

文章编号:1006-9941(2019)05-0363-08

TNT 熔铸炸药内部结晶组织的数值模拟

刘雨荻,曹红松,刘 胜,张 亨,张晓东,谢 峰

(中北大学机电工程学院,山西太原 030051)

摘要: 为了探究熔铸炸药内部的微观结晶组织形貌,提高炸药柱的成型质量,采用 ProCAST 铸造模拟软件中的 CA-FE 模块对 TNT 熔铸炸药内部结晶组织进行了数值模拟。利用 CA-FE 模块中的元胞自动机,预测了不同工艺条件与 TNT 形核参数下药柱内部晶粒的形貌和尺寸,并通过调整熔体的形核过冷度、浇注温度和冷却速度,得出了晶粒细化工艺改进措施。结果表明:随着熔体的体形核过冷度的减小,药柱内的等轴晶区逐渐增大,晶粒平均尺寸由 715.5 μm 减小到 458.5 μm ;随着熔体的面形核过冷度减小,药柱内部晶粒形貌没有明显变化,平均尺寸由 715.5 μm 增加到 719.2 μm ;随着熔体浇注温度的降低,药柱内部等轴晶区逐渐增大,晶粒平均尺寸由 1114.5 μm 减小到 729.2 μm ;随着冷却速度的降低,药柱内部中心等轴晶区逐渐扩大,外层等轴晶区逐渐消失,晶粒平均尺寸由 719.4 μm 增大到 1149.1 μm 。工艺改进后,药柱内全部由细密等轴晶组成,晶粒平均尺寸为 516.9 μm ,尺寸分布较为集中,药柱内部微观质量有较大改善。

关键词: 熔铸炸药;数值模拟;元胞自动机(CA);结晶组织

中图分类号: TJ55; TG244

文献标志码: A

DOI:10.11943/CJEM2018162

1 引言

熔铸装药是将熔化的液态炸药注入弹体或模具后冷却凝固成型的方法,因其设备简单可适应各种弹型而得到广泛应用,但其工艺参数对装药质量影响较大。在熔铸炸药成型质量研究方面,宏观上,在熔态炸药注入弹体(或模具)过程及继续冷却凝固过程中,温度场、流场、应力场的变化以及装药弊病的形成过程已经可以用数值模拟技术进行观察和预测^[1-2]。在探索研究熔铸炸药的微观结晶组织方面,牛国涛等^[3]将 2,4-二硝基苯甲醚(DNAN)和 TNT 加热熔化后再自然冷却,期间利用放大倍率 100 倍的光电显微镜观测了 DNAN 及 TNT 的熔融结晶过程。田勇等^[4]利用微焦点工业 CT(μCT)对 TNT 炸药熔铸结晶成型过程进行了试验研究,获得了成型 TNT 炸药柱内部结晶与成

型质量的三维微观结构及其分布的演化特征与规律。大量的实验与研究表明,熔铸炸药内部的晶体形貌与尺寸将会在一定程度上影响炸药的使用性与安全性,粗大树枝晶与柱状晶的存在不仅会导致成型药柱内部易出现缝隙和裂纹,还会影响炸药的爆轰性能^[5]。目前,对于熔铸炸药内部结晶组织的研究主要通过成型药柱或药柱切片进行直接观测来实现,但通过数值模拟技术对炸药柱内的结晶组织进行研究的方法在国内外还未见文献报道。如能通过计算机仿真技术对熔铸炸药内部的结晶组织进行探索和研究,可有效降低生产和实验成本,并对熔铸炸药浇注工艺的优化起到重要作用。

随着计算机技术与工程应用软件技术的发展,Rappaz M 与 Gandin Ch 等^[6-8]首先利用元胞自动机法(CA)对金属凝固中结晶组织的形成进行了数值模拟研究,并将有限元法(FE)与元胞自动机法(CA)耦合起来建立了 CA-FE 数学模型。为了探索和研究 TNT 熔铸炸药内部的结晶组织,改善药柱的微观成型质量,本研究采用 CA-FE 耦合模型对 TNT 熔铸炸药内部结晶组织进行数值模拟,并提出相应的晶粒细化方法。

收稿日期:2018-06-20;修回日期:2018-11-09

网络出版日期:2018-11-30

作者简介:刘雨荻(1992-),男,硕士研究生,主要从事含能材料微观组织及熔铸炸药智能装药技术研究。e-mail:942895704@qq.com
通信联系人:曹红松(1967-),女,教授,主要从事智能装药仿真技术研究。e-mail:chs@nuc.edu.cn

引用本文:刘雨荻,曹红松,刘胜,等. TNT 熔铸炸药内部结晶组织的数值模拟[J]. 含能材料,2019,27(5):363-370.

LIU Yu-di, CAO Hong-song, LIU Sheng, et al. Numerical Simulation of the Internal Crystalline Structure of TNT Melt-Cast Explosive[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2019, 27(5):363-370.

2 数学模型

2.1 形核模型

CA模型采用基于正态分布的连续函数来处理熔体内部形核(体形核)与模具内壁处的形核(面形核)。体形核密度与面形核密度可以由连续而非离散的函数 $dn/d(\Delta T)$ 即正态分布来描述,具体见式(1):

$$\frac{dn}{d(\Delta T)} = \frac{n_{\max}}{\sqrt{2\pi} \Delta T_{\sigma}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\Delta T - \Delta T_{\max}}{\Delta T_{\sigma}} \right)^2 \right] \quad (1)$$

式中, n 为晶粒密度, m^{-3} (体密度), m^{-2} (面密度); ΔT 为过冷度, $^{\circ}C$; n_{\max} 为正态分布从0到 ∞ 积分得到的最大形核密度, m^{-3} (体最大形核密度), m^{-2} (面最大形核密度); ΔT_{\max} 为平均形核过冷度, $^{\circ}C$; ΔT_{σ} 为形核过冷度标准方差, $^{\circ}C$ 。

2.2 枝晶生长动力学模型

枝晶生长动力学数学模型采用Kurz、Giovanola等提出的KGT模型^[9],熔体凝固界面前沿的过冷度 ΔT ,见式(2):

$$\Delta T = \Delta T_c + \Delta T_r + \Delta T_k + \Delta T_t \quad (2)$$

式中, ΔT 为总过冷度, $^{\circ}C$; ΔT_c 为成分过冷度, $^{\circ}C$; ΔT_r 为固-液界面曲率过冷度, $^{\circ}C$; ΔT_k 生长动力学过冷度, $^{\circ}C$; ΔT_t 为热力学过冷度, $^{\circ}C$ 。

为了加快模拟计算时的速度,可对KGT模型进行拟合简化,得到反映枝晶尖端生长速度的三次多项式,见式(3):

$$v(\Delta T) = a_2 \Delta T^2 + a_3 \Delta T^3 \quad (3)$$

式中, a_2 为第一生长系数, $m \cdot s^{-1} \cdot K^{-2}$; a_3 为第二生长系数, $m \cdot s^{-1} \cdot K^{-3}$; $v(\Delta T)$ 为枝晶尖端生长速度, $m \cdot s^{-1}$ 。

2.3 CA-FE模型

CA-FE数学模型是由有限元法(FE)与元胞自动机法(CA)耦合构成。为了将FE法和CA法耦合到一个模型中,并且引入凝固潜热的影响,确保微观组织是温度场的函数,为此定义了FE节点和CA元胞之间的插值因子,在有限元网格中心的CA元胞与有限元节点之间分别具有非零的插值因子。这些因子结合FE节点的温度就可以确定网格中元胞处的温度。在节点处,采用同样的插值因子对树枝晶形核、生长过程释放的潜热求和,更新节点温度^[10]。

CA-FE模型的工作流程为:凝固区域首先使用FE法中的粗网格对铸件进行宏观温度场与流场模拟,在此粗网格内继续划分为更细、更均匀的节点,然后将

FE法与CA法进行耦合,最后,在FE粗网格的基础上,使用CA法中的细密网格进行微观晶粒模拟^[7]。

3 数值模拟

纯TNT熔铸炸药采用无冒口补缩的方式浇注成型,TNT物性参数见表1^[11],模具规格为 $\Phi 110 \text{ mm} \times 130 \text{ mm}$,壁厚为10 mm,材质为纯铝,炸药与铝模具的界面换热系数为 $20 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$,冷却环境设置为 $20 \text{ }^{\circ}C$ 空冷,炸药浇注温度为 $86 \text{ }^{\circ}C$,熔铸TNT的单个晶胞尺寸为 $120 \text{ } \mu\text{m}$ ^[5],其它形核参数见表2。药柱内部宏观缩松与缩孔模拟结果见图1和图2。图3为炸药柱内部径向CT扫描,由文献[12]给出。选取距离模具底部82.5 mm处的径向无厚度切片作为研究对象,晶粒形貌及尺寸统计结果见图4。

表1 炸药及模具物性参数^[11]

Table 1 Properties parameters of explosive and mould^[11]

material	λ / $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$	ρ / $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	c / $\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$	H / $\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$	T_m / $^{\circ}C$
TNT	0.213(20 $^{\circ}C$)	1590(20 $^{\circ}C$)	1.17(20 $^{\circ}C$)	107.0	80.4
	0.200(90 $^{\circ}C$)	1453(90 $^{\circ}C$)	1.47(90 $^{\circ}C$)		
mould	240	2700	0.9		

Note: λ is thermal conductivity. ρ is density. c is specific heat. H is enthalpy of phase transition. T_m is melting point.

表2 TNT形核参数

Table 2 TNT nucleation parameters

ΔT_v / $^{\circ}C$	ΔT_s / $^{\circ}C$	a_2 / $\text{m} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{K}^{-2}$	a_3 / $\text{m} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{K}^{-3}$	ΔT_{σ} / $^{\circ}C$	$n_{v\max}$ / m^{-3}	$n_{s\max}$ / m^{-2}
4	4	5.83×10^{-6}	1.78×10^{-6}	1	1×10^{10}	1×10^8

Note: ΔT_v is volume average nucleation undercooling. ΔT_s is surface average nucleation undercooling. $n_{v\max}$ is volume maximum number of nucleation. $n_{s\max}$ is surface maximum number of nucleation.

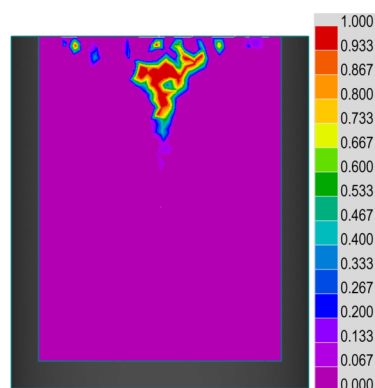


图1 炸药柱轴向切片缩松与缩孔预测图

Fig.1 Axial section shrinkage prediction

从图3炸药柱内部径向CT扫描图像可以看出,模具内壁附近的炸药由于冷却速度快,易形成等轴细晶区,且致密度较好,无孔隙产生,而药柱内部则主要由树枝晶和柱状晶构成,其在冷却过程中产生的孔隙也随之拉长变形。CT扫描结果(图3)与所示的晶粒模拟结果(图4)一致性较高。

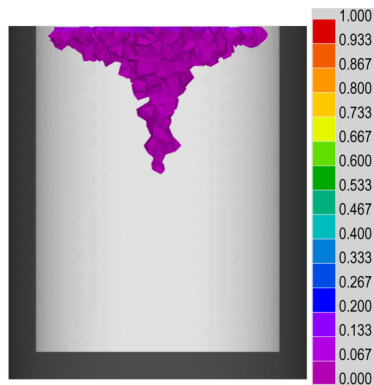


图2 炸药柱缩松与缩孔三维预测图

Fig.2 3D shrinkage prediction

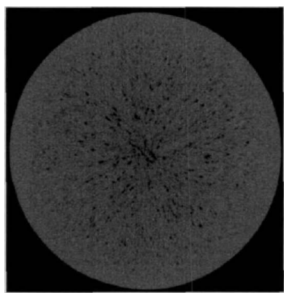


图3 炸药柱径向CT扫描^[12]

Fig.3 CT radial scanning of explosive column^[12]

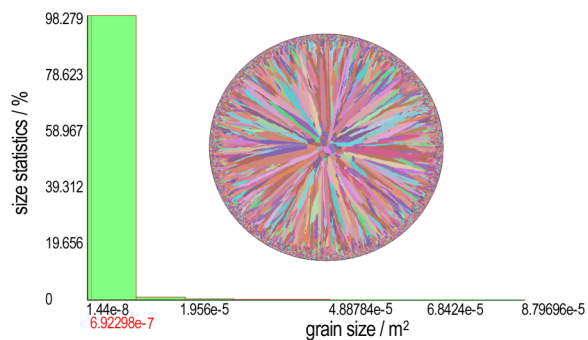


图4 晶粒形貌及尺寸统计图

Fig.4 Grain morphology and size statistics

4 结果与讨论

4.1 形核过冷度对晶粒的影响

4.1.1 过冷度对晶体生长的影响

过冷度是指熔体的理论结晶温度与实际结晶温度

的差值,是熔体产生凝固行为的驱动力。由式(1)与式(3)可知,熔体内产生的过冷度越大,生成的晶核数量就越多,晶体的生长速度也越快。由于晶体在熔体内存在竞争生长机制,晶核数量的增多及晶体生长速度的加快会导致单个晶体的生长空间受限,有利于小尺寸等轴晶的生成,抑制大尺寸的树枝晶、柱状晶和等轴晶的生长。

4.1.2 体形核过冷度对晶粒的影响

体形核过冷度为熔体内部形核所需过冷度,是熔体凝固结晶难易程度的判据。改变表2中的 ΔT_v ,不同 ΔT_v 对晶粒形貌及尺寸的影响见图5。 ΔT_v 的递增顺序为1, 2, 3 °C,晶粒平均尺寸的递增顺序为458.5, 547.8 μm 和715.5 μm ,在模具内壁附近,由于激冷效果的作用,始终会形成一薄层细密等轴晶区,而柱体内部的等轴晶则逐渐向粗大柱状晶和树枝晶过渡。

在给定的冷却条件下:(1)若体形核过冷度很小(见图5a),熔体内形核较容易。在液相炸药刚浇注完成时,由于模具的温度很低,导致内壁附近液相区的过冷度激增,晶核的大量生成与晶体的快速生长使柱晶和枝晶没有生长空间,最终形成外层等轴细晶区。在凝固过程中期,由于外围薄层固相区的导热系数很低,使剩余液相区向外传递的热流量减少,中心高温液相区无法形核,形核只能发生在外围等轴晶区前沿的低温液相区内,但这一区域的过冷度较低,生成的晶核以较慢的速度生长成柱晶和枝晶,最终形成柱状和树枝晶区。在凝固过程后期,随着外围固相区增厚,向外传递的热流量进一步减少,尚未凝固的液相区温度较高,伸向液相区生长的枝晶与柱晶尖端被熔断,游离在液相区的大量碎晶会成为新的晶核,随着凝固过程的进行,这些碎晶在中心液相区竞争生长为小尺寸等轴晶,并挤占外围柱晶和枝晶的生长空间,最终在铸件中心形成等轴晶区。(2)增大体形核过冷度(见图5b),熔体内形核难度上升。在凝固过程中期,外围等轴晶区前沿的低温液相区内形成的晶核数量减少,相邻晶核之间的横向生长空间变大,导致粗大枝晶和柱晶的生成。在凝固过程后期,粗大枝晶和柱晶向中心液相区生长时不容易被熔断,导致柱状和树枝晶区扩大,同时,中心液相区内的游离碎晶数量减少,少量碎晶最终生长为大尺寸的等轴晶。柱体内粗大晶粒的增多导致晶粒平均尺寸增大。(3)进一步增大形核过冷度(见图5c),由以上讨论可知,柱状和树枝晶区继续扩大,柱体内粗大晶粒进一步增多,晶粒平均尺寸随之增大。

由模拟结果及分析可知:在其它外部冷却条件不

变的情况下,熔体结晶所需的过冷度越小越容易形成小尺寸等轴晶。以下措施可有效降低熔体形核过冷度:(1)添加熔点高于熔体的微小颗粒(如纳米级的RDX颗粒或铝粉)可以解决新生固相在液相中的难成问题,使熔体由均质形核转变为异质形核,最终在炸药柱内部获得爆轰性能与力学性能各向同性的细密等轴晶^[13]。(2)将熔体放置在超声波环境下进行凝固也可以降低熔体形核过冷度^[14-15]。

为了突出其它冷却工艺对模拟结果的影响,提高模拟结果对所研究条件的响应度,鉴于图5c中等轴晶与柱状晶、树枝晶共存的情况恰好处于晶形转变的敏感阶段,故以下模拟均以图5c中的模拟结果为基础。

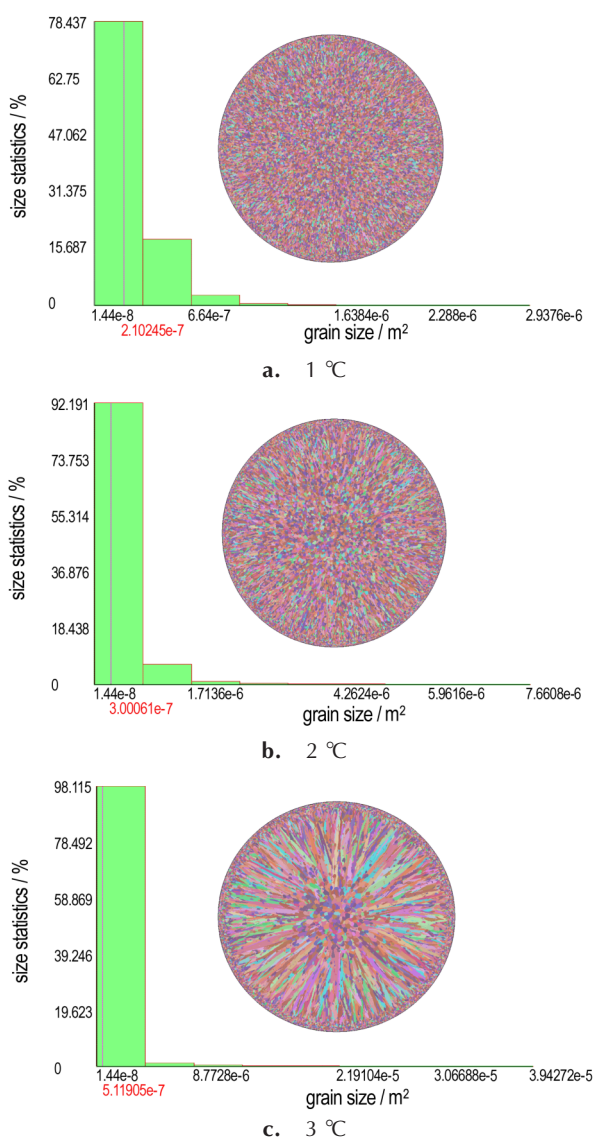


图5 体形核过冷度对晶粒形貌及尺寸的影响
Fig.5 Effect of volume undercooling on grain morphology and size

4.1.3 面形核过冷度对晶粒的影响

面形核过冷度为熔体在模具内壁成形核所需过冷度,是熔体凝固结晶难易程度的判据。在图5c模拟结果的基础上,改变熔体的 $\Delta T_s, \Delta T_s$ 为3 °C时的晶粒形貌和尺寸预测图见图5c, ΔT_s 为2 °C和1 °C时的晶粒形貌和尺寸预测图见图6。随着面形核过冷度由3 °C降低到1 °C,晶粒平均尺寸变化极小,其递增顺序为715.5, 717.7 μm 和719.2 μm ,柱体内部晶粒形貌与大小没有明显变化。

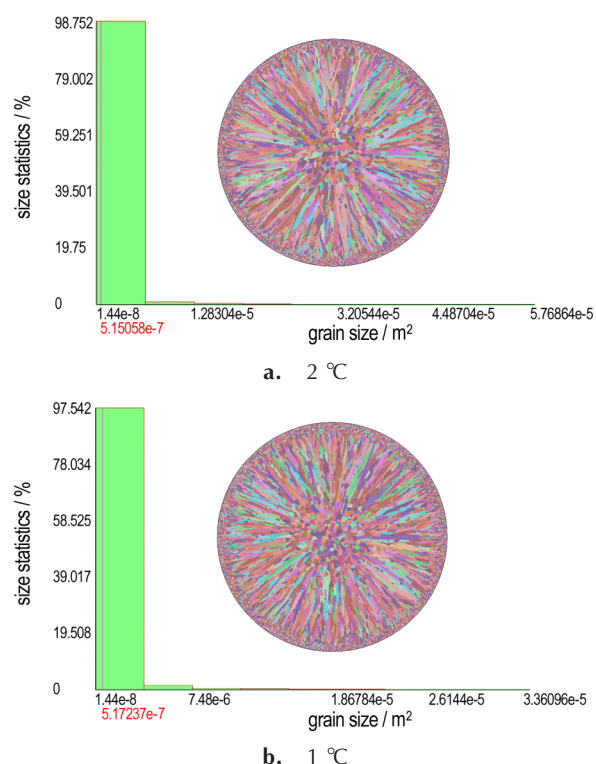


图6 面形核过冷度对晶粒形貌及尺寸的影响
Fig.6 Effect of surface undercooling on grain morphology and size

在给定的冷却条件下,当高温熔体注入较低温度的模具时,模具内壁相当于激冷壁,熔体与模具接触的瞬间会产生强烈过冷,其过冷度远远大于熔体在模具内壁上形核所需的过冷度,这也是导致模拟结果对面形核过冷度不敏感的原因,大量晶核在内壁上生成并快速生长,因此会在短时间内形成一薄层等轴细晶区。柱体内部晶体受体形核过冷度影响,与面形核过冷度无关,故柱体内部晶粒形貌与大小没有变化。

由模拟结果和分析可知,面形核过冷度对炸药柱内部晶粒形貌和尺寸的影响极小。

4.2 浇注温度对晶粒的影响

以图5c模拟结果为基础,调整熔铸炸药的浇注温

度,晶粒形貌及尺寸模拟结果见图7。随着炸药浇注温度由82℃升高到100℃,晶粒平均尺寸的递增顺序为729.2,847.0 μm和1114.5 μm,晶粒形貌由细密等轴晶转变为粗大柱状晶和树枝晶。

在其它冷却条件不变时:(1)当浇注温度很低时(见图7a),熔体内温度梯度较低,冷却速度较快,容易产生较大的过冷度,从而使晶核生成数量增多,晶体生长速度变快,柱晶和枝晶没有生长的空间,最终得到由等轴晶组成的柱体。(2)提高浇注温度(见图7b),模具的激冷效果降低,外围等轴细晶区缩小。在凝固过程中期,熔体内温度梯度较高,中心部位的高温液相区无法形核,形核只能发生在外围等轴晶区前沿的低温液

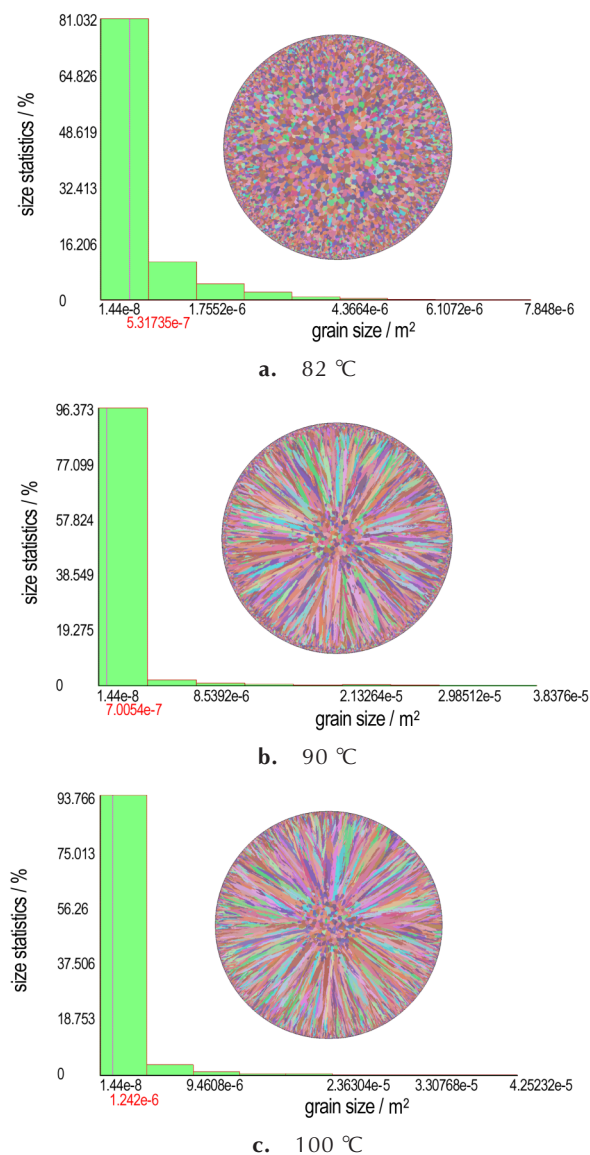


图7 浇注温度对晶粒形貌及尺寸的影响

Fig. 7 Effect of pouring temperature on grain morphology and size

相区内,但这一区域的过冷度较低,导致晶核形成数量少,晶体生长速度低,适宜粗大枝状和柱状晶的生长,最终形成柱状和树枝晶区。在凝固过程后期,增厚的外围固相区对中心液相区产生保温效果,伸入高温液相区生长的枝晶和柱晶的尖端被熔断,游离的碎晶自由生长为等轴晶,从而在铸体中心形成等轴晶区。柱体内粗大晶体的增多导致晶粒平均尺寸增大。(3)若进一步提高浇注温度(见图7c),由以上讨论可知,模具对液相炸药的激冷效果进一步降低,导致晶核难以在模具内壁附近较高的液相区内形成,外围小尺寸等轴细晶区进一步缩小,少量晶核直接依托内壁生长为粗大的枝晶与柱晶,最终造成晶粒平均尺寸明显变大。

由模拟结果及分析可知:浇注温度越低越有利于小尺寸等轴晶的生长。以稍高于熔体熔点的温度进行浇注将有利于柱体内部形成各向同性的等轴晶,并有效降低晶粒的平均尺寸。

4.3 冷却速度对晶粒的影响

以图5c中模拟结果为基础,调整熔铸炸药的冷却速度,不同的冷却速度对晶粒形貌与尺寸的影响见图8。随着模具的初始温度由30℃逐步升高到90℃,药柱冷却到20℃时的时间由18986s延长到20625s,熔体的冷却速度逐渐降低,晶粒平均尺寸递增顺序为719.4,968.6 μm和1149.1 μm,模具内壁表面等轴晶区逐渐消失,柱体中心等轴晶区逐渐扩大。

在给定的冷却条件下:(1)当熔体的冷却速度较高时(图8a),模具内壁的激冷效果明显,内壁附近的低温液相区可产生强烈过冷,进而生成大量晶核,形成薄层细密等轴晶区。在凝固过程中期,外围薄层固相区降低了熔体向外传递的热流量,中心高温液相区无法形核,形核只能在外层等轴晶区前沿的低温液相区进行,由于这一区域的过冷度较低,适宜柱晶和枝晶的生长,最终形成柱状和树枝晶区。在凝固过程后期,增厚的外层固相区对剩余熔体产生保温效果,枝晶和柱晶的尖端被熔断,游离的碎晶自由生长为等轴晶,最终在柱体中心形成等轴晶区。(2)降低熔体的冷却速度(图8b),熔体向外传递的热流量减少,模具内壁激冷效果降低,内壁附近液相区的过冷度减小,从而使外围细密等轴晶区厚度减小。在凝固过程中期,在外围等轴晶区前沿的液相区内,由于该区域过冷度较低,适宜柱晶和枝晶的生长。在凝固过程后期,外围固相区较低的导热系数与较高的模具初始温度会对中心尚未凝固的液相区产生良好的保温效果,导致熔断碎晶增多,中心粗大等轴晶区随之扩大。柱体内粗大晶体的增多

导致晶粒平均尺寸增大。(3)若进一步降低熔体的冷却速度(如图8c),由以上讨论可知,外层细密等轴晶区完全消失,由粗大等轴晶构成的中心等轴晶区继续扩大,晶粒平均尺寸显著增大。

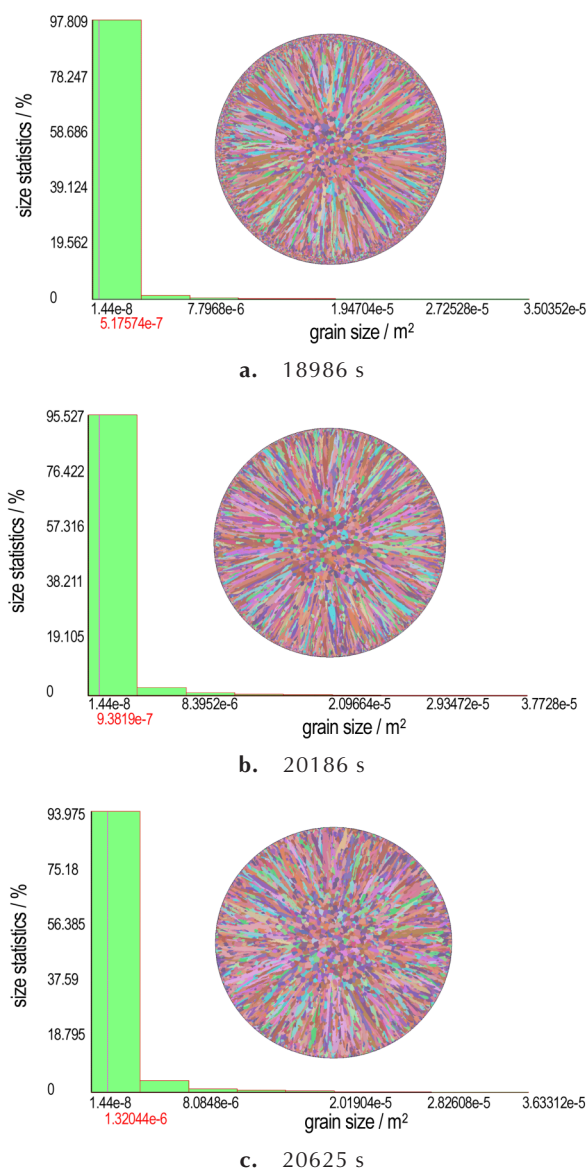


图8 冷却速度对晶粒形貌及尺寸的影响

Fig.8 Effect of cooling velocity on grain morphology and size

由模拟结果及分析可知:虽然较低的冷却速度会导致晶粒平均尺寸增大,但却可以抑制柱状晶和树枝晶的生长,有利于中心等轴晶区的扩大。以下措施可以有效降低熔体的冷却速度:选用导热系数较低的模具或减小模具的壁厚、对模具外壁和冒口进行保温、提高模具的初始温度等。

4.4 工艺改进

在图5c模拟结果的基础上,将 ΔT_v 变更为 $1\text{ }^\circ\text{C}$,浇

注温度由 $86\text{ }^\circ\text{C}$ 降低到 $82\text{ }^\circ\text{C}$,模具初始温度由 $20\text{ }^\circ\text{C}$ 升高到 $82\text{ }^\circ\text{C}$,对模具的顶端进行可控保温,保温的温度随时间的变化曲线见图9,保温工作物质为空气,其它冷却条件与形核参数保持不变。图10表示冷却时间为8142 s时,炸药柱内部的温度云图。冷却结束后药柱内的缩松与缩孔预测见图11。晶粒形貌及尺寸模拟结果见图12。

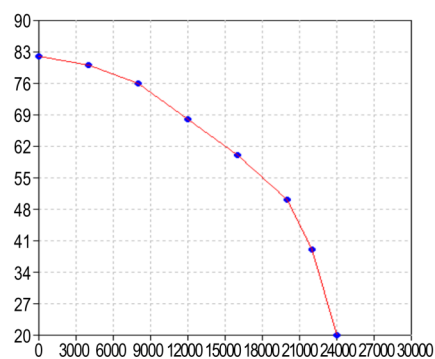


图9 顶部保温曲线

Fig.9 Top heat preservation curve

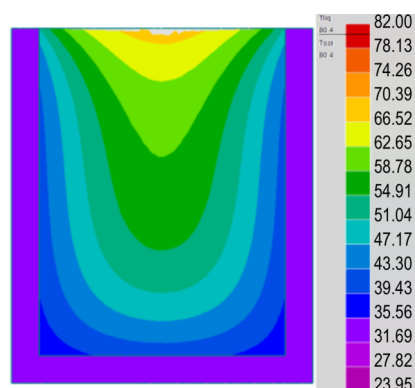


图10 轴向切片温度云图

Fig.10 Axial section temperature cloud map

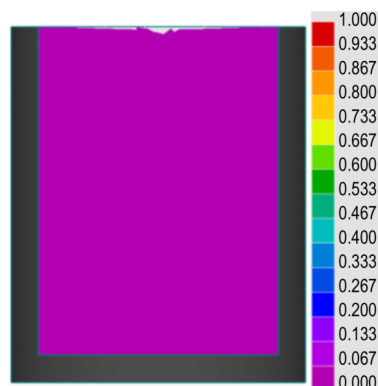


图11 炸药柱轴向切片缩松与缩孔预测

Fig.11 Axial section shrinkage prediction

工艺优化后,药柱内部全部由细密等轴晶组成,晶粒尺寸分布较为集中,平均尺寸大小为 $516.9\text{ }\mu\text{m}$,

柱状晶与树枝晶消失,药柱内部结晶组织形貌得到较大改善。在宏观层面上,炸药柱内部能够被模拟软件后处理系统识别出来的较大缩松与缩孔消失,仅在上表面处存在凹陷情况。根据 Clausius-Clapeyron 方程,液态 TNT 的凝固过程将会伴随着体积收缩,所以,宏观缩松与缩孔的消失将导致药柱内细小缩孔的增多。在实际生产实践中,熔铸炸药的装药工艺极其复杂,所有的浇注与凝固过程是在一整套真空振动装药机内进行,在浇注阶段,弹体上部要外加冒口,在凝固阶段,水浴冷却工艺与热芯棒保温工艺同时进行,使熔融炸药的凝固过程自下而上地进行,这些举措均有助于消除药柱内部产生的宏、微观缩松与缩孔。

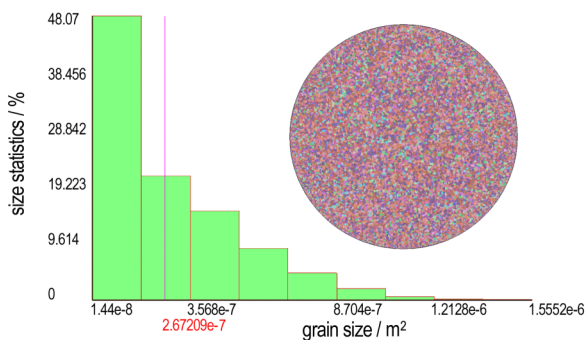


图 12 晶粒形貌及尺寸统计图

Fig.12 Grain morphology and size statistics

5 结论

(1) 熔体形核所需的体形核过冷度越低,炸药柱内等轴晶所占比例越大,晶粒平均尺寸越小。当体形核过冷度由 3 °C 降低到 1 °C 时,晶粒平均尺寸由 715.5 μm 减小到 458.5 μm 。

(2) 降低熔体的面形核过冷度,药柱内晶粒形貌没有变化,仅对晶粒尺寸由微小影响,当面形核过冷度由 4 °C 降低到 1 °C 时,晶粒平均尺寸由 715.5 μm 微增到 719.2 μm 。

(3) 浇注温度越低,越适宜等轴晶的形成,晶粒的平均尺寸越小。当浇注温度由 100 °C 降低到 82 °C 时,晶粒平均尺寸由 1114.5 μm 降低到 729.2 μm 。

(4) 降低熔体的冷却速度可以扩大中心等轴晶区的范围,抑制表面细晶、内部树枝晶与柱状晶的生长,但会增大晶粒的平均尺寸。当药柱冷却到 20 °C 的时间由 18986 s 延长到 20625 s 时,冷却速度逐渐降低,晶粒平均尺寸由 719.4 μm 增大到 1149.1 μm 。此外,通过观察成型药柱的缺陷预测图可知:降低熔体的冷

却速度可以避免药柱内出现宏观缩松与缩孔,对获得高质量的药柱有一定的帮助。

参考文献:

- [1] 李敬明, 田勇, 张明, 等. 熔黑梯炸药凝固过程的数值模拟与实验验证[J]. 含能材料, 2009, 17(4): 428-430.
LI Jing-ming, TIAN Yong, ZHANG Ming, et al. Numerical simulation and experimental validation of RHT solidification process [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2009, 17(4): 428-430.
- [2] 马松, 袁俊明, 刘玉存, 等. 水浴和自然条件下熔铸炸药凝固过程的数值计算[J]. 火炸药学报, 2013, 36(3): 54-57.
MA Song, YUAN Jun-ming, LIU Yu-cun, et al. Numerical calculation of solidification process of melt-cast explosive water bath and natural condition [J]. *Chinese Journal of Explosives*, 2013, 36(3): 54-57.
- [3] 牛国涛, 金大勇, 罗一鸣, 等. DNAN 基熔铸炸药工艺特性[J]. 兵工自动化, 2014, 33(7): 86-88.
NIU Guo-tao, JIN Da-yong, LUO Yi-ming, et al. Technical characteristics of DNAN-based melt-casting explosives [J]. *Chinese Journal of Ordnance Industry Automation*, 2014, 33(7): 86-88.
- [4] 田勇, 刘石, 张伟斌, 等. TNT 炸药熔铸结晶成型过程 μCT 实验研究[J]. 含能材料, 2009, 17(2): 173-177.
TIAN Yong, LIU Shi, ZHANG Wei-bin, et al. Experimental study on crystallization of casting TNT explosive during solidification by high-resolution X-ray CT [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2009, 17(2): 173-177.
- [5] 赵瑞先, 高天平, 郑颖娟, 等. 结晶粒状 TNT 粒度分级工艺[J]. 火炸药学报, 2004, 27(2): 20-22.
ZHAO Rui-xian, GAO Tian-ping, ZHENG Ying-juan, et al. A study on size grading process of crystalline TNT [J]. *Chinese Journal of Explosives*, 2004, 27(2): 20-22.
- [6] Rappaz M, Gandin Ch A. Probabilistic modeling of microstructure formation in solidification processes [J]. *Acta Metallurgica Material*, 1993, 39(2): 345-360.
- [7] Gandin Ch A, Rappaz M. A coupled finite element-cellular automaton model for the prediction of dendritic grain structure in solidification processes [J]. *Acta Metallurgica Material*, 1994, 40(7): 2233-2246.
- [8] Gandin Ch A, Charbon Ch, Rappaz M. Stochastic modeling of solidification grain structure [J]. *ISIJ International*, 1995, 35: 651-657.
- [9] Kurz W, Giovanola B, Trivedi R. Theory of microstructural development during rapid solidification [J]. *Acta Metallurgica*, 1986, 34(5): 823-830.
- [10] 王金龙, 赖朝彬, 王福明, 等. CAFE 模型机理及应用[J]. 钢铁研究学报, 2009, 21(10): 60-63.
WANG Jin-long, LAI Chao-bin, WANG Fu-ming, et al. Mechanism and application of CAFE method [J]. *Chinese Journal of Iron and Steel Research*, 2009, 21(10): 60-63.
- [11] 李敬明, 田勇, 张伟斌, 等. 炸药熔铸过程缩孔和缩松的形成与预测[J]. 火炸药学报, 2011, 34(2): 17-20.
LI Jing-ming, TIAN Yong, ZHANG Wei-bin, et al. Formation and prediction of shrinkage hole and shrinkage porosity in explosive during casting process [J]. *Chinese Journal of Explosives*, 2011, 34(2): 17-20.
- [12] 田勇. 炸药熔铸成型过程监测评价及数值模拟研究[D]. 北京:

中国科学院工程热物理研究所,2009.

TIAN Yong. Process monitoring/evaluation and numerical simulation during casting explosive solidification[D]. Beijing: Institution of Engineering Thermophysics, Chinese Academy of Sciences, 2009.

- [13] 乔羽. 纳米RDX和HMX在TNT基熔铸炸药中的应用基础研究[D]. 南京: 南京理工大学, 2016.
- QIAO Yu. Applied research of nanometer RDX/HMX based on TNT-melt-cast explosive[D]. Nanjing: Nanjing University of Science and Technology, 2016.
- [14] 邵高建, 胡仕成, 夏晨希, 等. 超声对7050铝合金凝固组织影

响的数值模拟[J]. 特种铸造及有色合金, 2011, 31(2): 119-122.

SHAO Gao-jian, HUB Shi-cheng, XIA Chen-xi, et al. Numerical simulation of solidification structure of 7050 aluminum alloy by ultrasonic wave[J]. *Chinese Journal of Special Casting and Nonferrous Alloys*, 2011, 31(2): 119-122.

- [15] 张雪. 7050铝合金园锭超声铸造微观组织及热裂敏感性研究[D]. 长沙: 中南大学, 2010.
- ZHANG Xue. Microstructure and thermal cracking susceptibility of 7050 aluminum alloy ingot by ultrasonic casting[D]. Changsha: Central South University, 2010.

Numerical Simulation of the Internal Crystalline Structure of TNT Melt-Cast Explosive

LIU Yu-di, CAO Hong-song, LIU Sheng, ZHANG Heng, ZHANG Xiao-dong, XIE Feng

(College of Mechanical and Electrical Engineering, North University of China, Taiyuan 030051, China)

Abstract: In order to investigate the micro-crystalline structural morphology in Melt-cast explosive and improve the quality of explosive column, the CAFE module of ProCAST casting simulation software was used to simulate the internal crystalline structure of TNT melt-cast explosive. Using cellular automata in CAFE module, the shape and size of grain in column under different technological conditions and TNT nucleation parameters were predicted. The improvement measures of grain refinement process were obtained by adjusting the nucleation undercooling degree, pouring temperature and cooling rate of melt. The results show that with the decrease of melt nucleation undercooling, the equiaxed grain area in the column gradually increases, and the average grain size decreases to 458.5 μm from 715.5 μm ; with the decrease of melt surface nucleation undercooling, the grain morphology inside the column does not change significantly, and the average grain size increases to 719.2 μm from 715.5 μm ; with the decrease of melt pouring temperature, the equiaxed grain area in the column gradually increases, and the average grain size decreases to 729.2 μm from 1114.5 μm ; with the decrease of cooling rate, the central equiaxed grain area gradually enlarges, the outer equiaxed grain area gradually disappears, and the average grain size increases to 1149.1 μm from 719.4 μm . After process optimization, the column is composed of fine equiaxed grains with an average grain size of 516.9 μm , the size distribution is concentrated, and the micro-quality of the grain is greatly improved.

Key words: melt-cast explosive; numerical simulation; cellular automation(CA); crystalline structure

CLC number: TJ55; TG244

Document code: A

DOI: 10.11943/CJEM2018162

(责编:高毅)