



HAL
open science

Étude expérimentale et numérique de la sensibilité de compositions énergétiques : influence de la microstructure et rôle de l'endommagement

E Kaeshammer, B Erzar, S Belon, François Willot, P Dokladal, J Corbel, L Borne

► **To cite this version:**

E Kaeshammer, B Erzar, S Belon, François Willot, P Dokladal, et al.. Étude expérimentale et numérique de la sensibilité de compositions énergétiques : influence de la microstructure et rôle de l'endommagement. Colloque MECAMAT 2018:Matériaux numériques. Microstructures et comportements thermomécanique , 2018, Aussois, France. hal-01678704

HAL Id: hal-01678704

<https://hal.science/hal-01678704>

Submitted on 9 Jan 2018

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

ÉTUDE EXPÉRIMENTALE ET NUMÉRIQUE DE LA SENSIBILITÉ DE COMPOSITIONS ÉNERGÉTIQUES : INFLUENCE DE LA MICROSTRUCTURE ET RÔLE DE L'ENDOMMAGEMENT

E. Kaeshammer ^{a,b}, B. Erzar ^a, S. Belon ^a, F. Willot ^b, P. Dokladal ^b, J. Corbel ^c, L. Borne ^c

^a CEA, DAM, CEA-Gramat, elodie.kaeshammer@mines-paristech.fr, benjamin.erzar@cea.fr, steve.belon@cea.fr ;

^b CMM (Centre de Morphologie Mathématiques), francois.willot@mines-paristech.fr, petr.dokladal@mines-paristech.fr ;

^c ISL (Institut franco-allemand de recherche de Saint-Louis), justine.corbel@isl.eu, lionel.borne@isl.eu

Mots-clés : points chauds, traitement d'images, simulation mésoscopique

1 Introduction

La sensibilité aux chocs d'un explosif est un aspect important dans l'étude des matériaux énergétiques. Il intervient à la fois en fonctionnement nominal lors des amorçages par détonateurs mais également en fonctionnement accidentel (impact d'une balle, chute, ...). Il a été admis dès les années 50 que la sensibilité d'un matériau énergétique dépend de sa microstructure [1]. Les ondes de chocs interagissent avec les hétérogénéités de la microstructure créant des sauts de pression et des zones de température plus élevée. On parle de points chauds. Ils sont de potentiels sites d'amorçage de la détonation. Différentes études ont révélé l'influence de la morphologie et de la taille des charges [2][3], du phénomène d'implosion de pores [4], de réflexions d'ondes [5], ou encore du frottement entre grains [6] dans l'apparition des points chauds. Un des phénomènes qui semble jouer un rôle important est lié à l'endommagement mécanique. La fragmentation de grains entraîne une augmentation des surfaces de contact entre grains. La friction entre ces surfaces génère de la chaleur et conduit à la formation des points chauds.

L'ISL et le CEA-Gramat ont démarré une collaboration sur cette thématique en 2015. Des formulations explosives composées de grains d'hexogène (RDX) liés par une matrice de cire avec des propriétés différentes ont été réalisées et testées par l'ISL et analysées au CEA Gramat par microtomographie. Cette collaboration se poursuit par la mise en place d'une thèse avec l'appui du CMM dont l'objectif est d'améliorer la compréhension de la formation des points chauds en déterminant le rôle et l'importance des paramètres de la microstructure (porosité, taille et forme des grains, distribution, ...) et de l'endommagement mécanique.

2 Présentation des échantillons

Les échantillons étudiés sont composés de 70% en masse de RDX et de 30% en masse de cire. Trois types de RDX vont être analysés : le RS-RDX, le VI-RDX brut et le VI-RDX (Fig.1a). Des pores et des inclusions de solvants sont visibles dans l'hexogène du commerce (RS-RDX). Pour supprimer ces défauts, l'ISL recristallise le RS-RDX et obtient le VI-RDX brut. La porosité a quasiment disparu mais les grains ont maintenant des arêtes vives. Un traitement de surface permet aux grains de RDX de retrouver des formes plus arrondies, c'est le Very Insensitive RDX (VI-RDX). Le VI-RDX est un brevet de l'ISL [7].

L'ISL a réalisé des tests de sensibilité par impact de petits projectiles sur des formulations RDX/Cire (70,30) afin de mesurer la sensibilité au choc des différentes sortes de RDX. Un projectile avec une vitesse donnée impacte le bloc RDX/Cire (Fig.2). La vitesse de l'impacteur est déterminée par radiographie éclair. La vitesse et donc la pression exercée par l'impacteur est augmentée progressivement jusqu'à atteindre le seuil de détonation.

La morphologie joue bien un rôle comme en témoigne la comparaison entre les seuils de réactivité du VI-RDX et du VI-RDX brut (Fig.1b). L'échantillon contenant des particules avec des formes arrondies est moins sensible. En supposant que la morphologie de l'hexogène est similaire sur les échantillons VI-RDX et RS-RDX, on s'aperçoit que la diminution de la porosité intra-granulaire implique une baisse de la sensibilité.

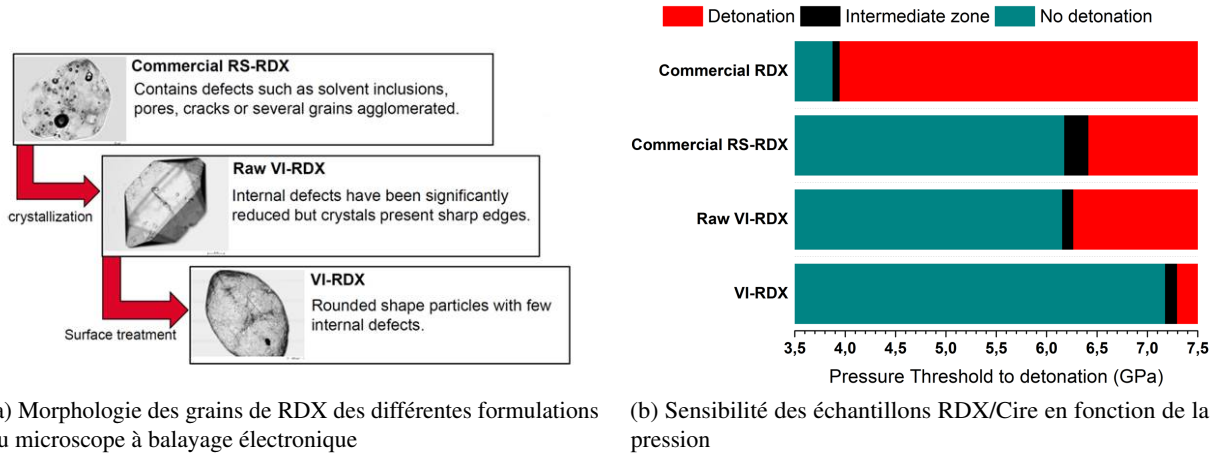


FIGURE 1 – Morphologie des différents RDX et résultats des tests de sensibilité des échantillons RDX/Cire

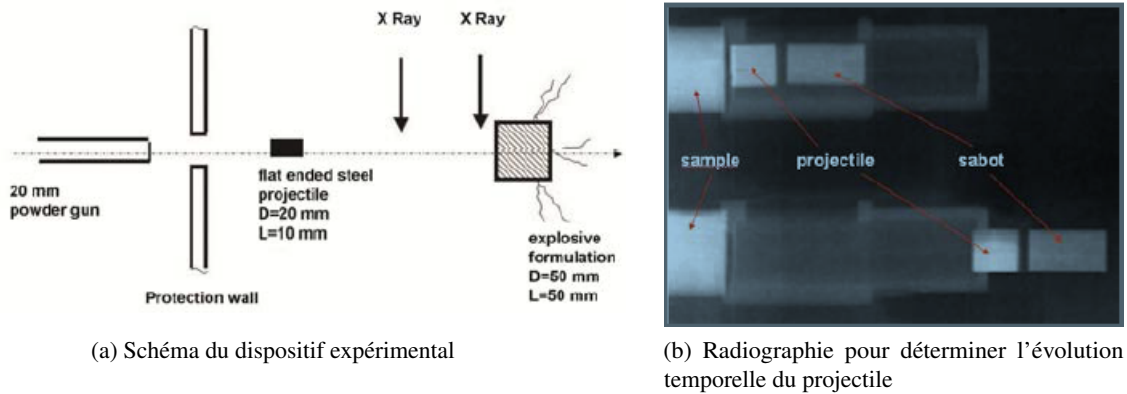


FIGURE 2 – Expérience d'impact d'un petit projectile

Six échantillons RDX/Cire avec des propriétés différentes (porosité matricielle, porosité intra-granulaire, morphologie des charges) vont être analysés au cours de la thèse (Fig.3, Fig.4) :

- 3 RS-RDX/Cire avec des porosités matricielles à 0, 2.5 et 5 %
- 1 VI-RDX brut/Cire
- 2 VI-RDX/Cire comprimé ou coulé

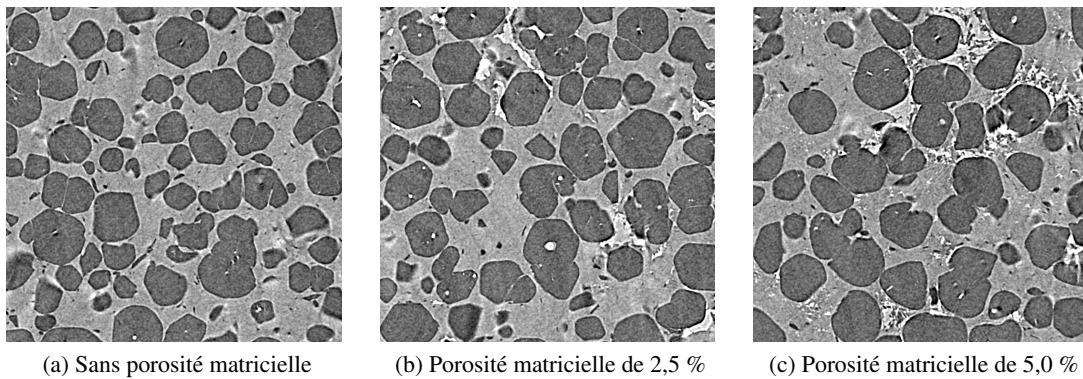


FIGURE 3 – Zoom sur les microtomographies des échantillons de RS-RDX/Cire

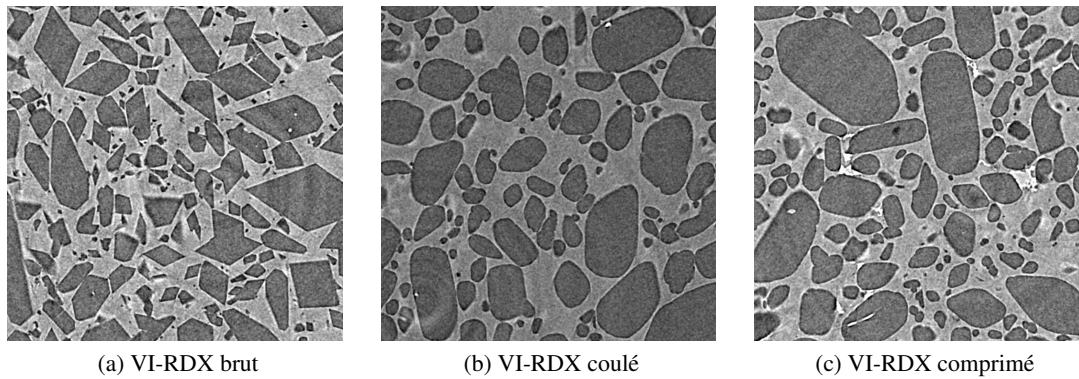


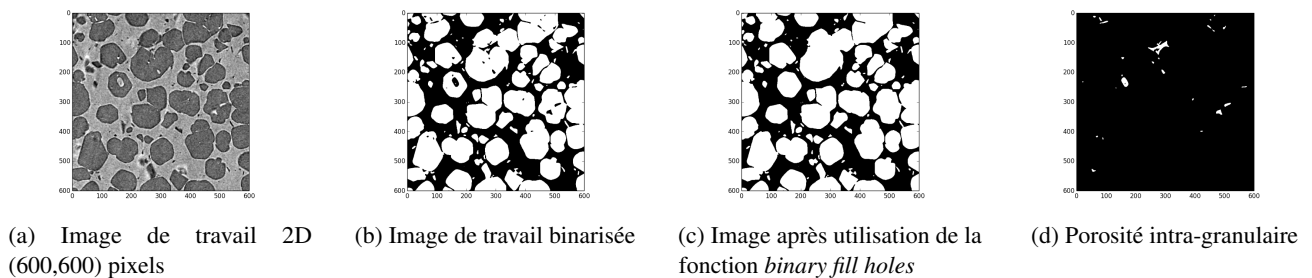
FIGURE 4 – Zoom sur les microtomographies des échantillons de VI-RDX brut et VI-RDX coulé et comprimé

3 Axes principaux de recherches

3.1 Traitement d'images

La première étape est le traitement des microtomographies. Le microtomographe renvoie une grande quantité d'images 2D de coupes du matériau. La superposition de ces coupes permet d'obtenir un volume permettant la visualisation de la microstructure interne des échantillons. L'objectif est d'extraire des grandeurs d'intérêt comme le volume des pores matriciels et intra-granulaires, la taille et la distribution des grains, etc. Ces informations permettront de créer des géométries statistiquement représentatives pour des simulations numériques et ainsi de dé-corréler les paramètres.

Des premières méthodes ont été mises au point pour déterminer certaines grandeurs d'intérêt comme la porosité intra-granulaire, matricielle et la fraction massique d'hexogène avec la librairie *Scikit-Image* de Python [8]. Par exemple, pour accéder au volume d'inclusion intra-granulaire (Fig. 5), une fonction Python basée sur l'opération de morphologie mathématique de la dilatation est utilisée.

FIGURE 5 – Obtention de la porosité intra-granulaire avec la fonction *binary fill holes*

La définition de la dilatation d'une image $A \in E^N$ par un élément structurant $B \in E^M$ (E^N et E^M des espaces vectoriels) est donnée par :

$$A \oplus B = \{a + b | b \in B, a \in A\} \quad (1)$$

avec

$$a = (a_1, a_2, \dots, a_N), b = (b_1, b_2, \dots, b_M)$$

La première étape est de séparer le liant (gris clair) des charges (gris foncé) avec un seuillage d'Otsu [9] afin d'obtenir une image binarisée. Une deuxième image binarisée de même dimension que l'image seuillée est ensuite créée. Seuls les pixels aux bordures seront non nuls. Une dilatation avec un élément structurant est effectuée avec comme masque l'image seuillée. Les pixels atteints par le masque ne seront pas affectés par la dilatation. Une fois les inclusions supprimées, une opération booléenne entre l'image seuillée et l'image résultat

permet de ne conserver que la porosité intra-granulaire.

Le traitement d'images va se poursuivre avec le code SMIL développé par le CMM. SMIL est un regroupement d'outils de traitement d'images plus complet que la librairie *Scikit-Image*.

Un autre aspect important du traitement d'images est la segmentation (Fig. 6). Elle permet de discrétiser chaque grain, chaque pore ce qui permet d'accéder à leurs tailles, leurs morphologies et ainsi d'avoir accès à une distribution. La segmentation des grains se base sur l'algorithme de ligne de partage des eaux [10].

Il s'agit d'une méthode de segmentation basée sur les régions c'est à dire sur des groupes de pixels ayant les mêmes caractéristiques. La meilleure méthode pour expliquer cet algorithme est par analogie. L'image est considérée comme une carte de reliefs avec des cratères (les grains) et des montagnes (le liant). La hauteur d'un point provient de la valeur du pixel correspondant. Les minima locaux (le fond des cratères) deviennent des marqueurs. Les bassins sont ensuite remplis par un liquide à partir des marqueurs. Au moment où il y a débordement, une barrière est mise en place. C'est la ligne de partage qui permet de dissocier les régions (les grains de RDX dans notre étude).

Dans un premier temps, il faut donc générer des marqueurs. Pour ce faire, la distance euclidienne entre l'arrière plan (le liant) et les grains sur l'image binarisée est utilisée. Les marqueurs sont obtenus en faisant un seuillage sur l'image représentant la distance euclidienne. Chaque marqueur est ensuite labélisé c'est à dire qu'il prend une valeur unique.

La seconde étape est l'utilisation de l'algorithme de ligne de partage des eaux. On s'aperçoit que certains grains agglomérés ne sont pas dissociés et que les grains de plus petites tailles disparaissent. Il n'y a pas assez de marqueurs, le seuillage sur la distance euclidienne est trop important. Mais une augmentation de la valeur de seuillage donc du nombre de marqueurs risque d'entraîner une sur-segmentation. Un grain se retrouve alors avec plusieurs labels donc coupé en plusieurs morceaux.

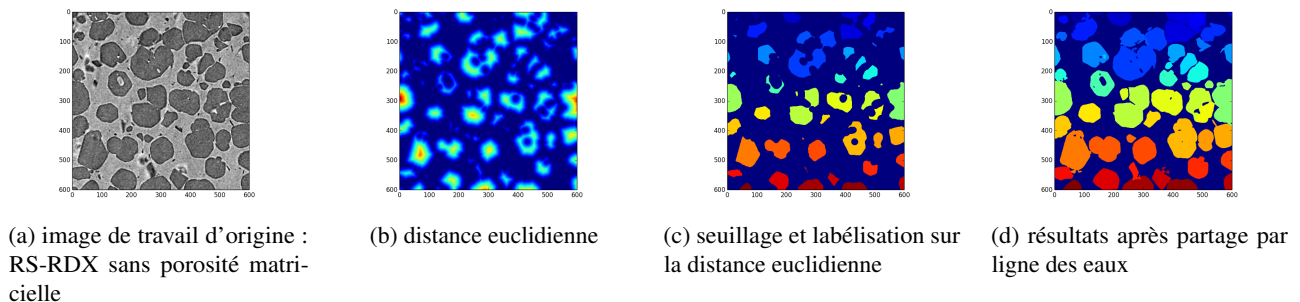


FIGURE 6 – Partage par ligne des eaux pour discrétiser les grains d'hexogène

Le logiciel SAMG, développé au CMM, est un logiciel de segmentation automatique qui permettra d'améliorer les résultats [11]. Pour éviter la sur-segmentation, certaines lignes de partage des eaux sont supprimées suivant un critère basé sur les valeurs prises par la fonction distance. Les petits éléments sont également conservés.

3.2 Simulations numériques

Le second axe majeur de la thèse sera la simulation numérique à l'échelle mésoscopique. L'objectif final est d'obtenir un modèle prédictif basé sur la microstructure réelle extraite des microtomographies d'un matériau énergétique. Il serait alors possible de déterminer pour chaque échantillon quelle est le seuil de sensibilité.

Des premiers essais de simulation 3D à l'échelle mésoscopique ont été réalisés au CEA pour vérifier la faisabilité. Le code de calcul utilisé est OURANOS avec un solveur eulérien. OURANOS est un code développé par le CEA [12]. Un projectile impacte la microstructure idéalisée ($1 \times 1 \times 2.5 \text{ mm}^3$) avec une vitesse de 1000 m.s^{-1} (Fig. 7). Des équations d'état de Birch-Murnaghan sont utilisées pour la cire et les charges. L'hexogène a une loi de comportement élasto-plastique avec une dépendance à la température (Johnson-Cook simplifiée) tandis que la cire se comporte comme un liquide (déviateur des contraintes nul). Une condition d'endommagement des grains

de RDX est fixé à 35% de déformation plastique. Une fois cette valeur atteinte, le matériau perd toute résistance et se comporte comme un liquide.

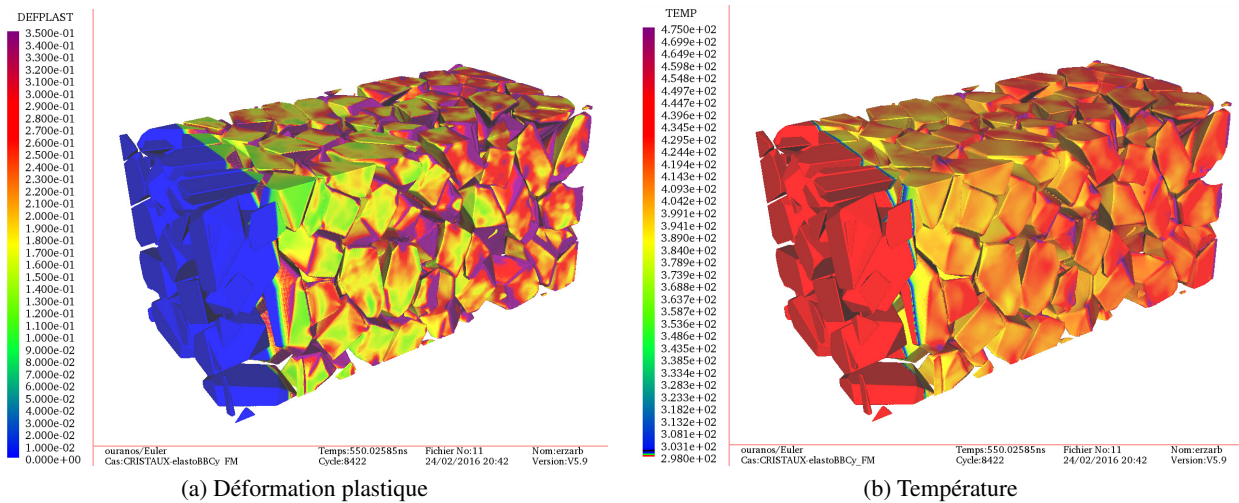


FIGURE 7 – Champs de température et de déformation plastique à 550 ns pour un impact de 1000 m.s^{-1}

Les résultats sont encourageants : des zones de plus forte température apparaissent. Il faut maintenant améliorer la description des matériaux et comparer différentes simulations.

Des résultats avec des comportements thermoélastiques seront également obtenus par méthode de Fourier (code issu du CMM) [13]. Il permet de visualiser le flux de chaleur et de la température localement dans chaque phase (liant et grain) dans le cas quasi-statique. Cette première approche permettra de visualiser les zones où les températures sont maximales. Il sera alors possible de fixer des conditions qui permettront, dès l'analyse des microtomographies, de repérer les zones critiques c'est-à-dire les zones où il peut y avoir potentiellement formation de points chauds.

3.3 Endommagement sous choc : expériences à l'ISL

Des essais de caractérisation vont être réalisés au cours de la thèse. L'idée est de récupérer un échantillon après le passage d'une onde de choc, il ne faut donc pas que le matériau énergétique détonne. Une analyse par microscopie optique permettra d'obtenir des renseignements sur l'endommagement mécanique. Il faut donc trouver un dispositif expérimental permettant de récupérer l'échantillon sans lui causer de dommages supplémentaires. La méthode actuellement à l'étude est celle du relèvement de plaque. Des essais de caractérisation de la cire et de l'hexogène sont également envisagés.

4 Conclusion

L'objectif de la thèse est de mieux comprendre le rôle de l'endommagement et des paramètres microstructuraux dans la formation des points chauds. Cette étude se basera sur les microtomographies de six échantillons RDX/Cire formulés par l'ISL. Le traitement d'images permettra de créer des géométries statistiquement représentatives qui seront utilisées pour réaliser des simulations numériques à l'échelle mésoscopique. Les résultats des simulations aideront à localiser les zones de risque sur les microtomographies c'est à dire les zones où il peut potentiellement y avoir formation de points chauds.

A long terme, l'objectif serait d'intégrer la réactivité chimique dans les simulations numériques pour pouvoir, à partir d'une microtomographie d'un matériau, déterminer son seuil de détonation. Dans le cas d'un échantillon endommagé, il serait alors possible avec une seule microtomographie de déterminer si l'échantillon respecte toujours les normes de sécurité et peut donc être utilisé ou s'il doit au contraire être détruit.

La thèse vient de débuter c'est pourquoi d'autres idées et méthodes seront encore développées au cours des prochains mois.

Références

- [1] F. Bowden and A. Yoffe, Initiation and growth of explosions in liquids and solids *Cambridge University Press*, 1952.
- [2] A. C. van der Steen, H. J. Verbeek and J. J. Meulenbrugge, Influence of RDX crystal shape on the shock sensitivity of PBXs. *Ninth Symposium (International) on Detonation*, 1989.
- [3] H. Moulard, J. W. Kury and A. Delclos The effect of RDX particle size on the shock sensitivity of cast PBX formulations. *Eight Symposium (International) on Detonation*, 1985.
- [4] R. Menikoff, Pore collapse and hot spot in HMX. *Shock Compression of Condensed Matter*, 2003.
- [5] R. Menikoff, Hot spot formation from shock reflexions. *Shock Waves*, 2011.
- [6] A. Barua, *Mesoscale computational prediction and quantification of thermomechanical ignition behaviour of PBXs*. PhD thesis, 2013.
- [7] L. Borne, Particle of explosive of low-sensitivity to shock and associated treatment process. US Patent 20060272755A1, filed June 2, 2006 and issued June 10, 2014.
- [8] Stefan van der Walt, Johannes L. Schönberger, Juan Nunez-Iglesias, François Boulogne, Joshua D. Warner, Neil Yager, Emmanuelle Gouillart, Tony Yu and the scikit-image contributors. scikit-image : Image processing in Python. *PeerJ* 2 :e453, 2014
- [9] Nobuyuki Otsu, A threshold selection method from gray-level histograms. *IEE Trans. Sys., Man., Cyber.*, vol. 9, 1979
- [10] S. Beucher and C. Lantuejoul, Use of watersheds in contour detection. *International Workshop on Image Processing : Real-time Edge and Motion Detection/Estimation*, sep 1979
- [11] T. Chabardès, P. Dokladal, M. Faessel, M. Bilodeau, An affinity score for grains merging and touching grains separation. *ISMM 2017*
- [12] E. Buzaud, et al., Development of computational standards for the simulation of conventional weapons effect. *Int. Symposium on Ballistics*, 2013
- [13] F. Willot, Fourier-based schemes for computing the mechanical response of composites with accurate local fields. *Comptes Rendus - Mécanique*, 343.3 pp. 232-245