想图

Fig.2 Conceptual diagram for forward design strategy and its application for polymer bonded explosives (PBX)

(1) 需求定义: PBX应用需求指标通常是明确的, 如能量水平、安全性能、力学性能等的具体参数, 这既是正向设计的具体目标, 也是考核产品的量化指标; 有些时候, 需求指标并不明晰, 需要同用户进一步沟通, 确定应用需求指标参数或参数范围。这些参数或参数范围正是正向设计的首要输入。

(2) 配方组成设计: PBX的组成通常包括大比例的含能晶体、一定量的粘结剂和少量的功能助剂。尽管PBX的组成较为复杂, 但其原料库的样品有限, 例如, 可用含能化合物通常就在10多个范围之内, 各种粘结剂的数量也比较有限。实际设计中可根据上述主要的性能需求, 比如根据能量与安全性需求, 初步确定含能化合物的范围及其含量多少, 特别是, 对于PBX, 能量指标既重要, 又容易预估, 极有利于组成设计; 由于环境适应性与抗老化性能均同配方的稳定性相关, 这样可进一步缩小配方的组成范围; 再根据力学性能需求, 进一步优化配方组成。

(3) 结构设计: PBX组成复杂, 为非均相材料, 涉及到炸药晶体形态与分布、聚合物粘结剂的多级结构、各种功能助剂的形态及广泛的界面结构。这些多层级结构是影响PBX力学性能、安全性、环境适应性与抗老化性能的本质原因; 通常, 这些结构可以通过结构与性能间关系来确定, 或通过建模仿真来确定。总体来讲, PBX结构设计是在组成确定基础上更精确的设计; 但也有先确定结构, 再确定组成的设计。

(4) 工艺设计。PBX有压装、熔铸、浇铸多种成型方式, 成型过程中, 操作步骤、温度、湿度、压力、时间、助剂类型及用量、溶剂挥发速率、搅拌剪切强度等都有可能影响PBX的微、介观结构, 并最终影响其宏观性能。显然, 建立工艺参数同PBX的微、介观结构间的关系至关重要。然而, 这种关系较少, 主要原因之一是缺乏对PBX的微、介观结构的描述。

(5) PBX制备实践: 制备获得PBX, 并通过结构表征与性能测试, 验证设计、模型等的有效性。

在上述基于正向设计的PBX研发过程中, 涉及到了模型计算、物理仿真和工艺仿真三个重要的仿真计算环节, 依照其结果进行实验, 而其有效性也是有待于实验结果的验证, 并进一步优化。上述过程需要不断迭代, 直至

仿真与实验结果一致。

现阶段 PBX 研发绝大部分仅停留在图 2 所示 V 模型的组成设计阶段,具体的工作集中在提升 PBX 的特定性质,包括配方优化、界面增强研究、新型功能材料研发、PBX 的失效机理和安全性评估等,很难实现多目标性能协同设计。因此,要真正实现 PBX 的正向设计还存在诸多挑战亟需突破,例如:PBX 微、介观结构的实验表征,工艺条件对 PBX 微、介观结构的决定关系,PBX 微、介观结构与宏观性能间关系等。

3. 结语

现有 PBX 研发模式缺乏系统工程理念的指导,常出现“摠下葫芦浮起瓢”的现象,在某些性能提升时可能伴随着其它性能恶化的问题。事实上,对于 PBX 这一类复杂体系,其研制过程在数学模型上可表达为一类复杂的多输入与多输出的函数,简单的“画加算”与“画加打”模式已难以为继。大力提高理论、实验、计算与大数据四种范式在 PBX 研发中的融合度,提升 PBX 研发效率已势在必行。

张朝阳, 黄鑫, 谢炜宇

中国工程物理研究院化工材料研究所

e-mail: chaoyangzhang@caep.cn