FICENCE N°5 JUIN 2017



ACTUALITÉS SCIENTIFIQUES À LA DIRECTION DES APPLICATIONS MILITAIRES

SIMULATION DES MATÉRIAUX ÉNERGÉTIQUES

3^{ES} JOURNÉES DE LA DÉTONIQUE

ENERGETIC MATERIALS MODELLING

3RD WORKSHOP ON EXPLOSIVES

SOMMAIRE CONTENTS

AVANT-PROPOS / FOREWORD	03
INTRODUCTION / INTRODUCTION D. Picart	. 04
NOUVEAUX MATÉRIAUX / NEW MATERIALS	06
P. 06 ► Recherche sur les matériaux énergétiques au sein des na du MSIAC / Energetic materials research among MSIAC nations M. Andrews	ations
P.08 ► Étude des propriétés détoniques des explosifs nanostruc Study of nanostructured explosives detonation properties	turés /

A. Lefrançois, L. Jacquet, M. Genetier, G. Baudin, A. Wuillaume-Keromnès, A. Beaucamp, K. Woirin, C. Collet

P.10 ► Compositions explosives à très faible diamètre critique : formulation et caractérisation / Very low critical diameter explosive compositions: formulation and characterization K. Woirin. C. Collet

DÉVELOPPEMENT DES CODES DE THERMOCHIMIE / IMPROVEMENT OF THERMOCHEMICAL CODES

P.12 ► Le code de thermochimie HELIOS / The HELIOS thermochemical code W. Belfield

P. 14 ► SIAME, un nouveau code de simulation thermochimique / SIAME, a new thermochemical code M. Genetier, G. Baudin

DE L'ÉCHELLE MICROSCOPIQUE À L'ÉCHELLE MACROSCOPIQUE / FROM MICROSCALE TO MACROSCALE

P.16 ► Étude des effets de la synthèse sur la microstructure de poudres d'explosif / Study of the synthesis effects on the microstructure of explosive powders

E. Bruneton, A. Forzy, M. Guerain, A. Lecardeur, G. Del Rio, J. Piquard, S. Beaugrand, P. Palmas

P.18 ► Sensibilité aux chocs et microstructure des explosifs / Sensitivity to shocks and explosives microstructure L. Borne, J. Corbel

P. 20 ► Étude des interfaces polymère-cristal / Investigation of polymercrystal interfaces M. M. Nardai, M. A. Bohn

P. 22 ► Outil de simulation mésoscopique pour explosifs à base de TATB / *A mesoscopic simulation tool for TATB-based explosives* H. Trumel, F. Bernard, J.-B. Gasnier, F. Willot, D. Jeulin P. 24 > Caractérisation de l'endommagement dans les matériaux énergétiques / Characterizing mechanical damage in energetic materials D. Williamson

SIMULATION DES	IMPACTS /	20
MPACT MODELLING		20

P. 26 ► Modélisation et prévision des sensibilités mécaniques de composés explosifs / Modelling and prediction of mechanical sensitivities for explosive compounds D. Mathieu. T. Alaime

P. 28 ► Modélisation de l'allumage des explosifs soumis à un écrasement / Modelling the ignition of explosives by pinch J. P. Curtis, J. E. Reaugh

P. 30 ► Maillage et remaillage adaptatif – Application aux impacts à faible vitesse / Meshing and remeshing adaptativity – Application in low velocity impacts H. Borouchaki, A. Cherouat, D. Picart, S. Camus

P.32 Simulation de la fissuration sous choc / Simulation of cracking under shock

N. Moës, K. Moreau, D. Picart

TRANSITION DU CHOC À LA DÉTONATION / 34 SHOCK TO DETONATION TRANSITION

P.34 > Approches multi-échelles : Application au TATB / Multiscale approaches: Application to TATB

J.-B. Maillet, P. Lafourcade, B. Rouet-Leduc, C. Denoual, L. Soulard, G. Stoltz

P. 36 ► Le modèle CREST pour les explosifs / The CREST reactive-burn model for explosives C. A. Handley, N. J. Whitworth, B. D. Lambourn

EXPÉRIENCES ET MESURES : NOUVELLES TENDANCES / NEW TRENDS IN EXPERIMENTS AND MEASUREMENTS

P. 38 ► Capteur chronométrique à réseaux de Bragg / Chronometric Bragg grating sensor J. Bénier, L-M. Adolf

P. 40 ► **OPTIMEX** : analyseur optique pour procédés explosifs / OPTIMEX: an optical analyzer for explosive processes

J. Pachman, J. Selesovsky, R. Marsalek, M. Pospisil, M. Kubicek, M. Kunzel, J. Moravec

P.42 > Étude de la transition choc-détonation à l'aide de métrologies continues / Study of shock-to-detonation transition using continuous measurements

V. Chuzeville, G. Baudin, A. Lefrançois, M. Genetier, Y. Barbarin, L. Jacquet, R. Boulanger, L. Catoire

P. 44 > Tests miniatures appliqués aux matériaux énergétiques /

Mini-scale tests applied to energetic materials I. Plaksin, R. Mendes, L. Rodrigues, S. Plaksin, J. Campos

SESSION POSTERS - ALBUM PHOTO / POSTER SESSION - PICTURES BOOK

46

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives Simulation des matériaux énergétiques Image de couverture : Cristaux de TATB observés avec un microscope électronique à balayage. / TATB crystals observed with a Scanning Electron Microscope. *Crédits image : A. Forzy et G. Del Rio / CEA – DAM* Directeur de la publication : Laurence Bonnet. Coordinateur scientifique : Didier Picart. Comité scientifique : D. Autissier, A. Cosculluela, G. Koussouros, E. Lapébie, C. Matignon, D. Picart, R. Serradeil, L. Soulard.

Comité d'organisation des journées : D. Autissier, M. Biessy, B. Bobet, S. Camus, M. Dufort, A. Forzy, D. Picart. Rédacteur en chef : Jean-Marc Laborie

Création : EFIL/www.efil.fr. Impression : Gibert & Clarey. Secrétariat, diffusion : Régis Vizet.

CEA/DAM Institut supérieur des études nucléaires de défense (ISENDé) Bruyères-le-Châtel, F-91297 Arpajon Cedex Tél. : 33 (0)1 69 26 76 98 - Fax : 33 (0)1 69 26 70 05 E-mail : chocs@cea.fr





AVANT-PROPOS FOREWORD



es troisièmes journées de la détonique de la Direction des applications militaires du CEA (CEA – DAM) se sont déroulées les 30 septembre et 1^{er} octobre 2015. Organisée à Tours, cette manifestation s'est tenue en

présence d'environ cent cinquante chercheurs du CEA – DAM, du milieu académique et des industries françaises de la défense. Pour la première fois, plus de trente chercheurs étrangers en provenance de tous les grands laboratoires européens ont participé à ce séminaire.

Ce numéro de *Focus* rassemble les articles associés à certaines des présentations faites durant ces journées. Après une introduction qui présente l'actualité des recherches menées en Europe, la rubrique *Nouveaux matériaux* rassemble des exemples de matériaux innovants. Les articles présentés dans les rubriques *Développement des codes de thermochimie* et *De l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique* illustrent les travaux menés pour comprendre les comportements inerte et réactif aux différentes échelles. Les rubriques *Simulation des impacts* et *Transition choc-détonation* sont respectivement dédiées aux

LORS DE CES JOURNÉES, DE NOMBREUX EXPOSÉS ONT MIS EN AVANT LES COLLABORATIONS ACTIVES QUI ONT PERMIS DE RELEVER DE NOMBREUX DÉFIS SCIENTIFIQUES ET TECHNIQUES.

cas des sollicitations mécaniques d'énergie modérée et des chocs menant à une détonation. Enfin, la rubrique *Expérience et mesures : nouvelles tendances* présente des moyens expérimentaux nouveaux, développés pour caractériser la détonation.

Lors de ces journées, de nombreux exposés ont mis en avant les collaborations actives qui ont permis de relever de nombreux défis scientifiques et techniques et sont un gage de réussite pour des recherches à venir, à la fois fructueuses et stimulantes.

he 3rd Workshop on Explosives of the Direction des applications militaires of CEA (CEA – DAM) took place on September 30 and October 1, 2015, in Tours. More than a hundred par-

ticipants have attended the workshop from the CEA – DAM, the academic laboratories, and the French defense industries. For the first time, more than thirty researchers from european laboratories and companies have also participated to the workshop.

This issue of Focus gathers papers of some of the talks given during these days. In the introduction, the european research scene about energetic materials is presented and some examples of innovative materials are given under the heading New materials. *Papers collected in* Improvement of thermochemical codes *and* From microscale to macroscale *highlight the researches made to understand the inert and reactive behaviours at the different scales. The headings* Impact modelling *and* Shock-to-detonation transition *are dedicated to mechanical insults from low-velocity impacts to shocks yielding a detonation. Finally, new measurements and experiments to characterize the detonation are presented in* New trends in experiments and measurements.

During this workshop, talks have illustrated how fruitful collaborations between the teams enable handling scientific and technical challenges and give confidence for the future researches.

INTRODUCTION

ACTUALITÉ EUROPÉENNE DES RECHERCHES EN SCIENCE DES MATÉRIAUX ÉNERGÉTIQUES



a science des matériaux énergétiques couvre un spectre large de compétences et de techniques, depuis la conception des molécules sur ordinateur, leur synthèse chimique sous forme de cristaux, la formulation de com-

positions par l'apport de liant et d'additifs, jusqu'aux procédés de fabrication. Garantir la tenue des systèmes pyrotechniques en environnement, leur sécurité et leur performance réactive nécessite de caractériser les matériaux et d'en modéliser le comportement.

Aux plus petites échelles, l'innovation porte sur le meilleur compromis entre la performance énergétique et la sensibilité des molécules, ou l'amélioration des voies de synthèse pour les molécules existantes. Citons les résultats obtenus à l'Institut Saint-Louis ISL (F, DEU) pour réduire la sensibilité des cristaux d'hexogène. Ces travaux sont repris actuellement par le TNO (NL) et par EURENCO (F, SWE). Disposer de cristaux de petite taille permet de baisser la sensibilité des matériaux et de libérer plus rapidement l'énergie chimique, ce qui inté-



Résultat d'une simulation numérique du frottement, de droite à gauche, d'une demi-sphère en explosif sur un plan fixe et abrasif (code ABAQUS/explicit). La simulation permet de visualiser le champ de pression au contact et, par les flèches, l'intensité du champ de vitesse.

Results of a numerical simulation of friction, from right to left, of a hemisphere made of explosive on a fixed and abrasive plane (ABAQUS/explicit code). This simulation shows the pressure (colors) and the displacement (arrows) fields. Crédit D. Picart, G. Plassart / CEA – DAM resse notamment l'ISL, le CEA (F) et l'université de Munich (DEU).

La prise en compte des contraintes opérationnelles conduit à l'élaboration de nouvelles compositions. Des travaux sont en cours dans les universités en République tchèque et en Allemagne, ainsi que dans des entreprises en France (CEA, Airbus Safran Launchers-ASL, aujourd'hui dénommée Arianegroup, NEXTER Munitions) pour remplacer le trinitrotoluène (TNT) ou disposer de matériaux insensibles. Parmi ces travaux, notons l'effort de la société ROXEL (F, UK) et de l'université d'Édimbourg pour réaliser des suspensions fortement concentrées par résonance acoustique.

La communauté scientifique européenne cherche aussi à relier les propriétés macroscopiques de ces matériaux à celles de leurs constituants. L'adhésion liant-charge et l'endommagement sont étudiés au Fraunhofer ICT (DEU) et au Cavendish Laboratory (UK), tandis que le CEA s'intéresse au comportement thermoélastique d'un polycristal de triaminotrinitrobenzène. Ces études prometteuses tirent profit des nouvelles méthodes de caractérisation comme la nano-indentation et la résonance magnétique nucléaire. L'une des problématiques d'avenir concernera la compréhension et la modélisation de la plasticité des cristaux soumis à un choc.

À une échelle supérieure, l'amélioration perpétuelle de la sécurité des munitions est un enjeu majeur pour les fabricants; en témoigne le dynamisme de l'IMEMG (Insensitive Munition European Manufacturers Group) et du MSIAC (Munitions Safety Information Analysis Center) de l'OTAN auquel participent nombre d'acteurs européens. Il s'agit de prévoir la violence de la réaction suite à une agression, et d'adapter la conception technologique si besoin. La compréhension et la simulation de la transition d'une combustion à la détonation sont toujours des sujets de recherche ouverts auxquels contribuent le TNO, l'Atomic Weapons Establishment AWE (UK), le CEA et ASL.

Enfin, la transition choc-détonation reste un domaine scientifique de grande importance comme

l'indiquent les progrès continus des codes de thermochimie (CEA, AWE), l'introduction de la température dans les modèles (AWE) et l'évolution des diagnostics (travaux réalisés par les laboratoires au Portugal et en République tchèque, par le CEA et le TNO, et les sociétés ASL, OZM, FOTON). Les études s'orientent là aussi vers les échelles les plus petites.

Le succès des troisièmes journées de la détonique du CEA – DAM (3rd Workshop on Explosives), avec une participation nombreuse d'acteurs français et européens, montre l'intérêt porté en Europe à la science des matériaux énergétiques et le dynamisme de cette communauté. À l'heure où les besoins industriels proposent des défis scientifiques toujours plus audacieux, le CEA – DAM entend continuer à favoriser les échanges, source de nouvelles collaborations, à travers l'organisation des prochaines journées.

🛏 Didier PICART

EUROPEAN RESEARCH SCENE ABOUT ENERGETIC MATERIALS

he science of energetic materials covers a wide spectrum of skills and techniques, from the computerised design of molecules, their chemical synthesis to obtain crystals,

the formulation of explosive compositions with the addition of a binder and additives, to manufacturing methods. Guaranteeing the behaviour of pyrotechnic structures in their environment, their safety and their reactive performance requires characterisation of the materials and modelling of their behaviour.

On the very smallest scale, innovation is geared towards the best compromise between energy-based performance and the sensitivity of the molecules, or towards the proposal of new synthetic pathways for existing molecules. The results obtained at the Institut Saint-Louis ISL (F, DEU) to reduce the sensitivity of hexogen crystals could be cited. This work is currently being taken up once more by TNO (NL) and by EURENCO (F, SWE). The ability to obtain smaller crystal sizes allows the sensitivity of materials to be reduced and chemical energy to be released more rapidly. The ISL, CEA (F) and the University of Munich (DEU) are taking a particular interest in this.

Consideration of operational constraints is leading to the creation of new compositions. Work is under way in universities in the Czech Republic and Germany, and in France (CEA, Airbus Safran Launchers ASL, today called Arianegroup and NEXTER Munitions) on replacing trinitrotoluene (TNT) or on producing non-sensitive materials. Of note amongst this work are the efforts by the ROXEL organisation (F, UK) and by the University of Edinburgh to produce highly concentrated suspensions using acoustic resonance.

Efforts are also being made within the European scientific community to link the macroscopic properties of these materials with those of their constituents. Binder-charge adhesion and damage are being studied at Fraunhofer ICT (DEU) and in the Cavendish Laboratory (UK), whilst CEA is working on the thermoelastic behaviour of a triaminotrinitrobenzene polycrystal. These promising studies are benefiting from new characterisation methods such as nano-indentation and nuclear magnetic resonance. A future problem involves understanding and modelling the plasticity of crystals which are subjected to shock.

On a larger scale, the continuous improvement in the safety of munitions is a major issue for manufacturers. This is illustrated by the dynamism shown by the IMEMG Group (Insensitive Munition European Manufacturers Group) and by NATO's MSIAC (Munitions Safety Information Analysis Center), in which a number of European players participate. Predicting the violence of a reaction as a result of an insult is of interest and could lead to adaptation of the technological design involved if necessary. Achieving an understanding and carrying out simulation of the transition from combustion to detonation are still open subjects of research, to which TNO, AWE (UK), CEA and the ASL organisation are contributing.

Finally, the impact-detonation transition remains a scientific field of great importance, as shown by the continuous progress in thermochemical codes (CEA, AWE), the incorporation of temperature into models (AWE) and developments in diagnostics (work carried out by laboratories in Portugal and in the Czech Republic, by CEA and TNO, and by the ASL, OZM and FOTON organisations). Here also the studies focus on the very smallest scales.

The high level of participation in this Workshop shows the interest in the science of energetic materials within Europe, and the dynamism that exists within this community. At a time when production requirements are presenting ever more difficult scientific challenges, it is the intention of CEA – DAM to continue to promote exchanges of ideas and new collaborations by organising future Workshops on Explosives.



ENERGETIC MATERIALS RESEARCH AMONG MSIAC NATIONS

here is a constant message among NATO MSIAC nations that the resources for energetics research are decreasing, the numbers of people involved in research are reducing, and that knowledgeable senior personnel are not always replaced. This has consequences on current and future energetics research and weapons programs. This is not a new problem. So how are the nations solving the problem? Which fields of research are attractive and which energetic molecules are most promising in terms of potential?

The article is based on recent scientific publications (dated 2015) and conference proceedings on energetic materials, and not on a comprehensive review of the whole 13 MSIAC member countries efforts.

A number of national (USA) and international (SWE/FRA) programs reported some renewed interest in the replacement of trinitrotoluene (TNT), in the compliant formulations to Insensitive Munitions, and/or in high performing materials. Such factors as: easy synthesis at different scales of production, and toxicity and the environmental impact are considered now as major criteria as performance and safety. This is clearly demonstrated in the studies carried out on 3(5),4-dinitropyrazole as a substitute for TNT, and 2,5,7,9-tetranitro-2,5,7,9-tetrazabicyclo[4.3.0] nonan-8-one (HK-56) as a material equivalent to RDX. These materials and other compounds are highlighted in figure 1.

Studies on propellant additives, such as plasticizers, anti-oxidants and burn rate modifiers, are presently ranked high priority as effective replacements for phthalates and lead containing compounds which are restricted in supply and use by the environmental legislation. Belgium, Sweden

🛏 NOUVEAUX MATÉRIAUX

RECHERCHE SUR LES MATÉRIAUX ÉNERGÉTIQUES AU SEIN DES NATIONS DU MSIAC

u sein des nations membres du MSIAC à l'Otan, les ressources dédiées à la recherche sur les matériaux énergétiques diminuent, le nombre de personnes impliquées

dans la recherche est en baisse et les départs à la retraite ne sont pas toujours remplacés. Cela a des conséquences sur les programmes de recherche actuels et futurs dédiés aux matériaux énergétiques et à leurs applications militaires. Cela n'est pas un problème nouveau. Comment les nations abordent-elles cela? Quels sont les domaines de recherche attractifs et quelles sont les molécules énergétiques qui offrent un potentiel intéressant?

Cette présentation est basée sur les publications scientifiques (année 2015) et les actes des conférences récents sur les matériaux énergétiques et non sur un examen exhaustif de l'ensemble des efforts des treize pays membres du MSIAC.

Un certain nombre de programmes nationaux (USA) et internationaux (FRA/SWE) ont témoigné d'un intérêt renouvelé pour le remplacement du trinitrotoluène (TNT), pour des formulations pouvant être intégrées dans les munitions à risques atténués et/ou pour des matériaux à haute performance. La facilité de synthèse à différentes échelles de production, la toxicité et l'impact sur l'environnement sont maintenant aussi importants que les critères de performance et de sécurité. Les travaux sur le 3(5), 4-dinitropyrazole en remplacement du TNT, et sur la 2,5,7,9-tétranitro-2,5,7,9-tétrazabicyclo[4.3.0] nonane-8-one (HK-56) en tant que matériau équivalent au RDX (hexogène) le démontrent. La figure 1 permet de comparer ces matériaux et d'autres composés étudiés récemment.

Les additifs pour les poudres pour arme, tels que les plastifiants, les antioxydants et les modérateurs de combustion, sont étudiés actuellement en priorité pour remplacer les composés contenant des phtalates et du plomb, dont l'approvisionne-

DR M. ANDREWS, Energetic Materials, Munitions Safety Information Analysis Center (MSIAC), NATO, Brussels, Belgium and Australia are counted among nations that develop and test new propellant formulations.

Technology is also playing a crucial role in energetics research. Microfluidics devices and micro flow reactors are being used (DEU/ USA) to help achieve the continuous synthesis of nitrate esters and the nitration of diaminopyrazine-1-oxide. The process is scalable, energy consumption can be reduced, and the safety risks minimized during nitration.

Particle morphologies, mainly of ammonium dinitramide, are being studied through emulsification membrane (GBR) and pressurized spray prilling (SWE) techniques. Both techniques improve product stability and formulation performance.

A number of countries (USA, GBR, FRA, CAN, AUS) are investing work in ResonantAcoustic[®] Mixing (RAM) to produce energetic formulations not previously achievable due to high viscosity. The RAM technique induces mixing using acoustic resonance replacing the need for blades or impellers. The technique has been successfully applied to high-solid loaded cast cured energetic formula-

ment et l'utilisation sont limités par la législation environnementale. La Belgique, la Suède et l'Australie comptent parmi les pays qui développent et testent de nouvelles formulations.

La technologie joue également un rôle crucial dans les recherches sur les matériaux énergétiques. Des dispositifs de microfluidique et des réacteurs à microécoulement sont utilisés (DEU/USA) pour la synthèse en continu d'esters de nitrate et pour la nitration du diaminopyrazine-1-oxyde. Le procédé est transposable à plus grande échelle. Il réduit la consommation d'énergie et minimise les risques lors de la nitration.

La morphologie des particules, principalement celles du dinitramide d'ammonium, est étudiée au moyen de membranes d'émulsionnement (GBR) et de vaporisation sous pression (SWE). Les deux techniques améliorent la stabilité du produit et les performances de la formulation.

Un certain nombre de pays (USA, GBR, FRA, CAN, AUS) travaillent aussi sur le dispositif RAM (Resonant Acoustic[®] Mixing) pour produire des formulations énergétiques jusqu'alors non réalisables en raison de leur forte viscosité. La technique RAM tions (>90%), co-crystal synthesis and to a range of propellant formulations.

CONCLUSION

Despite a reduction in resources available for energetics research, nations are increasingly collaborating to reach their objectives which are now increasingly focused on technologies to improve formulations mainly based on existing materials.



Figure 1

Energetic Materials Research. Comparison of molecules of interest based on oxygen balance (dark blue, left scale), nitrogen percentage (red, left scale), metting points (light blue, left scale), density (green triangle, right scale), and detonation velocity (pink cross, right scale). Values are given in the table. DNP (respectively HK-56) is a good candidate to replace TNT (resp. RDX). Recherche en matériaux énergétiques. Comparaison de molécules d'intérêt basée sur la proportion d'oxygène (bleu foncé, échelle de gauche), le pourcentage d'azote (rouge, échelle de gauche), les points de fusion (bleu clair, échelle de gauche), la densité (triangle vert, échelle de droite) et la vitesse de détonation (croix violette). Les valeurs sont données dans le tableau. Le DNP (resp. HK-56) est un bon candidat pour remplacer le TNT (resp. RDX).

permet de mettre en résonance un récipient et le matériau pour le mélanger sans avoir recours à des lames ou des pales. La technique a été appliquée avec succès pour des formulations énergétiques à forte teneur en charges solides (> 90%), la synthèse de co-cristaux et sur une gamme de formulations de propergols.

CONCLUSION

Malgré la diminution des ressources pour la recherche sur les matériaux énergétiques, les nations collaborent pour atteindre les objectifs et concentrent tous leurs efforts sur les technologies permettant d'améliorer les formulations qui font principalement intervenir des matériaux existants.

ÉTUDE DES PROPRIÉTÉS DÉTONIQUES DES EXPLOSIFS NANOSTRUCTURÉS

amélioration des propriétés détoniques fait l'objet d'une recherche constante dans le but d'augmenter la performance et de renforcer la sécurité des explosifs. La réduction de la taille de l'oxydant et du réducteur se révèle très prometteuse pour accélérer les réactions énergétiques en rapprochant les constituants. Cette réduction d'échelle est possible aujourd'hui grâce à différents procédés. Le procédé cryogel permet de cristalliser l'oxydant à l'échelle d'une centaine de nanomètres au sein d'une matrice poreuse grâce à la maîtrise de la solution colloïdale. Le réducteur peut être constitué par de l'aluminium (Al) très fin obtenu grâce à une technique de fil explosé. Les compositions comprimées et composites sont fabriquées ensuite à partir des constituants, respectivement soit par un pressage avec la matrice cryogel, soit par une méthode de malaxage avec le liant polybutadiène.

L'étude de la formulation et de la caractérisation des nanocryogels comprimés à base de nanoperchlorate (nPA) et de nanohexogène (nRDX) a été réalisée en partenariat avec le CEA – Le Ripault [1]. Le diamètre moyen des particules nanométriques est compris entre 100 et 200 nm. Une diminution de la sensibilité à l'impact de



Mesure pyrométrique à la longueur d'onde de 660 nm : les trois compositions composites nanostructurées montrent une augmentation de la température par rapport à la composition de référence. Pyrometric measurement at a 660 nm wavelength: increased temperature for the three nanostructured composite compounds, compared to the reference one. 50% et une augmentation par trois de la vitesse de combustion ont été constatées pour la composition cryogel à base de 80% de nPA par rapport à la composition de référence micronique de même densité. Une sensibilité à l'impact équivalente et une diminution de la sensibilité au gap test de 50% ont été mesurées pour le cryogel à base de 75 à 90% de nRDX.

L'étude sur les propriétés détoniques des explosifs composites à base de nRDX et de nanoaluminium (nAl) a été réalisée en partenariat avec Airbus Safran Launchers [2]. La composition composite RDX/Al/PA/Liant 50/12/24/14 % en masse avec 25 % de nRDX présente une diminution de la sensibilité à l'impact et à la friction, une sensibilité au gap test équivalente, une augmentation de 40 % de la profondeur d'amorçage, mais ne montre aucune influence sur le test de relèvement du cylindre. L'objectif est ici de compléter cette étude par la détermination des propriétés à l'état CJ (Chapman-Jouguet) de ces compositions par des expérimentations de choc plan.

La faisabilité des diagnostics a été établie au moyen des lanceurs ARES et CEPAGE sur des échantillons de faible dimension de composition classique RDX/Al/liant polybutadiène 64/20/16 % en masse. Les simulations numériques ont été réalisées avec le code hydrodynamique Ouranos. La comparaison expérience-calcul de la vitesse d'interface explosif/fenêtre en LiF (fluorure de lithium) montre une bonne restitution de la détente des produits de détonation. Cette première étape a permis d'améliorer le montage expérimental afin d'intégrer trois échantillons sur le même support de cible, pour caractériser la température, la vitesse de détonation et la vitesse d'interface.

Les résultats expérimentaux pour les nanocryogels montrent une baisse de la vitesse de détonation de 10,6 % du nRDX par rapport à la référence. Une vitesse d'interface équivalente est obtenue. Pour les compositions composites, une diminution de la vitesse de détonation a également été constatée jusqu'à 16 % pour la composition avec 25 % de nRDX et 12 % de nAl. Une augmentation de la température est présentée sur la **figure 1**. La vitesse d'interface est similaire.

En conclusion, l'influence des particules nanométriques a été constatée sur la diminution

A. LEFRANCOIS,

L. JACQUET.

CEA – Gramat

KEROMNÈS.

A. WUILLAUME-

A. BEAUCAMP.

CEA – Le Ripault

K. WOIRIN,

C. COLLET,

France

Airbus Safran Launchers, Le Bouchet, Vert-le-Petit,

.

M. GENETIER, G. BAUDIN, de la vitesse de détonation et sur l'augmentation de la température des produits de détonation, démontrant ainsi des échanges thermiques plus rapides favorisant l'équilibre des particules solides avec les produits de détonation. En perspective, ces résultats doivent être comparés au calcul thermochimique SIAME permettant de prédire l'état CJ. Une analyse détaillée du front de la vitesse d'interface doit être menée. D'autres compositions peuvent être envisagées en associant nPA et nRDX.

RÉFÉRENCES / REFERENCES

[1] A. WUILLAUME, A. BEAUCAMP, F. DAVID-QUILLOT, C. ERADÈS, "Formulation and Characterizations of Nanoenergetic Compositions with Improved Safety", *Propellants Explos. Pyrotech.*, 39, p. 390-396 (2014).

[2] K. WOIRIN, A. COMBE, Y. GUGUIN, C. ROUX, "Performance and Characteristics of Nano Particles Based High Explosives", Proc. of the 45th international Annual Conference of the Fraunhofer ICT, June 24-27, 2014, Karlsruhe, Germany, Fraunhofer ICT, v25 (2014).

NEW MATERIALS

STUDY OF NANOSTRUCTURED EXPLOSIVES DETONATION PROPERTIES

he improvement of detonation properties is the subject of constant research for increasing the High Explosives (HE) performance and safety. The size reduction of the par-

ticles is a great concern to enhance the energetic reactions by faster mass and thermal exchanges. Today, this size reduction is made quite possible due to different processes. The cryogel method helps crystallizing oxidizer particles down to about one hundred nanometers inside the porous matrix. To get some very fine aluminum particles, the exploding wire technique is applied with a high current to obtain the wire burst. The compressed and composite compositions are respectively based on particles, either by compression with the cryogel matrix, or by some cast-cured process using polybutadiene binder.

The study of the formulation and characterization of nanocryogels made from nanoperchlorate (nPA) and nanohexogen (nRDX) was carried out in partnership with CEA – Le Ripault [1]. The average diameter of the nanoparticles was between 100 and 200 nm. A 50% decrease in the impact sensitivity and a threefold increase of the combustion rate were observed in the cryogel made from 80% nPA compared to the micron reference composition of the same density. An equivalent impact sensitivity and a 50% decreased gap test sensitivity were measured for 75 to 90% nRDX cryogel.

The study of the formulation and characterization of the composite high explosives made from nRDX and nanoaluminum (nAl) was carried out in partnership with Safran Herakles [2]. The RDX/ Al/PA/binder formulation with a composition of 50/12/24/14% by weight with 25% nRDX showed a decrease of sensitivity to impact and friction, an equivalent sensitivity to gap test, and a 40% increase of the run distance, but no influence on the cylinder test. The purpose was to complete the study by determining the properties to the Chapman-Jouguet (CJ) state properties of these compositions by plane shock experiments.

The diagnosis feasibility was established with the ARES and CEPAGE launchers on samples of small dimensions with a classical RDX/Al/polybutadiene binder composition of 64/20/16% weight. Numerical simulations were performed with the Ouranos hydrodynamic code. The comparison between experiments–calculations of the interface explosive/LiF (lithium fluoride) window velocity showed a good restitution of the detonation products release. This first step made it possible to improve the experimental setup so as to include three samples on the same target holder in order to characterize the temperature, the detonation and interface velocities.

The experimental results on nanocryogels showed a decrease in the nRDX detonation velocity of 10.6% in comparison to the reference. A similar interface velocity is reached. As for the composite compounds, a decrease in the detonation velocity that can reach 16% was also found in the composition with 25% nRDX and 12% nAl. An increase in temperature is displayed in figure 1. The interface velocity was quite similar.

In conclusion, the influence of nanoscale particles was observed on the detonation velocity decrease and temperature increase of the detonation products, highlighting faster heat exchanges responsible for the equilibrium between the solid particles and the detonation products. In perspective, these results should be compared to SIAME thermochemical calculations to predict the CJ state. The front of the interface velocity should be analyzed in detail. Some other compositions combining nPA and nRDX could be planned.

COMPOSITIONS EXPLOSIVES À TRÈS FAIBLE DIAMÈTRE CRITIQUE FORMULATION ET CARACTÉRISATION

K. WOIRIN. C. COLLET. Airbus Safran Launchers, Le Bouchet, Vert-le-Petit, France



e diamètre critique de détonation est défini, pour une charge solide cylindrique, par le diamètre minimum permettant la propagation stationnaire d'une détonation. L'influence du procédé de formulation sur le faible diamètre critique de plusieurs compositions est ici étudiée.

	Charge	Rate (%w)	Particle size	2x2 mm²	1x1 mm²
P #1/#2	CL20	>80 / >75	Fine	D / D	D/-
P #3 / #4	RDX	>75/>80	Fine	- / -	-/-
P #5 / #6	RDX	>85 / >88	100% Coarse / 80% Coarse	D / D	- / -
P #7	НМХ	>85	Coarse / Fine (50 / 50)	-	-
T #1	RDX CH	>85	Coarse / Fine (70 / 30)	D	-
T #2 to #4	RDX B	>85/>88/>88	50% Coarse/id./ 100% Fine	D / D / D	-/-/D
T #5 to #7	CL20	>85 / >86 / >87	Fine	- / D / D	-/-/-

Tableau 1

Présentation des compositions PBX (P) et TPBX (T) fabriquées à base de HTPB et évaluées durant cette étude. Les compositions TPBX ont été fabriquées par laminage. En fonction de la taille de l'échantillon, une détonation (D) est observée ou non. Presentation of the HTPB-based PBX and TPBX compositions evaluated in this study. TPBX compositions have been manufactured via a rolling machine. Detonation is observed (D) or not, according to the sample cross section size.

FORMULATION DE COMPOSITIONS À TRÈS FAIBLE DIAMÈTRE CRITIQUE

Les premières compositions PBX (Plastic Bonded eXplosive) ont été formulées à partir d'un procédé de mélange standard et en utilisant un liant inerte HTPB (Hydroxyl-Terminated PolyButadiene). Sept compositions ont été formulées avec différents types de charge explosive (HexaNitro-hexaazaIsoWurtzitane-CL20-, and Hexogen-RDX-), de taille de particules et de taux de remplissage. Pour atteindre un diamètre critique inférieur à 1 mm (tableau 1), nous devons considérer une composition à base de CL20 avec des particules fines et un taux de remplissage supérieur à 80% en masse et une viscosité élevée (supérieure à 15 kPo). Les compositions TPBX (ThermoPBX) ont été formulées à l'aide d'un laminoir. À partir de ce procédé, on obtient des feuilles d'explosifs d'épaisseurs calibrées entre 0,8 et 3 mm. Huit compositions à base de liants thermoplastiques ont été formulées (figure 1).

NEW MATERIALS

VERY LOW CRITICAL DIAMETER EXPLOSIVE **COMPOSITIONS** FORMULATION AND CHARACTERIZATION



or a cylindrical solid charge, the critical diameter in detonation is defined as the minimum diameter at which a standing detonation can propagate. Low critical diameter compositions are investigated with two main objectives: optimizing the formulation with two types of processes (mixing and rolling), and developing the characterization of such compositions.

FORMULATION OF VERY LOW **CRITICAL DIAMETER COMPOSITIONS**

The first Plastic Bonded eXplosive (PBX) compositions have been formulated on a standard mixing process, and using a HTPB (Hydroxyl-Terminated PolyButadiene) inert binder. Seven compositions have been formulated with different types of explosive charges (HexaNitrohexaazaIsoWurtzitane -CL20-, and Hexogen -RDX-), of particle sizes and filling rates. In order to reach a critical diameter lower than 1 mm (Table 1), it is necessary to consider a CL20-based composition with fine particles, a filling rate higher than 80 wt%, and high viscosity (superior to 15 kPo). Next compositions have been formulated by means of a rolling machine. This in

CARACTÉRISATION DE LA COURBURE DU FRONT

L'onde de détonation en sortie de charge explosive est visualisée à l'aide d'une caméra à balayage [1,2]. Pour adapter le test classique aux microéchantillons, nous avons utilisé un microscope optique placé entre la charge explosive et la caméra.

Sur les films enregistrés (figure 1, à gauche), nous pouvons observer trois phénomènes :

• l'onde de détonation émerge au centre de l'échantillon, puis sur son pourtour. La courbure du front n'est pas régulière mais sa forme est classique [2];

• lorsque l'onde de choc s'est détachée de l'échantillon, nous observons les gaz de détonation;

• lorsque l'onde de choc atteint la paroi en PMMA, on observe la réflexion du choc puis la perte de lumière due au changement de l'indice optique du PMMA.

Les fibres optiques placées en face de l'échantillon montrent un décalage temporel entre le centre et le contour (18 ns), en accord avec les résultats précédents (figure 1, à droite).

CONCLUSION

Grâce à deux procédés de fabrication, nous avons formulé des compositions explosives à base de liants HTPB et thermoplastiques de diamètre critique inférieur à 1 mm. L'application de méthodes utilisant des fibres optiques a permis la visualisation directe de la courbure du front de détonation dans les microéchantillons que nous avons fabriqués. Remerciements – Les auteurs tiennent à remercier la DGA pour son soutien financier.

RÉFÉRENCES / REFERENCES

T. D. TRAN, C. M. TARVER, J. MAIENSCHEIN, P. LEWIS, M. MOSS, R. S. LEE, F. ROESKE, "Characterization of Detonation Wave Propagation in LX-17 near the Critical Diameter", *Proc. of the International Detonation Symposium*, San Diego, California, August 11-16, 2002, ed. ONR, p. 684.

I. PLAKSIN, J. CAMPOS, P. SIMOES, A. PORTUGAL, J. RIBEIRO, R. MENDES, J. GOIS, "Detonation Study of Energetic Micro-Samples", *Proc. of the International Detonation Symposium*, San Diego, California, August 11-16, 2002, ed. ONR, p. 650.



Figure 1

Diagnostics permettant de comparer le comportement des compositions (ici PBX #1) sur de petits échantillons : (a) visualisation de l'émergence du front de détonation sur une caméra à balayage de fente ; l'échantillon de PBX #1 a une section de seulement 1 x 1 mm². (b) reconstruction 3D de la courbure du front à partir des signaux enregistrés sur des fibres optiques.

Measurements technics used to compare the behavior of the compositions (here PBX #1) using small samples: (a) streak camera visualization of detonation front emergence for a PBX #1 micro-sample in a 1x1 mm² cross section configuration. (b) 3D reconstruction of the front curvature from data recorded on optical fibers.

turn produces explosive sheets, with a calibrated thickness of 0.8 to 3 mm. Eight ThermoPlastic Bonded eXplosive (TPBX) compositions have been formulated (Figure 1).

FRONT CURVATURE CHARACTERIZATION

The detonation wave is visualized via a streak camera at exit of explosive charge [1-2]. In order to adapt the typical test to micro samples, an optical microscope placed between the explosive charge and the camera has been used.

On the recorded films (**Figure 1** - left), it can be observed three phenomena:

• the detonation wave emerges from the explosive sample at its center, and next, on the periphery. Front curvature is not regular, but its shape agrees with common references [2];

 when the shock wave is out of the sample, it can be observed detonation gases; • when the shock wave reaches the poly(methyl methacrylate) (PMMA) wall, it can be observed shock reflection, and next, the loss of light due to the change of the PMMA optical index.

The optical fibers placed in front of the sample show the time shift between the center and the periphery (18 ns), in accordance with previous results (Figure 1- right).

CONCLUSION

Due to two different processes, it has been made possible to formulate HTPB and thermoplastic binder-based explosive compositions with a critical diameter lower than 1 mm. Applications of optical fiber methods allow direct visualization of micro sample front curvatures.

Acknowledgements – The authors would like to thank the Direction Générale de l'Armement, French Ministry of Defence, for its financial support.

THE HELIOS THERMOCHEMICAL CODE

key factor in explosive behaviour modelling is the equation of state (EOS) of the resulting detonation products (DP). Traditionally, this has been expressed in empirical

analytical forms, with such coefficients as to reproduce experimental results. This method has issues with fitting other experimental data that lie outside the regime in which the EOS was calibrated. An alternative approach is the use of thermochemical codes, which can calculate the resulting DP EOS given the composition, density and heat of formation of an explosive.

The DP are assumed to be in chemical equilibrium, as found by minimizing the Gibbs free energy of the mixture while conserving the elemental mole numbers. The chemical composition therefore changes with the thermodynamic state, so that codes must simultaneously solve for thermodynamic state variables and chemical concentrations. The issue then depends on the individual EOS of the detonation product species formed (**Figure 1**).

Modern thermochemical codes, such as CHEE-TAH or CARTE, use theoretical EOS, assuming that



(a) mind structure of a single molecule of NHX and (b) decomposed into representative product species (e.g. water, nitrogen, carbon monoxide). Colour coding for atoms is white for hydrogen, blue for nitrogen, green for carbon and red for oxygen. Thermochemical codes explicitly take into account the composition of the products. (a) Structure de départ d'une molécule de HMX et (b) sa décomposition en espèces représentatives des produits (c.-à-d. eau, azote, monoxyde de carbone). Code couleur pour les atomes : blanc pour l'hydrogène, bleu pour l'azote, vert pour le carbone et rouge pour l'oxygène. Les codes thermochimiques tiennent compte explicitement de la composition des produits.

W. BELFIELD, Atomic Weapons Establishment (AWE), Aldermaston, United Kingdom

DÉVELOPPEMENT DES CODES DE THERMOCHIMIE

LE CODE DE Thermochimie Helios

ne des clés de la modélisation du comportement des explosifs est l'équation d'état (EOS) des produits issus de la détonation (DP). Traditionnellement, celle-ci s'exprime

sous une forme analytique et empirique, et ses coefficients sont ajustés pour reproduire une série de résultats expérimentaux. Cette méthode pose problème pour simuler des données expérimentales situées en dehors du régime dans lequel l'EOS a été calibrée. Une approche alternative consiste à utiliser les codes de thermochimie qui calculent l'EOS DP à partir de la composition, de la densité et de la chaleur de formation d'un explosif donné.

Les DP sont supposés être à l'équilibre chimique, obtenu en minimisant l'énergie libre de Gibbs du mélange tout en conservant le nombre de moles élémentaires. La composition chimique varie donc avec l'état thermodynamique et les codes doivent simultanément déterminer les variables d'état thermodynamiques et les concentrations chimiques. Ce problème dépend alors de l'EOS individuelle des espèces formées dans les produits de détonation (figure 1).

Les codes thermochimiques modernes, tels que CHEETAH ou CARTE, utilisent des EOS théoriques basées sur un potentiel modèle pour décrire les interactions entre molécules de produits. La forme la plus couramment utilisée est le potentiel exponentiel-6 (exp-6) (figure 2). Il a été montré que celui-ci the product molecules interact with some model potential. The most common form used in thermochemical codes is the exponential-6 (exp-6) potential (**Figure 2**). This has been shown to be sufficiently realistic to construct EOS over a wide physical range including high-pressure areas.

The contribution to the free energy arising from these molecular interactions is calculated with statistical mechanics theories which use a hardsphere fluid as a reference system. The DP EOS is then derived from these theories, which have been shown to accurately reproduce the results of Monte Carlo simulations. However, these methods apply to the description of a pure fluid (that is containing one kind of molecule only). The multi-component mixture of detonation products is assumed to be represented by a hypothetical one-component pure fluid, with parameters being generated by a series of mixing rules so as to closely approximate the properties of the mixture.

A new thermochemical code called HELIOS has been developed at AWE based on open literature publications and CHEETAH. HELIOS uses an exp-6 potential based EOS in DP description and finds the chemical equilibrium by balancing the chemical potentials of the different product species. HELIOS has been validated by direct comparison with CHEETAH calculations, and from identical input data.

In addition, the use of different mixture rules has been explored. While the most widely used approaches are the mixing rule of Ree [1] together with Lorentz-Berthelot rules, a variety of other approaches have been suggested [2,3]. The impact of these rules on the predicted performance of explosives was found to be small compared to the changing of the product species considered.

© British Crown Owned Copyright 2016/AWE

REFERENCES / RÉFÉRENCES

 F. H. REE, "Simple mixing rule for mixtures with exp-6 interactions", *J. Chem. Phys.*, **78**, p. 409 (1983).
C. L. KONG, M. R. CHAKRABARTY, "Combining rules for inter-molecular potential parameters. III. Application to the exp-6 potential", *J. Phys. Chem.*, **77**, p. 2668–2670 (1973).

[3] N. DESBIENS, V. DUBOIS, C. MATIGNON, R. SORIN, "Improvements of the CARTE thermochemical code dedicated to the computation of properties of explosives", *J. Phys. Chem. B*, **115**, p. 12868-12874 (2011).





Un exemple de potentiel V(r) en exponentiel-6 pour la description des interactions entre molécules dans les équations d'état. Le paramètre r_m est la distance entre molécules au minimum du potentiel, ε la profondeur du potentiel et cx un paramètre de forme. Le potentiel a été divisé par la constante de Boltzmann k pour que l'axe des ordonnées soit en kelvins.

est suffisamment réaliste pour construire une EOS valable dans un domaine physique assez large, y compris dans la gamme des hautes pressions.

La contribution à l'énergie libre résultant des interactions intermoléculaires est calculée à l'aide de théories mécaniques statistiques qui utilisent, comme système de référence, un modèle de fluide de sphères dures. L'EOS DP est alors dérivée de ces théories qui sont capables de reproduire fidèlement les résultats de simulations de type Monte Carlo. Cependant, ces méthodes s'appliquent seulement à la description de fluides purs (c'est-à-dire ne contenant qu'un seul type de molécule). On suppose donc que le mélange de produits de détonation à plusieurs constituants peut être représenté par un fluide pur «hypothétique» dont les paramètres sont générés à partir de lois de mélange qui se rapprochent au mieux des propriétés du mélange de DP. Un nouveau code thermochimique appelé HELIOS a été développé à l'AWE à partir de publications ouvertes et de CHEETAH. HELIOS utilise une EOS avec un potentiel exp-6 pour décrire les DP et atteint l'équilibre chimique en équilibrant les potentiels chimiques des différentes espèces de produits. HELIOS a été validé par comparaison directe avec des résultats issus du code CHEETAH pour les mêmes données d'entrée.

De plus, l'utilisation de différentes lois de mélange a été explorée. Bien que les approches les plus couramment utilisées utilisent la loi de mélange de Ree [1] associée aux règles de Lorentz-Berthelot, plusieurs autres approches ont été proposées [2,3]. L'influence du choix de ces lois sur les prédictions de performance des explosifs s'est révélée faible, compte tenu des changements d'espèces des produits considérés.

SIAME, UN NOUVEAU CODE DE SIMULATION THERMOCHIMIQUE

IAME, acronyme de SImulation Aéro-thermochimique et Mécanique des Explosifs, est un outil de simulation thermochimique développé depuis deux ans à la demande de la Direction générale de l'armement (DGA), et intégrant les besoins actuels des utilisateurs du

domaine des matériaux énergétiques de la défense

conventionnelle. Il sera mis à la disposition des centres techniques de la DGA et des industriels de l'armement. Ces matériaux contiennent notamment des additifs métalliques ou des oxydants comme le perchlorate d'ammonium. Le solveur de calcul à l'équilibre thermochimique est basé sur un nouvel algorithme mettant en œuvre une décomposition en valeurs singulières de la matrice de

	Grandeur physique	Expérience	CHEETAH BKW-S	CARTE BKW-S	SIAME BKW-S
Explosif 1	Vitesse de détonation	7 980 m/s en Φ 50 mm	7 871 m/s	7 855 m/s	7 871 m/s
	Pression de détonation		23,1 GPa	23,1 GPa	23,1 GPa
	Température de détonation		3 5 4 3 K	3 538 K	3 543 K
Explosif 2	Vitesse de détonation	8 374 m/s en Φ 50 mm	8 433 m/s	8 429 m/s	8 434 m/s
	Pression de détonation		28,3 GPa	28,4 GPa	28,2 GPa
	Température de détonation		3 535 K	3 533 K	3 536 K
Explosif 3	Vitesse de détonation	7 625 m/s en Φ ∞	7 416 m/s	7 365 m/s	7 416 m/s
	Pression de détonation		20,6 GPa	20,7 GPa	20,6 GPa
	Température de détonation		3 070 K	3 066 K	3 070 K

M. GENETIER, G. BAUDIN, CEA – Gramat

Tableau 1

Vitesse de détonation stationnaire. L'écart entre les vitesses de détonation stationnaire calculées et mesurées est inférieur à 3 % avec les paramètres de la calibration BKW-S. Detonation velocity. The difference between calculated and experimental detonation velocities is below 3%, according to BKW-S calibration parameters.

IMPROVEMENT OF THERMOCHEMICAL CODES

SIAME, A NEW CODE FOR THERMOCHEMICAL SIMULATION



IAME, an acronym for SImulation Aero-thermochemical Mechanics and Explosives, is a thermochemical simulation tool, under development for the last two years at the

request of the Direction générale de l'armement (DGA), that integrates the current needs of the users involved in the field of energetic materials for the conventional defense. This will be a new tool available to DGA technical centers and arms manufacturers. These materials more particularly include metallic additives or oxidizers, such as the ammonium perchlorate. The thermochemical equilibrium calculation solver is based on a new algorithm implementing a singular value decomposition of the stoichiometry matrix recently proposed by Massa and Jha [1]. The 2016 version is based on the empirical BKW [2] or theoretical KLRR [3] descriptions of the actual gas mixture. SIAME helps solving a great variety of thermodynamic problems, regarding both reactant mixture and reaction products.

The SIAME software developers have devoted special effort into the consistency of results via a unique library of reagents and products. Calculations of radiative and molecular transport coefficients have been added in order to feed the fluid mechanics computer codes meant to solve Navier-Stokes equations. Two applications are illustrated stœchiométrie proposée récemment par Massa et Jha [1]. Le code est aujourd'hui basé sur la description empirique BKW [2] ou théorique KLRR [3] du mélange de gaz réels. SIAME résout une grande variété de problèmes thermodynamiques portant aussi bien sur le mélange des réactifs que sur les produits de réaction.

Les développeurs de SIAME ont porté une attention particulière à la cohérence des résultats *via* une librairie unique de réactifs et de produits. Le calcul des coefficients de transport moléculaire et radiatif a été intégré afin d'alimenter les codes de calcul de mécanique des fluides résolvant les équations de Navier-Stokes. Deux applications sont données et comparées aux codes CHEETAH et CARTE et à l'expérience : un calcul de détonation stationnaire (tableau 1) et l'explosion d'une charge de TNT en volume clos pour différentes masses d'explosif (figure 1). L'écart avec l'expérience est inférieur à 3% en ce qui concerne la vitesse de détonation stationnaire et inférieur à 15% en ce qui concerne la pression quasi statique.

La stratégie KLRR s'appuie sur un modèle statistique où les molécules interagissent selon un potentiel d'interaction dit exponentielle-6, ce qui permet de disposer d'un modèle théorique. De futures évolutions sont également prévues pour améliorer l'aspect prédictif par l'adjonction d'équations d'état plus précises, avec un effort particulier porté sur les additifs condensés (particules métalliques, d'alumine et de silice) et les liants inertes. Des fonctionnalités thermocinétiques seront éga-

below, in comparison with the CHEETAH and CARTE codes: the calculation of stationary detonation (table 1), and the explosion in a confined volume of a TNT charge for various explosive masses values (figure 1). The discrepancy with the experiment is less than 3% as for stationary detonation velocities, and less than 15% for quasi-static pressures.

The KLRR strategy is based on a statistical model, with molecules interacting according to a so-called 6-exponential interaction, which makes it possible to have a theoretical model without any calibration of parameters. Future developments are also planned in order to improve the predictive aspect, by the addition of more accurate equations of state, with special emphasis on condensed additives (metal, alumina and silica particles) and inert binders. Some thermokinetic features will also be lement introduites pour prévoir l'épaisseur de la zone de réaction en détonation et en déflagration, ainsi qu'un algorithme de formulation automatique permettant d'ajuster les concentrations afin d'optimiser les caractéristiques détoniques d'une composition énergétique. Des modèles réduits y seront également implantés pour les utilisateurs de codes technico-opérationnels.

Le développement de SIAME est le fruit d'une coopération entre plusieurs équipes du CEA – DAM et du laboratoire d'Énergétique, de Mécanique et d'Électromagnétisme de l'université Paris-Ouest-Nanterre La Défense.

RÉFÉRENCES / REFERENCES

[1] L. MASSA, P. JHA, "Teaching thermo-chemical equilibrium using a MATLAB algorithm", *Proceedings of the 2013 ASEE Gulf-Southwest Annual Conference*, University of Texas, Arlington, USA March 21-23, 2013, American Society for Engineering Education, p. 395 (2013).

[2] C. L. MADER, Numerical Modeling of Explosives and Propellants, 3rd edition, CRC Press, 2008.

S. B. VICTOROV, S. A. GUBIN, "A new accurate equation of state for fluid detonation products based on an improved version of the KLRR perturbation theory", *Proceedings of the 13th International Detonics Symposium*, 23-28 July, 2006, Norfolk, USA, 2006, Office of Naval Research, 1118 (2006).



Explosion adiabatique en volume clos d'une charge de TNT. Pressions quasi statiques obtenues après explosion d'une charge de TNT pour plusieurs rapports de masse d'explosif sur volume de salle. Siame est en bon accord avec Cheetah, Carte et avec les résultats expérimentaux

Closed volume explosion. Quasi-static pressures observed after an explosion of TNT for various values of explosive mass divided by room volume. A good agreement is found between Siame and Cheetah, Carte and the experimental results.

introduced to provide the reaction zone thickness under detonations and explosions, together with an automatic formulation algorithm allowing to adjust the concentrations in order to optimize the detonating characteristics of an energetics composition. Some reduced models will also be implemented for the users of technical and operational codes.

The development of SIAME is the result of the cooperation between several CEA – DAM teams and the Energetics, Mechanics and Electromagnetism laboratory at the University of Paris-Ouest-Nanterre La Défense.

ÉTUDE DES EFFETS De la synthèse Sur la microstructure De poudres d'explosifs

es poudres de TATB (triaminotrinitrobenzène) et d'octogène (ou HMX, High Melting Explosive), composés intéressants pour leur faible sensibilité et leur vitesse de détonation élevée, possèdent des morphologies liées à leur structure cristalline. Bappelons que la morphologies

structure cristalline. Rappelons que la morphologie est un paramètre important pour être à même de juger de la qualité des lots de poudres.

Cet effet est encore plus marqué pour le TATB, qui présente une structure lamellaire relativement proche de celle du graphite [1,2]. Le procédé de synthèse influe également sur la morphologie, via le mode de cristallisation du produit. Les cristaux de TATB sont obtenus par précipitation réactive à l'interface solvant/gaz de réaction, ce qui entraîne une germination importante du fait de la forte sursaturation locale en TATB. Les conditions de croissance, pilotées par des phénomènes de type «nucléation secondaire», conduisent à des particules de morphologie imparfaite et le plus souvent à des directions de croissance multiples à l'intérieur d'une même particule (figure 1). Les lots contenant davantage de ce type de particules peuvent être repérés par analyse d'images (particules plus isotropes). De plus, la surface est affectée à la fois par le départ de matières volatiles se produisant au moment de la cristallisation, mais aussi par la présence de chocs subis par les particules sous forte agitation. La formation de pores et de défauts, pouvant aller jusqu'à l'arrachement de matière et à la création de fines, est mise en évidence. Cet état de surface peut varier selon que l'on utilise un filtre-presse ou un filtre statique, de l'eau chaude ou de la vapeur d'eau pour le lavage des poudres. Il faut toutefois noter que l'analyse radiocristallographique ne montre pas de différences notables lorsque ces variations sont appliquées lors de la synthèse.

Les particules de TATB renferment des impuretés, en particulier de l'eau et du chlorure d'ammonium. Une étude par spectrométrie RMN (résonance magnétique nucléaire) a montré que ces deux composés sont inclus sous forme liquide dans des pores fermés de quelques micromètres [3,4]. L'existence de telles cavités a été confirmée en couplant l'imagerie par microscopie électronique à balayage et l'abrasion par des ions gallium (MEB/FIB, figure 2).

La formulation n'induit pas de modification structurale, alors que le pressage tend à modifier la qualité cristalline des matériaux : un abaissement de cette qualité est observé pour le TATB et





Figure 1

(a) Image de microscope électronique à balayage (MEB-SE) d'une particule de TATB présentant un axe de croissance principal correspondant à l'axe cristallographique c (en bleu); (b) Image MEB-SE d'une particule de TATB formée par agglomération de cristaux avec plusieurs axes de croissance. Ce dernier type de morphologie peut conduire à un comportement différent par rapport à une croissance uniaxiale.

(a) Scanning electron microscope (SEM-SE) image of a TATB particle with a main growth axis corresponding to the crystallographic c axis (in blue); (b) SEM-SE image of a TATB particle formed by agglomeration of crystals with several growth axes. This type of particles can lead to different behaviors with respect to uniaxial growth.

E. BRUNETON, A. FORZY, M. GUERAIN, A. LECARDEUR, G. DEL RIO, J. PIQUARD, S. BEAUGRAND, P. PALMAS, CEA – Le Ripault une amélioration se produit pour le HMX. Une analyse plus précise de ces phénomènes doit encore être menée.

Pour le HMX, des variations morphologiques sont également observées si différentes conditions de synthèse sont utilisées. Elles se traduisent, dans les cas étudiés ici, par des modes de croissance différents reliés à des orientations cristallines préférentielles susceptibles de varier. En revanche, contrairement au TATB, les surfaces des particules sont pratiquement similaires et présentent peu d'endommagements.

RÉFÉRENCES / REFERENCES

[1] H. H. CADY, A. C. LARSON, "The crystal structure of 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene", *Acta Cryst.*, 18, p. 485 (1965).

[2] C. ZHANG, B. KANG, X. CAO, B. XIANG, "Why is the crystal shape of TATB is so similar to its molecular shape? Understanding by only its root molecule", *J. Mol. Model*, **18**, p. 2247-2256 (2012).

[3] P. PALMAS et al., "Structural characterization of small size impurities inside an organic solid material using IH NMR methods: The case of TATB", Workshop on Explosives, Tours, 30/09-01/10/2015.

[4] P. PALMAS, T. BOTZANOWSKI, M. GUERAIN, A. FORZY, E. BRUNETON, G. DEL RIO, "Size determination of porosity inclusions in an organic solid material by (I)H NMR diffusion and SEM-FIB experiments: The TATB case", J. Phys. Chem. B., 120, p. 4152–4159 (2016).

FROM MICROSCALE TO MACROSCALE

STUDY OF THE SYNTHESIS EFFECTS ON THE MICROSTRUCTURE OF EXPLOSIVE POWDERS

ATB (triaminotrinitrobenzene) and HMX (High Melting Explosive) powders, as compounds of great interest owing to their low sensitivity and high detonation velocity,

have morphologies associated with their crystal structure. Particles morphology is an important parameter in the comparison of different batches of powder.

This shows more in TATB, which has a lamellar structure fairly close to that of graphite [1,2]. Morphology also depends on the synthesis process, through the product cristallization mode. TATB crystals are obtained by reactive precipitation at the solvent-reaction gas interface, resulting in a significant nucleation due to high local supersaturation of TATB. Growth conditions, driven by so-called "secondary nucleation" phenomena, lead to an imperfect particle morphology and in most cases, to multiple growth directions inside the same particle (Figure 1). The batches containing a greater number of such particles can be identified by image analysis (more isotropic particles). In addition, the surface is affected by the removed volatile by-products at the time of crystallization, but also by the occurring shocks onto the particles during vigorous stirring. The formation of pores and defects, that can go as far as to the tearing of matter and the creation of fines, is highlighted. This surface state may vary depending on whether, either



Figure 2

Image MEB en section transverse d'une tranche (carré rouge) obtenue à l'intérieur d'une particule de TATB après abrasion au FIB (Focus Ion Beam); la partie blanche correspond à la métallisation nécessaire pour éviter les problèmes de charge. Les pores apparaissent en sombre sur la coupe.

SEM image in the transverse section of a slice (red square) got inside a TATB particle after FIB (Focus Ion Beam) abrasion; the white part corresponds to the metallization required to avoid electric charae problems. In dark on the cross section appear the pores.

a press or static filter, hot water or steam to wash the powders are used. However, it should be noted that the radiocrystallographic analysis showed no significant differences when these variations were applied during synthesis.

TATB particles contain impurities, particularly water and ammonium chloride. A study by NMR spectrometry showed that these two compounds were included in liquid form to closed pores of a few micrometers [3,4]. The existence of such cavities was confirmed by coupling scanning electron microscopy imaging and by gallium ions abrasion (FIB/SEM, Figure 2).

For HMX, morphological variations are also observed according to different synthesis conditions. They resulted here in varying growth patterns related to preferential crystal orientations likely to differ. Unlike TATB however, particle surfaces were substantially similar and presented little damage.

The formulation did not induce any structural change while pressing tended to change the crystalline quality of the material : some poorer quality for TATB, and some higher for HMX. The analysis of these phenomena has yet to be more accurately carried out.

SENSIBILITÉ AUX CHOCS ET MICROSTRUCTURE DES EXPLOSIFS

L. BORNE, **J. CORBEL** Institut franco-allemand de recherches de Saint-Louis (ISL), France

ontrôler la sensibilité des explosifs à l'onde de choc est important pour maîtriser leur vulnérabilité. C'est un problème difficile car étroitement lié à leur chimie et leur microstructure. Dans l'explosif, le choc initie des réactions fortement exothermiques, qui peuvent conduire à la détonation. On parle de transition choc-détonation (TCD). Pour obtenir la détonation, le choc initial



Figure 1

Microscopie optique avec adaptation d'indice. (a) Cristal d'hexogène (RDX) standard comportant des inclusions de solvant augmentant la sensibilité aux chocs. (b) Cristal d'hexogène de sensibilité réduite (VI-RDX) fabriqué à l'Institut franco-allemand de recherches de Saint-Louis (ISL). Ce cristal est exempt d'inclusion.

Optical microscopy with index matching. (a) Standard RDX crystal showing solvent inclusions and an increase of the shock sensitivity. (b) Very-insensitive crystal made in Institut franco-allemand de recherches de Saint-Louis (ISL). Porosity with solvent has been eliminated.

doit être suffisamment intense et d'une durée suffisamment longue. Les chocs faibles (vulnérabilité) devront être d'une durée plus importante que les chocs forts (amorçabilité).

Les explosifs sont en général hétérogènes et la TCD s'initie localement au voisinage d'hétérogénéités. Dans une seconde étape, le développement des réactions sur ces «points chauds» conduit à la détonation. L'initiation des points chauds est le facteur limitant des chocs faibles. De nombreux travaux ont été réalisés sur les hétérogénéités liées à la fabrication des compositions (porosités résiduelles dans les formulations). Il existe aussi des hétérogénéités propres aux constituants élémentaires comme les particules d'explosif. Actuellement, deux qualités commerciales de particules d'hexogène existent avec des sensibilités aux chocs standard (RDX) et réduite (RS-RDX) (Reduced Sensitivity). Cependant, il n'existe pas à ce jour de prédiction de leur sensibilité à partir de caractérisations microstructurales.

Grâce à la microscopie optique avec adaptation d'indice (figure 1) et des mesures de densité des particules [1], l'Institut franco-allemand de recherches de Saint-Louis (ISL) a mis en évidence le rôle important des inclusions de solvants dans les particules d'explosifs. Des expérimentations

FROM MICROSCALE TO MACROSCALE

SENSITIVITY TO SHOCKS AND EXPLOSIVES **MICROSTRUCTURE**

ontrolling the sensitivity of an

explosive to shock waves is quite esssential to handle its vulnerability. It will be no easy matter, since this is closely linked to the

chemistry and microstructure of the explosive. The shock initiates strong exothermic reactions in the explosive, that can lead to detonation. It is all about shock-to-detonation transition (SDT). In order to cause detonation, the initial shock should be sufficiently intense and long-lasting. Weak shocks (vulnerability) should be lasting longer than strong shocks (initiation).

Explosives are generally heterogeneous, and the SDT is locally initiated in the vicinity of heterogeneities. Subsequently, the developing reactions at these "hot spots" lead to detonation. The initiation of the hot spots is the limiting factor to weak shocks. A lot of studies have been carried out on heterogeneities linked to the production of the compositions (residual porosity in formulations). There also exist some heterogeneities specific to elemental constituents, such as explosive particles. At the moment, there exist two commercial grades of hexogen particles with sensitivities to shocks: standard (RDX) and reduced (RS-RDX) (Reduced

et des modélisations mettent aussi en évidence le rôle de la forme des particules [2]. La maîtrise de ces paramètres a permis à l'ISL de fabriquer une nouvelle qualité de particules de RDX appelée VI-RDX (Very Insensitive) [3]. Les seuils expérimentaux de sensibilité aux chocs faibles soutenus pour les diverses qualités de RDX sont donnés sur la figure 2 pour des formulations RDX/cire avec 30% en masse de cire. Une attention particulière a été portée à la fabrication des formulations par coulée ou par granulation-compression afin de ne pas endommager les particules de RDX et d'éliminer les porosités extra-granulaires résiduelles. La sensibilité aux chocs soutenus du VI-RDX est la plus faible. Les formulations coulée et comprimée de RS-RDX ont à peu près la même sensibilité. La formulation coulée de VI-RDX est moins sensible que la formulation comprimée. Les qualités cristallines des particules de VI-RDX permettent de mettre en évidence le rôle de la qualité des interfaces RDX/cire sur la sensibilité des formulations. Avec le RS-RDX, la sensibilité est pilotée en priorité par les inclusions de solvants et la forme des particules, ce qui masque le rôle des interfaces. Des travaux de modélisation de ces résultats expérimentaux sont en cours, en collaboration avec le CEA – Gramat, sur la base de caractérisations géométriques obtenues par microtomographie.

RÉFÉRENCES / REFERENCES

1 L. BORNE, J.-C. PATEDOYE, « Dispositif de mesure de la masse volumique de particules par flottation », Brevets FR 06 03261 (2006) et US n° 7,607,341 (2009).

[2] J. M. L. CORBEL, L. BORNE, E. FOUSSON, "Understanding the effect of RDX particle shape on shock sensitivity", *Proc. of the 41th International Pyrotechnics Seminar (EUROPYRO 2015)*, 4-7 mai 2015, Toulouse, France, à paraître.

L. BORNE, « Particules d'explosif peu sensibles aux chocs et procédé de traitement associé », Brevets FR 06 04878 (2006) et US n° 8,747,581 (2014).



Sensibilité aux chocs faibles soutenus de formulations mises en œuvre par coulée d'un mélange de cire fondue et de particules de RDX, ou par compression dans un moule de granulés obtenus par enrobage des particules de RDX avec de la cire. Quel que soit le mode de préparation des compositions, l'utilisation de VI-RDX diminue fortement la sensibilité aux chocs. *Comparison of the shock sensitivity for cast or pressed formulations made of RDX crystals mixed with wax. Whatever the process used, the use of VI-RDX significantly reduced the shock sensitivity.*

Sensitivity). However, no sensitivity predicted from microstructural characterization is available.

Thanks to optical microscopy with index matching (Figure 1) and particle density measurements [1], the Institut franco-allemand de recherches de Saint-Louis (ISL) has pointed out the importance of including solvents in explosives particles. Experiments and models also highlight the role of particle shapes [2]. Handling these parameters has made it possible for the ISL to produce a new quality of RDX particles called VI-RDX (Very Insensitive) [3]. The experimental sensitivity thresholds to weak sustained shocks for the different qualities of RDX are given in Figure 2, for RDX/wax formulations with 30% wt wax. Some particular attention was paid to the production of formulations by casting or granulation-compression in order to save the RDX particles from damaging, and remove residual extra-granular porosity. The VI-RDX sensitivity to sustained shocks was at the lowest level. RS-RDX cast and compressed formulations almost show the same sensitivity. The VI-RDX cast formulations were less sensitive than their compressed counterparts. The crystalline qualities of the VI-RDX particles made it possible to highlight the role of the RDX/wax interfaces quality on the sensitivity of the formulations. As for RS-RDX, sensitivity was primarily controlled by solvent inclusion and the particle shape, thus masking the role of the interfaces. Modeling of these experimental results is ongoing in collaboration with CEA - Gramat, based upon geometrical characterizations obtained by X-Ray microtomography.

INVESTIGATION OF POLYMER-CRYSTAL INTERFACES

omposite materials aim to combine advantageous properties of their constituent materials. As for filled polymer composites, a polymer binder matrix, for example in polybutadiene, that facilitates melt-casting, holds filler components that are particles immiscible with the matrix. These particles give the system the required property. Fillers added in high mass fractions (> 80%) may be oxidizing agents such as ammonium perchlorate particles for solid propellants, as used here. Although mechanical and thermal stabilities of highly filled polymers are being reached easily, it is nonetheless true that they are inferior to those of pure elastomer. The components physically differ in terms of crystallinity and thermal expansion, as well as chemically, in terms of cohesion and compatibility. Each surface of insoluble particle forms a phase boundary to the matrix. More particularly with wide variations in temperature, insufficient resilience leads to the detachment of filler material from the binder, and some reduced performances of the composite.

This low interfacial adhesion is investigated by solution calorimetry. Although originally designed to measure solution heats, the device is now used to measure heats of adsorption: inside the calorimeter, a sealed glass vial containing particles is submerged in pre-polymer or plasticizer liquid, and crushed to help bringing both phases into contact. The heat emitted from the immersion procedure is monitored. In order to calculate heat per unit area, particle size and area distribution are determined by laser scattering and gas adsorption measurements. The results are used to validate molecular dynamics simulations (Figure 1). Representative crystal surfaces are identified, and filled with liquid. Given that the crystallized ammonium perchlorate is anisotropic, each surface orientation from the crystal unit cell will yield some different adsorp-

→ DE L'ÉCHELLE MICROSCOPIQUE À L'ÉCHELLE MACROSCOPIQUE

ÉTUDE DES INTERFACES POLYMÈRE-CRISTAL

es matériaux composites ont pour but de combiner les propriétés bénéfiques de leurs constituants. Pour les composites polymères chargés, une matrice polymère,

par exemple en polybutadiène permettant une coulée à l'état fondu, enrobe des charges qui sont des particules non miscibles avec la matrice. Celles-ci apportent au système la propriété souhaitée. Les charges présentes en grande quantité massique (> 80 %) peuvent être des agents oxydants, comme les particules de perchlorate d'ammonium pour les propergols solides étudiés ici. Bien qu'obtenues facilement, les stabilités mécanique et thermique des polymères fortement chargés sont inférieures à celles de l'élastomère pur. Les composants diffèrent sur le plan physique vis-à-vis de la cristallinité et de l'expansion thermique, et sur le plan chimique vis-à-vis de la cohésion et de la compatibilité. Chaque surface de particule insoluble forme une interface avec la matrice. En particulier, lors de grandes variations de température, une résilience insuffisante conduit à un endommagement par décohésion et une dégradation des performances du composite.

Cette faible adhérence de l'interface est étudiée par calorimétrie. Bien qu'initialement conçu pour mesurer les chaleurs de solutions, le dispositif est utilisé ici pour mesurer la chaleur d'adsorption. Dans le calorimètre, un flacon de verre scellé contenant des particules est immergé dans le prépolymère ou dans le plastifiant, puis écrasé pour mettre en contact les deux phases. La chaleur dégagée par l'immersion est enregistrée. Pour cal-

M. M. NARDAI, M. A. BOHN, Fraunhofer Institute of Chemical Technology (ICT), Pfinztal, Germany tion energy. The energy of interactions, and the contribution of each functional chemical group are extracted from simulations at experimental conditions (pressure, temperature).

Although the heats of adsorption measured are in comparison pretty small (about one thousand times lower than heats of dissolution), the procedure shows that heats of immersion scale linearly with the total surface of the solid sample. The contribution of broken glass stirring and friction is taken into account with blank measurements in empty vials. Computer simulations allow some discrimination between the dispersive and electrostatic terms of the total adhesion energy. It turned out that dispersion interaction is dominant indeed, but similar for both polar and non-polar liquids (150 mJ/m²), while the electrostatic term is different for each crystal surface cut orientation (from 30 mJ/m² for polybutadiene to 120 mJ/m² for polyethers with polar side chains).

This leads to two further ways of adjusting the system to the desired increased interaction strength: Modification of crystal growth toward particles that present more strongly interacting surfaces, and chemical modification of the adsorbed liquid by incorporation of polar groups.

The copyright of this publication belongs to Fraunhofer ICT and the authors.





Simulation par dynamique moléculaire de l'interface entre un cristal de perchlorate d'ammonium et le liant polymère (HTPB). L'influence de l'anisotropie du cristal sur l'énergie d'adsorption est étudiée en simulant différentes orientations de l'interface.

culer la chaleur par unité de surface, la taille des particules et leur surface spécifique sont mesurées par diffraction laser et par adsorption de gaz. Les résultats sont utilisés pour la validation des simulations numériques obtenues par dynamique moléculaire (**figure 1**). Des surfaces cristallines représentatives sont identifiées et chargées de liquide. Le perchlorate d'ammonium sous forme de cristaux étant anisotrope, chaque orientation de surface par rapport à la cellule unitaire du cristal conduira à une énergie d'adsorption différente. Les énergies d'interaction et la contribution de chaque groupe chimique fonctionnel sont extraites à partir de simulations des conditions expérimentales (pression, température).

Bien que les chaleurs d'adsorption mesurées soient comparativement faibles (environ mille fois inférieures aux chaleurs de dissolution), la procédure montre que les chaleurs d'immersion évoluent linéairement avec la surface totale de l'échantillon solide. La contribution de l'agitation et du frottement des débris de verre est prise en compte par des mesures réalisées avec des flacons vides. Des simulations numériques permettent de différencier les composantes dispersives et électrostatiques de l'énergie totale d'adhésion. Il s'avère que l'interaction dispersive est dominante, mais du même ordre pour des liquides polaires ou non polaires (150 mJ/m²), alors que la composante électrostatique est différente pour chaque orientation de surface du cristal (variant de 30 mJ/m² pour le polybutadiène à 120 mJ/m² pour des polyéthers contenant des chaînes latérales polaires).

Cela conduit à deux possibilités pour optimiser un matériau composite en augmentant la force d'interaction : modifier la croissance cristalline des particules qui présentent des surfaces à plus forte interaction, et modifier chimiquement le liquide absorbé en y incorporant des groupes polaires.

OUTIL DE SIMULATION Mésoscopique Pour explosifs à base de tatb

H. TRUMEL, F. BERNARD, CEA – Le Ripault J.-B. GASNIER, F. WILLOT, D. JEULIN, Centre de morphologie mathématique, Mines ParisTech, Fontainebleau, France es explosifs à base de TATB présentent un comportement thermomécanique complexe, incluant une dilatation thermique non linéaire et irréversible, communément connue sous le nom de *ratchet growth*. Le but de ce

travail est de contribuer à la compréhension de ce comportement au moyen de simulations au niveau microstructural. Un outil numérique combinant un ensemble de modèles 3D de microstructure virtuelle et un outil numérique par transformée de Fourier (FFT) est donc en cours d'élaboration, et est appliqué à un explosif pressé à base de TATB et d'une faible proportion de liant polymère **[1]**.

Compte tenu de la complexité du matériau et de ses mécanismes de déformation, une approche prudente est employée, commençant par une description simplifiée de l'explosif comme polycristal parfait. Ce dernier est représenté à l'aide d'un modèle de pavage de Johnson-Mehl, comprenant un processus spatio-temporel aléatoire de nucléation et un processus anisotrope déterministe de croissance des grains (figure 1).

En utilisant les propriétés thermoélastiques linéaires de monocristaux de TATB issues de données bibliographiques **[2,3]**, le code FFT permet la détermination des champs locaux de déformations et de contraintes sous l'effet des déformations, contraintes ou températures macroscopiques appliquées (figure 2), aussi bien que des propriétés thermoélastiques macroscopiques. L'outil numérique est validé par comparaison aux modèles exacts d'encadrement et d'estimation (auto-cohérents) existants. Les modules élastiques et de dilatation thermique prédits sont surestimés, ce qui confirme la nécessité de tenir compte des mécanismes de fragilisation aux frontières des grains.

FROM MICROSCALE TO MACROSCALE

A MESOSCOPIC SIMULATION TOOL FOR TATB-BASED EXPLOSIVES

ATB-based explosives exhibit complex thermo-mechanical behaviour, including nonlinear and irreversible thermal expansion ("ratchet growth"). The purpose of this work is to contribute to the comprehension of this behaviour through microstructural level simulations. A numerical tool is therefore being developed, which includes 3D virtual microstructure modeling and a Fourier-based (FFT) numerical tool, to be applied to a pressed TATB-based explosive containing a small fraction of a polymeric binder **[1]**.

Considering the complexity of the material and its deformation mechanisms, a careful approach is followed, wich begins with a simplified description of the explosive as a perfect polycrystal. The latter is represented by means of a Johnson-Mehl tessellation model, including a space-time random grain nucleation process and deterministic anisotropic grain growth (Figure 1). Using TATB single crystal thermoelastic properties from bibliographic data [2,3], the FFT code allows to determine local stress and strain fields in response to applied macroscopic strains, stresses or temperature (Figure 2), as well as macroscopic thermoelastic properties. The numerical tool is fully validated by comparing its predictions to those of existing exact,

On s'intéresse d'abord à l'adjonction du liant polymère. La morphologie de ce dernier au sein de l'explosif étant mal connue, on le suppose réparti sous forme d'une couche d'épaisseur uniforme



Figure 1

(a) Observation au microscope optique de la microstructure du TATB et (b) exemple de microstructure prédite par le modèle de pavage restituant la taille et la forme des grains.

(a) Optical microscope view of the TATB microstructure and (b) example of microstructure predicted by the tessellation model, rendering the average grain size and elongation.

bounding or estimation (self-consistent) models. Predicted elastic and thermal expansion moduli are grossly overestimated, which reinforces the need to account for grain boundaries softening mechanisms.

The introduction of the binder is examined first. Owing to limited morphological knowledge, the binder is assumed as a uniform thickness layer around every TATB grain. Measured macroscopic properties can only be retrieved through a large overestimation of binder thickness or through a large underestimation of binder properties. It is therefore concluded that the TATB grains are not completely coated by the binder, binder-free grain boundaries thus acting as intergranular microcracks.

Ongoing work aims at identifying the density of existing microcracks populations in the entourant chaque grain de TATB (figure 2). Les propriétés réelles de l'explosif ne peuvent dans ce cas être restituées qu'en surestimant largement l'épaisseur de liant, ou en sous-estimant largement ses propriétés. On en conclut que le liant n'enrobe pas totalement les grains, les joints de grains non enrobés jouant alors le rôle de microfissures intergranulaires.

Les travaux en cours consistent à identifier la densité existante de microfissures présentes dans le matériau initial, tandis que les travaux futurs viseront à inclure un modèle permettant de décrire l'évolution des populations de microfissures, c'est-à-dire de l'endommagement mécanique de l'explosif.

RÉFÉRENCES / REFERENCES

A. AMBOS, F. WILLOT, D. JEULIN, H. TRUMEL, "Numerical modeling of the thermal expansion of an energetic material", Int. J. Solids Struct., 60-61, p. 125-139 (2015).

[2] D. BEDROV, O. BORODIN, G. D. SMITH, T. D. SEWELL, D. M. DATTELBAUM, L. L. STEVENS, "A molecular dynamics simulation study of crystalline 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene as a function of pressure and temperature", J. Chem Phys., 131, 224703 (2009).

[3] J. SUN, B. KANG, C. XUE, Y. LIU, Y. XIA, X. LIU, W. ZHANG, "Crystal State of 1,3,5-Triamino-2,4,6-Trinitrobenzene (TATB) Undergoing Thermal Cycling Process", J. Energetic Mat., 28, p. 189-201 (2010).



Figure 2

Exemple de champ hétérogène de pression, prédit par la simulation, dans une microstructure soumise à un chargement thermique uniforme. Example of heterogeneous pressure field, predicted by simulation, in a microstructure submitted to a uniform thermal load.

material in its initial state, whereas future work will aim at including a model capable to describe the evolution of microcrack populations, *i.e.* of explosive mechanical damage.

CHARACTERIZING MECHANICAL DAMAGE IN ENERGETIC MATERIALS

n partnership with the Atomic Weapons Establishment, QinetiQ and UK MOD, scientists at the Cavendish Laboratory in the Physics Department of the University of Cambridge are studying the damage mechanisms of energetic materials.

The energetic materials under consideration are particle composites formed of energetic crystalline filler particles bound in a polymer matrix. A key observation is that when deformed, it is the significantly more compliant polymer component that accommodates most of the strain. It follows that the matrix rheological properties dominate the response of the composite, despite the fact that it is the minor volume component (typically < 20%). Correspondingly, the composites demonstrate bulk mechanical properties which are highly sensitive to temperature and strain-rate.

The so-called glass transition is a defining characteristic of polymers and denotes the boundary between a stiff, brittle, glass-like response (low temperatures, or equivalently by the doctrine of time-temperature superposition theory, high strain rates) and a soft, extensible, rubber-like response (high temperatures or low strain rates). Energetic materials are mostly in rubber-like state, and under such circumstances, the observed mode of failure is typical loss of adhesion between the polymer and stiff filler particles (Figure 1).





Évolution de l'endommagement en fonction de la vitesse de déformation (faible, rond orange; rapide, rond bleu). La déformation de l'échantillon à énergie mécanique donnée conduit à beaucoup plus d'endommagement lorsque la vitesse de déformation est faible [2].

An insightful top-down approach is to subject individual samples to compression at low and high strain-rates, and then to measure residual properties. Graphics in **Figure 2** illustrate that imparting a fixed quantity of mechanical energy at a low strain rate results in greater damage than at a high strain rate. Once more this can be explained due to the rheological properties of the polymer matrix.



Figure 1

Several failure modes with respect to loading conditions: (a) A polymer bonded energetic material damaged above the glass transition condition of the polymer matrix (high temperature or equivalently low strain-rate) exhibits intergranular adhesive failure. (b) Damaged below the glass transition condition (low temperature or equivalently high strain-rate) it exhibits transgranular cohesive failure [1].

Différents modes de rupture en fonction de la sollicitation : (a) Matériau composite énergétique endommagé lors d'un essai réalisé au-dessus de la transition vitreuse de la matrice polymère (haute température ou faible taux de déformation) et présentant une rupture adhésive intergranulaire. (b) Le même matériau endommagé en dessous de la transition vitreuse (basse température ou taux de déformation) étevé) et présentant une rupture transgranulaire cohésive [1].

D. WILLIAMSON, Cavendish Laboratory, United Kingdom

Bottom-up interfacial properties can be probed by performing miniaturized pull-off experiments in calibrated atomic force microscopes providing a direct measure of the adhesive bond intrinsic strength (Figure 3).

Taken holistically, careful experiments performed across a wide range of length and time scales and integrated with computational modelling can account for damage formation and provide valuable information for planning the safe storage and use of energetic materials.

AWE © Crown Owned copyright (2016)

REFERENCES / RÉFÉRENCES

1 D. M. WILLIAMSON, S. J. P. PALMER, W. G. PROUD, R. GOVIER, "Brazilian disc testing of a UK PBX approaching the glass transition condition", Proc. of Conference on Shock Compression of Condensed Matter, 28 June-3 July 2009, Nashville, Tennessee, USA, AIP Conf. Proc., 1195, p. 494 (2009).

[2] R. L. BODDY, P. J. GOULD, A. P. JARDINE, D. M. WILLIAMSON, "Damage in Polymer Bonded Energetic Composites: Effect of Loading Rate", J. Dynamic Behavior of Mater., 2, p. 157-165 (2016).

3 D. M. WILLIAMSON, N. R. HAMILTON, S. J. P. PALMER, A. P. JARDINE, C. LEPPARD, "Thermodynamic work of adhesion measurements of polymer bonded explosive constituents via the Wilhelmy plate technique and their application to AFM pull-off experiments", Proc. of the 2nd Joint Conference APS Topical Group on Shock Compression of Condensed Matter (APS-SCCM) and the International Association for the Advancement of High Pressure Science and Technology (AIRAPT), 7-12 July 2013, Seattle, Washington, USA, Journal of Physics: Conference Series, 500, 112068 (2014).

DE L'ÉCHELLE MICROSCOPIQUE À L'ÉCHELLE MACROSCOPIQUE

CARACTÉRISATION DE L'ENDOMMAGEMENT DANS LES MATÉRIAUX ÉNERGÉTIQUES



n partenariat avec l'AWE (Atomic Weapons Establishment), la société QinetiQ et le ministère de la Défense du Royaume-Uni, des scientifiques du laboratoire Cavendish du dépar-

tement de physique de l'université de Cambridge étudient les mécanismes d'endommagement des matériaux énergétiques.

Les matériaux énergétiques étudiés sont des composites formés de charges particulaires énergétiques cristallines enrobées dans une matrice polymère. Nous avons observé que lorsque ces matériaux sont sollicités thermo-mécaniquement, le polymère enregistre la majeure partie de la déformation. En conséquence, les propriétés rhéologiques de la matrice gouvernent majoritairement la réponse du composite malgré sa présence en faible quantité dans le composite (typiquement < 20%). Pour les mêmes raisons, les explosifs composites ont des propriétés mécaniques qui sont très sensibles à la température et à la vitesse de déformation.

La transition vitreuse est une caractéristique déterminante des polymères. Elle délimite le domaine dans lequel le matériau a une réponse rigide et fragile, tel du verre (aux basses températures ou, d'après la théorie d'équivalence temps-température, aux vitesses de déformation élevées), du domaine où le matériau est plus souple et son comportement plus «ductile», à l'image du caoutchouc (aux températures élevées ou aux faibles vitesses de déformation). Les matériaux énergétiques se trouvent généralement à l'état caoutchouteux et,



Figure 3

(a) Silicon nitride AFM cantilever functionalized with a spherical cap of fluoropolymer binder material, radius of curvature 24.5 microns. The pull-off force is measured after contacting with a substrate of interest. (b) Pull-off force is compared to calculated values of cap size, allowing to measure the free surface energies of the fluoropolymer and substrate [3].

(a) Pointe du microscope à force atomique fonctionnalisée par une capsule de liant fluoropolymère de rayon 24,5 microns. Après mise en contact de la pointe avec un substrat, la force d'arrachement est mesurée. (b) Évolution de la force d'arrachement en fonction de la taille de la capsule. La méthode permet de déterminer les énergies libres surfaciques du fluoropolymère et du substrat [3]

dans de telles circonstances, le mode de rupture généralement observé est la perte d'adhérence entre le polymère et les charges particulaires rigides (figure 1).

Une démarche instructive (approche top-down) consiste à soumettre des éprouvettes à une compression à taux de déformation faible ou élevé, puis à mesurer leurs propriétés résiduelles. Les courbes présentées sur la figure 2 montrent que pour une même quantité d'énergie mécanique appliquée au matériau, le dommage est plus élevé à faible vitesse de déformation qu'à vitesse de déformation élevée. Cette observation s'explique à nouveau par les propriétés rhéologiques de la matrice polymère.

Les propriétés des interfaces peuvent être mesurées (approche bottom-up) en effectuant des expériences d'arrachement à l'aide d'un microscope à force atomique étalonné et offrant une mesure directe de la force intrinsèque de la liaison adhésive (**figure 3**).

Plus globalement, la conduite d'expériences minutieuses sur une large gamme d'échelles de longueur et de temps et leur intégration par modélisation informatique permettent d'expliquer la formation de l'endommagement et fournissent des informations précieuses pour sécuriser les conditions de stockage et d'utilisation des matériaux énergétiques.

MODÉLISATION ET PRÉVISION DES SENSIBILITÉS MÉCANIQUES DE COMPOSÉS EXPLOSIFS

a quête d'explosifs plus sûrs et plus puissants repose actuellement sur la conception par les chimistes organiciens de nouvelles cibles synthétiques et sur l'évaluation théorique de leurs performances. Malheureusement, un grand nombre de composés nouvellement synthétisés se sont montrés trop instables pour des applications pratiques. Dans ce contexte, un modèle qui pourrait prédire la stabilité d'une molécule avant sa synthèse réelle serait d'un intérêt primordial. Cet article donne un aperçu des nombreuses tentatives réalisées au cours des cinquante dernières

tatives réalisées au cours des cinquante dernières années dans le but de développer un tel outil et décrit les progrès importants réalisés au cours des dernières années. Le critère de stabilité le plus utilisé pour les explosife est la sensibilité à l'impact, caractérisée

explosifs est la sensibilité à l'impact, caractérisée par la hauteur h_{50} de laquelle un poids chutant sur l'échantillon déclenche une décomposition observable avec une probabilité de 50%. Il a été remarqué depuis plus de cinquante ans que h_{50} a tendance à diminuer lorsque la proportion d'atomes d'oxygène augmente dans la molécule. Toutefois, il s'est avéré extrêmement difficile d'aller plus loin, en dépit d'efforts considérables consacrés au développement d'approches alternatives, tirant parti des progrès de la chimie quantique et des méthodes d'apprentissage automatique [1]. Ces études sont principalement empiriques. Très peu d'approches physiquement fondées ont été envisagées. Ces dernières peuvent être classées en trois groupes en fonction de l'hypothèse sous-jacente concernant l'étape déterminante du processus de décomposition. Comme illustré sur la figure 1, certaines études supposent que h_{50} est déterminée soit par la capacité du matériau à développer des points chauds (1), soit par le transfert d'énergie de phonons excités mécaniquement vers des modes vibrationnels d'élongation de liaisons préalables à leur rupture (2). Cependant, la plupart d'entre elles supposent que la sensibilité dépend principalement de l'énergie de dissociation de liaison la plus faible (3). Bien que ces approches soient théoriquement attrayantes, elles ne sont pas parvenues à fournir des prévisions utiles.

Par conséquent, une approche basée sur une quatrième hypothèse concernant l'étape déterminante a été introduite (4). Celle-ci considère que les impacts mécaniques conduisent à la formation de centres réactifs où des réactions exothermiques apparaissent [2]. La sensibilité dépend alors de la capacité de ce processus de décomposition à se propager au sein du matériau avant que l'énergie libérée par les réactions ne soit dissipée. En d'autres termes, elle est déterminée par la valeur de la constante de vitesse de cette propagation, un paramètre qui peut être estimé à partir de la quan-



Figure 1

D. MATHIEU.

T. ALAIME,

CEA – Le Ripault

Quatre étapes du processus d'initiation qui pourraient affecter les valeurs de sensibilité : (1) la formation de points chauds après l'impact ; (2) le transfert d'énergie des phonons vers des modes d'élongation de liaisons ; (3) la rupture de liaisons ; (4) la propagation du processus de décomposition aux molécules voisines.

Four steps in the initiation process that might affect sensitivity values: (1) hot spot formation following impact; (2) energy transfer from phonons to stretching vibrations; (3) bond dissociation; (4) propagation of the decomposition process to neighboring molecules.

tité d'énergie libérée au cours de la décomposition et des énergies d'activation mises en jeu. Contrairement aux modèles précédents, cette méthode offre des prévisions fiables pour des centaines de matériaux à partir de quelques paramètres seulement [3]. Par conséquent, elle représente une étape importante dans la compréhension de la sensibilité. Comme le montre la figure 2, elle peut être utilisée pour illustrer pour la première fois le compromis performance-sensibilité auquel sont confrontés les concepteurs d'explosifs.

RÉFÉRENCES / REFERENCES

[11] D. MATHIEU, "Toward a physically based quantitative modelling of impact sensitivities", *J. Phys. Chem. A*, **117**, p. 2253-2259 (2013).

[2] D. MATHIEU, T. ALAIME, "Predicting impact sensitivities of nitro compounds on the basis of a semiempirical rate constant", J. Phys. Chem. A, 118, p. 9720-9726 (2014).

[3] D. MATHIEU, T. ALAIME, "Impact sensitivities of energetic materials: Exploring the limitations of a model based only on structural formulas", J. Mol. Graph. Model, 62, p. 81-86 (2015).

IMPACT MODELLING

MODELLING AND PREDICTION OF MECHANICAL SENSITIVITIES FOR EXPLOSIVE COMPOUNDS

he quest for safer and more powerful explosives currently relies on the design of new synthetic targets by organic chemists and the theoretical evaluation of their performances.

Unfortunately, a large number of newly synthesized compounds prove too unstable for practical applications. In this context, a model that could predict the stability of a molecule before its actual synthesis would be of utmost interest. This article provides a brief review of the many attempts to develop such a tool over the last 50 years, and describes significant progress made in recent years.

The most popular stability criterion for explosives is impact sensitivity, as characterized by the height h_{50} that a given weight must be dropped onto a sample to trigger an observable decomposition with a 50% probability. It has been noted for more than 50 years that h_{50} tends to decrease as molecules with a larger fraction of oxygen atoms are considered. However, it proved extremely difficult to progress further, despite tremendous effort devoted to the development of alternative relationships, taking advantage of quantum chemical data and machine learning techniques as they became available [1]. These studies are mostly empirical. Very few physically grounded approaches have been considered. They may be classified in three groups depending on the underlying assumption regarding the determining step of the decomposition process. As illustrated on Figure 1, some studies assume





 h_{50} to be determined by the ability of the material to develop hot spots (1) or by the energy transfer from the mechanically excited phonons to vibrational stretching modes preceding bond cleavage (2). However, most of them assume that it depends primarily on the lowest bond dissociation energy (3). While these approaches are theoretically appealing, they fail to provide useful predictions.

Therefore, an approach based on a fourth assumption regarding the determining step is introduced (4). The assumption considers that mechanical impacts lead to the formation of reactive centers where exothermic reactions take place [2]. The sensitivity depends on the ability of this decomposition process to propagate to the surroundings before the energy released by the reactions dissipates away. In other words, it is determined by the value of the rate constant for this propagation, a parameter which may be estimated from the energy content and activation energies. In contrast to earlier models, this method yields reliable predictions for hundreds of materials on the basis of some parameters only [3]. Therefore, it represents a significant step forward in the understanding of sensitivity. As shown on Figure 2, it may be used to illustrate for the first time the sensitivity versus performance trade off.

MODELLING THE IGNITION OF EXPLOSIVES BY PINCH

o ensure the safe storage and deployment of high explosives one must understand the mechanisms that cause ignition and reaction growth in response to accidental impacts, one of which is pinch. Shear, friction and confinement affect the response. Atomic Weapons Establishment (AWE) deploys low speed impact tests to understand the physics. In a supporting modelling effort, the High Explosive Response to MEchanical Stimulus (HERMES) material model [1], jointly developed by the Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL) and AWE, has been integrated into the Lagrangian finite element hydrocode LS-Dyna and the Arbitrary Lagrangian Eulerian (ALE) code named ALE3D. This has been applied to investigate the pinch.

HERMES includes a strength model, a model for porosity generated via damage, and calculates the growth of an ignition parameter derived from the stresses and plastic strain rate. Following ignition, HERMES determines the rate of reaction depending on the current reaction extent, the spe-



Schematic of drop test. A cylindrical sample of explosive is submitted to compression between a fixed anvil (bottom) and a free-falling mass (top). Schéma du test de chute. Un échantillon cylindrique d'explosif (ici en orange) est comprimé entre une enclume fixe (en bas) et une masse en chute libre (en haut).

cific surface area, and pressure. If shocks develop, an entropy-based reaction ensues.

Pinch is modelled by LS-Dyna Lagrangian finite element simulations of an idealized schematic drop test (Figure 1). A steel drop-hammer with a flat bottom face is dropped onto the flat upper end of the cylindrical explosive samples, which stand on a solid steel anvil. The configuration is easier

SIMULATION DES IMPACTS

J. P. CURTIS,

Atomic Weapons

United Kingdom

J. E. REAUGH,

(LLNL), USA

Lawrence Livermore National Laboratory

.....

Establishment (AWE),

MODÉLISATION DE L'ALLUMAGE DES EXPLOSIFS SOUMIS À UN ÉCRASEMENT

our assurer la sécurité en stockage et lors du déploiement des explosifs, il est nécessaire de comprendre les mécanismes qui provoquent l'allumage et la croissance de la réaction suite à un choc accidentel. Parmi ces sollicitations, on trouve les cas d'écrasement. Le cisaillement, le frottement et le confinement affectent la réponse réactive. L'Atomic Weapons Establishment (AWE) réalise des essais d'impact à faible vitesse pour en comprendre la physique. Contribuant à l'effort de modélisation, le modèle HERMES (High Explosive Response to MEchanical Stimulus) [1], développé par le Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL) et l'AWE, a été intégré dans le code hydrodynamique aux éléments finis lagrangien LS-Dyna et dans le code ALE3D (Arbitrary Lagrangian Eulerian). Ce modèle a été utilisé pour étudier l'écrasement.

HERMES comprend un modèle de comportement mécanique et un modèle reliant l'endommagement à la porosité. Il permet de calculer le critère d'allumage à partir de la contrainte et du taux de déformation plastique. Après l'allumage, HERMES détermine la vitesse de réaction en fonction des niveaux de réaction, de la surface spécifique et de la pression. Si des chocs se forment, un modèle basé sur l'entropie permet de prévoir la transition à la détonation.

L'écrasement est modélisé ici sous la forme d'une chute, simulée avec LS-Dyna (figure 1). Une masse plate en acier est lâchée sur l'extrémité supérieure plane d'un échantillon cylinto model than in the Steven Test, as for example in **[1,2]**. Two samples of explosives are considered: PETN, of density 1.4 g/cc, and an HMX-based explosive. The PETN was chosen, owing to its well-known sensitivity, at such density. Drawing on experiments at the Cavendish Laboratory **[3]**, the sample is made tiny compared with the drop hammer and anvil. It is very finely meshed, which requires quite fine adjacent meshes for the hammer and anvil as well. A coefficient of friction 0.4 is applied between the explosive and surrounding material. The growth of the ignition parameter and the reaction progress are predicted.

As for the PETN, an impact speed as low as 1 m/s causes violent reaction in most of the explosive before mesh distortion halts the run. Figure 2a shows the ignition parameter contours at a time of 120 µs in the sample. There is marked similarity with [1], in that the highest ignition parameter values are associated with shear resulting from friction as the explosive is crushed and flows radially. Just 3 µs later (Figure 2b), the map of the extent of reaction reveals two separate main areas of fully reacted material. The most violent reaction occurs away from the axis of symmetry as in [1] and [3]. As for the HMX-based explosive, even up to 10 m/s impacts, the response is much less violent than for PETN, reflecting the well-known relative sensitivities of these explosives.

Modelling pinch has been shown to be feasible and to offer insights into the explosive pinch. Friction and shear greatly affect the response. Future work will explore the use of ALE3D, meshing refinements, parametric studies, and 3D modelling, including asymmetric parameter variations. JER's work was performed under the auspices of the US

DOE by LLNL under Contract DE-AC52-07NA27344.

© British Crown Owned Copyright 2016/AWE

RÉFÉRENCES / REFERENCES

[1] J. P. CURTIS, J. E. REAUGH, "Modelling violent reaction following low speed impact on confined explosives", *Proc. of the AIP Conference on Shock Compression of Condensed Matter*, Chicago, USA, June 26-July 1, 2011, **1426**, p. 669-672 (2012).

[2] C. GRUAU, D. PICART, R. BELMAS, E. BOUTON, F. DELMAIRE-SIZES, J. SABATIER, H. TRUMEL, "Ignition of a confined high explosive under low velocity impact", *Int. J. Impact Engng.*, **36**, p. 537-550 (2009).

[3] J. E. FIELD, G. M. SWALLOWE, S. N. HEAVENS, "Ignition mechanisms of explosives during mechanical deformation", *Proc. Roy. Soc. London*, A382, p. 231-244 (1982).



Figure 2

(a) Numerical simulation of the drop test. The axis of symmetry (dashed line on figure 1) is here on the left. Ignition threshold showing deformed mesh at 120 µs with a range of ignition parameter 0 (blue) to 352 (red). (b) Contours of reaction extent at 123 µs. Blue is 0 (no reaction) and red is 1 (fully reacted).

Simulation de l'essai de chute. L'axe de symétrie (ligne pointillée sur la figure 1) se trouve ici à gauche. (a) Critère d'allumage montrant le maillage déformé après 120 µs sur une plage allant de 0 (bleu) à 352 (rouge). (b) Localisation des réactions après 123 µs. La couleur bleue correspond à 0 (aucune réaction) et le rouge à la valeur 1 (entièrement réaqi).

drique d'explosif disposé sur une enclume en acier massif. Cette configuration est plus simple à modéliser que celle, par exemple, du Steven-test [1,2]. Deux explosifs sont considérés : la pentrite (PETN) de densité 1,4 g/cm³ et un explosif à base de HMX. Le PETN a été choisi en raison de sa sensibilité à cette densité. Se basant sur des expériences du laboratoire Cavendish [3], l'échantillon est de taille très inférieure à celle de la masse et de l'enclume. Il est très finement maillé, ce qui nécessite aussi des mailles assez fines dans la masse et l'enclume. Un coefficient de frottement de 0,4 est appliqué entre la matière explosive et l'acier. Le critère d'allumage et la propagation de la réaction sont prédits.

Pour le PETN, une vitesse d'impact aussi faible que 1 m/s provoque une réaction violente dans tout l'échantillon avant l'arrêt du calcul par distorsion du maillage. La figure 2a représente les contours du critère d'allumage dans l'échantillon après 120 µs. Tout comme dans **[1]**, un critère d'allumage est associé au cisaillement dû au frottement, lorsque l'explosif est écrasé et s'écoule radialement. Seulement 3 µs plus tard, la réaction s'est développée (**figure 2b**), et deux zones apparaissent où le matériau a complètement réagi. La réaction la plus violente se produit loin de l'axe de symétrie comme observé dans **[1]** et **[3]**. Pour l'explosif à base de HMX, la réponse est beaucoup moins violente que pour le PETN, même pour des vitesses d'impact allant jusqu'à 10 m/s, ce qui corrobore les sensibilités relatives connues pour ces deux explosifs.

Il est maintenant possible de modéliser l'écrasement. Le frottement et le cisaillement affectent grandement la réponse réactive lors de l'impact. Les travaux futurs permettront d'utiliser ALE3D et d'explorer les méthodes de remaillage. Des simulations 3D sont envisagées ainsi que des études paramétriques.

MAILLAGE ET REMAILLAGE ADAPTATIF APPLICATION AUX IMPACTS À FAIBLE VITESSE

H. BOROUCHAKI, A. CHEROUAT, Université de technologie de Troyes, France D. PICART, S. CAMUS, CEA – Le Ripault

ne condition essentielle de la simulation numérique par éléments finis des problèmes physiques exprimés en termes d'équations aux dérivées partielles est de construire un maillage adéquat du domaine [1]. On peut montrer que la qualité de la solution dépend fortement de la qualité de ce maillage. En particulier, la solution optimale peut être obtenue à partir d'un maillage régulier du domaine. La solution numérique obtenue avec le maillage initial est généralement analysée a posteriori à l'aide d'un estimateur d'erreurs qui indique si la solution est exacte. La qualité de la solution est étroitement liée à la façon dont le maillage correspond au phénomène physique sous-jacent à travers la taille de l'élément fini ou le degré des fonctions d'interpolation. À cette fin, un maillage adapté doit être généré. Une méthode h-adaptative ajuste alors le maillage à la solution en le diminuant ou en le grossissant localement. Une méthode p-adaptative ajuste les espaces fonctionnels d'éléments sélectionnés en augmentant le degré des polynômes d'inter-



Impact d'un projectile sur une plaque en acier. La méthode détecte automatiquement l'arrivée du projectile et raffine le maillage dans la zone de contact prévue.

Impact of a projectile on steel plate. The method automatically detects the target/projectile contact zone. Meshing is refined by the algorithm.



Figure 2

Vue en coupe du maillage, en cours d'impact, dans la tranche de la plaque et sous l'action de la pénétration du projectile du haut vers le bas. Déformation de la plaque, érosion et remaillage adaptatif. La taille des mailles s'adapte automatiquement en fonction de la sévérité de la sollicitation.

Cut view of the plate submitted to a top-to-bottom penetration of the projectile. Deformation of the plate, erosion and adaptive remeshing. The mesh size distribution is automatically optimized with respect to the loading. polation locaux. Enfin, une méthode hp-adaptative combine les méthodes précédentes en diminuant ou en grossissant localement le maillage dans certaines parties du domaine et en augmentant le degré des fonctions dans d'autres [2]. Une méthode h-adaptative est employée ici. Une estimation d'erreur a posteriori basée sur l'erreur d'interpolation dépendant de la hessienne de la solution est adaptée à l'objectif. Plusieurs études font référence à ces estimateurs d'erreur [3]. Soit u la solution exacte du champ scalaire, u_h le champ calculé à partir d'un maillage donné et $\pi_{i}(u)$ le champ interpolé à partir du même maillage. Pour des problèmes elliptiques, le lemme de Céa $||u-u_h|| \le C ||u-\pi_h(u)||$, où *C* est une constante fonction du domaine de calcul, est vérifié. En d'autres termes, en contrôlant l'erreur d'interpolation, on peut contrôler l'erreur de la solution éléments finis. Soit K un élément de maillage et soit h_{K} sa taille, on peut montrer [3] que:

$$\forall x \in K \qquad ||u(x) - \pi_h(u(x))||_{\infty} \leq \frac{9}{32} M h^2_{12}$$

avec $M = \max_{x \in K} (\max_{||v||=1} |v^T H_u(x)v|)$, où v est une direction d'unité quelconque et $H_u(x)$ la hessienne de u en x. Cette relation permet de borner l'erreur d'interpolation en contrôlant la taille de la maille :

$$h_k \leq \frac{4}{3} \sqrt{\frac{2}{M}} \varepsilon \implies \forall x \in K ||u(x) - \pi_h(u(x))||_{\infty} \leq \varepsilon$$

La hessienne de la solution exacte u est approximée par la hessienne de la solution calculée u_h .

Une nouvelle méthode de remaillage local est proposée. Elle est basée sur la suppression des segments ou leur raffinement combiné avec une procédure de modification de la topologie, basée sur la méthode de Delaunay pour construire, à partir d'un maillage donné, un nouveau maillage conforme à une carte de taille donnée. Soit h une fonction de taille définie sur un domaine Ω dans R^3 . Un tenseur métrique riemannien M est défini à partir de h par $M = \frac{1}{h^2} I^3$, qui transforme la taille *h* en unité dans toutes les directions. Le maillage de Ω respectant la carte de taille *h* est un maillage de Ω associé à la métrique *M*, dans laquelle les longueurs de tous les segments sont égales à l'unité. Le principe général de cette méthode comprend deux étapes itératives principales: le maillage des bords libres (avec suppression des «petits» segments et fractionnement des «grands» pour améliorer la qualité des éléments) et l'optimisation du maillage.

Cette stratégie de remaillage adaptatif est appliquée au calcul de l'allumage d'un explosif protégé par une plaque d'acier sous l'impact d'un projectile (400 m/s). Le confinement en acier est modélisé avec un comportement élasto-plastique. La figure 1 montre le maillage adapté en cours de déformation de la plaque. Enfin, une coupe de la plaque de confinement est montrée sur la figure 2, où l'on peut observer le raffinement du maillage suite à l'érosion sous de grandes déformations plastiques.

RÉFÉRENCES / REFERENCES

[1] P. G. CIARLET, The Finite Element Method for Elliptic Problem, North Holland, 1978.

[2] M. AINSWORTH, B. SENIOR, "Aspects of an adaptive hp-finite element method: adaptive strategy, conforming approximation and efficient solvers", *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 150, p. 65-87 (1997).

[3] H. BOROUCHAKI, D. CHAPELLE, P. L. GEORGE, P. LAUG, P. FREY, « Estimateurs d'erreur géométriques et adaptation de maillages », in : P. L. George (sous la direction de), Maillage et adaptation, Traité mécanique et ingénierie des matériaux, Hermès, France, p. 279-310, 2001.

IMPACT MODELLING

MESHING AND REMESHING ADAPTIVITY APPLICATION IN LOW VELOCITY IMPACTS



n essential prerequisite of the numerical finite element simulation of physical problems in terms of partial differential equations, is the construction of an adequate mesh

[1]. It may be shown that the quality of the solution greatly depends on the shape quality of the mesh of the domain. In particular, the optimal solution at this stage can be obtained with some regular mesh of the domain. Generally, the numerical solution obtained with the initial mesh is *a posteriori* analyzed via an appropriate error estimate which, based on the quality of the solution, indicates whether the solution is accurate or not. The quality of the solution is closely linked to how the mesh corresponds with the underlying physical phenomenon, through the dimensions of the finite element or the extent of trial interpolation functions. To this end, an adapted mesh needs to be generated. An adaptive h-method adjusts the mesh to the solution by locally refining or coarsening the mesh. An adaptive p-method adjusts the trial function spaces on selected elements by increasing the dimension of local spaces. Finally, an adaptive hp-method combines the h- and p-methods by refining or coarsening the mesh locally in some parts of the domain, and enlarging the trial function spaces in other parts [2]. Here, the focus is on the adaptive h-method. An error estimate, a posteriori based on the interpolation error depending on the hessian of the solution seems to perfectly match the objectives. A number of studies are referring to such estimates [3]. Let u be the exact solution of the scalar field, u_h the field computed from a given mesh, and $\pi_h(u)$ the field

interpolated from the very same mesh. For elliptic problems, the Cea's lemma $||u-u_h|| \le C ||u-\pi_h(u)||$, where *C* is a constant depending on the computational domain, is verified. In other words, by controlling the interpolation error first, you can control the finite element error. Let *K* be a mesh element and h_K be its size, it may be shown that [3]:

$$\forall x \in K \qquad \left| \left| u(x) - \pi_h(u(x)) \right| \right|_{\infty} \le \frac{9}{32} M h^2_{K}$$

with $M = \max_{x \in K} (\max_{||v||=1} |v^T H_u(x)v|)$, where v is any unit direction, and $H_u(x)$ the hessian of u at x. This relation helps bounding the interpolation error by controlling the mesh size:

$$h_k \leq \frac{4}{3} \sqrt{\frac{2}{M}} \varepsilon \implies \forall x \in K ||u(x) - \pi_h(u(x))||_{\infty} \leq \varepsilon$$

The hessian of the exact solution u is approximated by the hessian of the computed solution u_h .

A new local remeshing method is thus proposed. It is based on edge removing and edge-based refinement combined with a Delaunay-based topology modification procedure so as to construct, starting from a given mesh, a new mesh complying with a given size map. Let *h* be a size function defined on a domain Ω in \mathbb{R}^3 . A Riemannian metric tensor M is defined from *h* by $M = \frac{1}{h^2}I^3$, which transforms the size *h* to unit in all directions. The mesh of Ω respecting the size *h* is a mesh of Ω equipped with the metric *M*, in which the length of all edges is equal to the unit. The basis of the method employed includes two main iterative steps: the mesh edge processing (with the removal of "small" edges, and splitting of "large" ones, as topology modifications so as to improve the element shape quality) and meshing optimization.

This adaptive remeshing strategy is applied to the computing of ignition of a confined explosive submitted to an impact (400 m/s). The confinement is modelled with an elasto-plastic behavior. **Figure 1** shows the adaptive mesh modifying process, under projectile and plastic strain. In **Figure 2**, the cut view illustrates the mesh refining, following erosion due to high deformation.

SIMULATION DE LA FISSURATION Sous choc

a prédiction de l'allumage de matériaux énergétiques soumis à des impacts dits à basse vitesse est un enjeu important pour la sécurité des structures pyrotechniques. Le modèle actuel [1] explique l'allumage de matériaux énergétiques par l'échauffement dû au frottement des lèvres de fissures et de microfissures, après que la structure a subi des dommages. Simuler numériquement l'allumage nécessite ainsi une modélisation précise des mécanismes de dégradation.

Ces mécanismes de dégradation (figure 1) peuvent être représentés à une échelle fine ou à une échelle dite macroscopique. Dans le premier cas, il faut s'enquérir de la géométrie des agrégats, être capable d'en modéliser la rupture et/ou la désolidarisation par rapport au liant, ainsi que la rupture du liant lui-même. Cela demande une puissance de calcul très importante et la possibilité d'accéder à des données microscopiques statistiquement représentatives.

C'est la seconde voie, dite macroscopique, qui a été choisie dans le cadre d'une collaboration entre le CEA et l'École centrale de Nantes (thèse de Kevin Moreau [2]). La dégradation est résumée



Figure 1

Échantillon carré poussé du bas vers le haut contre un coin fixe en acier. Zones endommagées (A à G) que l'on cherche à modéliser. Ces endommagements ont donné naissance à une fissure, dont le frottement des lèvres aurait pu conduire à un échauffement et un allumage du matériau énergétique.

Square sample submitted to bottom-to-top displacement around a fixed edge. The point is to predict, via simulation, the damaged areas (A to G), where a macro-crack initiates. Lip friction of the macro-crack could be conducive to heating and ignition of the energetic material.

en chaque point de Gauss par une variable interne du niveau d'endommagement. La localisation de cet endommagement conduit à l'apparition de fis-

N. MOËS, K. MOREAU, Institut de recherche

en génie civil et mécanique (GeM), UMR 6183 CNRS – École centrale de Nantes – Université de Nantes, France

> **D. PICART,** CEA – Le Ripault

IMPACT MODELLING

SIMULATION OF CRACKING UNDER SHOCK



redicting the ignition of energetic materials submitted to low-velocity impacts is an important issue in terms of safety of pyrotechnic structures. The model in question

[1] describes the ignition of energetic materials caused by the heating induced by lip friction of crack and micro-cracks, after the structure has suffered damage. Numerical simulation of ignition thus requires an accurate modelling of degradation mechanisms. These degradation mechanisms (Figure 1) can be represented on fine scale or so-called macroscopic scale. In the first case, it is necessary to ascertain the geometry of aggregates, and be able to model their breaking and/or the aggregate/binder interface failure, as well as the breaking of the binder itself. This requires very high performance computing, and the capacity to access statistically representative microscopic data.

It is the second way (so-called macroscopic) that was chosen in the joint collaboration between the CEA and Ecole Centrale de Nantes (PhD project by Kevin Moreau [2]). Degradation is resumed at each Gauss point by an internal variable of the damage level. Localizing this damage leads to the sures macroscopiques. La transition de l'endommagement à la fissuration est une question épineuse tant du point de vue théorique, car il est nécessaire d'introduire une longueur dans le modèle pour éviter des ruptures à énergie nulle, que du point de vue numérique, car il s'agit de faire avancer des fissures sur un maillage en dynamique rapide.

L'originalité de la thèse a été de combiner une approche numérique, qui a fait ses preuves pour la



Comparaison entre calcul et expérience lors de l'impact d'une plaque préentaillée. En médaillon : trajet des fissures observé expérimentalement. Dans le résultat de la simulation, le trajet de la fissure verticale est bien reproduit. La gestion des conditions aux limites induit, en bas, une fissure non réaliste. L'adaptation du modèle permettra de résoudre ce biais.

Comparison between calculation and experiment at the time of the impact of a previously notched plate. Insert: Cracks path observed experimentally. The direction of the vertical crack is correctly predicted via simulation. Boundary-modelled conditions lead to an unintended crack (below). Consequently, the code will be modified to cope with. représentation numérique de fissures (l'approche X-FEM, éléments finis étendus), et une nouvelle approche théorique dite TLS (Thick Level Set). L'approche TLS impose *a priori* une limitation sur le gradient de l'endommagement et permet d'extraire explicitement les positions des fissures dans les zones où l'endommagement est localisé (figure 2). Basée sur la technique des fonctions de niveau, cette approche est très peu gourmande en moyens de calcul (même s'il faut représenter finement les zones de localisation).

Même si ce résultat est encourageant, la démarche proposée ne permet pas, pour l'instant, de représenter la naissance de fissures sous une forte compression et un cisaillement. Cette situation étant malheureusement propice à l'allumage par frottement sur les lèvres, les recherches actuelles s'orientent vers une représentation plus complexe de l'endommagement du matériau dans laquelle l'endommagement n'est plus un scalaire en chaque point, mais un ensemble de valeurs permettant de représenter une dégradation anisotrope selon différents plans.

RÉFÉRENCES / REFERENCES

 D. PICART, J. ERMISSE, M. BIESSY, E. BOUTON, H. TRUMEL, "Modelling and simulation of plasticbonded explosive mechanical initiation", *Int. J. Energetic Mat. Chem. Propulsion*, 12, p. 487-509 (2013).
K. MOREAU, N. MOËS, D. PICART, L. STAINIER, "Explicit dynamics with a non-local damage model using the thick level set approach", *Int. J. Num. Meth. Engng*, 102, p. 808-838 (2015). DOI: 10.1002/nme.4824.

initiation of macroscopic cracks. The transition from damage to cracking is a difficult issue, both from theoretical and numerical perspectives: first, this requires the introduction of a length variable in the model, in order to avoid breakage at zero energy, and second, this requires cracks moving in a fast deforming mesh.

The originality of the PhD project has been to combine a numerical approach, which has proven itself as for numerical representation of cracks (X-FEM approach, extended finite elements), and a new theoretical approach called TLS (Thick Level Set). The TLS approach generally requires a limitation with regard to the damage gradient, and makes it possible to explicitly extract the positions of the cracks in the areas, where damage is localized (Figure 2). Based upon the technique of level set functions, this approach does not require many computing resources (although it is certainly necessary to finely represent localization areas).

Despite this encouraging record, the proposed approach does not make it possible for the moment to represent the nucleation of cracks under high compression and shear. This is unfortunately conducive to ignition by lip friction. Current research is thus directed to a more complex representation of material damage, in which the damage is no longer a scalar quantity in each point, but a set of values allowing some anisotropic degradation representation from different planes.

APPROCHES MULTI-ÉCHELLES APPLICATION AU TATB

J.-B. MAILLET, P. LAFOURCADE, B. ROUET-LEDUC, C. DENOUAL, L. SOULARD, CEA – DAM Île-de-France G. STOLTZ, CERMICS, École des ponts ParisTech – INRIA – Université Paris-Est Marne-Ia-Vallée

a compréhension des différents mécanismes impliqués dans l'amorçage et la propagation d'une détonation nécessite une description multi-échelle du matériau : à l'échelle atomique, où les forces intermoléculaires déterminent la structure cristalline et les propriétés thermomécaniques du monocristal, à l'échelle mésoscopique pour étudier les effets de l'implosion d'un pore au passage d'une onde de choc (mécanisme de « hot spot » - point chaud), jusqu'à l'échelle macroscopique pour rendre compte de l'effet de la microstructure sur la cinétique globale de transformation. Quelques aspects de cette approche multi-échelle appliquée au TATB sont présentés dans cet article.



Simulation basée sur les méthodes de particules dissipatives (DPD) : élévation de la température au passage d'un choc sur un pore sphérique. Les températures supérieures à un certain seuil correspondent aux zones en rouge. DPD simulation: rise in temperature after a shock wave passing over a spherical pore. Red areas correspond to temperatures above a certain threshold.

Le passage micro-méso repose sur les méthodes de particules dissipatives (DPD) où les molécules sont remplacées par des mésoparticules possédant leur propre équation d'état. Le passage d'une description atomique à une description mésoscopique permet ainsi de gagner un à deux ordres de grandeur dans la taille des systèmes simulés. Les paramètres spécifiques de cette approche sont choisis à partir d'une comparaison entre des simulations à l'équilibre effectuées en DPD et à l'échelle microscopique [1]. Une fois calibré, ce modèle est utilisé pour étudier le comportement sous choc d'un monocristal de TATB.

Au passage d'une onde de choc, l'implosion des pores naturellement contenus dans une composition explosive donne lieu à la création de points chauds, lieux privilégiés pour l'initiation des réactions chimiques. La compréhension de ce processus est l'une des clefs de la modélisation de l'amorçage des explosifs. Dans ce but, des simulations d'implosion de pore dans des monocristaux de TATB ont été réalisées par DPD. Elles montrent que l'échauffement consécutif à l'implosion d'un pore apparaît dans des directions privilégiées, témoignant ainsi de son caractère viscoplastique (figure 1). D'autre part, une modélisation reposant sur ces résultats permet de prédire le temps d'implosion, l'énergie dégagée par le point chaud et, via un modèle chimique simple, la probabilité d'initiation en fonction de l'intensité du choc et de la taille du pore.

La dernière étape est le développement d'un modèle de cinétique fondé sur une répartition hétérogène des pores. En admettant que la porosité efficace soit intergranulaire, un modèle analytique prenant en compte explicitement l'initiation de réaction en différents points de la surface des grains a été proposé [2]. Ce modèle permet de faire la distinction entre les régimes de transformation homogène et hétérogène appliqués au TATB, et montre que le régime de combustion dans la zone de réaction est hétérogène (figure 2). Les effets microstructuraux doivent donc être pris en compte.

RÉFÉRENCES / REFERENCES

M. P. KROONBLAWD, T. D. SEWELL, J.-B. MAILLET, "Characteristics of energy exchange between inter- and intramolecular degrees of freedom in crystalline 1,3,5-triamino-2,4,6trinitrobenzene (TATB) with implications for coarse-grained simulations of shock waves in polyatomic molecular crystals", *J. Chem. Phys.*, 144, 064501 (2016).

[2] B. ROUET-LEDUC, J.-B. MAILLET, C. DENOUAL, "The kinetics of heterogeneous nucleation and growth: an approach based on a grain explicit model", *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 22, 035018 (2014).

SHOCK TO DETONATION TRANSITION

MULTISCALE Approaches Application to tatb

nderstanding the different mechanisms involved in the initiation and propagation of detonation requires a multiscale description of the material: on the atomic

scale where the intermolecular forces determine the single crystal structure and thermo-mechanical properties, on the mesoscopic scale to study the effects of a pore implosion with the passing of a shock wave (defined as "hot spot" mechanism), up to the macroscopic scale to account for the effects of microstructure on overall transformation kinetics. Some aspects of the multiscale approach applied to TATB are presented below.

The micro-to-meso transition is based on the dissipative particle dynamics (DPD) method where molecules are replaced by mesoparticles having their own equation of state. The transition between atomic and mesoscopic descriptions makes it possible for simulated systems to grow by one or two orders of magnitude in size. The specific parameters of this approach are selected from some comparative balanced simulations performed in DPD, at a microscopic scale [1]. Once calibrated, the model is used to study the behavior of a TATB single crystal under impact conditions.

With the passing of a shock wave, the implosion of pores, that are naturally contained in an explosive composition, results in the creation of hot spots, ideal places for the initiation of chemi-



Combustion d'un milieu granulaire au passage d'un choc. *Combustion of a granular medium with the passing of a shock wave.*

cal reactions. Understanding this process is one prerequisite for modelling the ignition of explosives. To this end, pore implosion simulations in TATB single crystals were performed by DPD. They showed that heating resulting from the implosion of a pore appears in preferential directions, reflecting its viscoplastic characteristics. Moreover, modelling based on these results makes it possible to predict the time of implosion, the energy of the hot spot and, by means of a simple chemical model, the probability of initiation depending on impact intensity and pore size.

The last step in the process is the development of a kinetic model based on heterogeneous pore distribution. Assuming that the effective porosity is intergranular, an analytical model explicitly taking into account the initiation of reaction in different parts of the grain surface has been proposed [2]. This model allows to distinguish between homogeneous and heterogeneous processing systems that can be applied to TATB, and shows that combustion conditions in the reaction zone are heterogeneous. Thus microstructural effects must be taken into account.

THE CREST REACTIVE-BURN MODEL FOR EXPLOSIVES

t is vitally important to the Atomic Weapons Establishment (AWE), the CEA and other defence laboratories that explosives are safe to handle and react predictably, when required. Among all the regimes relevant to the safety and performance of explosives, the response to shocks and detonations is of prime importance, owing to the potential risk of release of the whole energy from the munitions.

CREST, the acronym for Computational Reaction Evolution depending on entropy (S) and Time, is a computer model for predicting the response of high explosives to shock and detonation waves, which is available within several multi-material hydrodynamics codes.

CREST has been developed at AWE over the last decade and uses a reaction rate that depends on shock strength [1], represented by a function of the shocked, non-reacted explosive entropy. This allows CREST to predict the effects of initial porosity (Figure 1) and temperature on explosives, in contrast to most other models. CREST also assumes that the non-reacted explosive and the reaction products are thermally isolated from each other, and as a result uses the ISE mixture model [3].

Both these assumptions can be justified from the underlying meso-scale shock physics, where it is well-known that chemical reactions spread outwards from isolated "hotspots". Detailed computer simulations of this reaction propagation show that the pressure is in equilibrium, but the non-reacted explosive and reaction products have different temperatures and densities, justifying the use of the ISE model. It can be argued that the overall reaction rate depends on the density of hotspots, depending in turn on the shock strength. Since the non-reacted entropy provides a convenient measure of the shock strength, the use of an entropy-dependent reaction rate is justified.

Just like other reactive-burn models for explosives, CREST is a continuum-scale empirical model so the many coefficients in its governing equations

TRANSITION DU CHOC À LA DÉTONATION

LE MODÈLE CREST POUR LES EXPLOSIFS

l est extrêmement important pour l'Atomic Weapons Establishment (AWE), le CEA et d'autres laboratoires de la défense que les explosifs soient sûrs et réagissent de façon prévisible lorsqu'ils sont utilisés. Parmi les nombreux régimes réactifs d'intérêt pour la sécurité et la performance des explosifs, la réponse aux chocs et à la détonation est d'importance primordiale en raison du risque potentiel de libération totale de l'énergie contenue dans la munition.

CREST, acronyme de Computational Reaction Evolution depending on entropy (S) and Time, est un modèle permettant de prédire numériquement la réponse d'explosifs pressés, soumis à des ondes de choc et de détonation. Ce modèle est disponible dans plusieurs codes d'hydrodynamique multi-matériaux. CREST a été développé à l'AWE au cours de la dernière décennie. Il est le seul modèle à utiliser un taux de libération d'énergie dépendant de l'intensité du choc **[1]** sous la forme d'une fonction de l'entropie de l'explosif choqué non réagi. Cela permet de prédire les effets de la porosité initiale (**figure 1**) et de la température, ce que de nombreux autres modèles sont incapables de faire. CREST suppose également que l'explosif non réagi et les produits de la réaction sont isolés thermiquement les uns des autres, et utilise ainsi le modèle de mélange ISE **[3]**.

Ces deux hypothèses peuvent être justifiées par la physique du choc à échelle mésoscopique, où il est bien connu que les réactions chimiques se propagent vers l'extérieur depuis des « points chauds » isolés. Des simulations numériques sophistiquées de la propagation de ces réactions montrent que la pression est en équilibre, mais que l'explosif non réagi et ses produits de décomposition ont des températures et des densités différentes, justifiant l'utilisation du modèle ISE. On peut faire valoir que le taux de réaction global dépend de la densité de

C. A. HANDLEY, N. J. WHITWORTH, B. D. LAMBOURN, Atomic Weapons Establishment, Aldermaston, United Kingdom



Effect of porosity, up to 7 %, on the shock-to-detonation response of TATB-based explosives: varying the initial density of the explosive LX-17 between 1.81 and 1.90 g/cm³ causes the run-to-detonation distance as a function of the shock pressure to change significantly. The CREST model, developed at AWE for a similar explosive named PBX 9502 can predict this effect [2].

Effet de la porosité (< 7%) sur la réponse à la transition choc-détonation d'explosifs à base de TATB: la variation de la densité initiale mesurée de l'explosif LX-17 entre 1,81 et 1,90 g/cm³ modifie considérablement la profondeur d'amorçage (axe des ordonnees) en fonction de la pression (axe des abscisses). Le modèle CREST, développé à l'AWE pour un explosif similaire, le PBX 9502, est en mesure de prévoir cet effet [2].

must be fitted to the available experimental data. Until recently, this was done *via* a time-consuming manual fitting process. The process has recently been automated: CREST reaction rates are fitted to a limited set of shock and detonation data using a Particle Swarm Optimisation code, which was developed in collaboration with Professor Mike Christie at Heriot Watt University.

Once the CREST model has been calibrated for a particular explosive, it can be tested over a range of

points chauds qui, à son tour, dépend de l'intensité du choc. Puisque l'entropie de l'explosif non réagi est une mesure acceptable de l'intensité du choc, l'utilisation d'un taux de libération d'énergie dépendant de l'entropie est justifiée.

Comme les autres modèles de combustion pour explosifs, CREST est un modèle empirique dont les nombreux coefficients intervenant dans ses équations doivent être ajustés aux données expérimentales disponibles. Jusqu'alors, cela se faisait au moyen d'un processus d'ajustement manuel à la fois fastidieux et coûteux en temps. Les taux de réaction de CREST sont maintenant ajustés automatiquement à partir d'un ensemble limité de données expérimentales de choc et de détonation en utilisant un code d'optimisation (Particules Swarm Optimization Code) développé en collaboration avec le professeur Mike Christie de l'université Heriot-Watt.

Une fois le modèle CREST étalonné pour un explosif particulier, il peut être testé, sans modifier aucun de ses coefficients, sur une large gamme de données expérimentales pour évaexperimental data without changing any of the coefficients, to establish its predictive capabilities. For example, **Figure 2** shows that CREST accurately predicts detonation wave shapes. It has been demonstrated that CREST can model shock desensitization, detonation corner turning, failure and extinction, as well as a variety of other shock and detonation phenomena. However, further work is needed to improve its agreement with experiments where rarefaction waves dominate the hydrodynamics. Incorporating a reaction-rate term depending on the temperature of the reaction products is one possible way to do this.

© British Crown Owned Copyright 2016/AWE

REFERENCES / RÉFÉRENCES

[1] H. R. JAMES, B. D. LAMBOURN, "On the systematics of particle velocity histories in the shock-todetonation transition regime", J. Appl. Phys., 100, 084906 (2006).

[2] C. A. HANDLEY, H. J. LACY, B. D. LAMBOURN, N. J. WHITWORTH, H. R. JAMES, "CREST Models for PBX 9501 and PBX 9502", *Proc. of the 15th International Detonation Symposium*, San Francisco, USA, July 13-18, 2014, p. 82-92 (2014).

[3] Acronym of Isentropic Solid Equation mixture model. See M. COWPERTHWAITE, "A constitutive model for calculating chemical energy release rates from the flow fields in shocked explosives", Proc. of the 7th Detonation Symposium, Annapolis, USA, June 16-19, 1981, p. 498-505 (1982).

[4] N. J. WHITWORTH, M. CHILDS, "Determination of Detonation Wave Boundary Angles via Direct Numerical Simulations Using CREST", submitted to *Proc. of the APS Shock Compression of Condensed Matter conference*, Tampa, USA, June 14-19, 2015.



Detonation wave shapes in the TATB-based explosive PBX 9502 confined by aluminium (left), or by aluminium and a Sylgard polymer (right). CREST simulations (black and white) compare well with the experimental data (colour plots) from the Los Alamos National Laboratory [4].

Formes d'onde de détonation dans l'explosif PBX 9502 à base de TATB confiné par de l'aluminium (à gauche), ou par de l'aluminium et un polymère Sylgard (à droite). Les simulations CREST (noir et blanc) reproduisent bien les données expérimentales (zones de couleurs) obtenues au Laboratoire national de Los Alamos [4].

luer ses capacités prédictives. Par exemple, la **figure 2** montre que CREST prédit avec précision des formes d'onde de détonation. Il a été démontré que CREST peut modéliser la désensibilisation par choc, le contournement de coins par la détonation, les conditions de non-allumage et d'extinction, ainsi qu'une variété d'autres phénomènes de chocs et de détonations. Cependant, des travaux supplémentaires sont nécessaires pour améliorer ses prédictions dans le cas d'expériences où les ondes de détente contrôlent l'hydrodynamique. Pour cela, l'intégration d'un terme dans le taux de libération d'énergie, fonction de la température des produits de réaction, est à l'étude.

CAPTEUR CHRONOMÉTRIQUE À RÉSEAUX DE BRAGG

J. BÉNIER, L.-M. ADOLF, CEA – DAM Île-de-France e CEA – DAM Île-de-France a développé un capteur optique permettant de mesurer la chronométrie d'une onde de détonation. L'objectif est de remplacer à terme les capteurs électriques appelés *circuits imprimés*.



Signature d'un capteur FORB : le passage de l'onde de choc sur le réseau de Bragg provoque une décroissance par paliers du signal.

Signature of an FBG sensor: The passing of the shock wave through the Fiber Bragg Grating induces signal decrease.

Ce capteur, nommé FORB (Fibre Optique à Réseaux de Bragg), est constitué d'une succession de réseaux de Bragg gravés dans une fibre optique monomode. Le FORB est avant tout un capteur de chronométrie, mais en connaissant sa position sur la surface à étudier, la vitesse de défilement de l'onde peut être calculée. Chaque réseau de Bragg (les sigles FBG sur la figure 1) fonctionne comme un miroir spectral et réfléchit une partie de la lumière incidente (source laser). Au passage de l'onde de choc, les réseaux sont détruits et une chute de la lumière par paliers est observée (figure 1). Chaque front de descente donne ainsi une signature temporelle du phénomène à observer.

Les principaux inconvénients résident dans la fragilité du capteur, ce qui nécessite quelques précautions à prendre lors de son implantation, et une valeur minimale du rayon de courbure, qui doit être supérieur à 5 mm.

Ce nouveau capteur a l'avantage d'être, d'une part, peu intrusif (épaisseur < 150 μ m) et, d'autre part, d'être insensible aux perturbations électromagnétiques. La longueur du capteur est adaptable sans contrainte à la zone d'intérêt du phénomène à observer. Une très grande

NEW TRENDS IN EXPERIMENTS AND MEASUREMENTS

CHRONOMETRIC BRAGG GRATING SENSOR

he CEA – DAM Île-de-France has developed an optical sensor for determining the chronometry of a detonation wave. When the wave reaches the sensor, a signal is immediately delivered. The objective is to eventually replace the electrical sensors, so-called *switch foils*.

This sensor, called Fiber Bragg Grating (FBG) consists in a series of Bragg gratings etched into a single-mode optical fiber. The FBG is first of all a sensor for chronometry, but in fact the average speed of the wave can be calculated when its position on the surface to be studied is known. Each Bragg grating (spelled FBG in **Figure 1**) stands for a spectral mirror, and reflects part of the incident light (laser source). At the time the shock wave passes through the grating, networks are destroyed and a decrease in light is recorded (**Figure 1**). Thus, each FBG gives the time signature of the phenomenon to be observed.

The main disadvantages include sensor fragility, hence the need for precaution during the implementation phase, and bending radius size, that must be greater than 5 mm.

The main benefits of this new sensor are first being not very intrusive (thickness



Figure 2

Système de mesure ChronoBragg constitué d'un laser, d'un capteur, d'un détecteur et d'un numériseur.

ChronoBragg measurement system made with laser, sensor, detector and digitizer.

flexibilité existe dans le nombre et l'intervalle des points de mesure. Enfin, le risque laser est réduit car l'ensemble du dispositif est fibré, et la source émet dans l'infrarouge (laser de classe 1M).

Les signaux de mesure peuvent transiter dans une fibre du type G652 et être enregistrés à une distance importante sans perte photométrique (< 0,2 dB/km). Le dispositif est associé à un interrogateur (ChronoBragg, voir figure 2) qui éclaire le capteur et convertit la lumière réfléchie en signal électrique directement enregistrable sur un numériseur.

Le fonctionnement de ce capteur a été validé en comparant sa réponse à d'autres capteurs de chronométrie dans différentes configurations : immergé dans un explosif liquide ou collé à la surface d'un cylindre d'explosif solide, avec et sans confinement métallique. La réponse du capteur a également été observée en fonction de la nature du confinement (acier ou aluminium).

Tous ces résultats ont permis de déterminer une configuration permettant de répondre à la plupart des sollicitations. Cette nouvelle technologie a été brevetée en 2013 et est aujourd'hui commercialisée sous licence CEA par la société IDIL SAS.

<150 microns), and also being insensitive to electromagnetic interference. The sensor length is adjustable without constraint to the area of concern of the phenomenon to be observed. There is great flexibility in the number and ranges of measurement points. Finally, the laser risk is reduced, because the entire device is guided in a fiber and the source emits infrared light (1M-class laser).

The measurement signals can be carried by a fiber with type G652 and are recorded at a significant distance with photometric losses (0.2 dB/km). The device is associated with an interrogator (ChronoBragg, see Figure 2) which both emits probing light and converts reflective light into

an electic signal that is directly recordable on a digitizer.

This sensor was validated by comparing its response to other chronometric sensors in different configurations: immersed in a liquid explosive or glued to the surface of a solid explosive cylinder, both with and without metal confinement. The sensor response was also observed by reference to the confinement type (steel or aluminum).

As a result of all these achievements, it was made possible to determine a configuration to meet most of the requests. This new technology was patented in 2013, and is now marketed under a CEA license by IDIL SAS Company.

OPTIMEX AN OPTICAL ANALYZER FOR EXPLOSIVE PROCESSES

J. PACHMAN, J. SELESOVSKY, University of Pardubice, Czech Republic R. MARSALEK, M. POSPISIL, M. KUBICEK, Brno University of Technology, Czech Republic M. KUNZEL, OZM Research Ltd., Czech Republic

J. MORAVEC, Foton Ltd., Czech Republic

he light generated by a flame or detonation wave is a valuable source of information in explosive testing. Burning rate of propellants of dust mixtures, detonation velocity of all sorts of explosives and gas mixtures, detonation pressure, detonation front curvature, transition of deflagration to detonation can all be studied from light analysis. Historically, the streak or image shooting cameras were the only available option. Making use of optical fibers was problematic, due to the fact that plastic fibers showed high losses, and glass fibers are fragile. Standalone device for reliable measurements, even for the most easily measurable parameter, that is detonation velocity, was not available. Thanks to telecommunications industry, cheap fiber optic components and accessories were introduced and are now available on the market.

Therefore, it has been decided to develop a multiple channel device, called OPTIMEX, that would be able to acquire the light generated by an explosion (deflagration and detonation) *via* fiber optics, and provide an insight as to the



Three pulses as recorded by OPTIMEX during detonation velocity measurements. Zoomed parts clearly show gradual increase of light intensity up to about one fourth of the dynamic range.

Trois impulsions enregistrées par OPTIMEX pendant la mesure de la vitesse de détonation. La partie agrandie montre clairement l'augmentation progressive de l'intensité lumineuse jusqu'à environ un quart de la plage dynamique. material performance. The prime purpose was to have reliable passive battery operated handheld machine for the determination of detonation velocity. The issue was to eliminate electric power for safety reasons and also eliminate the long signal cables that were sources of randomly induced noise or failures. At the same time, it seemed wise to get rid of the external data acquisition unit, while however maintaining the capability to observe the whole light intensity history.

The combined efforts of the University of Pardubice, the Brno University of Technology, Foton Ltd. and OZM Research Ltd, together with the support of the Technological Agency of Czech Republic, resulted in the development of a system that meets the above requirements. The light emitted by the explosive event enters plastic or glass fiber, moves to the data acquisition unit. It is then converted via the photodiode to an electric signal, which is subsequently processed by FPGA (Field-Programmable Gate Array) and stored into the internal memory.

The discontinuous measurement of detonation velocity was successfully tested on a number of explosives, ranging from high explosives such as HMX with nearly ideal behavior, through dynamites, ammonium nitrate based commercial explosives or gas mixtures, to highly non-ideal blasting agents. It was observed that the light does not present a single sharp rise in intensity, but rather gradual increase, due to the translucency of the explosives as shown in **figure 1**. In order to get precise measurement of the moment when detonation wave passes along the fiber, it is therefore important to acquire on each channel the signal history as a whole.

The relatively high sampling rate enables the measurements of other detonation parameters, such as detonation front curvature, while positioning the fibers perpendicular to the incoming detonation wave [1]. Figure 2 shows an experimental setup with the fibers held in place by a PMMA window. The high speed photography was used to verify the OPTIMEX results. The results are shown at the top of the same figure.

REFERENCES / RÉFÉRENCES

J. PACHMAN et al., "OPTIMEX: Measurement of Detonation Front Curvature with a Passive Fiber Optical System", Cent. Eur. J. Energ. Mater., 13, p. 807-820 (2016).

EXPÉRIENCES ET MESURES: NOUVELLES TENDANCES

OPTIMEX ANALYSEUR OPTIQUE POUR PROCÉDÉS EXPLOSIFS

a lumière produite par une flamme ou une onde de détonation est une source d'information précieuse lors d'expériences menées avec des explosifs. Le taux de combus-

tion de propergols ou de mélanges de poussières, la vitesse de détonation de toutes sortes d'explosifs et de mélanges de gaz, la pression de détonation, la courbure du front de détonation, la transition entre déflagration et détonation peuvent être étudiés à partir de la lumière émise. Historiquement, les caméras cinématographiques à prise de vues continue ou par succession d'images constituaient la seule option pour filmer les mouvements à distance. L'utilisation de fibres optiques était alors un peu problématique du fait de pertes élevées pour celles en plastique et de la fragilité de celles en verre. Aucun dispositif autonome pour une mesure fiable du plus facile des paramètres à mesurer - la vitesse de détonation - n'était donc disponible. Grâce à l'industrie des télécommunications, des composants et accessoires contenant des fibres optiques plus abordables ont été introduits sur le marché et sont maintenant disponibles.

Il a donc été décidé de développer un dispositif à fibres optiques et à canaux multiples, appelé OPTIMEX, qui serait en mesure d'acquérir la lumière générée par une explosion (déflagration et détonation) et de donner un aperçu de la performance des matériaux. L'objectif principal était d'obtenir un équipement fonctionnant sur batterie passive et fiable (pour raison de sécurité) permettant la détermination de la vitesse de détonation. L'enjeu était d'éliminer toute énergie électrique pour des raisons de sécurité, et aussi d'éliminer les longs câbles, sources de bruit ou de défaillances aléatoires. Dans le même temps, il était souhaitable de se débarrasser de l'unité externe d'acquisition de données, en maintenant toutefois la capacité d'observer l'intégralité de l'histoire de l'intensité lumineuse.

L'effort combiné de l'université de Pardubice, de l'université de technologie de Brno, et des sociétés



Figure 2

The detonation front curvature measured by eight channels of the OPTIMEX system compared to the results of high speed framing camera UHSi (top). Photograph of the charge setup (bottom left) and an example of the frame of the emerging detonation wave acquired by UHSi (bottom right).

La courbure du front de détonation mesurée par les huit canaux du système OPTIMEX est comparée aux résultats obtenus à partir d'une caméra grande vitesse (UHSI) (en haut). Photographie de la configuration de la charge (en bas à gauche) et exemple de la trace de l'onde de détonation émergente acquise par UHSI (en bas à droite).

Foton Ltd. et OZM Research, sous l'égide de l'Agence de la Technologie de la République tchèque, a permis le développement d'un système répondant à ces exigences. La lumière pénètre dans la fibre en plastique ou en verre, se déplace vers l'unité d'acquisition de données, est convertie en signal électrique par la photodiode. Ce signal est ensuite traité directement par FPGA (Field-Programmable Gate Array), puis stocké dans la mémoire interne.

La mesure discontinue de la vitesse de détonation a été testée avec succès sur bon nombre d'explosifs, allant d'explosifs puissants à base de HMX et présentant un comportement quasi idéal, comme les dynamites, les explosifs commerciaux à base de nitrate d'ammonium ou les mélanges de gaz, à des matériaux fortement non idéaux. La lumière ne présente pas de forte variation de son intensité, mais plutôt une augmentation assez progressive, du fait de la translucidité des explosifs, comme cela est illustré sur la **figure 1**. Pour avoir une mesure précise de l'instant auquel l'onde de détonation passe dans la fibre, il est donc important de mesurer toute l'histoire du signal sur chaque canal.

Le taux d'échantillonnage relativement élevé permet de mesurer d'autres paramètres de détonation, telle la courbure du front de détonation, en positionnant des fibres perpendiculairement à l'onde de détonation entrante [1]. La figure 2 montre un dispositif expérimental où les fibres sont maintenues en place par une fenêtre en PMMA. La photographie à grande vitesse a été utilisée pour vérifier les résultats obtenus par OPTIMEX, qui sont présentés dans la partie supérieure de cette même figure.

ÉTUDE DE LA TRANSITION Choc-détonation À l'AIDE de Métrologies Continues

es essais d'impact plan sur des coins d'explosif sont régulièrement réalisés pour caractériser leur sensibilité au choc et établir des modèles cinétiques traitant la transition choc-détonation (TCD). Habituellement, la chronométrie de la TCD est réalisée à l'aide d'aiguilles de chronométrie, qui ont l'inconvénient d'être des mesures discrètes. Les trackers de choc permettent une meilleure résolution spatiale, mais sont intrusifs. Dans le cadre d'une étude sur les explosifs coulés-fondus, deux métrologies continues permettant d'enregistrer le déplacement de l'onde de choc au cœur des échantillons ont été intégrées : le radio-interféromètre (RIF) et le BraggFast.

Le RIF est un interféromètre de déplacement fonctionnant à 94 GHz, fréquence à laquelle la majorité des explosifs sont transparents. Le rayonnement est réfléchi par l'onde de choc avec un déphasage Doppler mesurable [1]. La détermination du déplacement nécessite de connaître la permittivité diélectrique relative ε , de l'échantillon à 94 GHz. Pour cela, la vitesse de détonation établie est mesurée dans une cartouche cylindrique à l'aide d'aiguilles de chronométrie et du RIF. L'égalisation des deux résultats permet d'obtenir ε_r .

Le BraggFast est basé sur l'utilisation de fibres optiques à réseau de Bragg à pas variable. La fibre

Explosive	Initial density (kg/m³)	Relative dielectric permittivity ε_r
Hexolite (RDX/TNT – 60%/40%)	1700	3.226 ± 0.035
Ontalite 1 (ONTA/TNT – 60%/40%)	1762	3.173 ± 0.004
Ontalite 2 (ONTA/TNT – 60%/40%)	1762	3.173 ± 0.005

Tableau 1

Permittivités diélectriques relatives des explosifs coulés-fondus hexolite et ontalite, déterminées par la méthode dynamique de la cartouche ; les ontalites 1 et 2 ont été réalisés à partir d'ONTA provenant de deux fournisseurs différents.

Relative dielectric permittivity of the hexolite and ontalite melt-cast explosives, determined by the stick dynamic method; ontalites 1 and 2 were made with ONTA, coming from two different suppliers. est intégrée au cœur de l'échantillon, orthogonalement à la direction de propagation de l'onde de choc, et illuminée par une source large bande. Le réseau de Bragg est progressivement détruit par l'avancée de l'onde, ce qui provoque une diminution de l'intensité du signal retour qui peut être corrélée à la taille du réseau, et donc à la position du choc [2].

PRINCIPAUX RÉSULTATS

Les mesures de ε_r obtenues pour les compositions d'étude sont données dans le **tableau 1**. Il s'agit des premières données publiées pour les explosifs secondaires dans la bande W de fréquences (75 à 110 GHz). La méthode présentée permet de déterminer ε_r avec une précision acceptable pour l'utilisation du RIF, une variation de 1 % sur la permittivité induisant une variation de 0,5 % sur la vitesse mesurée.

Des exemples de mesures continues de l'accélération de l'onde de choc vers la vitesse de détonation établie sont donnés sur la **figure 1**, et comparés avec les mesures discrètes associées à une relation d'accélération théorique établie dans la référence [3]. Ces premiers résultats particulièrement encourageants permettent d'étudier la zone de transition dans laquelle l'accélération de l'onde de choc est maximale avec une précision inédite et d'en déduire une profondeur de transition à la détonation. Cette avancée autorise l'établissement et la validation de modèles cinétiques physiques possédant le moins de paramètres possible.

CONCLUSION

Le RIF s'avère être une métrologie continue et non intrusive innovante pour l'étude de la TCD. Le système BraggFast se montre également prometteur, et apparaît comme une alternative solide au RIF pour l'étude des matériaux non radio-transparents, comme ceux contenant des particules d'aluminium.

Y. BARBARIN, L. JACQUET, CEA – Gramat R. BOULANGER, NEXTER Munitions, Bourges, France L. CATOIRE, ENSTA ParisTech, Palaiseau, France

V. CHUZEVILLE,

G. BAUDIN, A. LEFRANCOIS.

M. GENETIER.

RÉFÉRENCES / REFERENCES

V. M. BEL'SKII, V. M. MIKHAILOV, A. V. RADIONOV, A. A. SEDOV, "Microwave Diagnostics of Shock-Wave and Detonation Process", Combustion, Explosion and Shock Waves, 47, p. 639-650 (2011).

Y, BARBARIN, A, LEFRANCOIS, G, ZANIOLO, V, CHUZEVILLE, L, JACQUET, S, MAGNE, J. LUC, A. OSMONT, "Optimization of detonation velocity measurements using a Chirped Fiber Bragg Grating", Proc. SPIE, Fiber Optic Sensors and Applications XII, Baltimore, USA, April 20-24, 2015, G. Pickrell, E. Udd, H. H. Du (Eds), Vol. 9480, 9480-25 (2015).

[3] L. G. HILL, R. L. GUSTAVSEN, "On the characterization and mechanisms of shock initiation in heterogeneous explosives", Proc. of the 12th International Detonation Symposium, Baltimore, San Diego, USA, August 11-16th, 2002, p. 975-984 (2002).

SHOCK TO DETONATION TRANSITION

STUDY OF SHOCK-TO-**DETONATION TRANSITION USING CONTINUOUS MFASURFMFNTS**

late impact tests on high explosive wedges are regularly performed to characterize their shock sensitivity, and create kinetic models treating Shock-to-Detonation transition

(SDT). Usually, SDT chronometry is performed using chronometric pins, which offers the inconvenience of being discrete measurements. Shock trackers allow some better spatial resolution, but are, on the other hand, intrusive. As part of a study on meltcast explosives, two continuous measurements that record the shock trajectory within the samples were integrated: a radio interferometer (RIF) and a BraggFast system.

The RIF is a displacement interferometer operating at 94 GHz, the frequency at which a majority of explosives are transparent. Radiation is reflected by the shock wave with a measurable Doppler phase shift [1]. Determining the displacement will require knowing the relative dielectric permittivity ε_r of the sample at 94 GHz. To this end, the established detonation velocity is measured in a cylindrical stick with chronometric pins and the RIF. The equalization of the two results gives ε_r .

The BraggFast system is based on the use of a chirped Fiber Bragg Grating (FBG). The FBG is embedded in the sample, orthogonal to the direction of propagation of the shock wave, and probed by a broadband source. The Bragg grating is gradually destroyed by the propagating shock-wave, causing a decrease in the intensity of the return signal, that can be correlated to grating size, and therefore shock position [2].



) Exemples de mesure de la vitesse de l'onde de choc sur différentes expérimentations à l'aide du radio-interféromètre (RIF) et (b) comparaison du déplacement mesuré avec les aiguilles de chronométrie, le RIF et le BraggFast sur une hexolite. Ces premiers résultats particulièrement encourageants permettent d'étudier la zone de transition dans laquelle l'accélération de l'onde de choc est maximale avec une précision inédite et d'en déduire une profondeur de transition à la détonation.

(a) Examples of measurements of the shock wave speed in various experiments with RIF and (b) a comparison of the trajectory measurement with chronometric pins, RIF and BraggFast on a hexolite. This first particularly encouraging record helps studying with an unprecedented accuracy the transition zone. in which the acceleration of the shock wave is at its peak.

MAIN RESULTS

The measurements of ε_{r} , obtained for the compositions in our study, are given in Table 1. These are the first published data for secondary explosives in W-band frequencies (75 to 110 GHz). The presented method determines ε_r with an acceptable accuracy for RIF use, a variation of 1% in permittivity inducing a variation of 0.5% in speed measurement.

Examples of continuous measurements of the shock wave acceleration up to the established detonation velocity, are given in Figure 1, and compared with the discrete pins that are associated with the theoretical acceleration relationship established in ref. [3]. This first particularly encouraging record helps studying with an unprecedented accuracy, the transition zone, in which the acceleration of the shock wave is at its peak. The run distance to detonation can then be precisely determined. The advances in this field allow the development and validation of physical kinetic models, with as few parameters as possible.

CONCLUSION

The RIF turns out to be an innovative and non-intrusive continuous measurement system in SDT research. The BraggFast system shows a great potential too, and is proving a solid alternative to the RIF as for the study of non-radio-transparent materials, such as those containing aluminum particles.

MINI-SCALE TESTS APPLIED TO ENERGETIC MATERIALS

I. PLAKSIN, R. MENDES, L. RODRIGUES, S. PLAKSIN, J. CAMPOS,

Association for the **Development of Industrial** Aerodynamics (ADAI), Laboratory of Energetics and Detonics (LEDAP), University of Coimbra, Portugal

rogress in the area of detonation metrology allowed to reach a level of mesoscopic scale diagnostics of both phenomena hot spots origination and growth at initiation chemistry and local perturbations in the detonation reaction zone (DRZ).

Significant contribution to the mesoscopic diagnostics development was obtained in miniscale tests instrumented with the Multi-Channel Optical Analyzer developed in the University of Coimbra (MCOA-UC) [1-3]. Up to now, the



The DRZ Performance Test with simultaneous registration of detonation front motion and the DRZ-induced shock field in the Kapton stacked monitor (KSM): (a) experimental setup instrumented with booster charge PE-4A (RDX 85/15 wt. % Elastomer), KSM (eight 125 µm-Kapton films separated by 6 µm argon gaps), and optical probes MFOP-D and MFOP-US having 14 and 64 optic channels respectively; (b) streak camera record. Tested charge was tightly connected to the side surface of optical ribbon. The interstitial space between optical fibers was filled with the epoxy resin. The vacuum treatment was applied to avoid air micro-bubbles residues. When the detonation front is crossing the plane surface of optical ribbon, any fluctuations occurring in the detonation front surface are imprinted by their crests.

Expérimentation avec enregistrement simultané du mouvement du front de détonation et de la répartition spatiale du choc dans le moniteur Kapton (KSM):) montage expérimental instrumenté avec une charge d'amorçage PE-4A (RDX/élastomère 85/15 % en masse), le KSM (huit films de Kapton de 125 µm séparés par des lames d'argon de 6 µm), et les sondes optiques MFOP-D et MFOP-US ayant respectivement 64 et 14 canaux optiques; (b) enregistrement de la caméra : l'explosif testé était relié à la surface latérale du ruban ontinue. L'espace interstitiel entre les fibres ontinues a été comblé à l'aide de résine époxy. Une mise au vide évite la formation de microbulles d'air. Lorsque le front de détonation traverse la surface plane du ruban optique, toute variation se produisant dans la surface frontale de la détonation laisse l'empreinte de ces crêtes

EXPÉRIENCES ET MESURES: NOUVELLES TENDANCES

TESTS MINIATURES APPLIQUÉS AUX MATÉRIAUX ÉNERGÉTIQUES



es progrès réalisés en métrologie de la détonation ont permis d'atteindre l'échelle mésoscopique et l'observation de l'origine et de la croissance des points chauds lors de l'initiation et de mettre en évidence des perturbations locales dans la zone de réaction de la détonation (ZRD).

MCOA-UC is a unique metrology device, and the most advanced to provide meso-scale probing of the DRZ 3D structure of detonations, and to offer the best compromise between high temporal and spatial resolutions (0.2 ns and 50-250 µm), large amounts of independent registration channels, and a great simplicity in design. There is here no limit to the pressure amplitude of shock or detonation waves, as opposed to multipoint VISAR or line ORVIS devices. The basic element of the MCOA-UC is a ribbon of 64-96 Toray 250 µm-diameter optical PMMA-fibers, which, in the streak camera, stand for the collectors and transducers of the light and radiation induced by reaction and shock. Using electronic streak cameras (ESC), such as the Thomson TSN 506 N, allows to record the shock induced radiation with a 0.2 ns-max radiation pulse temporal resolution in the spectral range 360 nm < λ < 850 nm, without any intermediate optical devices or elements. The optical ribbon is connected at one end, to the tested sample via the optical stacked monitor (SM), and at the other end, to the optical slit of the ESC. It is splitted into several parts, which are integrated in the Multi-Fiber Optical Probes (MFOPs). With a 3-5m total length, it terminates at the focal plane of the ESC, which records the transferred radiation output. MCOA-UC metrology was developed for spatially resolved direct time diagnostics of reaction initiation scenarios in crystalline energetic

Une contribution significative provient de tests miniaturisés et instrumentés à l'aide de l'analyseur à multicanaux optiques développé à l'université de Coimbra (MCOA-UC) [1-3]. À ce jour, ce dispositif est unique et constitue l'outil métrologique le plus avancé pour observer, à l'échelle mésoscopique, la structure 3D des ZRD. Il offre le meilleur compromis entre hautes résolutions temporelle et spatiale (0,2 ns et 50-250 µm), une grande quantité de canaux d'enregistrement indépendants, et une grande simplicité de conception. L'amplitude de la pression de choc observable n'est pas limitée, contrairement aux dispositifs VISAR multipoints ou ORVIS ligne. L'élément de base du MCOA-UC est un ruban de 64 à 96 fibres optiques en PMMA de 250 µm de diamètre,

.....

materials subjected to shock and detonation. **Figures 1** and **2** illustrate two configurations of DRZ, which provided spatially resolved simultaneous measurements of reaction localizations in detonation front, local speed of detonation front and 3D-shock field at interface with optical monitor.

The tested explosive was poreless composition: HMX_{Coarse}/HMX_{Medium & Fine}/GAP = 65.6/16.4/18 wt. % of density $\rho_0 = 1.745$ g/cm³ (0.974 TMD). In order to reach maximum packing density of HMX particles, it was manufactured starting from the three-modal particle size distribution: $d_{50}(HMX_{Coarse}) = 203.7 \ \mu m$), $d_{50}(HMX_{Medium}) = 56.00 \ \mu m$ and $d_{50}(HMX_{Fine}) = 10.4 \ \mu m$.

Using the MCOA-UC helps recording some huge information concerning the kinetics of chemical reactions, the energy localizations in the DRZ structure and the dynamic effects of detonation instabilities on metal confinement. The instrumentation of shock initiation and detonation performance tests with the MCOA-UC provided spatially resolved measurements of the DRZ structure [1-3]. It helps revealing the multiple ejecta from the DRZ surface, the mechanism of ejecta formation, the cellular structure of detonations [1,3], and the effect of the reaction radiance absorption on the formation of a precursor and the origination of an oscillating (galloping) detonations regime [2,3].

produites par la société Toray et qui, au niveau de la caméra à balayage de fente, jouent le rôle de capteurs et de transducteurs de la lumière et du rayonnement induits par la réaction et le choc. L'utilisation de caméras à balayage de fente électronique (ESC), telles que la Thomson TSN 506 N, fournit l'enregistrement du rayonnement avec une résolution temporelle maximale de 0,2 ns dans la gamme spectrale 360 nm < λ <850 nm, sans aucun dispositif optique ou élément intermédiaire. Une extrémité du ruban optique est disposée au contact de l'échantillon à l'aide du moniteur optique (SM) et l'autre extrémité est connectée à la fente optique de l'ESC. Le ruban optique est découpé en plusieurs parties, intégrées dans la sonde optique multifibres (MFOPs). D'une longueur totale de 3 à 5 m, il débouche sur le plan focal de l'ESC, qui enregistre la sortie du rayonnement transféré. La métrologie MCOA-UC a été développée pour établir le diagnostic de localisation spatiale en temps direct des scénarios d'initiation de la réaction dans le domaine des matériaux énergétiques soumis à des chocs et des détonations. Les figures 1 et 2 montrent deux configurations de tests DRZ qui donnent les mesures simultanées de la localisation spatiale de la réaction lors de la détonation

RÉFÉRENCES / REFERENCES

I. PLAKSIN, J. RIBEIRO, R. MENDES, J. CAMPOS, "Detonation performance and shock sensitivity of PBXs based on re-crystallized and comminuted HMX and RDX particles", in *Insensitive Energetic Materials – Particles, Crystals, Composites*, U. Teipel and M. Herrmann (Eds.), Fraunhofer IRB Verlag, Prinztal, ISBN 978-3-8167-7328-3, p. 156-186 (2007).

[2] I. PLAKSIN, L. RODRIGUES, S. PLAKSIN, J. CAMPOS, R. MENDES, J. RIBEIRO, "Effect of the reaction light absorption on the formation of the detonation reaction zone 3D-structure in PBXs", *Proc. of the 14th Int. Detonation Symposium*, Cœur d'Alene, Idaho, USA, 11-16 April, 2010, ONR, Arlington VA 22217-5660, ONR 351-10-185, p. 241-250 (2010).

[3] I. PLAKSIN, R. GUIRGUIS, R. MENDES *et.al.*, "Dominating the cumulating efficiency of PBX-driven liners in shaped charges: from the convergent motion up to the jet formation", *Proc. ONR 6.1 Advanced Energetic Materials Program Peer Review*, 7-9 July 2015, Holiday Inn Arlington, 4610 N. Fairfax Dr, VA 22203, (2015).



DRZ Performance Test with mesoscale probing of the surface structure through the side surface of optical fibers: (a) experimental setup instrumented with the 96-channel side-survey MFOP; (b) streak camera record (left) revealing multiple ejecta of overdriven micro-jets from the DRZ and the ejecta-driven cellular structure of detonation front, and craters produced by DRZ localizations on the surface of recovered copper confinement (right). Individual jets have maximal duration and length of approximately 60 ns and 0.5 mm respectively. The DRZ consists of detonation cells of 0.5-1.5 mm cross-section size having a lifetime from 20 to 70 ns.

Étude de la ZRD à l'échelle mésoscopique à travers la surface latérale des fibres optiques : (a) montage instrumenté avec les 96 canaux latéraux du MFOP; (b) enregistrement de la caméra (à gauche) révélant de multiples éjectas de micro-jets et la structure cellulaire de la ZRD influencée par les éjectas du front de détonation, et cratères produits par la ZRD à la surface du cuivre de confinement (à droite). Les jets individuels ont une durée maximale d'environ 60 ns et une lonqueur de 0,5 mm. La ZRD se compose de cellules de détonation de tailles transversales comprises entre D.5 et 1,5 mm et avant une durée de vie de 20 à 70 ns.

d'un explosif, la vitesse locale du front de détonation et la répartition 3D du choc à l'interface avec le moniteur optique.

L'explosif testé est peu poreux : HMX_{grossier}/ HMX_{moyen & fin} /GAP = 65,6/16,4/18 % en masse, de densité ρ_0 = 1,745 g/cm³, à 97,4 % de la densité maximale théorique. Avec comme objectif la densité de tassement à atteindre, l'explosif a été conçu à partir des trois classes de tailles de particules suivantes : d₅₀(HMX_{grossier}) = 203,7 µm, d₅₀(HMX_{moyen}) = 56,00 µm et d₅₀(HMX_{Fin}) = 10,4 µm.

L'utilisation du dispositif MCOA-UC permet d'enregistrer une quantité importante d'informations concernant la cinétique des réactions chimiques, les localisations de l'énergie dans la ZRD et les effets dynamiques des instabilités de détonation sur le confinement métallique. Son utilisation a permis de mesurer la localisation spatiale de la ZRD [1-3], de découvrir les multiples éjectas émanant de la surface de l'échantillon, leur mécanisme de formation, d'observer la structure cellulaire des détonations dans les explosifs [1,3] et d'étudier l'effet de l'absorption du rayonnement sur la formation d'un précurseur et l'origine du régime des détonations oscillantes [2,3]. **SESSION POSTERS** POSTER SESSION

FRENCH GROUP FOR TEST METHODS STANDARDIZATION

🔶 A. YODO (DGA)

COMPACTION OF A HIGH EXPLOSIVE: MODELLING AND SIMULATION

<table-cell-rows> E. ONGARI, D. PICART (CEA – Le Ripault)

MECHANICAL CONSTITUTIVE LAW: DAMAGE INDUCED ANISOTROPY

← M. GRATTON, A. BENELFELLAH, A. FRACHON, M. CALIEZ, D. PICART (INSA Centre-Val de Loire, CEA – Le Ripault)

PROMISING PERSPECTIVES FOR THE USE OF ENHANCED BLAST EXPLOSIVES CASED WITH COMPOSITE MATERIALS

ᅛ C. COLLET (Airbus Safran Launchers)

EXPERIMENTAL CHARACTERIZATION OF THE THERMAL DECOMPOSITION OF INSENSITIVE PROPELLANTS

← C. BOULNOIS, L. COURTY, P. GILLARD (NEXTER Munitions, université d'Orléans)

NUMERICAL SIMULATION OF THE COMBUSTION OF RDX WITH OR WITHOUT GAS

← M. MAR, P. GILLARD, L. COURTY (université d'Orléans)

PREDICTING THE PERFORMANCE OF A SELECTION OF EXPLOSIVES WITHIN THE ISL BUNKER

↔ S. CARGILL (Fluid Gravity Engng LTD, United Kingdom)

GASEOUS DETONATION MITIGATION BY WATER SPRAY

← G. JARSALE (Institut Pprime)

A NUMERICAL STUDY OF GASEOUS Detonations confined by an inert Layer

➡ M. REYNAUD (Institut Pprime)

NUMERICAL INVESTIGATION ON ENERGETIC FILLER SUBSTITUTION BY ALUMINUM TO INCREASE AIR BLAST EFFECTS AND MAINTAIN SHAPED CHARGE

← C. COLLET (Airbus Safran Launchers)

THERMOMECHANICAL SIMULATION ON A STRUCTURE WITH AN AGGREGATE MATERIAL: PARAMETER STUDY

→ J. MARTINEZ, A. S. LESAFFRE (ENSCPB et CEA – Cesta)

THE SHOCK-TO-DETONATION TRANSITION IN HETEROGENEOUS MELT-CAST EXPLOSIVES WITH CONTINUOUS MEASUREMENTS

← V. CHUZEVILLE, G. BAUDIN, A. LEFRANÇOIS, M. GENETIER, Y. BARBARIN, L. JACQUET, R. BOULANGER, L. CATOIRE (CEA – Gramat, NEXTER Munitions, ENSTA ParisTech)

DESIGN OF AN EDGE-ON IMPACT TEST FOR MICROSTRUCTURAL OBSERVATIONS

← K. SERAFIN, P. BAILLY, D. PICART (INSA Centre-Val de Loire et CEA – Le Ripault)





ALBUM PHOTO PICTURES BOOK

TT



SOMMAIRE CONTENTS



SIMULATION DES MATÉRIAUX ÉNERGÉTIQUES 3^{SE} JOURNÉES DE LA DÉTONIQUE

ENERGETIC MATERIALS MODELLING 3RD WORKSHOP ON EXPLOSIVES

CEA/DAM Institut supérieur des études nucléaires de défense (ISENDé) Bruyères-le-Châtel, F-91297 Arpajon Cedex Tél. : 33 (0)1 69 26 76 98 - Fax : 33 (0)1 69 26 70 05 E-mail : chocs@cea.fr



