

文章编号: 1006-9941(2013)05-0681-03

孔隙率对 PBX 热导率影响的数值模拟

韦兴文, 李明, 周筱雨, 黄忠

(中国工程物理研究院化工材料研究所, 四川 绵阳 621900)

摘要: 采用代表体积元建模方法, 建立了与实际高聚物粘结炸药 (Polymer Bonded Explosive, PBX) 细观结构高度相近、能反映炸药颗粒和微孔隙随机分布、可以任意调整填充率和孔隙率的有限元计算模型, 并计算分析了孔隙率对 PBX 热导率的影响。结果表明, 随着孔隙率增大, PBX 的有效热导率呈指数减小。

关键词: 材料物理; 高聚物粘结炸药; 热导率; 孔隙率; 数值模拟

中图分类号: TJ55; TB34

文献标识码: A

DOI: 10.3969/j.issn.1006-9941.2013.05.024

1 引言

TATB 基高聚物粘结炸药 (Polymer Bonded Explosive, PBX) 是一种综合性能优异的钝感炸药, 但其制品容易出现不可逆体积膨胀导致微孔隙的产生^[1]。研究微孔隙对 PBX 热物理性能的影响规律, 对认识炸药降感、起爆等物理过程均具有重要意义, 国内外已开展了较多实验研究工作^[2-4]。但由于样品微孔隙的不可控制性, 实验研究存在较大限制, 难以准确量化微孔隙对 PBX 性能的影响程度。因此, 采用数值模拟手段, 建立以材料细观结构为基础的热物理性能预测模型, 对深入认识 PBX 导热机制和优化配方设计均有重要意义。由于代表性体积元法 (Representative Volume Element, RVE) 建模方法能够反映材料细观结构的热力学响应, 其在二元复合材料热力学性能预测方面得到了广泛的应用^[5-6], 但对于多相体系, 尤其含气孔相的研究报道较少。本研究采用 RVE 建模方法, 建立了与实际 PBX 细观结构高度相近、能反映炸药颗粒和微孔隙随机分布、可以任意调整填充率和孔隙率的有限元 (Finite Element Method, FEM) 计算模型, 并计算分析了孔隙率对 PBX 热导率的影响。

2 计算方法

二维 RVE 采用蒙特卡罗随机充填的方式生成, 具体过程如下:

(1) 生成边长为 L 的正方形, 代表高聚物基体相。

(2) 在正方形中随机生成半径为 $R_{\min} \sim R_{\max}$ (R 为炸药颗粒半径) 无重叠的圆, 代表炸药晶体填充相, 直达到达到相应体积分数的为止。

(3) 在正方形中随机生成半径为 $r_{\min} \sim r_{\max}$ (r 为孔隙半径) 无重叠的圆, 代表气孔相, 直达到达到相应孔隙率为止。

(4) 当随机生成的圆与边界相交时, 在对应边生成对称的圆, 满足 RVE 重复性。

按照上述算法生成的模型如图 1a 所示。然后再利用 ANSYS 有限元软件计算 PBX 稳态热传导过程, 如图 1b 所示: 在确定 RVE 上、下边施加绝热边界条件, 在左边施加恒定的热流密度载荷 q'' , 在右边施加恒定的温度边界 T_2 , 计算从左边界到右边界的温度差 ΔT , 再由式(1)计算得到 PBX 的热导率:

$$k_{\text{eff}} = \frac{q''L}{\Delta T} \quad (1)$$

式中, L 为热传导方向 RVE 长度, m; $\Delta T = T_1 - T_2$, °C。

3 结果与讨论

对体积填充分数 (TATB:F2314 = 0.5) 相同, 不同孔隙率的 TATB 基 PBX 热导率进行数值模拟, 结果如表 1 所示。

收稿日期: 2012-12-06; 修回日期: 2013-03-16

基金项目: 国家自然科学基金(10832003); 化工材料研究所创新基金(626010947)

作者简介: 韦兴文(1977-), 硕士, 助研, 主要从事炸药及高分子材料表征与研究。e-mail: weixw@caep.ac.cn

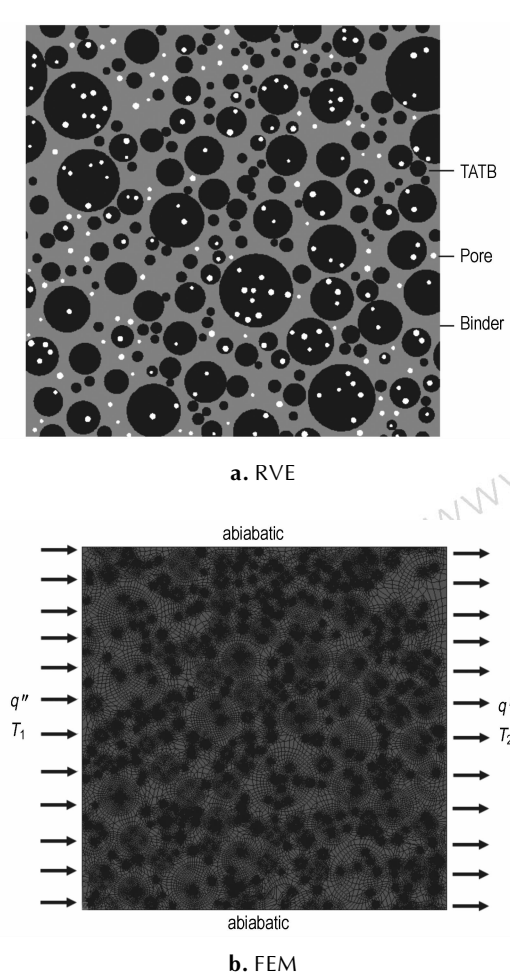


图 1 含微孔的 PBX 代表体积元和传热计算有限元模型
 Fig. 1 Representative volume element and finite element model of thermal conduction for PBX with pore

表 1 不同孔隙率 TATB 基 PBX 热导率计算结果

Table 1 Thermal conductivity of PBX based on TATB with different porosity

apparent density /g · cm ⁻³	porosity /%	thermal conductivity /W · m ⁻¹ · K ⁻¹
1.919	0	0.308
1.900	1.00	0.299
1.855	3.32	0.290
1.823	5.00	0.282

由表 1 可见, 考虑孔隙率后, TATB 基 PBX 基热导率模拟值与实测值 ($\rho = 1.855 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$, $k = 0.280 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$) 比较接近, 表明了所建模型的合理性。微孔隙的存在使得 PBX 的热导率显著降低, 不同孔隙率 PBX 热流图见图 2。

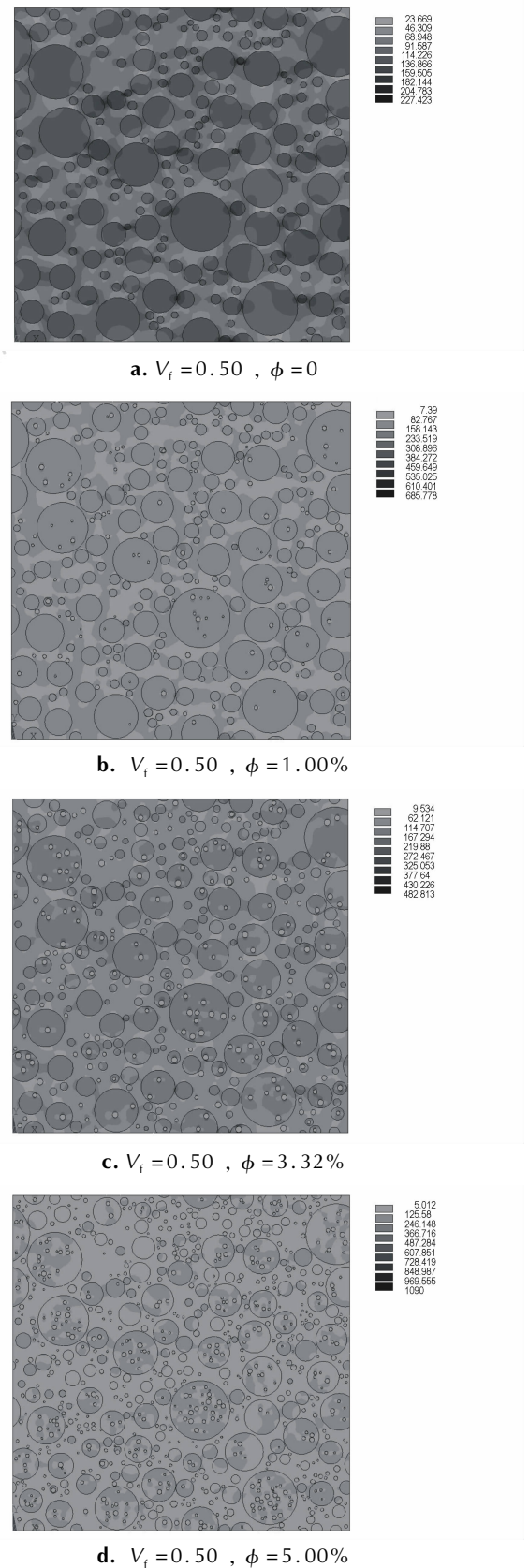


图 2 不同孔隙率 TATB 基 PBX 热流图
 Fig. 2 Thermal flux diagram of PBX based on TATB with different porosity

由图 2a 可见,当 PBX 内部没有孔隙时,由于 TATB(图中黑色大圆)热导率较高,TATB 颗粒形成较高热流率的导热链。由图 2b 和图 2c 可见,由于孔隙(图中白色小圆)内部空气热导率较低,容易形成较大的热阻而造成 TATB 颗粒高热流率导热链的中断,导致大部分热量需要绕过微孔,传热的路径变长且复杂化,导致 PBX 的传热性能下降。由图 2d 可见,随着孔隙率的增加,PBX 高热导率 TATB 填充相形成的导热链断点增多,当孔隙率达到 5% 时,大多数高热流率导热链被打断,热导率下降幅度达到 8.44%。图 3 给出了不同孔隙率 PBX 热导率变化曲线。由图 3 可见,不同孔隙率的 PBX 热导率变化曲线呈指数递减趋势,可采用下列函数关系式进行描述。

$$k(\phi) = k_0 - a(1 - e^{-b\phi}) \quad (2)$$

式中, k_0 、 $k(\phi)$ 分别为孔隙率为 0 和 ϕ 时的热导率, $W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$; ϕ 为孔隙率,% ; a 、 b 为待定常数,取决于孔隙的热导率和空间分布。

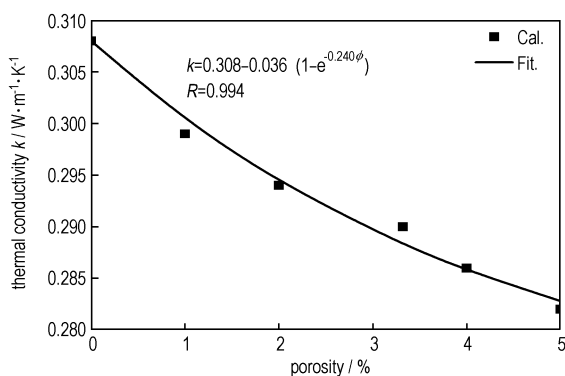


图 3 TATB 基 PBX 热导率随孔隙率变化曲线

Fig. 3 The curve of thermal conductivity of PBX based TATB on varied with porosity

4 结 论

采用代表体积元方法,建立了高聚物粘结炸药微观结构热传导有限元模型,计算表明,随着孔隙率增大,PBX 的有效热导率呈指数减小。

参考文献:

- [1] Rizzo H F, Humphrey J R, Kolb J R. Growth of 1, 3, 5-triamino-2, 4, 6-trinitrobenzene (TATB) II: control of growth by use of high Tg polymeric binders [J]. *Propellants Explosives Pyrotechnics*, 1981, 5(6): 27-36.
- [2] 李敬明,温茂萍,黄毅民.热循环对 TATB 基高聚物黏结炸药的性能影响研究[J]. *含能材料*, 2005, 13(4): 208-210.
LI Jing-ming, WEN Mao-ping, HUANG Yi-min. Effect of the thermal cycling test on the properties of TATB based PBX [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2005, 13(4): 208-210.
- [3] Willey T M, Buuren T, Lee R I, et al. Changes in pore size distribution upon thermal cycling of TATB-based explosives measured by Ultra-Small angle X-ray scattering [J]. *Propellants Explosives Pyrotechnics*, 2006, 31(6): 466-471.
- [4] Mang J T, Hjelm R P. Small-angle neutron scattering and contrast variation measurement of the interfacial surface area in PBX 9501 as a function of pressing intensity [J]. *Propellants Explosives Pyrotechnics*, 2011, 36(5): 439-445.
- [5] Banerjee B, Cady C M, Adams D O. Micromechanics simulations of glass-estane mock polymer bonded explosives [J]. *Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2003, 11(4): 457-475.
- [6] Annapragada S R, Sun D, Garimella S V. Prediction of effective thermo-mechanical properties of particulate composites [J]. *Computational Materials Science*, 2007, 40(2): 255-266.

Numerical Simulation of the Porosity Influence on Thermal Conductivity of Polymer Bonded Explosive

WEI Xing-wen, LI Ming, ZHOU Xiao-yu, HUANG Zhong

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

Abstract: A representative volume element (RVE) model was developed to investigate the thermal conductivity of three-phase polymer bonded explosive (PBX), and the fraction and distribution of the fillers and pores were taken into consideration. The influence of porosity on the thermal conduction of PBX was analyzed. Results show that the thermal conduction of PBX decreases exponentially with the increase of porosity.

Key words: material physics; polymer bonded explosive; thermal conductivity; porosity; numerical simulation

CLC number: TJ55; TB34

Document code: A

DOI: 10.3969/j.issn.1006-9941.2013.05.024