

文章编号: 1006-9941(2014)04-0535-07

基于分形方法的高聚物粘接炸药热导率预测模型

周筱雨, 王 翕, 韦兴文, 黄 忠, 周美林

(中国工程物理研究院化工材料研究所, 四川 绵阳 621900)

摘 要: 采用颗粒随机填充模型和分形理论, 提出了基于分形维数的高聚物粘结炸药(PBX)热导率计算模型, 利用该模型对填充率为 20%、40%、50%、60%、80%、90% 和 95% 的 TATB 基 PBX 的热导率进行了计算, 使用闪光法对相应填充率下 PBX 的热导率进行了实验验证。结果表明, 在 20% 的填充率下, 本研究的热导率模型计算值与实测值的误差为 20.2%, 40% 的填充率时达到 32.8%, 随着填充率进一步增加, 预测误差趋于减小, 在填充率为 95% 时误差为 15.0%; PBX 的热导率随着 TATB 填充率的增加而升高, 且本研究模型的预测结果优于半经验 Hamilton-Crosser 模型。

关键词: 材料物理与化学; 高聚物粘结炸药; 热导率; 分形; 数值模拟

中图分类号: TJ55; O64

文献标志码: A

DOI: 10.3969/j.issn.1006-9941.2014.04.021

1 引 言

热导率是炸药材料主要热物理性能参数之一, 是表征物质导热能力的重要参数, 是炸药结构可靠性分析, 热安全性能评估和热爆炸计算的关键参数之一。高聚物粘结炸药(PBX)是一种复合材料, 其中炸药晶体为填充相, 粘结剂为基体相。作为颗粒填充型的导热体系, 影响 PBX 材料热导率的因素众多, 如炸药与聚合物基体的热导率、炸药颗粒和基体的体积分数、颗粒形状、粒径及粒径分布等^[1]。长期以来, PBX 热导率都是通过实验获得, 但由于 PBX 实验样品需要经过造粒、压制成型和机加等过程, 实验周期长、成本高。因此, 在了解导热机制的基础上, 建立热导率预测模型, 用以指导 PBX 配方设计和工程应用很有必要。

对于颗粒填充型聚合物基复合材料的热导率, 目前已有几种运用较广泛的预测模型, 且各具特点: 如早期建立的 Maxwell-Eucken 热导率模型^[2], 为球形颗粒复合材料的电导率计算模型转换而成, 适用于低填充率下的热导率预测; Bruggeman^[3]通过微分的方法对 Maxwell-Eucken 热导率模型进行改进, 推导出较高填充率下热导率的计算模型; Fricke^[2,4]考虑了填充颗粒形状对复合材料热导率的影响, 假设填充颗粒为椭圆形, 建

立了包含颗粒形状参数的热导率计算模型。这些模型整体上预测了体系的热导率, 但仍存在一定的偏差^[5]。因为许多预测模型都假设填充粒子是规则几何形状, 如圆形或椭圆形等, 而实际情况是复合材料中的填充粒子形状及分布都是复杂和无规则的。对此不规则几何形态的研究, 目前应用得较多的方法是分形理论。何兵兵等^[6]使用无规 Al_2O_3 陶瓷颗粒填充至液态环氧树脂, 实验证实了聚合物基复合材料的性能与填充粒子的分形维数存在一定关系; 阚安康等^[7]通过表征聚氨酯泡沫材料中固体基质和泡孔的微观结构, 计算出泡孔的结构分形维数, 并使用该维数对热阻网络公式中的孔隙率进行修正, 建立了具有复杂泡孔网络结构的聚氨酯泡沫的热导率的预测模型; 王亮亮^[8]根据导热填料在聚合物基体中的分布, 提出了导热聚合物基复合材料两相体系的“海岛-网络”模型, 对任意填充率的复合材料的热导率进行了预测。

PBX 作为一种特殊的复合材料, 其填充颗粒一般是有机炸药晶体, 且几何形状基本都是非球形粒子, 而基体则是较稳定的高聚物粘结材料。由于基体很难使用强氧化剂染色, 且出于对安全的考虑, 对染色剂的使用也有所限制, 因此用显微观察等传统手段很难将两相区分开, 无法由实验直接获得 PBX 填充颗粒的形状及分布状态。计算机技术的发展, 为使用任意复杂形状的图形来模拟复合材料的填充结构提供了必要的物质基础, Wittmann^[9]在 20 世纪 80 年代提出了复合材料中填充颗粒几何形状的模拟方法; 伍君勇^[10]利用计

收稿日期: 2013-07-27; 修回日期: 2014-01-04

基金项目: 化工材料研究所创新基金(626010947)

作者简介: 周筱雨(1982-), 男, 助理研究员, 主要从事含能材料及高分子材料表征及评估研究。e-mail: 231567120@qq.com

算机技术实现了混凝土材料中任意形状填料的模拟。

本研究将借鉴复合材料细观结构的模拟生成技术,及随机粒子理论探索 PBX 二维填充结构的数值模拟方法,采用分形理论对粒子在二维空间的分布状态进行研究,建立基于粒子分形维数的 PBX 热导率预测模型,同时对压制 PBX 药块进行导热实验,使用实验数据对模型进行验证。

2 PBX 热导率方程

Hamilton 和 Crosser^[11] 根据分散相粒子的形状和两相热导率的比值,推导出具有普遍意义的等效热导率计算公式:

$$\lambda_e = \lambda_i \times \frac{\lambda_p + (n-1)\lambda_i + (n-1)(\lambda_p - \lambda_i)\varphi_v}{\lambda_p + (n-1)\lambda_i - (\lambda_p - \lambda_i)\varphi_v} \quad (1)$$

式中, λ_e 为颗粒填充型复合材料热导率, $W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$; λ_i 为基体热导率, $W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$; λ_p 为填充颗粒热导率, $W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$; n 为形状因子; φ_v 为体积分数, %。

形状因子 n 是与分散相粒子的形状有关的重要参数,如何确定该参数是建立材料热导率模型的难点。目前形状因子一般由实验确定,且有研究表明,当分散相粒子在二维平面上为均匀分布的圆形颗粒时, n 取值为 3^[12]。为了简化 Hamilton-Crosser 模型的应用,该取值作为经验值进一步推广到了任何存在不连续相的体系中^[11,13]。而鉴于形状因子的特殊性,赋予该参数一确定值而建立的半经验 Hamilton-Crosser 模型,往往很难反映真实情况(如复杂形状和随机分布的填充颗粒),因此会引入较大误差,所以在 PBX 热导率的预测模型中不便直接引用;若要针对各类 PBX 的粒子形状及分布通过实验重新确定 n 值,又意味着要进行大量工作。

因此,为了能更科学及高效地定义形状因子,本研究将使用分形维数来描述二维平面上粒子的分布和形状,则式(1)可变形为:

$$\lambda_e = \lambda_i \times \frac{\lambda_p + (d_f - 1)\lambda_i + (d_f - 1)(\lambda_p - \lambda_i)\varphi_v}{\lambda_p + (d_f - 1)\lambda_i - (\lambda_p - \lambda_i)\varphi_v} \quad (2)$$

式中, d_f 为分形维数。

3 建模和计算

3.1 PBX 粒子填充模型

在细观层次上,填充型复合材料主要由填充粒子和基体构成。进行结构模拟时主要需要解决填充粒子

配比控制、粒子形状及粒子的随机投放三个问题。

3.1.1 粒子填充个数控制

使用累积分布函数表示 PBX 中位于内截面上任一点具有直径 $D < D_0$ 的概率^[14]:

$$P_s(D < D_0) = \varphi_v \left[\begin{array}{l} 1.065 (D_0/D_{\max})^{0.5} - 0.053 (D_0/D_{\max})^4 - \\ 0.012 (D_0/D_{\max})^6 - 0.0045 (D_0/D_{\max})^8 + \\ 0.0025 (D_0/D_{\max})^{10} \end{array} \right] \quad (3)$$

式中, D_0 为基准粒径, μm ; D 为小于基准的粒径, μm ; D_{\max} 为粒子群中的粒径最大值, μm ; P_s 为小于基准粒径的概率, %; φ_v 为炸药颗粒占 PBX 的体积分数, %。

在一定的炸药颗粒体积分数下,若粒子群有 n 个粒径等级,则有式(4):

$$P_{s(n, n-1)} = P_s(D_n) - P_s(D_{n-1}) \quad (4)$$

根据该式即可求得两个粒径等级之间粒子出现的概率,从而可求得该粒径范围内粒子在内截面里所占的面积:

$$S_{(n, n-1)} = S_{\text{total}} P_{s(n, n-1)} \quad (5)$$

式中, S_{total} 为全部填充粒子在内截面上所占总面积, μm^2 。

通过式(5),再在两个粒径等级之间选择特定直径,即可获得一定直径对应的粒子个数。

3.1.2 多边形粒子生成

为了使炸药晶体(填充粒子)——粘结剂(基体)的细观模型与真实的 PBX 细观结构一致,要求粒子的生成算法能满足如下两个条件:

- (1) 单个粒子的形状和大小都要随机,不能给予其固定值;
- (2) 投放粒子总体的粒径符合正态分布;

在实际工程中, PBX 中的炸药通常是多面体,因此颗粒截面也应呈现为多边形,因此决定一个粒子的形状则需要以下几个参数:形心坐标、边数和多边形各顶点坐标。因此在极坐标下通过变动极半径和极角就可以达到上述要求,如图 1 所示。

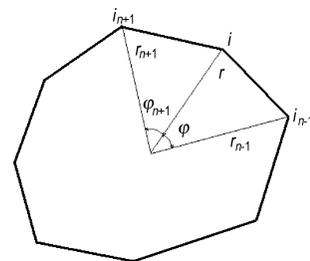


图 1 粒子的极坐标表示

Fig. 1 Polar coordinates for particle

使用计算机语言绘制多边形填充粒子的过程如下:

(1) 产生随机数 n (即为顶点数), 其中 n 根据炸药品体的具体情况确定取值范围, 然后在范围内随机产生;

(2) 将 2π 分成随机大小的 n 份, 其中每一份对应多边形顶点的一个极半径 r 和极角 φ ;

(3) 将生成的角度方向化, 并通过矢量法筛选, 只保留具有凸性顶点的多边形;

解决该问题的思路是将 φ 按内角和 φ 递增或递减的方式排列, 使多边形的各边不只有大小, 还有方向。

针对需要做出凹、凸判定的点, 检验其与旁边两点坐标的矢积, 即引入函数:

$$P_{rod}(i_{n-1}, i, i_{n+1}) = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} C_x(r_{n-1}, \varphi_{n-1}) & C_y(r_{n-1}, \varphi_{n-1}) & 1 \\ C_x(r, \varphi) & C_y(r, \varphi) & 1 \\ C_x(r_{n+1}, \varphi_{n+1}) & C_y(r_{n+1}, \varphi_{n+1}) & 1 \end{vmatrix} \quad (6)$$

C_x, C_y 是与极半径 r 和内角和 φ 有关的函数, 其中:

$$C_x = r \cos \varphi \quad (7)$$

$$C_y = r \sin \varphi \quad (8)$$

式中:

$$\varphi = \sum_{k=1}^n \varphi_k, (k=1, 2, 3, \dots, n) \quad (9)$$

若多边形各边方向是逆时针旋转的, 则 i 为凸性点时, $P_{rod}(i_{n-1}, i, i_{n+1})$ 大于等于 0, 反之 i 为凹性点时, $P_{rod}(i_{n-1}, i, i_{n+1})$ 小于 0; 若多边形各边方向是顺时针旋转的, 则正好相反;

(4) 将符合凸性条件的多边形顶点的极半径 r 和极角 φ 存入数据库, 以备调用;

(5) 重复上述步骤, 保存若干份极半径和极角参数组合。

3.1.3 填充粒子投放

填充粒子参数随机生成方法如下:

(1) 确定需投放的粒子数量 M ;

(2) 在区域内随机给定点作为填充粒子形心, 坐标为 (X_j, Y_j) , 其中 $j=1, 2, 3, \dots, M$;

(3) 调用 3.1.2 中存入数据库的极半径 r 和极角 φ 等参数共 M 份, 代入式(10)、(11)计算多边形顶点坐标。

$$x_{j,n} = r_{j,n} \cos \varphi_{j,n} + X_j \quad (10)$$

$$y_{j,n} = r_{j,n} \sin \varphi_{j,n} + Y_j \quad (11)$$

通过形心坐标和多边形各顶点的坐标, 即可确定多边形的形状及位置。

因形心坐标都是随机产生, 所以随着粒子投放数量的增加, 粒子之间重叠的几率也越来越大, 因此需要

对投放的粒子进行重叠判断。本研究采用角度加和的方法, 即对每一个新生成的多边形, 对其每个顶点与已生成多边形进行侵入判断。若新生成的多边形有顶点在已知多边形内部, 则判定两多边形重叠; 若新生成的多边形所有顶点均在已知多边形外侧, 则两多边形不重叠, 如图 2 所示。

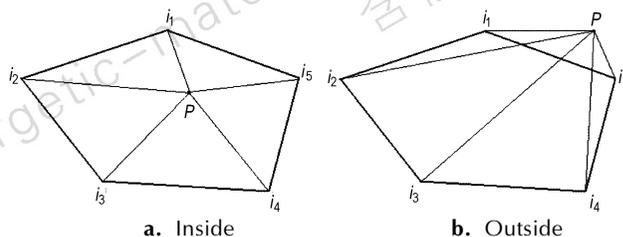


图 2 顶点侵入形式

Fig.2 Incursion of apexes

图 2a 显示的是新生成多边形顶点 P 侵入已生成多边形内部, 以此为例, 这种情况下侵入点与已知多边形各顶点内角绝对值之和为:

$$\varphi = \sum_{i=1}^n \angle i_n P i_{n+1} = 2\pi \quad (12)$$

图 2b 为侵入点在已知多边形外侧的情况, 其与各顶点形成的角度绝对值之和不为 2π 。

根据以上规则, 使用 matlab 作出投放效果图, 如图 3 所示。

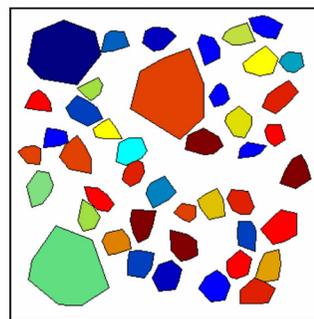


图 3 粒子投放示意图

Fig.3 Diagrammatic sketch of particle distribution

图 3 显示的是 3 种粒径水平粒子的投放效果, 其中粒子边数设置为 5~8, 投放结果与预设相符。

3.2 粒子分形特性

本研究只考察 PBX 材料的一维热传导, 因此主要对 PBX 材料中填充粒子的平面分布维数进行表征。

Mandelbrot 创立的分形理论已经成为非线性科学的重点研究内容之一, 是一门以随机几何形状为研究对象的学科, 用数学表达式描述分形理论的本质为^[15]:

$$N(\delta) \propto \delta^{d_f} \quad (13)$$

式中, N 为分形物体的空间占有积(线、面或体积), δ 为度量尺度, d_f 为分形维数, 它可以是整数也可以是分数。对于一个分形平面, d_f 的具体数值可以通过 $N(\delta) \propto \delta^{d_f}$ 对数坐标图上直线的斜率来确定。

实际应用的时候可以采用盒维数算法, 设 $A \subset R^n$ 是一个非空集合, 在欧式距离下, 假定 T_n 为标度, 则用边长为 $\frac{1}{T_n}$ 的小盒子紧邻地去包含 A , 设 $N_n(A)$ 表示包含 A 所需要的最小盒子数, 则:

$$d_f = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\ln N_n(A)}{-\ln T_n} \quad (14)$$

对二维平面上的集合, 盒维数的计算方法是: 逐渐增大 T_n , 计算出相应的 $N_n(A)$ 的值, 对此借由图 3 显示的投放结果加以说明, 如图 4 所示。

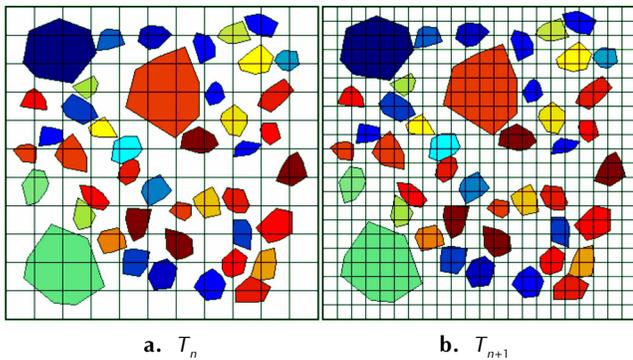


图 4 标度 T 下的总盒数 $N(A)$

Fig. 4 Total box number $N(A)$ at scale T

从图 4 中可以看出, 随着标度 T 增大, 对应的非空盒子数增加, 即 $N(A)$ 值增大, 由此可得到 $(-\ln T_n, \ln N_n(A))$ 数据对, 再利用最小均方差方法求出相应的斜率, 即为盒维数。

4 实验部分

4.1 试剂与仪器

TATB 晶体: 三斜晶型, 热导率为 $0.8 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ [16], 晶体密度为 $1.938 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。氟橡胶: 热导率为 $0.19 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$, 密度为 $2.03 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。

扫描电镜: KYKY2000 型扫描电镜。导热仪: LFA447 型闪光法导热分析仪。激光粒度仪: LS230; 材料试验机: YAW 4305。

使用激光粒度仪通过激光衍射法对经筛选后的 TATB 晶体原料的粒径进行表征, 粒径呈正态分布, 如图 5 所示。

具体粒径分布概率如表 1。

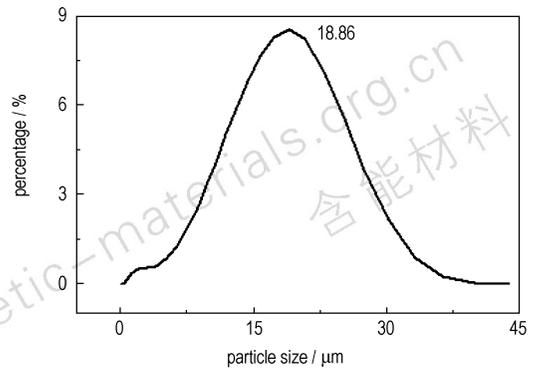


图 5 TATB 粒径分布

Fig. 5 Particle size distribution of TATB

表 1 不同 TATB 粒径的分布概率

Table 1 Distribution probability of TATB with different particle size

$D_0 / \mu\text{m}$	47.9	26.2	21.5	10.8
$P_0(D < D_0)$	1	0.75	0.5	0.25

Note: P_0 is the proportion of particle with size smaller than the base particle size of TATB (D_0).

将上述 TATB 颗粒及氟橡胶按质量分数为 20/80、40/60、50/50、60/40、80/20、90/10、95/5 的配比充分混合, 投入材料试验机中压制成 $\Phi 12.7 \text{ mm} \times 3 \text{ mm}$ 的小药块。

4.2 实验过程

使用闪光法导热分析仪进行热扩散率和比热测试, 测试温度为 $(20 \pm 2) \text{ }^\circ\text{C}$ 。

热导率由式(15)计算:

$$\lambda = \rho \alpha C_p \quad (15)$$

式中, λ 为热导率, $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$; ρ 为密度, $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$; α 为热扩散率, $\text{mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$; C_p 为定压比热容, $\text{J} \cdot \text{g}^{-1} \cdot \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$ 。

最后得到不同填充率下的热导率见表 2。

表 2 不同填充率下 TATB 基 PBX 热导率

Table 2 Thermal conductivity of TATB based PBX with different mass fraction

mass fraction of TATB/%	thermal conductivity/ $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
20	0.198±0.011
40	0.235±0.008
50	0.281±0.014
60	0.346±0.010
80	0.463±0.005
90	0.569±0.056
95	0.625±0.037

5 结果与讨论

压制成型的 PBX 中炸药晶体为连续级配,最大粒径 $D_{max}=47.9 \mu\text{m}$ 。根据式(3),并结合表 1,获得实际填充状态下 PBX 中 TATB 颗粒尺寸的概率水平 P_s :

根据式(4)和式(5),为简化计算,分别取粒径区间 47.9~26.2, 26.2~21.5, 21.5~10.8, 10.8~0 μm 的平均粒径 37.06, 23.9, 16.15, 5.4 μm 代表该区间粒子尺度,计算出在 250 $\mu\text{m} \times 250 \mu\text{m}$ 的区域内,相应配比下需要投放的粒子数,见表 4。

表 3 PBX 中各粒径的分布概率

Table 3 Distribution probability of various size of PBX particles

mass fraction (TATB)/%	volume fraction (TATB)/%	D_0 / μm	47.9	26.2	21.5	10.8
80	0.807	P_s ($D < D_0$)	0.802	0.780	0.729	0.430
70	0.710		0.705	0.686	0.641	0.378
60	0.611		0.607	0.591	0.552	0.325
50	0.510		0.506	0.493	0.460	0.271
40	0.411		0.408	0.397	0.371	0.219
20	0.207		0.205	0.200	0.187	0.110

表 4 PBX 中各粒径 TATB 投放数

Table 4 Number of TATB with different size

mass fraction (TATB)/%	particle size/ μm			
	37.06	23.9	16.15	5.4
80	1	7	91	1174
70	1	7	81	1047
60	1	5	69	887
50	1	5	58	748
40	1	4	46	598
20	0	2	23	299

使用 Matlab 根据细观结构填充模型编写程序,并把上面计算的参数代入程序,最后得到相应配比炸药的二维细观结构图,取其中部分区域并将二维结构图二值化处理,即将图中代表炸药晶体颗粒的位置取值为 0,代表基体的位置取值为 1,二值化后对相应配比的二维细观结构进行盒维数计算,结果如图 6。

$\ln(N_n)$ 对 $-\ln(T_n)$ 的斜率即为各填充率下二维细观结构的分形维数 d_i 。

通过最小二乘法获得 TATB 晶体在不同混合比例时对应的分布维数曲线,如图 7。

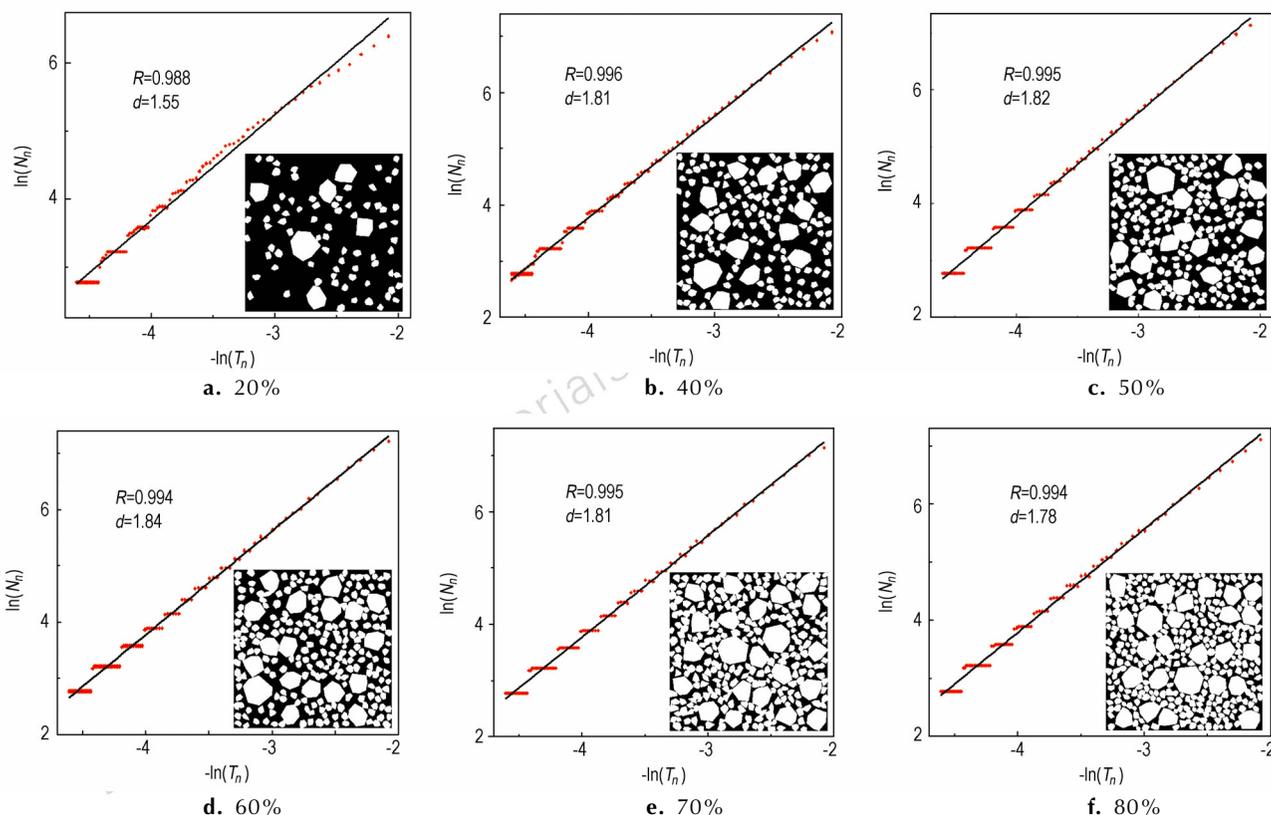


图 6 盒维数计算结果

Fig.6 Box dimension by calculation at different mass fraction of TATB

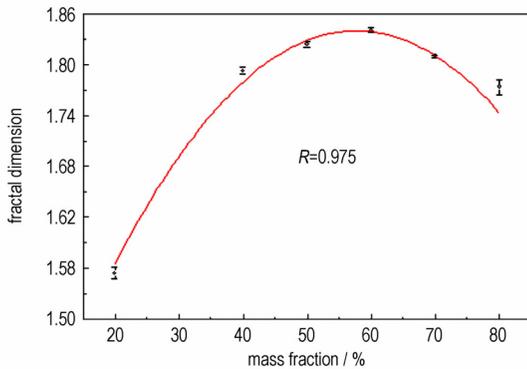


图7 不同配比下 TATB 的分布维数

Fig.7 TATB fractal dimension with different mixture ratio

最后得到 PBX 中 TATB 填充质量百分比(φ_m)与对应的任意截面二维分形维数的关系式:

$$d_f = 1.189 + 2.257\varphi_m - 1.956\varphi_m^2 \quad (16)$$

将式(16)代入式(2)计算不同配比 PBX 的热导率,并与形状因子取值为 3 的半经验 Hamilton-Crosser 模型及实测值进行比较,结果见表 5。

表 5 TATB 基 PBX 热导率计算结果

Table 5 Calculation value of thermal conductivity of TATB based PBX $W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$

method	mass fraction / %						
	20	40	50	60	80	90	95
fractal model	0.238	0.312	0.358	0.412	0.553	0.654	0.719
Hamilton-Crosser model	0.259	0.344	0.395	0.453	0.598	0.690	0.743

本研究模型, Hamilton-Crosser 模型及实测结果的比较如图 8 所示。

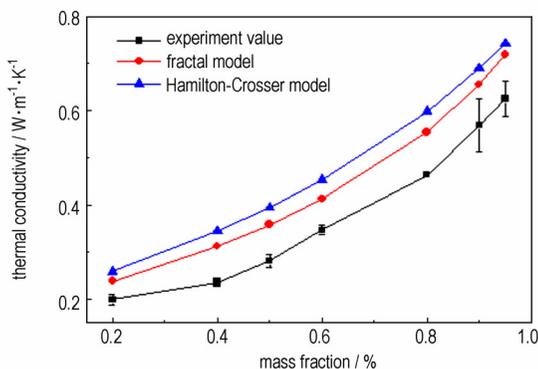


图8 不同 TATB 混合比例 PBX 的热导率

Fig.8 Thermal conductivity of TATB with different mass fraction based PBX

由图 8 可见,在 20% 的填充率下,本研究的热导

率模型计算值与实测值的误差为 20.2%,填充率为 40% 时达到 32.8%,随着填充率进一步增加,预测误差趋于减小,在填充率为 95% 时误差为 15.0%;总体上看本研究热导率模型计算结果比实验值略高,因为测试样品在实际压制成型后存在一定孔隙,阻滞导热过程,而计算值则出自理想的两相分布状态,因此要高于实测值;而在每个填充率下,本研究的热导率模型的预测结果与半经验 Hamilton-Crosser 模型相比,与实测值更接近,且更符合 PBX 热导率随填充率改变的变化趋势。因此可用基于分形方法的两项模型来预测 PBX 的热导率,并由此减少 PBX 研制过程中的实验次数。

6 结论

(1) 根据 TATB 粒子实际的形状及颗粒大小,计算得到 TATB 粒子截面的边数、粒径范围。并采用基于计算机技术的随机粒子生成方法建立了与 PBX 微观结构相近的粒子填充模型。

(2) 利用盒维数算法得到了 PBX 粒子分形维数,以基于分形理论的预测模型对不同充填率 PBX 的热导率进行了计算,并与实测值进行了对比。结果表明, PBX 的热导率随着 TATB 填充率的增加而增大,且本研究模型的预测结果优于半经验模型。预测值比实测值略高,可能是本研究模型中未考虑孔隙率等影响因素所致。如何在预测模型中加入孔隙率等因素的影响,仍需进一步研究。

参考文献:

- [1] Agari Y, Uno T. Estimation on thermal conductivities of filled polymer[J]. *J Appl Polym Sci*, 1986, 32(7): 5705.
- [2] Plast O H. Thermal conductivity of composite materials[J]. *Rubber Process*, 1981, 1: 9.
- [3] 刘加齐, 张立群, 杨海波, 等. 粒子填充聚合物基复合材料导热性能的数值模拟[J]. *复合材料学报*, 2009, 26(2): 36-42. LIU Jia-qi, ZHANG Li-qun, YANG Hai-bo, et al. The fractal of loading material and the thermal Conductivity Models for Polymer Matrix Composite [J]. *Acta Materiae Compositae Sinica*, 2011, 20(4): 65-66.
- [4] 肖善雄, 张艺, 孙世斌. 导热高分子复合材料的研究进展[J]. *广东化工*, 2010, 37(2): 5-8. XIAO San-xiong, ZHANG Yi, SUN Shi-yu. Progress in thermal conductive polymer composites[J]. *Guangdong Chemical Industry*, 2010, 37(2): 5-8.
- [5] 马传国, 容敏智, 章明秋. 聚合物基复合材料导热模型及其应用[J]. *宇航材料工艺*, 2003 (3): 1-4. MA Chuan-guo, RONG Min-zhi, ZHANG Ming-qiu. Thermal conductivity models of polymer matrix composites and their application[J]. *Aerospace Materials & Technology*, 2003 (3): 1-4.

- [6] 何兵兵, 江利, 傅仁利. 聚合物基复合材料的导热性能与导热填料的分形维数[J]. 中国胶粘剂, 2011, 20(4): 65-66.
HE Bing-bing, JIANG Li, FU Ren-li. The fractal of loading material and the thermal conductivity models for polymer matrix composite[J]. *China Adhesives*, 2011, 20(4): 65-66.
- [7] 阚安康, 韩厚德, 汤伟. 基于分形理论的开孔聚氨酯泡沫等效热导率研究[J]. 材料导报, 2012, 26(2): 143-146.
KAN An-kang, HAN Hou-de, TANG We. Research on effective thermal conductivity for open-cell polyurethane foam using fractal theory[J]. *Materials Review*, 2012, 26(2): 143-146.
- [8] 王亮亮. 聚合物基复合材料导热模型及热导率方程的研究[J]. 中国塑料, 2005, 19(12): 12-14.
WANG Liang-liang. Research of thermal conduction model and thermally conductive equation of polymer matrix composites[J]. *China Plastics*, 2005, 19(12): 12-14.
- [9] Wittmann F H, Roelfstra P E, Sadouki H. Simulation and analysis of composite structures[J]. *Mater Sci Engng*, 1984, 68: 239-248.
- [10] 伍君勇. 混凝土微观结构的自动生成[D]. 大连理工大学, 2006.
WU Jun-yong. Automatic generation of mesostructure of concrete [D]. Dalian: Dalian University of Technology, 2006.
- [11] Hamilton R L, Crosser O K. Thermal conductivity of heterogeneous two-component systems [J]. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 1962, 1(3): 187-191.
- [12] 张伟平, 邢益善, 顾祥林. 基于细观复合材料的混凝土导热系数模型[J]. 结构工程师, 2012, 28(2): 39-45.
ZHANG Wei-ping, XING Yi-shan, GU Xing-lin. Theoretical Models of Effective Thermal Conductivity of Concrete Based on Composite Materials in Mesoscale [J]. *Structural Engineers*, 2012, 28(2): 39-45.
- [13] 张枫, 肖建庄, 宋志文. 混凝土导热系数的理论模型及其應用[J]. 商品混凝土, 2009, 2: 23-25.
ZHANG Feng, XIAO Jian-zhuang, SONG Zhi-wen. The prediction models of thermal conductivity and their application [J]. *Ready-mixed Concrete*, 2009, 2: 23-25.
- [14] 蒋林华. 混凝土材料学[M]. 常州: 河海大学出版社, 2006.
JIANG Lin-hua. Material Science of Ready-Mixed Concrete [M]. Changzhou: Hohai University Press, 2006.
- [15] 陈颀, 陈凌. 分形几何学[M]. 北京: 地震出版社, 2005.
CHEN Yu, CHEN Lin. Fractal geometry theory [M]. *Seismological Press*, 2005.
- [16] Boddu V M, Viswanath D M, Ghosh T K. 2,4,6-Triamino-1,3,5-trinitrobenzene (TATB) and TATB-based formulations—A review [J]. *Journal of Hazardous Materials*, 2010, 181(1): 1-8.

Prediction Model for Thermal Conductivity of PBX Based on Fractal Approach

ZHOU Xiao-yu, WANG Xi, WEI Xing-wen, HUANG Zhong, ZHOU Mei-ling

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

Abstract: A fractal model of thermal conductivity for polymer bonded explosive (PBX) particles was established based on the fractal theory and random distribution filling model, and the thermal conductivity of TATB based PBX with different mass fraction such as 20%, 40%, 95%, ect, was calculated and compared with those measured by the flash method, and those from semi Hamilton-Crosser model with shape factor of 3. Results show that the errors between the calculated and the measured were 20.2%, 32.8%, 15.0% with the mass fraction of 20%, 40% and 95%, respectively. The thermal conductivity of PBX increases with the increase of mass fraction of TATB. The calculation results based on fractal model is better than that obtained by the semi-Hamilton-Crosser model.

Key words: materials physics and chemistry; polymer bonded explosive (PBX); thermal conductivity; fractal; numerical simulation

CLC number: TJ55; O64

Document code: A

DOI: 10.3969/j.issn.1006-9941.2014.04.021