

基于三维离散元方法探究奥克托今 颗粒落锤撞击点火机理*

蒋城露¹⁾²⁾† 王昂¹⁾²⁾ 赵锋³⁾ 尚海林³⁾
张明建¹⁾²⁾ 刘福生¹⁾²⁾ 刘其军¹⁾²⁾‡

1) (西南交通大学物理科学与技术学院, 材料先进技术教育部重点实验室, 成都 610031)

2) (西南交通大学键带工程组, 高压科学与技术四川省高校重点实验室, 成都 610031)

3) (中国工程物理研究院, 流体物理研究所, 绵阳 621900)

(2019年6月28日收到; 2019年9月11日收到修改稿)

炸药颗粒的冲击点火机理一直是人们关注并不断研究的课题, 但是迄今为止进展缓慢. 随着计算技术的高速发展, 三维离散元方法 (three-dimensional discrete meso-element method, DM3) 被认为是一种高效且直观的研究炸药冲击点火的有效手段. 本文基于三维离散元方法对奥克托今 (HMX) 颗粒在落锤撞击条件下的撞击变形和升温点火进行了研究, 模拟计算表明, 炸药的颗粒尺寸、堆积程度、内部缺陷以及落锤的冲击力大小都将影响 HMX 颗粒的升温点火和燃烧蔓延. 同时, 基于以上结果, 本文提出了尖顶变形加热点火机制以及平顶颗粒剪切加热机制. 特别地, 含内部缺陷的 HMX 颗粒在冲击条件下将出现两种情况: 尺寸较大的颗粒在孔洞处出现温度优势, 颗粒尺寸较小的温度优势出现在尖顶位置.

关键词: 三维离散元, 奥克托今颗粒, 点火

PACS: 83.10.Rs, 45.70.-n, 83.80.Fg

DOI: 10.7498/aps.68.20190993

1 引言

计算颗粒力学 (computational granular dynamics, CGD) 包括硬球模型^[1]和软球模型 (discrete element method, DEM)^[2], 而软球模型也称为离散元方法^[2,3]. Cundall 首先提出了离散元方法^[4-6], 随后探讨了土壤的本构关系^[7]以及塌陷滑移^[8], 并应用在地学上^[9-11]. 国内, Wang^[10]介绍了离散元方法, Tang 等^[12,13]建立了冲击合成的二维离散元方法 (two-dimensional discrete meso-

element method, DM2). 近年来, DM2 和 DM3 的应用包括了炸药的冲击响应^[14]、铁的冲击相变^[15,16]、颗粒堆积^[3]、颗粒流动^[17]、颗粒分层^[18]、动物的运动行为^[19]等.

炸药颗粒在外界冲击下的点火和燃烧蔓延机制制约着炸药的研发和应用^[20-23]. 一般情况下, 普遍认为冲击波作用使凝聚炸药起爆^[24,25]和促使炸药形成热点. 理论界公认的观点是 Campell 等^[26]提出的冲击反应追赶模型, 即冲击波传播过程中, 炸药颗粒出现化学反应, 炸药迅速完成反应, 形成高速传递的爆轰波, 紧接着追上原冲击波阵面. 随

* 国家自然科学基金 (批准号: 11272296)、中央高校基本科研业务费专项基金 (批准号: 2682019LK07)、西北工业大学凝固技术国家重点实验室开放课题 (批准号: SKLSP201843)、西南交通大学博士创新基金项目和西南交通大学博士生创新人才培养 (批准号: D-CX201832) 和西南交通大学第十八期重点实验室开放项目 (批准号: ZD201918083) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: juul@my.swjtu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: qijunliu@home.swjtu.edu.cn

后, Walker 和 Wasley^[27] 发现在低速下, 爆轰出现在冲击波入射面. 冲击波作用下热点的形成包括空洞坍塌^[1,28]、剪切带^[3]、入射面^[27]等. 其中 HMX (octahydro-1, 3, 5, 7-tetranitro-1, 3, 5, 7-tetrazocine) 是性能最好的炸药颗粒之一^[29], 拥有高能量和高密度, 探究其冲击爆炸过程有重要的科学价值. 目前, 对非均质炸药 HMX 颗粒点火特性的研究无论在实验^[30]上, 还是在理论计算^[14,23,25,28]上都取得了丰富的成果. 但是, 对于 HMX 点火特性的离散元模拟主要集中在 DM2 阶段^[14,28], 并且缺乏对能量波阵面传播的研究. 因此, 本文基于三维离散元技术^[31], 对 HMX 炸药颗粒进行了研究和讨论.

2 离散元计算中的相互作用和反应模型

模型假定将整体的材料介质定义为离散的并具有细观尺度的粒子“元”, 元拥有自己的质量、比热、相互作用等^[31]. 离散元的三维堆积方式采用点阵排列, 堆积的球形和其他形状统称为“颗粒”.

两个元之间选用经典牛顿运动方程^[23,31]:

$$\begin{cases} m^i \ddot{r}^i = \sum_{j=1}^{n_i} F^{ij} + b^j, & (i = 1, 2, \dots, N) \\ J^i \ddot{\theta}^i = \sum_{j=1}^{n_i} q^{ij} \times F^{ij} + c^i, & (i = 1, 2, \dots, N), \end{cases} \quad (1)$$

其中, 元 i 对应的质量与转动惯量为 m, J ; 位置与角矢量为 r, θ ; 作用力与力臂为 F, q ; 外力和外力矩为 b, c ; n 为体系中离散元的总数.

元与元之间的势函数选用 Hugoniot 关系推导的中心势^[32]:

$$P^{ij} = A^{ij} \rho_0 C_0^2 \frac{(1 - r^{ij}/r_0^{ij})}{[1 - \lambda(1 - r^{ij}/r_0^{ij})]^2} \frac{r^{ij}}{r^{ij}}, \quad (2)$$

其中, P^{ij} 为作用力, ρ_0 为初始密度, C_0 为声速, λ 是 Hugoniot 关系 $D = C_0 + \lambda u$ 中的参数, r^{ij} 为元之间的距离, A^{ij} 为元之间的作用面积.

假定塑性与摩擦的能量消耗转全部化为温度, 则温升为^[28,31]

$$\Delta T^i = \frac{dE^i}{m^i C_v^i}, \quad (3)$$

其中, dE^i 为元之间相互作用产生的能量消耗, m^i 为元的质量, C_v^i 为元的比热.

点火模型采用 Arrhenius 化学反应模型, 到达反应温度 T_{re} 后, 元开始进行化学反应^[32]:

$$k = A\lambda \left(e^{-\frac{E_a}{RT}} \right), \quad (4)$$

其中, k 为反应的速率常数, E_a 为元的活化能, R 为普适气体常量, T 为热力学温度, $0 \leq \lambda \leq 1$ 表示反应度.

HMX 爆炸膨胀采用 JWL 状态方程^[24]

$$p = a \left(1 - \frac{\omega}{r_1 v} \right) e^{-r_1 v} + b \left(1 - \frac{\omega}{r_2 v} \right)^{-r_2 v} + \frac{\omega Q_r}{V}, \quad (5)$$

其中, p 是 HMX 爆炸产生的压力; V 是元对应的体积; Q_r 为元中的能量; a, b, r_1, r_2, ω 为相关参数.

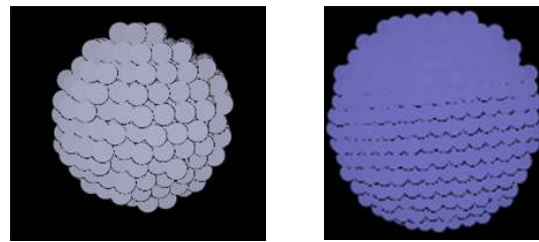
离散元 HMX 的计算参数如表 1 所示.

表 1 HMX 的计算参数
Table 1. The calculating parameters of HMX.

密度/ g·cm ⁻³	摩擦 系数	元的半径/ μm	元的能量 Q_r / MJ·kg ⁻¹	比热 C_v^i / J·g ⁻¹ K
1.83	0.35	10	6.19	1.1

3 HMX 颗粒离散元模型

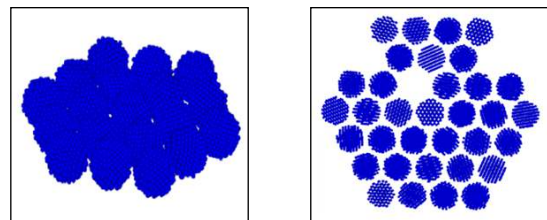
以 HMX 为主体的单质炸药, 采用 3D-DEM 分别建立了反映 HMX 炸药颗粒细观结构特征的三维离散元计算模型, 包括单个颗粒模型 (图 1) 和多个颗粒模型 (图 2).



(a) 单颗粒尖顶模型 (b) 单颗粒平顶模型

图 1 单个 HMX 颗粒离散元模型

Fig. 1. Discrete element model for a single HMX particle.



(a) 含 19 个颗粒的模型 (b) 含孔洞的 34 个颗粒的模型

图 2 多个 HMX 颗粒离散元模型

Fig. 2. Discrete element model for HMX multi-particles.

4 计算结果

4.1 颗粒尺寸对点火燃烧的影响

模拟中采用 HMX 颗粒炸药, 落锤的质量为 1.50 g, 下落高度为 30 cm; 模拟中采用的颗粒尺寸分别为 100, 500, 和 1000 μm (对应的离散元半径分别为 10, 50, 和 100 μm). 从图 3—图 5 中可以看出, 颗粒小的样品对撞击的响应更快, 这是由于其

尺寸较小导致塑性变形生成的热量较少. 因为热膨胀使元的体积增加, 温度越大, 半径越大. 可以看出, 颗粒小的样品元的半径增加量和温度上升幅度不如颗粒较大的样品.

4.2 落锤下落高度对点火燃烧的影响

模拟中采用颗粒尺寸为 100 μm 的 HMX 炸药颗粒, 落锤的质量为 1.50 g; 下落高度分别为 30 和 40 cm. 下落高度为 30 cm/40 cm 的 HMX

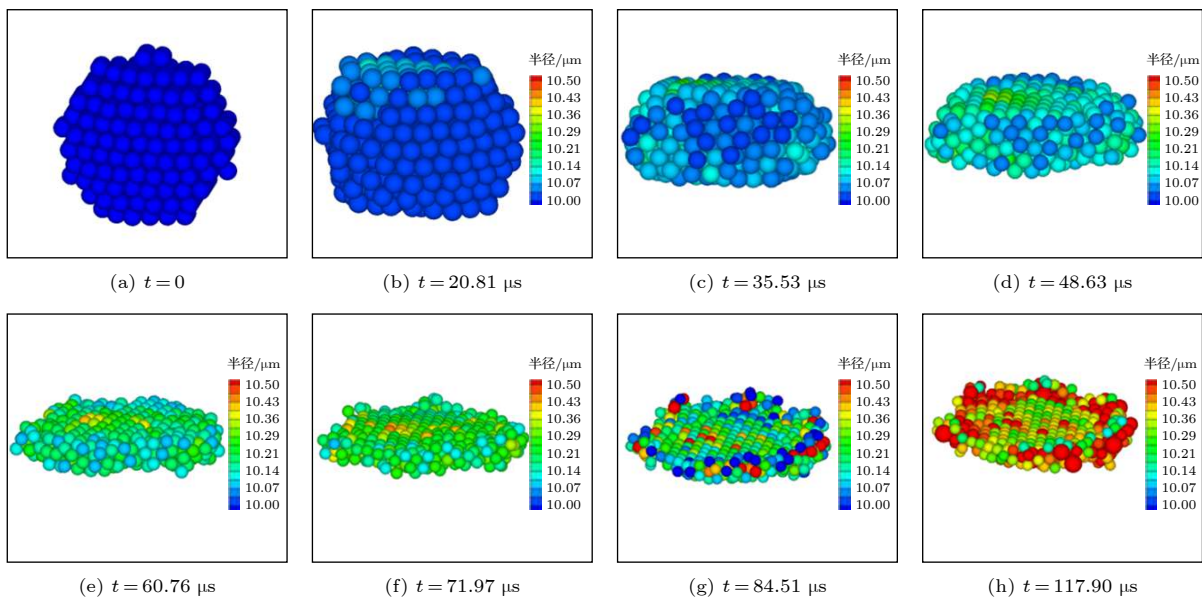


图 3 颗粒尺寸为 100 μm 的 HMX 颗粒受到撞击后的响应过程

Fig. 3. The response of HMX particles with the size of 100 μm .

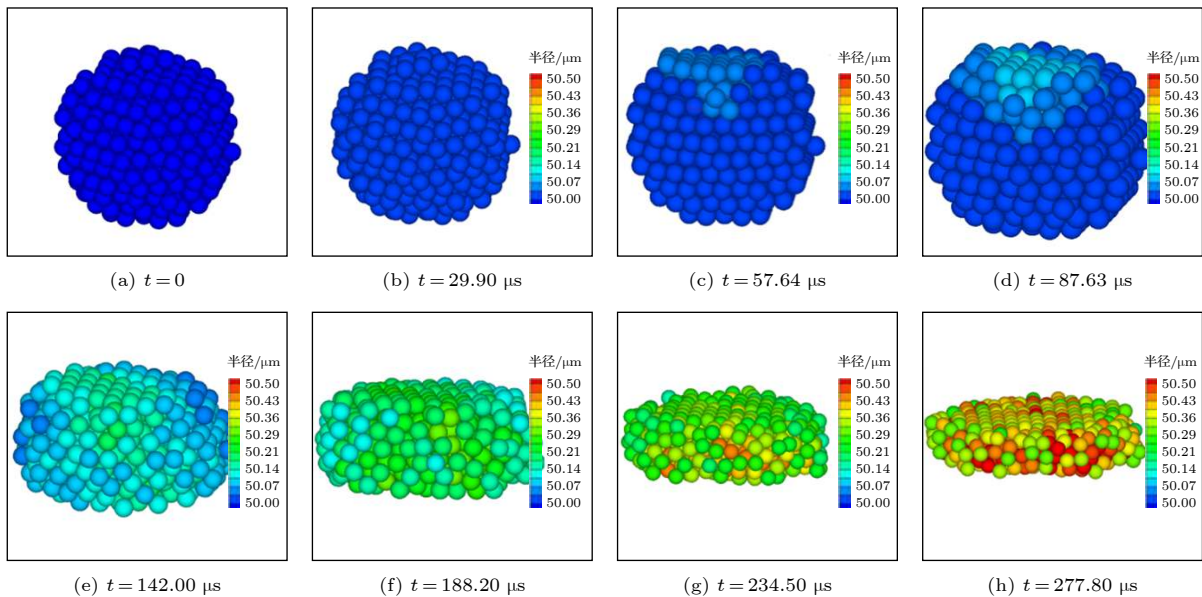


图 4 颗粒尺寸为 500 μm 的 HMX 颗粒炸药受到撞击后的响应过程

Fig. 4. The response of HMX particles with the size of 500 μm .

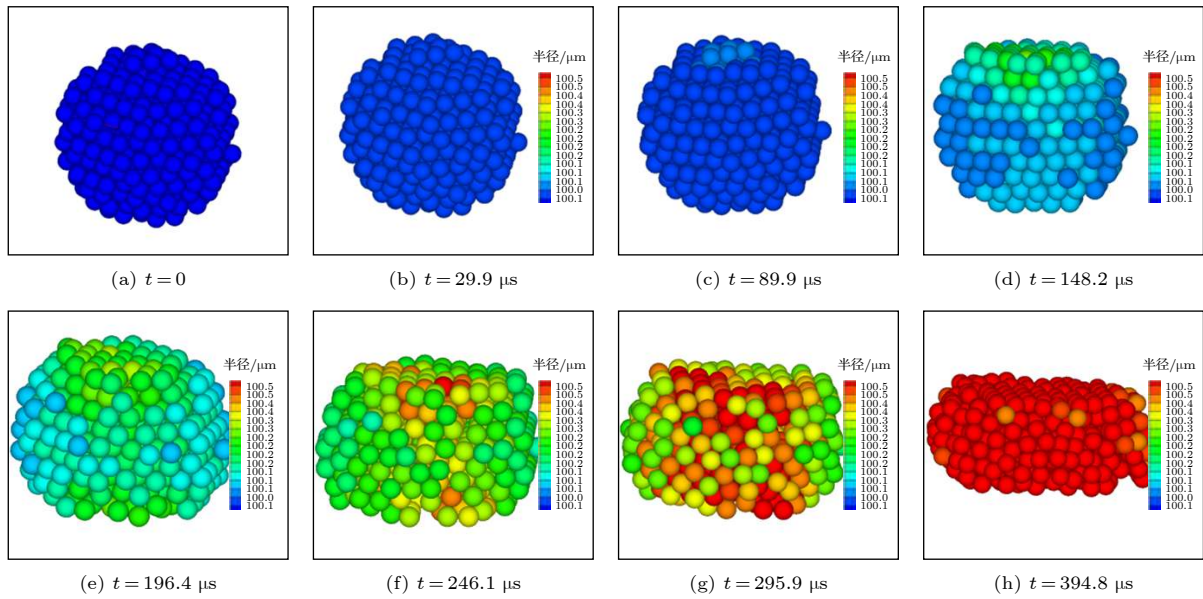


图 5 颗粒尺寸为 1000 μm 的 HMX 颗粒炸药受到撞击后的响应过程
 Fig. 5. The response of HMX particles with the size of 1000 μm .

颗粒炸药受到撞击后的响应过程如图 6/图 7 所示. 从图 6 和图 7 中可以看到, HMX 颗粒在撞击作用下被压实并产生塑性变形; 在塑性功和摩擦力的共同作用下发热并导致离散元半径的逐渐增加. 刚开始半径变大的部分为与落锤接触的部分离散元, 随

后内部的离散元半径增加, 并在 97 μs 时迅速增加, 同时边缘处的增加幅度大于内部离散元.

可以看到, 半径最先变化的地方是与落锤接触的颗粒顶部, 这是由于颗粒受撞击后塑性变形放热; 随后半径增幅较大的转为边缘处的离散元.

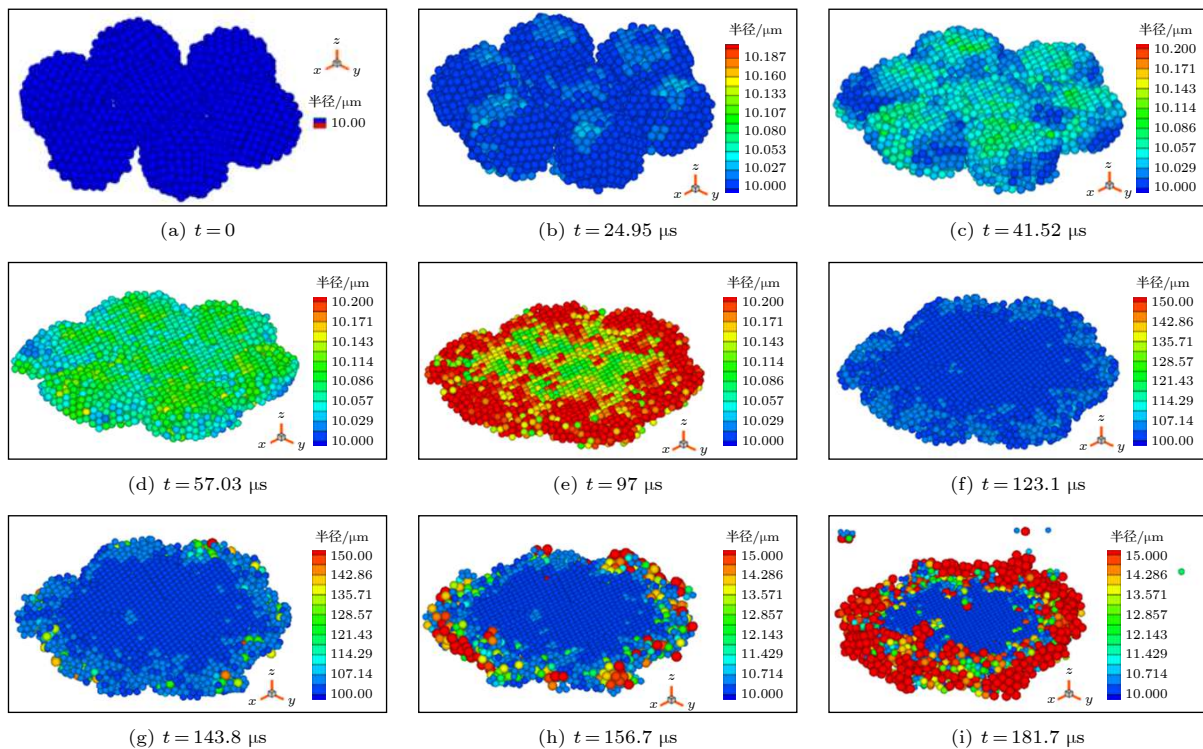


图 6 下落高度为 30 cm 的 HMX 颗粒炸药受到撞击后的响应过程
 Fig. 6. The response of HMX particles with the falling height of 30 cm.

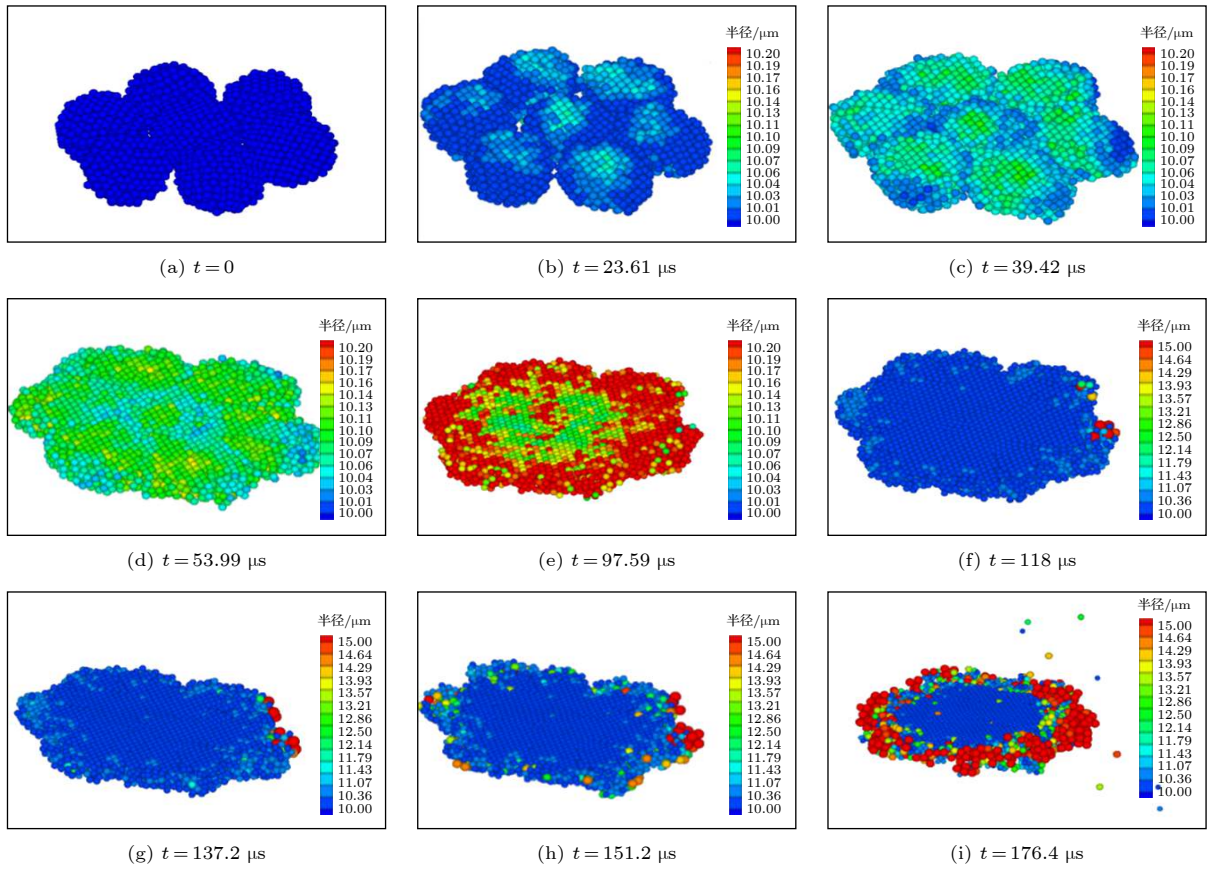


图 7 下落高度为 40 cm 的 HMX 颗粒炸药受到撞击后的响应过程

Fig. 7. The response of HMX particles with the falling height of 40 cm.

4.3 颗粒堆积对点火燃烧的影响

模拟中采用 HMX 颗粒炸药, 落锤的质量为 1.50 g, 下落高度为 30 cm, 颗粒尺寸为 100 μm ; 模拟中分别采用的堆放颗粒数为 1, 7 和 19. 颗粒

数为 1 的 HMX 颗粒炸药受到撞击后的响应过程如图 3 所示. 颗粒数为 7 的 HMX 颗粒炸药受到撞击后的响应过程如图 6 所示. 颗粒数为 19 的 HMX 颗粒炸药受到撞击后的响应过程如图 8 所

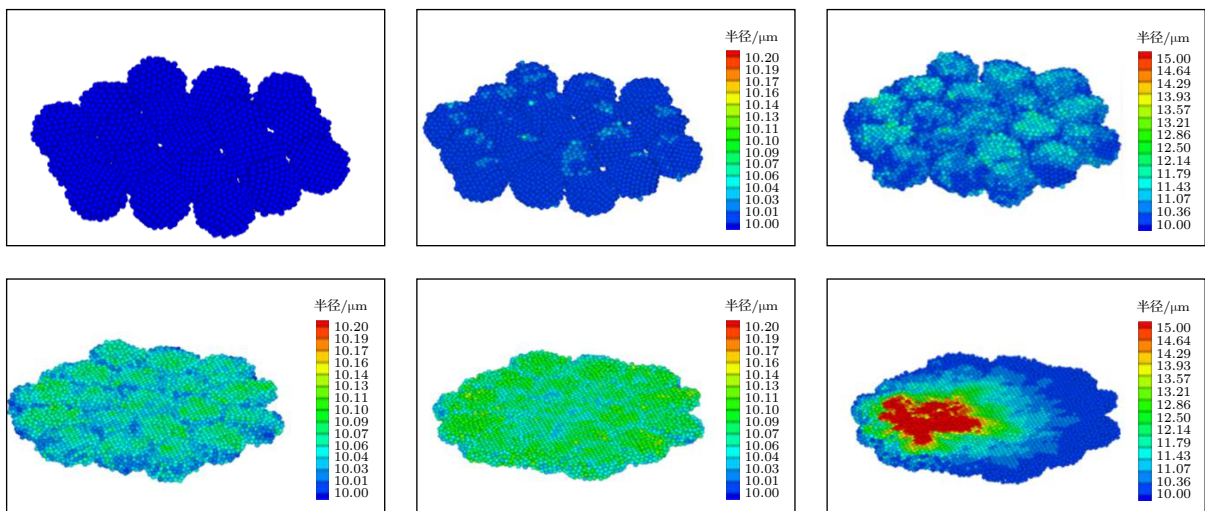


图 8 颗粒数为 19 的 HMX 颗粒炸药受到撞击后的响应过程

Fig. 8. The response of HMX particles with the particle number 19.

示. 结合三幅图中样品厚度和温度的关系, 得到如图 9 所示的不同颗粒数样品厚度与温度的关系. 可以看到, 颗粒堆积程度影响着炸药的点火燃烧. 同等条件下, 颗粒数越少, 塑性变形时间越短, 则温度越容易上升.

4.4 尖顶球型炸药颗粒冲击燃烧过程

如图 10 所示, 颜色变红表示温度升高, 当 $t = 10 \mu\text{s}$ 时, 尖顶突出位置被压平, 发生塑性加热过程; 当 $t = 20 \mu\text{s}$ 时, 在原尖顶处出现高温, 发生局部点火; 随后当 $t = 30 - 50 \mu\text{s}$ 时, 燃烧区域逐渐扩大; 当 $t = 60 - 68 \mu\text{s}$ 时, 燃烧区达到样品颗粒边沿, 燃烧产物冲破边沿约束, 产生的物质碎片从侧面喷出. 从某“点”发生点火, 后逐渐扩展燃烧的特点与实验观察结果非常相似, 说明实验中点

火发生在某颗粒的尖顶突出部分.

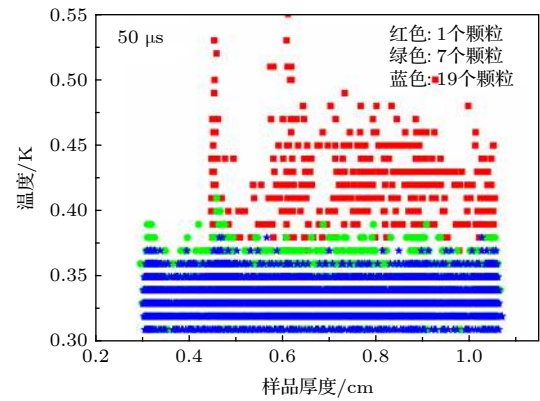


图 9 不同颗粒数样品厚度与温度的关系

Fig. 9. The relationship between temperature and thickness of particles.

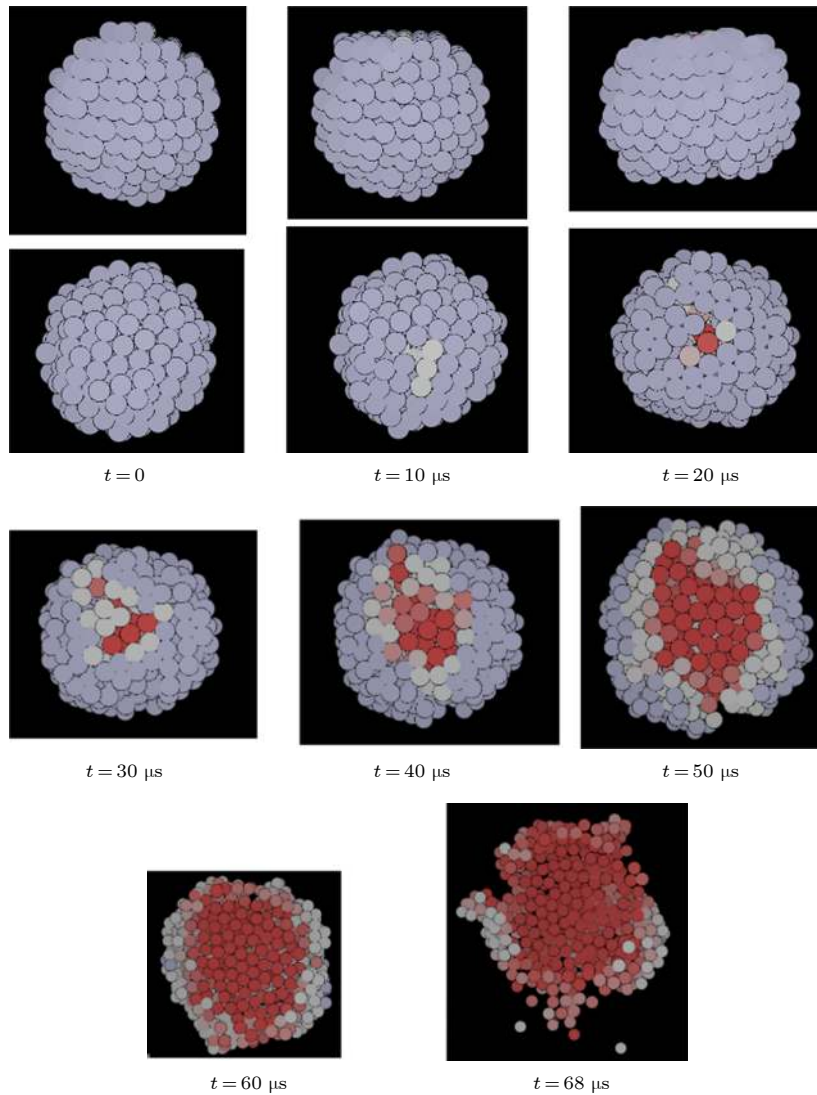


图 10 尖顶球型炸药颗粒冲击燃烧模型

Fig. 10. The combustion model under impact of spherical explosive particles.

4.5 平顶大尺寸球型炸药颗粒的冲击过程

球型颗粒冲击点火发生在顶端, 原因是应力集中, 发生大变形, 大量塑性功转化为热能. 但平顶球状粒子顶部呈平台状, 不存在早起尖顶大变形加热过程, 在顶部热点点火过程可能会被推迟, 甚至抑制. 那么点火机制是否呈现新特点呢? 本文从如下两个方面描述.

1) 平顶颗粒剪切加热效应: 由于 45 度方向剪切应力最大, 早起在该方向形成滑移面, 此时塑性功与摩擦产生大量热, 形成剪切加热带. 如图 11 中所示, 剪切带与上下断面相交区域发热更明显.

2) 上表面局部点火及燃烧区扩展过程: 图 12 为 0—80 μs 温度分布变化, 每幅图间隔 10 μs , 红色代表最高温度 6000 K. 在 0—30 μs , 颗粒经历一次压剪破裂, 分为两半. 左边一片, 在上表面边沿形成“尖顶”结构. 在 40—80 μs , 再现局部点火和

燃烧蔓延现象, 其特征与尖顶颗粒非常类似. 该结论支持尖顶大形变加热点火机制.

4.6 含孔洞球状炸药颗粒的冲击点火特性

如图 13 所示, 颜色对应温度变化 $T(\text{K})$, HMX 颗粒含离散元 8704 个, 其中内部包含孔洞. 在 10—30 μs , 颗粒之间温度都独自升高; 当 $t = 40 \mu\text{s}$ 时, 在某一个颗粒的某一个离散元处出现了高温, 并形成热点; 在 40—60 μs , 颗粒之间开始接触, 其热点远远超过周围其他离散元的温度, 特征与尖顶颗粒一致; 在 60—90 μs , 颗粒之间的孔洞在冲击波作用下逐渐消失, 孔洞附近某处升温很快, 并超过了最初的热点, 预示着孔洞周围的颗粒碎裂, 破裂颗粒的塑性形变与摩擦产生大量热, 孔洞附近的元就会产生明显的升温. 颗粒在该尺寸 (含孔洞) 情况下, 研究结果支持孔洞点火的机制 [32].

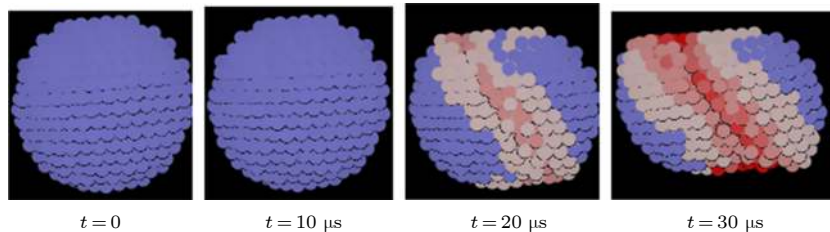


图 11 平顶颗粒剪切加热效应

Fig. 11. Shear heating effect of flat-topped particles.

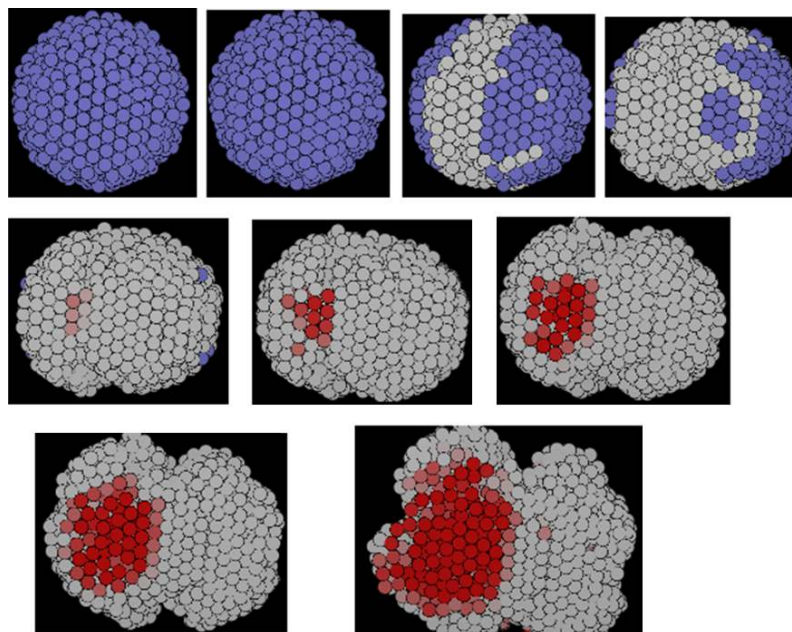


图 12 上表面局部点火及燃烧区扩展过程

Fig. 12. Local ignition of surface and the process of expansion.

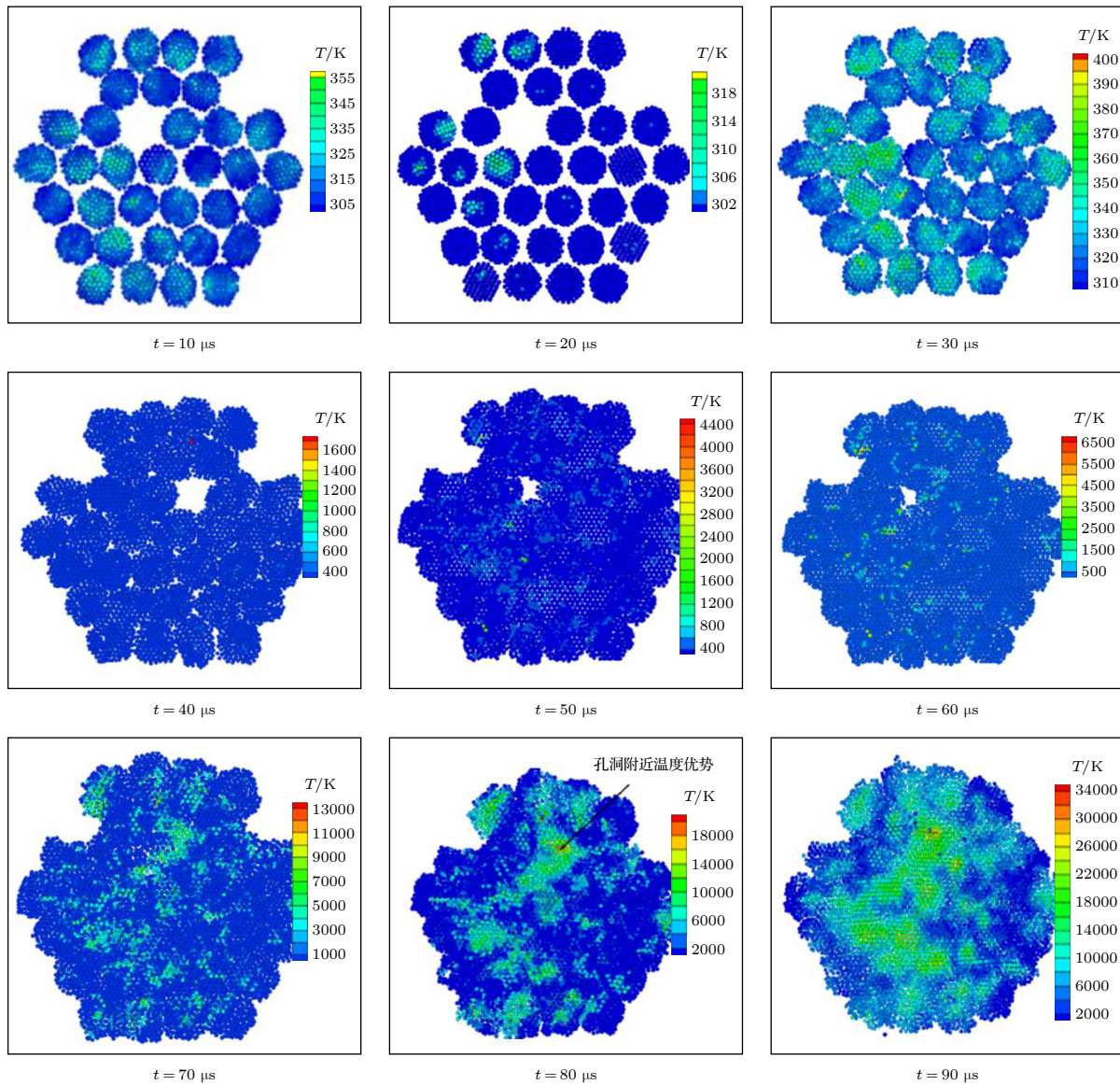


图 13 含孔洞颗粒(离散元 $256 \times 34 = 8704$ 个)受撞击后的的点火特性

Fig. 13. Ignition characteristics of porous particles (discrete elements $256 \times 34 = 8704$) under shock force.

如果将离散元尺寸下降到 $93 \times 35 = 3814$ 个, 如图 14 所示, 颜色对应温度变化 T (K). 在 $10\text{--}30 \mu\text{s}$, 与颗粒尺寸较大的情况相比, 颗粒温度升高也都是独自的, 但温度升高较快; 当 $t = 40 \mu\text{s}$ 时, 形成高温热点, 远远高于周围其他离散元的温度, 与颗粒尺寸对炸药点火影响相同; 在 $60\text{--}90 \mu\text{s}$, 发现尺寸小的颗粒(含孔洞)与尺寸较大的颗粒(含孔洞)相似, 其孔洞在冲击作用下逐渐消失, 伴随周围的元温度升高, 但对于小尺寸来说, 其孔洞附近的温度没有超过最初热点周围的温度, 且中心区域周围温度的升高也超过了孔洞周围. 所以, 在多个小尺寸颗粒(含孔洞)的情况下, 该结论不支持孔洞点火的机制^[32].

5 结 论

基于三维离散元技术, 得到了冲击波冲击作用下炸药颗粒点火的机制, 具体的结论如下:

1) 在相同的冲击条件下, 离散元颗粒尺寸较小导致其塑性变形生成的热量较少, 升温点火较慢.

2) 颗粒堆积程度影响着炸药的点火燃烧. 同等条件下, 颗粒数越少, 塑性变形时间越短, 则温度越容易上升.

3) 球形颗粒出现某“点”开始点火, 后逐渐扩展燃烧的特点与实验观察结果非常相似, 说明实验中点火发生在某颗粒的尖顶突出部分.

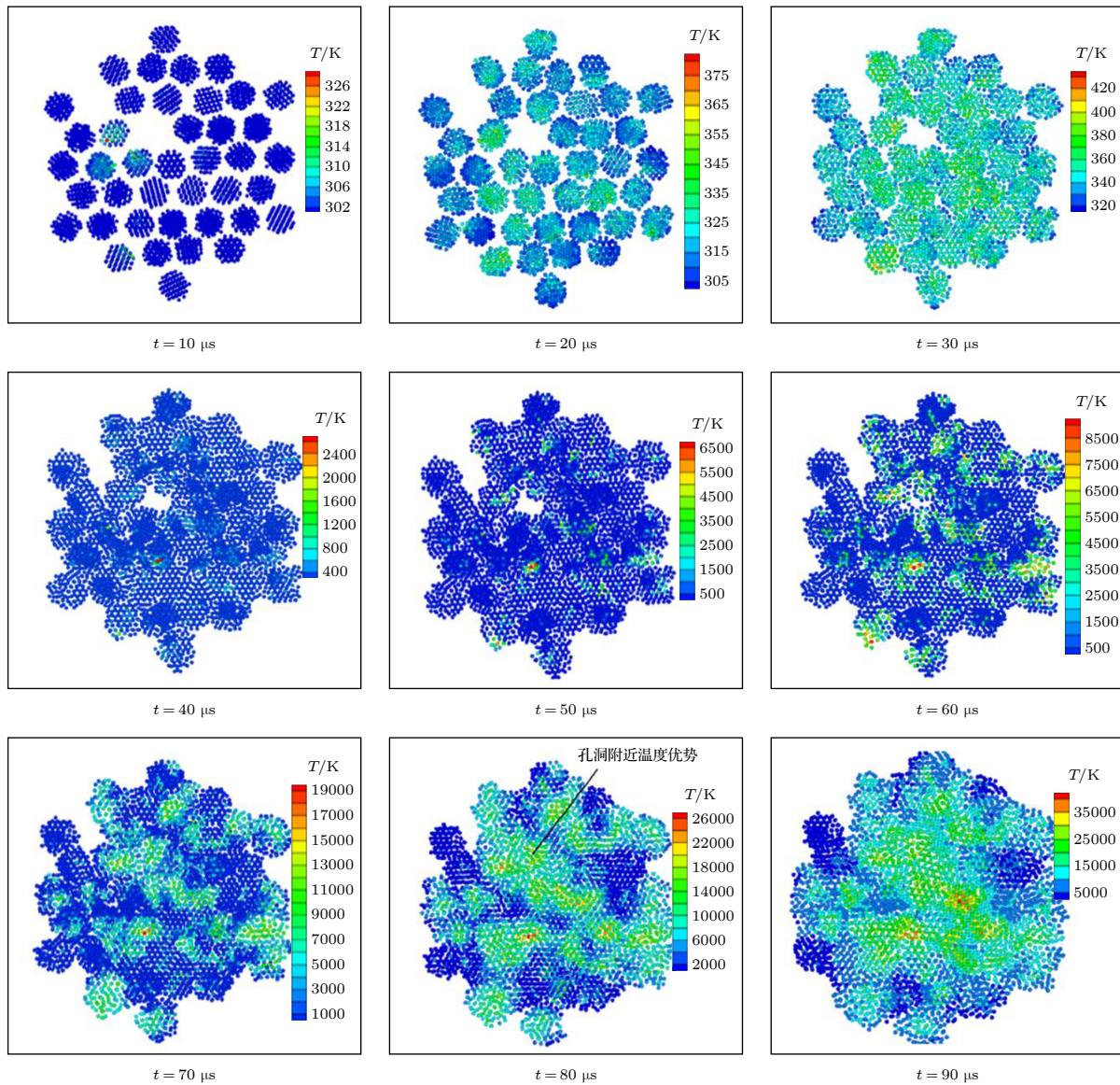


图 14 含孔洞颗粒 (离散元 $93 \times 35 = 3814$ 个) 受撞击后的的点火特性

Fig. 14. Ignition characteristics of porous particles (discrete elements $93 \times 35 = 3814$) under shock force.

4) 平顶颗粒出现剪切加热效应, 45 度方向剪切应力最大, 出现剪切加热带. 后续出现的局部升温点火蔓延与尖顶点火类似.

5) 在冲击压缩下, 带孔洞的炸药会在孔洞处产生明显的升温. 本研究支持尺寸大的 HMX 颗粒在孔洞处的点火机制, 反之, 如果颗粒尺寸太小, 本研究认为点火出现在尖顶而不是孔洞处.

参考文献

[1] Alder B J, Wainwright T E 1957 *J. Chem. Phys.* **27** 1208
 [2] Cundall P A, Strack O D L 1979 *Géotechnique* **29** 47
 [3] Zhao Y Z, Jiang M Q, Xu P, Zheng J Y 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1819 (in Chinese) [赵永志, 江茂强, 徐平, 郑津洋 2009 物理学报 **58** 1819]

[4] Cundall P A 1971 *Proceedings of the Symposium of the International Society of Rock Mechanics* **2** 2
 [5] Xu Y, Sun Q C, Zhang L, Huang W B 2003 *Advances in Mechanics* **33** 251 (in Chinese) [徐泳, 孙其诚, 张凌, 黄文彬 2003 力学进展 **33** 251]
 [6] Ahlinhan M F, Houehanou E, Koube M B, Doko V, Alaye Q, Sungura N E 2018 *Adjovi Geomaterials* **8** 39
 [7] Cundall P A, Hart R D 1979 *Numerical Methods in Geomechanics* **1** 289
 [8] Cundall P A, Hart R D 1992 *International Journal for Computer-Aided Engineering and Software* **9** 101
 [9] Cundall P A 2001 *Proceedings of the Institution of Civil Engineers-Geotechnical Engineering* **149** 41
 [10] Wang Y J 1986 *Proceedings of the First National Symposium on Numerical Computation and Model Testing of Rock Mechanics* Ji'an, Jiangxi, June 20-27 1986 pp32-37 (in Chinese) [王泳嘉 1986 第一届全国岩石力学数值计算及模型试验讨论会论文集 江西吉安 1986年6月20—27日 第3237页]
 [11] Liu K X, Gao L T 2003 *Advances in Mechanics* **33** 483 (in

- Chinese) [刘凯欣, 高凌天 2003 *力学进展* **33** 483]
- [12] Tang Z P, Horie Y, Psakhie S G 1997 *High-Pressure Compression of Solids IV* (New York: Springer) pp143–175
- [13] Tang Z P, Horie Y, Psakhie S G 1996 *AIP Conference Proceedings* **370** 657
- [14] Yu J D, Wang W Q, Liu C L, Zhao F, Sun C W 2008 *Explosion and Shock Waves* **28** 488 (in Chinese) [于继东, 王文强, 刘仓理, 赵峰, 孙承维 2008 *爆炸与冲击* **28** 488]
- [15] Liu C, Shi Y N, Qin C S, Liang X H 2014 *Chinese Journal of Computational Physics* **31** 51 (in Chinese) [刘超, 石艺娜, 秦承森, 梁仙红 2014 *计算物理* **31** 51]
- [16] Liu C, Shi Y N, Qin C S, Liang X H 2014 *Acta Armamentarii* **35** 1009 (in Chinese) [刘超, 石艺娜, 秦承森, 梁仙红 2014 *兵工学报* **35** 1009]
- [17] Meng F J, Liu K 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 262 (in Chinese) [孟凡净, 刘焜 2014 *物理学报* **63** 262]
- [18] Zhao L L, Liu C S, Yan J X, Xu Z P 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 187007 (in Chinese) [赵啦啦, 刘初升, 闫俊霞, 徐志鹏 2010 *物理学报* **59** 187007]
- [19] Cheng Q, Ran X W, Liu P, Tang W H, Raphael B 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 0147028 (in Chinese) [程琦, 冉宪文, 刘苹, 汤文辉, Raphael Blumenfeld 2018 *物理学报* **67** 0147028]
- [20] Su Y, Fan J Y, Zheng Z Y, Zhao J J, Song H J 2019 *Chin. Phys. B* **27** 056404
- [21] Fan H, He G S, Yang Z J, Nie F D, Chen P W 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 106201 (in Chinese) [范航, 何冠松, 杨志剑, 聂福德, 陈鹏万 2019 *物理学报* **68** 106201]
- [22] Tian Y, Wang H, Zhang C S, Tian Q, Zhang W B, Li H J, Li J, Liu B D, Sun G A, Peng T P, Xu Y, Gong J 2017 *Chin. Phys. Lett.* **34** 066101
- [23] Shng H L, Zhao F, Wang W Q, Fu H 2010 *Explosion and Shock Waves* **30** 131 (in Chinese) [尚海林, 赵锋, 王文强, 傅华 2010 *爆炸与冲击* **30** 131]
- [24] Zhang G R, Chen D N 1991 *Initiation Kinetics of Condensed Explosive* (Beijing: National Defense Industry Press) pp89–128 (in Chinese) [章冠人, 陈大年 1991 *凝聚炸药起爆动力学* (北京: 国防工业出版社) 第89—128页]
- [25] Shang H L 2009 *M. S. Thesis* (Mianyang: China Academy of Engineering Physics) (in Chinese) [尚海林 2009 硕士学位论文 (绵阳: 中国工程物理研究院)]
- [26] Campbell A W, Davis W C, Travis J R 1961 *Phys. Fluids* **4** 498
- [27] Walker F E, Wasley R J 1970 *Combust. Flame* **3** 233
- [28] Fu H, Zhao F, Tan D W, Wang W Q, Shang H L 2011 *Chinese Journal of High Pressure Physics* **25** 8 (in Chinese) [傅华, 赵峰, 谭多望, 王文强, 尚海林 2011 *高压物理学报* **25** 8]
- [29] Ge N N, Ji G F, Chen X R, Wei Y K 2013 *Explosion and Shock Waves* **S1** 34 (in Chinese) [葛妮娜, 姬广富, 陈向荣, 魏永凯 2013 *爆炸与冲击* **S1** 34]
- [30] Millett J C F, Taylor P, Roberts A, Appleby-Thomas G 2017 *J. Dynamic Behavior Mater.* **3** 100
- [31] Tang Z P 2003 *Sci. China Technol. Sci.* **11** 989 (in Chinese) [唐志平 2003 *中国科学E辑: 技术科学* **11** 989]
- [32] Shang H L 2018 *Ph. D. Dissertation* (Mianyang: China Academy of Engineering Physics) (in Chinese) [尚海林 2018 博士学位论文 (绵阳: 中国工程物理研究院)]

Three-dimensional discrete element technology investigated ignition mechanism of octahydro-1, 3, 5, 7-tetranitro -1, 3, 5, 7-tetrazocine particles under drop hammer impact^{*}

Jiang Cheng-Lu^{1)2)†} Wang Ang¹⁾²⁾ Zhao Feng³⁾ Shang Hai-Lin³⁾
 Zhang Ming-Jian¹⁾²⁾ Liu Fu-Sheng¹⁾²⁾ Liu Qi-Jun^{1)2)‡}

1) (*School of Physical Science and Technology, Southwest Jiaotong University, Key Laboratory of Advanced Technologies of Materials, Ministry of Education of China, Chengdu 610031, China*)

2) (*Bond and Band Engineering Group, Sichuan Provincial Key Laboratory (for Universities) of High Pressure Science and Technology, Southwest Jiaotong University, Chengdu 610031, China*)

3) (*Institute of Fluid Physics, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China*)

(Received 28 June 2019; revised manuscript received 11 September 2019)

Abstract

The ignition mechanism of the explosive particles under impact has been a hot topic, but the research progress is slow. With the rapid development of computer science, the three-dimensional discrete element technique (DM3) is regarded as an efficient and intuitive method to study the explosive ignition under impact. As is well known, octahydro-1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocine (HMX) is one of the most effective explosive particles in performance, which has high density and energy and thus possesses a significant application. In this paper, the deformation and ignition of HMX particles under impact of drop hammer are investigated based on the three-dimensional discrete element technique. Specifically, the computational process for shock loading as well as chemical reaction is employed in DM3 model through using the state equation of Hugoniot, the reactive model of Arrhenius, the state equation of JWL. The results show that the size, degree of accumulation, defect and the force of drop hammer can definitely influence the ignition and propagation of HMX particles. Under the same shock loading, the particles on a small scale would produce less power. On the same scale of particle, the less the number of particles, the shorter the deformation time is, so the temperature increases more easily. As for the different shapes of single particles, the deformation and ignition first appear from the ‘top’ for the spire particles, and then the deformation and ignition of flat particles happens from ‘shear’. Specifically, there are two results of the internal defect HMX particles under impact: the particles with bigger size (discrete elements $256 \times 34 = 8704$) have a temperature advantage near the ‘hole’, while the temperature advantage of the particles with the smaller size (discrete elements $93 \times 35 = 3814$) appears on the ‘top’.

Keywords: three-dimensional discrete element, octogen particles, ignition

PACS: 83.10.Rs, 45.70.-n, 83.80.Fg

DOI: 10.7498/aps.68.20190993

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11272296), the Fundamental Research Funds for the Central Universities, China (Grant No. 2682019LK07), the fund of the State Key Laboratory of Solidification Processing in NWPU, China (Grant No. SKLSP201843), the Doctoral Innovation Fund Program of Southwest Jiaotong University and the Doctoral Students Top-notch Innovative Talent Cultivation of Southwest Jiaotong University, China (Grant No. D-CX201832), and 18th key laboratory open project of Southwest jiaotong university, China (ZD201918083).

[†] Corresponding author. E-mail: juul@my.swjtu.edu.cn

[‡] Corresponding author. E-mail: qijunliu@home.swjtu.edu.cn