DOI: 10.11883/1001-1455(2015)06-0777-08

考虑约束爆炸后产物发生化学反应的约束空间内准静态温度计算*

钟 巍[1],田 宙[1],赵 阳[2]

(1.西北核技术研究所,陕西 西安 710024;
2.中国核电工程有限公司,北京 100840)

摘要:考虑爆炸产物发生化学反应产生的影响,对约束爆炸后约束空间内准静态温度的计算进行了研究。以能量守恒定律为基础,考虑爆炸产物的化学反应动力学过程,推导得到约束空间准静态温度的计算公式和方法,使用C++语言编写了计算程序,并对TNT炸药约束爆炸的情况进行了计算。计算结果表明,对于约束爆炸,爆炸产物发生的化学反应对约束空间内温度的变化有明显影响,且不同的药量体积比条件下,准静态温度的变化趋势不同。研究结果可为更准确的计算约束爆炸后的准静态温度及其他爆炸参数提供有效的方法。

关键词:爆炸力学;准静态温度;约束爆炸;TNT炸药;化学反应动力学;药量体积比

中图分类号:O389 **国标学科代码**:13035 **文献标志码**:A

约束爆炸[1]是指爆炸装药或易爆气体、材料在有约束的条件下发生的爆炸。在密封空间内发生的爆炸属于约束爆炸,由于约束的作用,爆炸后密封空间内形成高温高压环境,在该环境下,爆炸后的产物和空气中的氧气会发生化学反应。化学反应将形成新的反应产物,并导致容器内能量的改变,从而使容器内温度发生改变,进一步导致容器内压力的变化,这部分变化的压力称为附加压力。温度变化及附加压力会影响容器的结构响应,因此在容器设计的时候,很有必要考虑约束爆炸后产物发生化学反应对约束空间内准静态温度的影响[2]。国外学者对约束爆炸后考虑爆炸产物化学反应的问题进行了比较系统的研究,其中以美国Livemore国家实验室的A. L. Kuhl等为代表,取得了大量的研究成果[3-8]。他们认为,约束爆炸产生的气体产物中富含碳和一氧化碳等易燃物,这些易燃物与空气混合后,将会与空气中的氧气发生燃烧反应,导致约束系统内温度变化和明显的压力上升。他们采用逆向研究的方法,通过实验研究测得的压力,来推测炸药爆炸产物的消耗情况,从而对爆炸过程进行更详细的研究。国内学者对约束爆炸中考虑化学反应动力学过程的研究很少,尚未发现这方面的研究文献,对此笔者曾作过综述分析[9]。

本文中,结合笔者自己的研究工作,从能量守恒的角度出发,以约束空间内最终的温度状态为对象,研究约束爆炸后准静态温度的计算问题,并将给出不同药量体积比的TNT炸药发生约束爆炸后准静态温度的计算结果和分析。

1 约束爆炸后准静态温度计算公式推导

假设爆炸前约束空间内温度为T_0,爆炸产物和约束空间内气体混合均匀,化学反应开始后某时刻容器内温度为$T(t)$,$T(t)$即为要计算的温度。

根据能量守恒及比热容的定义,得:

* **收稿日期**:2014-05-07;**修回日期**:2014-08-01
基金项目:国家自然科学基金重大研究计划(91330205)
第一作者:钟 巍(1986—),男,硕士,助理研究员,lengshui222@163.com。

$$Q(t)=\int_{T_0}^{T(t)}c_p(t)\mathrm{d}T(t) \tag{1}$$

两边同时除以约束空间的体积：

$$\frac{Q(t)}{V}=\int_{T_0}^{T(t)}\frac{c_p(t)}{V}\mathrm{d}T(t) \tag{2}$$

式中：

$$c_p(t)=\sum_{i=1}^{M}n_i\,(c_{p,\mathrm{m}})_i,\qquad (c_{p,\mathrm{m}})_i=a_i+b_iT(t)+c_iT^2(t)+\frac{c_i'}{T^2(t)} \tag{3}$$

式中：M 为物质总数目，n_i 为组分 i 的物质的量。已知 $Q(t)$、T_0、n_i、a_i、b_i、c_i、$c_i'(i=1,2,3,\cdots,M)$ 时，根据式(2)可以求出 $T(t)$ 的值。

当不考虑爆炸产物化学反应释放的热量时，

$$Q(t)=E=Q_{爆}\ m \tag{4}$$

式中：E 表示爆炸释放的热量，$Q_{爆}$ 为爆热，m 为爆炸装药的质量。此时式(2)化为：

$$\frac{Q_{爆}\ m}{V}=\int_{T_0}^{T(t)}\frac{c_p(t)}{V}\mathrm{d}T(t) \tag{5}$$

当考虑爆炸产物化学反应释放的热量时：

$$Q(t)=Q_{爆}\ m+\sum_{i=1}^{N}\frac{Q_i(t)}{V} \tag{6}$$

式中：$Q_i(t)$ 为第 i 个化学反应在 t 时刻释放的热量，N 为发生的化学反应的总数目。此时式(2)化为：

$$\frac{Q_{爆}\ m+\sum_{i=1}^{N}\frac{Q_i(t)}{V}}{V}=\int_{T_0}^{T(t)}\frac{c_p(t)}{V}\mathrm{d}T \tag{7}$$

将式(3)代入式(7)，积分可得：

$$\frac{Q_{爆}\ m+\sum_{i=1}^{N}\frac{Q_i}{V}}{V}=\sum_{i=1}^{M}\frac{n_i}{V}\left[a_i(T(t)-T_0)+\frac{1}{2}b_i(T^2(t)-T_0^2)+\frac{1}{3}c_i(T^3(t)-T_0^3)-c_i'\left(\frac{1}{T(t)}-\frac{1}{T_0}\right)\right] \tag{8}$$

式(8)是一个关于 $T(t)$ 的复杂一元非线性方程，不考虑化学反应释放的热量对温度的影响时，$\sum_{i=1}^{N}\frac{Q_i}{V}=0$，设此时温度为 $T_{\mathrm{e}}(t)$，令：

$$f(T_{\mathrm{e}}(t))=\frac{Q_{爆}\ m}{V}-\sum_{i=1}^{M}\frac{n_i}{V}\left[a_i(T_{\mathrm{e}}(t)-T_0)+\frac{1}{2}b_i(T_{\mathrm{e}}^2(t)-T_0^2)+\frac{1}{3}c_i(T_{\mathrm{e}}^3(t)-T_0^3)-c_i'\left(\frac{1}{T_{\mathrm{e}}(t)}-\frac{1}{T_0}\right)\right] \tag{9}$$

考虑化学反应释放的热量对温度的影响时，设此时温度为 $T(t)$，令：

$$f(T(t))=\frac{Q_{爆}\ m+\sum_{i=1}^{N}\frac{Q_i}{V}}{V}-\sum_{i=1}^{M}\frac{n_i}{V}\left[a_i(T(t)-T_0)+\frac{1}{2}b_i(T^2(t)-T_0^2)+\frac{1}{3}c_i(T^3(t)-T_0^3)-c_i'\left(\frac{1}{T(t)}-\frac{1}{T_0}\right)\right] \tag{10}$$

根据式(9)～(10)，由 Newton 迭代法[10]：

$$T_{k+1}=T_k-\frac{f(T_k)}{f'(T_k)} \tag{11}$$

计算得到 t 时刻的温度值 $T_{\mathrm{e}}(t)$、$T(t)$。

使用 Newton 迭代法计算温度的流程如图 1 所示，图中 ε 为误差控制限。

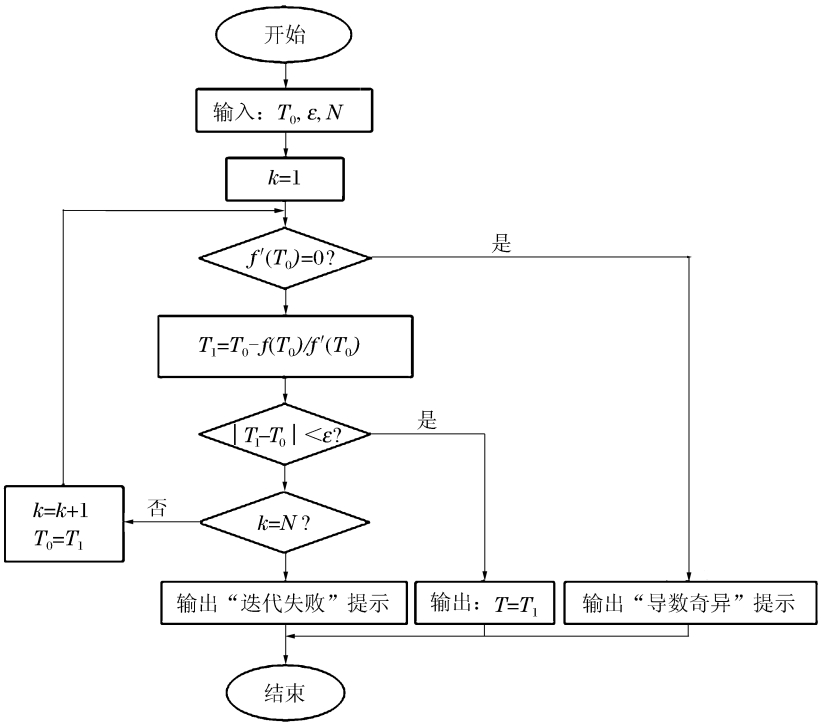

图 1 使用 Newton 迭代法计算温度流程图

Fig. 1 Procedure of temperature calculation by Newton iteration

2 爆炸产物化学反应释放热量的计算

2.1 爆炸释放的热量

假设炸药质量为 m，爆热为 $Q_{爆}$，则爆炸释放的总热量

$$E=Q_{爆}m \tag{12}$$

2.2 化学反应释放的热量

约束爆炸时约束空间体积是固定不变的，即 $\Delta V=0$，根据热力学定律，定压反应热等于定容反应热[11]，即 $\Delta_r H=\Delta_r U$。

反应进行到 t 时刻时，化学反应热为：

$$Q(t)=\xi(t)\Delta_r H \tag{13}$$

式中：$\xi(t)$ 是 t 时刻的化学反应进度，其值根据化学反应动力学计算得到，$\Delta_r H$ 为化学反应焓。

例如，对约束爆炸中常见的爆炸产物 C，其与空气中的 O_2 反应生成 CO_2 的方程式如下：

$$C(s)+O_2(g)=CO_2(g) \tag{14}$$

令反应式(14)的化学反应速率为常数 k，化学反应级数分别为 n_C、n_{O_2}，反应物初始浓度为 $c_C(0)$、$c_{O_2}(0)$，化学反应体积为 V，反应完全进行时的化学反应焓为 $\Delta_r H$，则其化学反应动力学控制方程为：

$$-\frac{dc_C(t)}{dt}=kc_C^{n_C}(t)c_{O_2}^{n_{O_2}}(t) \tag{15}$$

求解上述化学反应动力学控制方程[12]，得到任意时刻 t 对应的浓度值 $c_C(t)$，则化学反应进度为：

$$\xi(t)=[c_C(0)-c_C(t)]V \tag{16}$$

因此反应(14)进行到 t 时刻时释放的热量为：

$$Q(t)=\xi(t)\Delta_r H=[c_C(0)-c_C(t)]V\Delta_r H \tag{17}$$

化学反应焓 $\Delta_r H$ 有 2 种求解方法，一种方法是直接查询化学反应手册，另一种是根据基尔霍夫方程求解。

根据基尔霍夫(G. R. Kirchhoff)方程[11],在温度为 T_2 时,化学反应焓的计算公式为:

$$\Delta H(T_2)=\Delta H(T_1)+\Delta a(T_2-T_1)+\frac{1}{2}\Delta b(T_2^2-T_1^2)+\frac{1}{3}\Delta c(T_2^3-T_1^3)-\Delta c'\left(\frac{1}{T_2}-\frac{1}{T_1}\right) \quad (18)$$

式中:$\Delta H(T_1)$ 为温度取 T_1 时的化学反应焓,$T_1=298$ K 时 $\Delta H(T_1)$ 的值通过化学手册可以查到。系数 Δa、Δb、Δc、$\Delta c'$ 是与物质比热容有关的参数,计算方法如下:

对于某一化学反应,

$$\sum_{i=1}^{N}\alpha_i A_i \xrightarrow{k} \sum_{i=1}^{M}\beta_i B_i \quad (19)$$

比定压热容 $c_{p,\mathrm{m}}$ 与温度 T 的关系为[11](其中 a_i、b_i、c_i、c'_i 的值可以在化学手册上查到):

$$(c_{p,\mathrm{m}})_i=a_i+b_iT+c_iT^2+\frac{c'_i}{T^2} \quad (20)$$

则:

$$\Delta a=\sum\zeta_i v_i a_i,\qquad \Delta b=\sum\zeta_i v_i b_i,\qquad \Delta c=\sum\zeta_i v_i c_i,\qquad \Delta c'=\sum\zeta_i v_i c'_i \quad (21)$$

v_i 为物质 i 的化学计量系数,当物质 i 为反应物时,系数 $\zeta_i=-1$,当物质 i 为产物时,系数 $\zeta_i=1$。根据式(17)~(18)、(21)可以计算出各个时刻各化学反应释放的热量大小。当所有化学反应都反应完全时,约束空间内温度为准静态温度。因此,在计算准静态温度时,假设各化学反应都反应完全,即取 $\xi(t)=\xi(\infty)$。其他爆炸产物化学反应分析方法与上述方法类似,不再赘述。

3 TNT 炸药约束爆炸准静态温度计算

TNT 炸药爆炸的方程式为[13]:

$$\mathrm{C_7H_5O_6N_3}=2.5\mathrm{H_2O}+3.5\mathrm{CO}+3.5\mathrm{C}+1.5\mathrm{N_2} \quad (22)$$

由式(22)可见,爆炸产物为 $\mathrm{H_2O}$、CO、C 和 $\mathrm{N_2}$,此外,发生化学反应前,密封容器中还有 $\mathrm{O_2}$。假设 TNT 炸药在密封容器内发生约束爆炸,容器内的原始气体为空气,主要成分为:$\mathrm{O_2}$(约 21%)、$\mathrm{N_2}$(约 78%)、惰性气体(约 0.96%)、$\mathrm{CO_2}$(约 0.03%)、水蒸气及其他(约 0.03%)。其中 $\mathrm{O_2}$ 可以与爆炸产物 C、CO 发生反应,同时,在爆炸后容器内为高温高压环境,过量的 C、CO 可以与 $\mathrm{H_2O}$ 发生化学反应,并放出 $\mathrm{H_2}$,而过量的 C 可以与 $\mathrm{H_2}$ 反应生成 $\mathrm{CH_4}$,各化学反应的反应热可以查找化学手册得到,所以,爆炸发生后密封容器内可能的化学反应如表 1 所示。

表 1 298 K **时 TNT 炸药爆炸产物发生的化学反应的反应热**

Table 1 Chemical reaction heat $\Delta_r H_m$ of reactions of TNT detonation products (T=298 K)

化学反应编号	化学反应	$\Delta_r H_m$/(kJ·mol^{-1})
1	$\mathrm{C(s)+O_2(g)=CO_2(g)}$	−393.5
2	$\mathrm{CO(g)+(1/2)O_2(g)=CO_2(g)}$	−282.8
3	$\mathrm{C(s)+(1/2)O_2(g)=CO(g)}$	−110.7
4	$\mathrm{CO(g)+H_2O(g)=CO_2(g)+H_2(g)}$	−41.2
5	$\mathrm{C(s)+H_2O(g)=CO(g)+H_2(g)}$	131.3
6	$\mathrm{C(s)+2H_2(g)=CH_4}$	−74.9

理论上,所有化学反应既可以正向进行,也可以逆向进行。大多数情况下,逆向反应进行的程度很小,可以略去不计。作为一种估算,本文中将爆炸产物发生的化学反应均假定为不可逆反应,大部分学者在爆炸研究中考虑化学反应问题时,通常都采用这样的假定[14-16]。为了确定几个可能同时发生的化学反应的先后顺序,根据盖斯定理[11]及相关化学反应基本知识,作如下假设:

(1)由于无机物合成有机物的反应,反应条件都比较苛刻,因此假设其比无机物之间的反应更难以发生;

(2)由于吸热反应往往需要外界环境提供较高的反应条件,因此,假设吸热反应比放热反应更难以

发生；

(3)如上所述，所有反应其实都可以看作可逆反应，对于放热反应，其化学反应焓越大，证明其逆向反应要进行的话，需要吸收的热量越多，则该逆向反应更难进行，根据化学平衡原理，正向反应更容易发生，因此，假设化学反应焓绝对值越大，则反应越容易发生。

根据上面 3 个假设，式(22)中反应发生的先后顺序为：反应(1)、反应(2)、反应(3)、反应(4)、反应(5)、反应(6)。具体会发生哪几种反应，需要根据 C 与 O_2 的比例关系来确定。此处 C 全部来自炸药 TNT 的产物，O_2 全部来自容器中的空气。因此，取常温常压下空气中 O_2 的体积分数为 0.21，m 为爆炸装药的质量，V 为密封容器的体积，V' 为空气所占体积，V_m 为常温常压下的气体摩尔体积，$\rho_{装药}$ 为炸药的装药密度。根据上述反应发生的先后顺序，可以确定可能发生的化学反应，如表 2 所示，其中 m/V 表示药量体积比。

表 2 爆炸后约束空间内发生化学反应的情况

Table 2 Chemical reactions after confined explosions with different TNT explosive charge volume ratios

$(m \cdot V^{-1})$ /(kg · m^{-3})	发生的化学反应	$(m \cdot V^{-1})$ /(kg · m^{-3})	发生的化学反应
[0,0.371 3)	$C+O_2 \rightarrow CO_2$ $CO+\frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO_2$	[0.557 0,1.114 0)	$C+\frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO$ $CO+\frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO_2$ $CO+H_2O \rightarrow CO_2+H_2$
[0.377,0.487 4)	$C+O_2 \rightarrow CO_2$ $CO+\frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO_2$ $CO+H_2O \rightarrow CO_2+H_2$	[1.114 0,3.899 1)	$C+\frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO$ $C+H_2O \rightarrow CO+H_2$ $CO+H_2O \rightarrow CO_2+H_2$
[0.487 4,0.557 0)	$C+O_2 \rightarrow CO_2$ $CO+\frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO_2$ $CO+H_2O \rightarrow CO_2+H_2$	[3.899 1,+∞)	$C+\frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO$ $C+H_2O \rightarrow CO+H_2$ $C+2H_2 \rightarrow CH_4$

根据式(20)计算任意温度下的比定压热容 $c_{p,m}$ 时，需要知道各反应中相关物质的摩尔比定压热容计算参数，查找物理化学相关教材可得其值如表 3 所示，表中 T_u 表示适用的温度范围。

表 3 式(20)中的摩尔热容计算参数

Table 3 Values of parameters in Eq. (20)

物质	a/(J · mol^{-1} · K^{-1})	b/(J · mol^{-1} · K^{-2})	c'/(J · mol^{-1} · K)	c/(J · mol^{-1} · K^{-3})	T_u/K	$c_{p,m}$/(J · mol^{-1} · K^{-1})
C(s)	17.150	4.270×10^{-3}	-8.79×10^{5}		298～230 0	8.614
CO(g)	26.537	7.683×10^{-3}	-0.46×10^{5}		290～250 0	29.142
CO_2(g)	28.660	35.702×10^{-3}			300～200 0	37.129
H_2O(g)	30.000	10.710×10^{-3}	0.33×10^{5}		298～250 0	33.577
H_2(g)	29.066	-0.836×10^{-3}		2.012×10^{-6}	300～150 0	28.840
O_2(g)	36.162	0.845×10^{-3}	-4.31×10^{5}		298～150 0	29.359
CH_4(g)	14.318	74.663×10^{-3}		-17.426×10^{-6}	291～150 0	35.715
N_2(g)	27.870	4.270×10^{-3}			298～250 0	29.121

对于 TNT 炸药，取装药密度 $\rho_0=1.64$ g/cm^3，则其爆热为 4.19 MJ/kg。

根据 NIST 化学动力学数据库中查询的动力学参数，使用 Arrhenius 定理可以计算得到化学反应速率常数，详细的化学反应动力学过程及动力学参数参考文献[2]。

根据表 2 给出的化学反应动力学分析，结合表 1、3 和文献[2]中的化学反应动力学过程及动力学参数，根据式(15)～(21)可以计算出不同药量体积比下任意时刻爆炸产物发生化学反应释放的热量大小[2]。由式(12)可以计算出爆炸释放热量的大小，再根据式(8)～(11)计算出温度 $T_e(t)$、$T(t)$。取所有反应完全结束的时刻为反应终点，则计算得到的温度值为约束空间内的准静态温度，计算结果如图 2 所示。

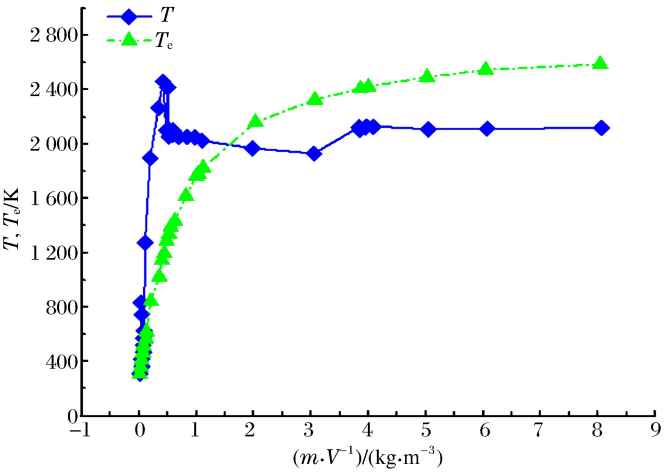

图 2 TNT 炸药约束爆炸准静态温度随药量体积比变化曲线

Fig. 2 Variation curves of temperatures with small explosive charge volume ratios

从图 2 可见，当约束爆炸的药量体积比较小时，考虑化学反应对热量影响计算得到的温度值比不考虑化学反应影响时要大；药量体积比较大时，考虑化学反应对热量影响计算得到的温度值比不考虑化学反应影响时要小。产生这一结果的原因是药量体积比较小时，化学反应以放热反应为主，且可以吸收热量的物质也比药量体积比较大时要少；药量体积比增大到一定的值后，会产生吸热化学反应，且物质组分也更多，吸热能力更强，从而导致温度降低。

考虑化学反应时，曲线在药量体积比为约 0.4 和 3～4 之间存在比较明显的变化。从化学反应动力学角度解释如下：根据表 2 分析的不同药量体积比下发生的化学反应可知，药量体积比为 0.371 时，化学反应由 2 个增加到 3 个，由表 1 可知，增加的反应释放的热量比前 2 个反应要小，由表 3 可知，增加反应的产物(主要是 CO_2)比热容比反应物(主要是 CO 和 O_2)要大，因此，在化学反应释放热量增加减小，产物比热容增大的情况下，出现了温度明显变小的现象。此后，随着药量体积比的增加，一直存在 3 个化学反应，同时，释放热量小而产物比热容大于反应物比热容的化学反应所占的比重越来越大，且当药量体积比增大到 1.113 时，有吸热反应出现，导致此间温度逐渐降低。随着药量体积比的进一步增加，当其值大于 3.890 时，化学反应的情况不再变化，且由于 O_2 的相对含量减少，化学反应释放热量及组分变化趋于稳定，温度值也逐渐趋于稳定，其值在 2 000 K 左右。

由于缺少直接的准静态温度实验数据，下面对考虑爆炸产物化学反应影响和不考虑该影响时的温度计算得到的准静态压力与实验结果及 ConWep 结果进行对比，如图 3 所示。图中结果表明，在计算准静态压力时，采用不考虑爆炸产物化学反应影响的温度时，计算结果与实验结果及 ConWep 计算结果之间的误差较大；采用考虑爆炸产物化学反应影响的温度时，计算结果与实验结果及 ConWep 计算结果基本一致。

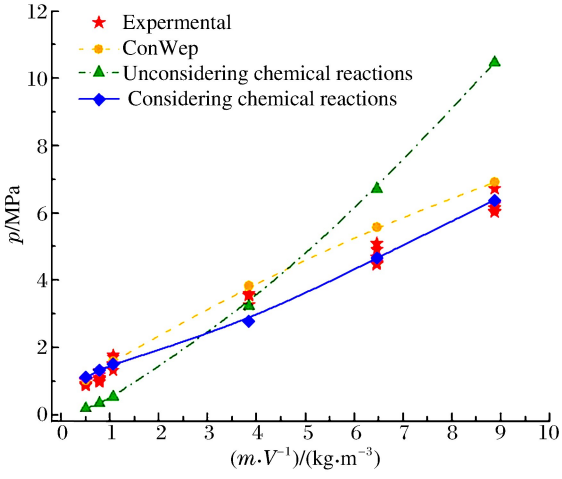

图 3 准静态压力随药量体积比的变化曲线

Fig. 3 Variation curves of quasi-static pressures with charge volume ratios

4 结 论

(1)由于存在约束,爆炸释放的热量聚集在有限的空间内,形成高温高压环境,爆炸产物与约束空间内的氧气在高温高压环境下,发生复杂的化学反应,化学反应释放或吸收热量,从而改变约束空间内的准静态温度大小;

(2)化学反应的类型和进行程度跟爆炸产物和氧气的含量有关,而不同类型的化学反应释放或吸收的热量也不同,因此,随着药量体积比的变化,计算得到的准静态温度存在变化,且在某一药量体积比范围内达到最大值,然后随着药量体积比的继续增大而减小,这是不考虑爆炸产物化学反应无法计算得到的现象;

(3)对于其他类型的炸药,在分析其爆炸特点和爆炸产物组成后,依据本文提供的方法,同样可以计算其考虑爆炸产物化学反应的准静态温度;

(4)考虑爆炸产物化学反应的影响后,可以更准确的计算约束爆炸的准静态温度,为后续进行约束爆照准静态压力等爆炸参数的研究提供重要参考依据和有效参数。

参考文献:

[1] 张守保,黄日德,张殿臣,等.抗偶然爆炸结构设计手册(第1/2卷)[M].北京:中国人民解放军总参工程兵科研三所,1998:26-56.

[2] 钟巍.约束爆炸中的化学反应动力学数值计算[D].西安:西北核技术研究所,2012.

[3] Kuhl A L, Bell J B, Beckner V E, et al. Gasdynamic model of turbulent combustion in TNT explosions[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2011,33(2):2177-2185.

[4] Kuhl A L, Oppenheim A K, Ferguson R E. Thermodynamics of combustion in a confined explosion[R]. Livermore: Lawrence Livermore National Laboratory, 2000:1-4.

[5] Kuhl A L, Ferguson R E, Oppenheim A K. Combustion of TNT products in a confined explosion[R]. Livermore: Lawrence Livermore National Laboratory, 1999:67-89.

[6] Oppenheim A K, Kuhl A L. Dynamic features of closed combustion systems[J]. Progress in Energy and Combustion Science, 2000,26(4/5/6):533-564.

[7] Oppenheim A K, Kuhl A L. Energy loss from closed combustion systems[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2000,28(1):1257-1263.

[8] Kuhl A L, Reichenbach H. Combustion effects in confined explosions[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2009,32(2):2291-2298.

[9] 钟巍,田宙.化学反应动力学应用于约束爆炸的研究进展[J].化学工程,2011,39(9):66-70.
Zhong Wei, Tian Zhou. Research progress in chemical reaction kinetics applied in confined explosions[J]. Chemical Engineering, 2011,39(9):66-70.

[10] 关治,陆金甫.数值分析基础[M].北京:高等教育出版社,2010:344-345.

[11] 印永嘉,奚正楷,张树永.物理化学简明教程[M].4版.北京:高等教育出版社,2009:24-47.

[12] 钟巍,田宙.多种复杂化学反应动力学统一的数值模拟[J].化学工程,2011,39(8):82-85.
Zhong Wei, Tian Zhou. Numerical simulation for some kinds of complex chemical reaction kinetics[J]. Chemical Engineering, 2011,39(8):82-85.

[13] 张宝枰,张庆明,黄风雷.爆轰物理学[M].北京:兵器工业出版社,2000:169.

[14] 严清华,王淑兰,李岳.大型球形密闭容器内可燃气体爆炸过程的数值模拟[J].天然气工业,2004,24(4):101-103.
Yan Qing-hua, Wang Shu-lan, Li Yue. Numerical simulation of flammable gas explosions in large closed spherical vessels[J]. Natural Gas Industry, 2004,24(4):101-103.

[15] 毕明树,尹旺华,丁信伟,等.管道内可燃气体爆燃的一维数值模拟[J].天然气工业,2003,23(4):89-92.
Bi Ming-shu, Yin Wang-hua, Ding Xin-wei, et al. 1-D Numerical simulation of combustible gas deflagration in pipeline[J]. Natural Gas Industry, 2003,23(4):89-92.

[16] 毕明树,尹旺华,丁信伟.圆筒形容器内可燃气体爆燃过程的数值模拟[J].天然气工业,2004,24(4):94-96.

Bi Ming-shu, Yin Wang-hua, Ding Xin-wei. Numerous simulations of flammable gas deflagrations in cylindrical vessels[J]. Natural Gas Industry, 2004,24(4):94-96.

[17] National Institute of Standards and Technology. NIST Chemical Kinetics Database[DB/OL]. http://kinetics.nist.gov/kinetics/index.jsp. 2012-02/2012-04

Calculation of the quasi-static temperature of confined explosions in consideration of the effect of the chemical reactions with detonation products

Zhong Wei[1], Tian Zhou[1], Zhao Yang[2]

(1. *Northwest Institute of Nuclear Technology*, *Xi'an* 710024, *Shaanxi*, *China*;
2. *China Nuclear Power Engineering Co. Ltd.*, *Beijing* 100840, *China*)

Abstract: By focusing our concern on the effect of chemical reactions with detonation products, we have done research on the calculation of the quasi-static temperature of confined explosion. On the basis of the energy conservation, considering the chemical kinetic reaction process of the detonation products, the formula and calculating method of quasi-static temperature were proposed. A computation program was designed using C++ language, which was used to calculate the quasi-static temperature of the TNT confined explosion. Calculation results show that chemical reactions of the detonation products play a very important role in the calculation of the quasi-static temperature in confined explosions, and obviously the temperature varies with the charge volume ratios. Ours is an efficient technique to obtain a more accurate quasi-static temperature and calculate some other parameters of confined explosions.

Key words: mechanics of explosion; quasi-static temperature; confined explosion; TNT explosive charge; chemical reaction kinetics; charge volume ratio

(责任编辑　曾月蓉)

本刊关于稿件、版权等的声明

在投稿、稿件处理、发表等过程中,作者需注意如下问题:

1. 稿件是作者独立取得的原创性研究成果,无抄袭,无一稿多投,未在国内外公开发表过。

2. 稿件无政治错误,不涉及保密和拟申请专利的内容,已经过作者单位保密审查。

3. 作者署名和排序无异议,单位署名和排序无争议,且无知识产权纠纷。在稿件处理过程中,如有作者或单位署名变更,需有全体作者亲笔签名和全部单位盖章同意的书面声明。

4. 稿件由编辑部组织审稿。自收稿之日时,编辑部将在4个月内反馈处理结果。若超过4个月未答复的,作者有权另行处理稿件,但需事先通知编辑部。

5. 对录用的稿件,在尊重稿件内容的基础上,编辑部有权作必要的修改和删减,按规定进行标准化和规范化。

6. 稿件录用后,稿件的所有出版权归编辑部。

7. 稿件发表后,编辑部赠送样刊,并一次性付给作者稿酬及版权转让费。

爆炸与冲击

2015年11月25日