DOI: 10.11883/1001-1455(2017)01-0046-07

不同升温速率下 AP/HTPB 底排装置慢速烤燃的数值模拟*

李文凤,余永刚,叶 锐,杨后文
(南京理工大学能源与动力工程学院,江苏 南京 210094)

摘要: 为研究在不同升温速率下高氯酸铵(ammonium perchlorate, AP)/端羟基聚丁二烯(tydroxyl-terminated polybutadiene, HTPB)底排装置的慢速烤燃特性,建立 AP/HTPB 底排推进剂二维轴对称非稳态传热模型和两步化学动力学反应模型。在不同升温速率下,分析底排装置的慢速烤燃响应特性。计算结果表明:在慢速烤燃的条件下,烤燃响应点发生在底排药柱与空气腔的接触面左侧,升温速率对底排药柱的着火延迟时间和烤燃响应点位置有较大影响。随着升温速率的提高,着火延迟时间变短,烤燃响应点向中心侧移动。升温速率对烤燃响应点的着火温度影响较小。

关键词: 爆炸力学;升温速率;慢速烤燃;底排装置;AP/HTPB
中图分类号: O389 **国标学科代码**: 13035 **文献标志码**: A

为确保武器弹药在贮存、转运、维护使用过程中的安全性,世界各国对武器弹药的安全性开展了广泛的研究。热引燃是能够激发含能材料着火、燃烧或起爆的最基本形式[1],而烤燃实验是用来检测含能材料对于意外热刺激的敏感程度和发生反应时的剧烈程度,所以分析含能材料的烤燃特性对其热安全性研究具有十分重要的意义。目前,热安全性的研究主要通过烤燃实验和数值模拟。标准烤燃实验成本高、危险性大且实验周期长,而烤燃数值模拟不仅能够有效地分析烤燃特性,而且方便改变升温速率、实验约束条件等工况条件。

底部排气弹因具有增程效率高、射弹散布小等优点而被广泛运用于火炮系统,而 AP/HTPB 复合固体推进剂是底排装置中常用的底排药柱,其燃烧稳定且较易控制燃烧速度,具有良好的生产工艺性。目前学者们对炸药的烤燃实验与数值模拟研究较多[2-3]。随着以 AP 基为主的复合固体推进剂越来越广泛的运用于火箭发动机和火炮系统,其热安全性问题也受到更多的关注。S. Y. Ho[4]设计了超小型尺寸烤燃爆炸装置(super small-scale cookoff bomb, SSCB),研究和对比了在快速和慢速烤燃条件下 AP/HTPB 推进剂的反应剧烈程度,分析了推进剂的热力学性质与烤燃行为的联系。P. Gillard 等[5]详细分析了在慢烤燃条件下 AP/HTPB 的分解反应过程,并且考虑了 AP 与 HTPB 间的质量和热量传递作用,对其过程进行了数值模拟。R. I. Caro 等[6]利用小尺寸慢速烤燃装置(slow cook-off test vehicles, SCTV),分析了以 HTPB 和端羟基聚醚(hydroxy terminated polyether, HTPE)这 2 种不同种类的推进剂在相同慢速烤燃条件下反应发生的响应程度,发现 HTPE 中有机相的液化是两种推进剂在慢烤条件下响应程度差异的重要影响因素。陈中娥等[7]利用同步差示/热重联用仪和扫描电镜,对比分析了 HTPB 推进剂和高能硝酸酯增塑聚醚(nitrate ester plasticized polyether propellant, NEPE)推进剂在慢速烤燃条件下的热分解特性和烤燃行为的关系,认为 AP 分解形成的多孔性物质是导致 HTPB 烤燃响应剧烈的主要因素。赵孝彬等[8]利用慢速烤燃装置研究了 HTPE 和聚叠氮缩水甘油醚(glycidyl azide polymer, GAP)推进剂的慢速烤燃特性的影响因素,发现配方因素和约束条件这 2 个方面对慢速烤燃特性的影响作用较大。

* **收稿日期**: 2015-05-18; **修回日期**: 2015-09-17
基金项目: 国家自然科学基金项目(51176076)
第一作者: 李文凤(1990—),男,博士研究生; **通信作者**: 余永刚,yyg801@njust.edu.cn。

本文中基于 AP/HTPB 复合固体推进剂两步分解反应，建立 AP/HTPB 底排推进剂二维轴对称非稳态传热模型和两步化学动力学反应模型，并同文献中已有的实验结果对比，验证模型的合理性。在此基础上，对比分析 3.3、4.7 和 6.0 K/h 这 3 种慢速升温速率对以 AP/HTPB 复合推进剂为药柱的底排装置热烤燃响应过程的影响，以期为弹药安全性问题提供参考。

1　烤燃模型

1.1　物理模型

本文中采用的二维轴对称底排装置模型如图 1 所示，包含壳体、包覆层、推进剂、环氧树脂板及空气腔等 5 个部分。按照某底部排气弹尺寸简化计算模型[9]，装置总长 90.44 mm，底部直径 145 mm。底排药柱内径 43.18 mm，药柱外径（含包覆层）120 mm，药柱（含包覆层）长 75.44 mm，对从壳体的上下侧、右侧以及空气腔的右侧进行加热，主要监测药柱中心点 A 点、药柱外表面端点 B 点和烤燃响应点 C 点这 3 个特征点的温度变化。对加热模型进行如下简化假设：(1)仅考虑 AP 与 HTPB 之间的化学反应，不考虑气体对复合推进剂的化学影响因素。空气腔内仅考虑热传导，不考虑对流效应。(2)装置左侧由于与弹体相连，将装置左侧面简化为绝热边界。(3)推进剂及整个壳体在加热过程中均为固体，不考虑推进剂的相变。(4)推进剂的自热反应遵循 Arrhenius 定律。(5)推进剂和壳体的物理参数均为常数，不随温度变化。

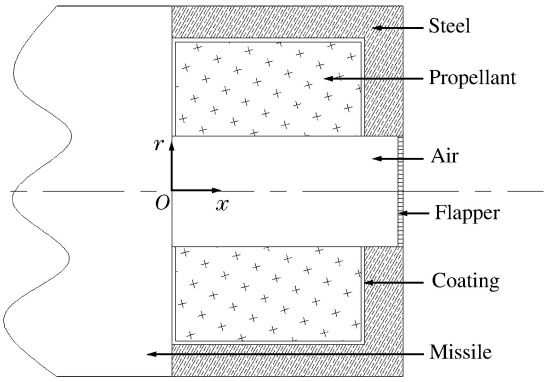

图 1　底排装置示意图

Fig. 1　Schematics of base bleed unit

1.2　数学模型

基于 AP/HTPB 两步分解反应机理[10]为：

$$NH_4ClO_4 \xrightarrow{R_1} O_2 + H_2O + HCl + N_2$$

$$HC + \beta(O_2 + H_2O + HCl + N_2) \xrightarrow{R_2} CO_2 + H_2O + HCl + N_2$$

反应速率 R_1 和 R_2 采用如下形式：

$$R_1 = D_1 \exp\left(-\frac{E_1}{RT}\right) p^{n_1} \rho_1$$

$$R_2 = D_2 \exp\left(-\frac{E_2}{RT}\right) p^{n_2} \rho_2 \rho_3$$

式中：$\beta=7.51$，为 AP/HTPB 质量当量比；n_1 和 n_2 为压力指数，$n_1=1.744$，$n_2=1.750$；D_1 和 D_2 为指前因子；E_1 和 E_2 为活化能；压力 $p=\rho RT$，ρ_1、ρ_2 和 ρ_3 分别为物质 AP、HTPB 和分解产物的密度；R 为摩尔气体常数。

组分守恒方程为：

$$\rho \frac{D\omega_1}{Dt} = -R_1$$

$$\rho \frac{D\omega_2}{Dt} = -R_2$$

$$\rho \frac{D\omega_3}{Dt} = R_1 - \beta R_2$$

式中：ω_1、ω_2 和 ω_3 分别为物质 AP、HTPB 和分解产物的质量分数，ρ 为 AP/HTPB 底排药的密度。

固相能量方程：

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t}=\frac{\lambda}{r}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial T}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial x}\left(r\frac{\partial T}{\partial x}\right)\right]+\Sigma(R_i q_i)$$

式中：c_p 为 AP/HTPB 底排药的定压热容，$i=1,2$；q_1 和 q_2 分别为 AP/HTPB 两步分解反应的反应热。

壳体外壁及环氧树脂板壁面加热条件：

$$T_r=T_0+Kt$$

式中：T_0 为环境温度，K 为升温速率，T_r 为外壁温度。

装置左侧边界壁面设为绝热边界：

$$\lambda_i \nabla T_i=0$$

式中：λ_i 代表金属壳体的导热系数，T_i 代表金属壳体左侧壁面的温度。

各相邻区域交界面有温度连续及热流连续条件：

$$T_m\big|_{r=r_n}=T_n\big|_{r=r_n}$$

$$T_m\big|_{x=x_n}=T_n\big|_{x=x_n}$$

$$\lambda_m\frac{\partial T_m}{\partial r}\bigg|_{r=r_n}=\lambda_n\frac{\partial T_n}{\partial r}\bigg|_{r=r_n}$$

$$\lambda_m\frac{\partial T_m}{\partial x}\bigg|_{x=x_n}=\lambda_n\frac{\partial T_n}{\partial x}\bigg|_{x=x_n}$$

式中：m 和 n 代表相邻 2 种材料，λ_m 和 λ_n 分别代表相邻 2 种材料的导热系数；r_n、x_n 分别代表 n 材料的表面半径和横向轴坐标。

2 网格划分及计算方法

计算时的初始温度为 300 K。通过用户自定义标量引入 3 种组分，通过用户自定义函数引入各方程的源项，划分网格时采用均匀四边形网格，共划分 6 643 个网格，如图 2 所示。由于慢速烤燃问题属于非稳态问题，计算采用压力隐式算子分割算法（pressure implicit split operator，PISO）比较合适。

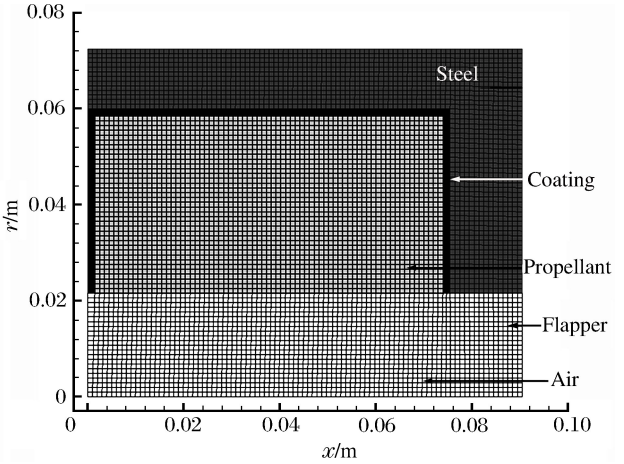

图 2 网格尺寸图

Fig. 2 Grid size chart

3 计算结果与分析

3.1 与实验结果的比较

文献[10]中以按一定比例缩小的简化火箭发动机为实验模型，先快速升温至 188 ℃，然后恒温一定的时间，最后以6 ℃/h的慢速升温速率进行加热，直至发生烤燃响应。本文中针对上述实验工况进行数值模拟，计算结果如图 3 所示。计算所用的 AP/HTPB 动力学参数及物性参数如表 1～2 所示。由图 3 可知，AP/HTPB 固体推进剂的中心点的升温曲线与文献[10]中实验的中心点测温结果吻合较好，数值模拟结果显示推进剂烤燃响应时间为 52 600 s 左右，着火温度约为 345 ℃，与实验结果相符。由此可见，本文中采用的数值计算模型是合理的。

表 1 AP/HTPB 推进剂的动力学参数[10]

Table 1 Parameters of AP/HTPB propellant[10]

反应步骤	D_i	E_i/(kJ·mol^{-1})	q_i/(kJ·kg^{-1})
1	800	137.18	−297.0
2	1 100	178.75	9 643.2

表 2 物性参数[3,11]

Table 2 Parameters of materials[3,11]

材料	ρ/(kg·m^{-3})	λ/(W·m^{-1}·K^{-1})	c_p/(J·kg^{-1}·K^{-1})
壳体	8 030	16.270	502.48
底排药	1 826	0.389	1 255.20
包覆层	950	0.276	2 860.00

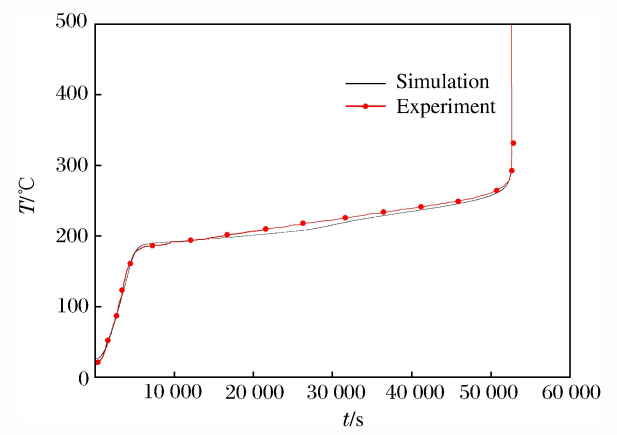

图 3 中心点温度时程曲线计算与实验对比

Fig. 3 Comparison of the temperature histories at center point in calculation and experiment

3.2 底排装置慢速烤燃特性的数值预测

借助文献[10]中方法研究底排装置的慢速烤燃特性。在 1 h 内将底排装置加热至188 ℃，再恒温 10 h，然后分别以 3.3、4.7、6.0 K/h 的加热条件对其加热，直至推进剂烤燃响应为止。

图 4 所示为底排装置在 1 h 和 11 h 的温度分布云图。在 0～1 h 内，壳体温度从常温 300 K 快速上升至 461 K 左右。由于包覆层、推进剂和空气的导热系数远小于壳体的导热系数，热量来不及传给推进剂内部，致使底排装置内的温差较大，最高温差约 120 K。经历了 10 h 的恒温时间后，热量有足够的时间传递至推进剂内部，从 11 h 的温度云图可以发现最大温差缩小至约 10 K。

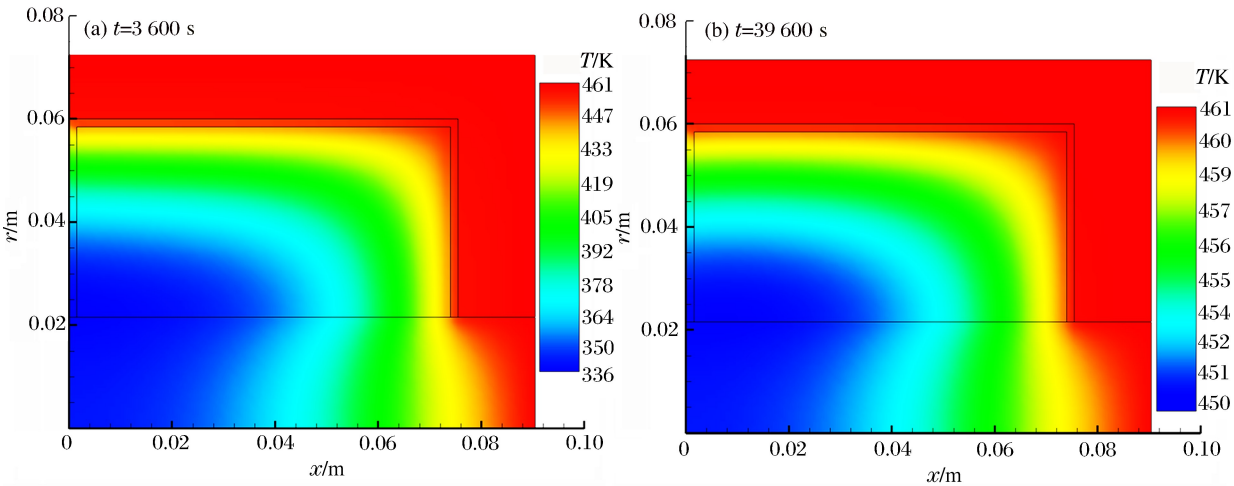

图 4 不同时刻下装置的温度分布云图

Fig. 4 Contour of temperature distribution on the unit at different times

图 5 所示为在 3.3、4.7、6.0 K/h 这 3 种升温速率的加热条件下底排装置在各个不同时刻的温度分布云图，对应的着火时间依次约为 103 735 s(约 28.82 h)、86 817 s(约 24.12 h)、78 384 s(约 21.77 h)。由于加热速率进行十分缓慢，热量有足够的时间进行传递，底排装置内部的温差随时间的增大而减小。另外，随着推进剂温度的逐渐升高，推进剂药柱内局部开始发生自热反应，但由于此时的温度达不到反应温度，自热反应的热量向周围传递。随着时间的推移，在推进剂内部某区域的温度达到着火条件，推进剂发生烤燃响应。由图 5 中看出，在 3.3、4.7 和 6.0 K/h 的升温速率下，推进剂的着火位置均处于推进剂与空气腔的连接处，烤燃响应区域的中心处 C 点分别位于(0.013，0.022)、(0.018，0.022)、(0.025，0.022)点附近，这是由于随着慢速升温速率的提高，推进剂内部右侧区域温度上升相对较快，从而更快地发生自热反应。由此可见，随着升温速率的增大，烤燃响应点会逐渐右移。

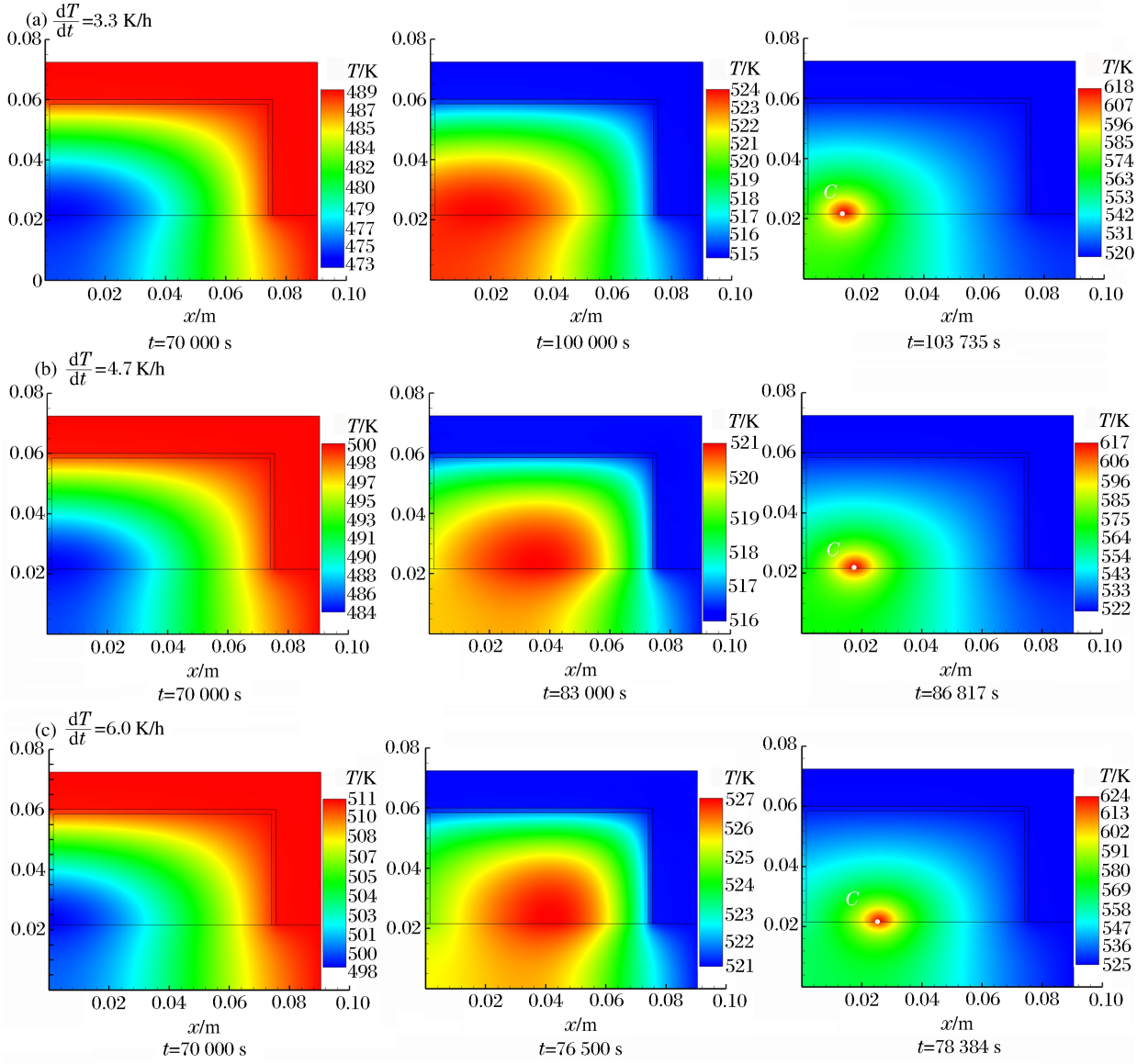

图 5 3 种升温速率下装置在不同时刻的温度分布云图

Fig. 5 Contour of temperature distribution on the unit at different times at different heating rates

药柱中心处点 $A(0.038,0.040)$、药柱外表面端点 $B(0.074,0.059)$和药柱烤燃响应点 C 处的温度随时间变化曲线如图 6 所示。在 0～1 h 内,由于壳体的导热率较大,推进剂 B 点升温曲线的斜率明显大于 A 点和 C 点处的斜率。经历了 10 h 的恒温阶段之后,各点温度相差明显缩小。在慢速烤燃的前期阶段,推进剂表面温度大于其内部区域温度。随着时间的推移,由于推进剂内部发生缓慢的自热反应,A 点及 C 点的温升曲线斜率明显大于 B 点的升温曲线斜率。在 3.0、4.7、6.0 K/h 的升温速率下,当分别进行到约 25.68、22.55、20.79 h 时,A 点及 C 点温度大于 B 温度。此后 C 点温度开始高于 A 点温度且温度上升速率明显增大,即在推进剂内部由于自热反应产生的热量开始积聚在推进剂与空气腔的接触面附近,从而形成烤燃响应点。

图 7 所示为 3 种不同升温速率下烤燃响应点 C 处的升温曲线对比图。在相同快速升温和恒温阶段,不同慢速升温速率下烤燃响应点的温度上升趋势均相同。随着升温速率的增加,烤燃响应点的温升曲线斜率相差明显加大。由图 7 中可知,在 3 种不同升温速率下,推进剂的着火温度均为 620 K 左右,这与文献[7]和[12]中的 AP/HTPB 复合固体推进剂分解放热峰值接近,说明计算结果是合理准确的。因此,在慢速升温条件下,升温速率的高低对着火温度的影响较小。

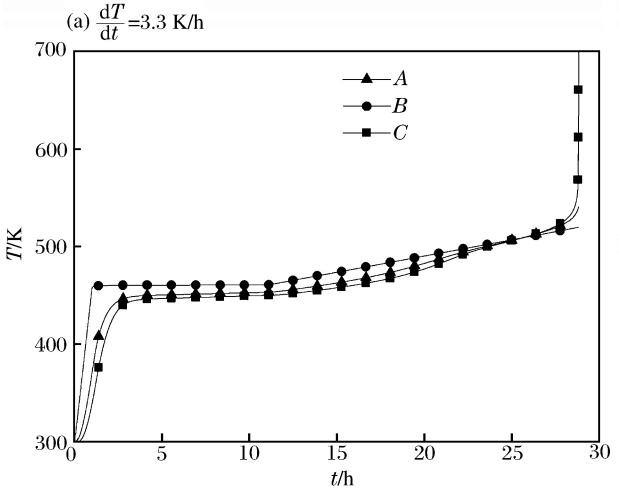

图 6　各特征点在不同升温速率下的温升曲线

Fig. 6　Histories of temperature at the feature points at different heating rates

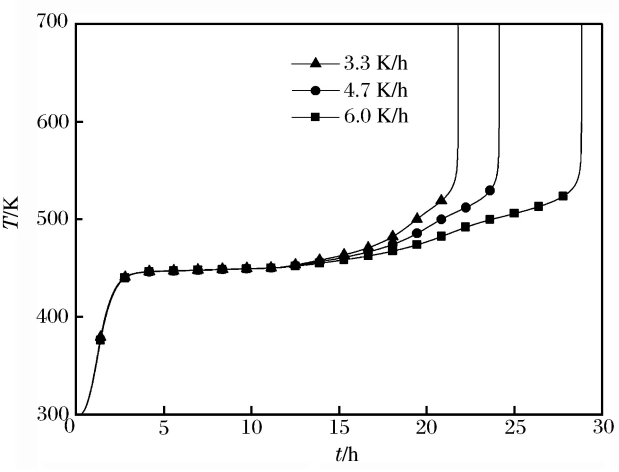

图 7　不同升温速率下烤燃响应点的温升曲线

Fig. 7　Histories of temperature at the cook-off response point at different heating rates

4　结　论

通过对不同升温速率下底排装置慢速烤燃特性进行数值模拟和分析，可得到如下结论：

(1)本文中建立的 AP/HTPB 推进剂慢速烤燃模型计算结果与文献[10]的结果吻合较好，能够较好地反映 AP/HTPB 复合固体推进剂的慢烤特性，证实该计算模型是合理的。

(2)底排装置的温度云图表明：在 3.3、4.7 和 6.0 K/h 这 3 种慢速升温条件下，某底排装置内的 AP/HTPB 药柱的烤燃响应点发生在药柱与空气腔的接触面上，烤燃响应点分别位于(0.013，0.022)、(0.018，0.022)、(0.025，0.022)附近。随着升温速率的增大，烤燃响应点会向右移动，着火延迟时间缩短。热烤燃的着火温度在 620 K 左右，升温速率的大小对 AP/HTPB 着火温度的影响很小。

参考文献：

[1]　张为华，陈广南. 固体火箭发动机撞击与热安全性分析[M]. 北京：国防工业出版社，2008：8-15.

[2]　马欣，陈朗，鲁峰，等. 烤燃条件下 HMX/TATB 基混合炸药多步热分解反应计算[J]. 爆炸与冲击，2014，34(1)：67-74.

Ma Xin，Chen Lang，Lu Feng，et al. Calculation on multi-step thermal decomposition of HMX and TATB-based composite explosive under cook-off conditions[J]. Explosion and Shock Waves，2014，34(1)：67-74.

[3]　向梅，黄毅民，饶国宁，等. 不同升温速率下复合药柱烤燃实验与数值模拟研究[J]. 爆炸与冲击，2013，33(4)：394-

400.
Xiang Mei, Huang Yimin, Rao Guoning, et al. Cook-off test and numerical simulation for composite charge at different heating rates[J]. Explosion and Shock Waves, 2013,33(4):394-400.

[4] Ho S Y. Thermomechanical properties of rocket propellants and correlation with cook-off behaviour[J]. Propellants, Explosives, Pyrotechnics, 1995,20(4):206-214.

[5] Gillard P, Longuet B. Investigation of heat transfer and heterogeneous reactions during the slow cook off of a composite propellant[J]. Journal of Loss Prevention in the Process Industries, 2013,26(6):1506-1514.

[6] Caro R I, Bellerby J M. Behavior of hydroxyl-terminated polyether (HTPE) composite rocket propellants in slow cook-off[J]. International Journal of Energetic Materials and Chemical Propulsion, 2008,7(3):171-185.

[7] 陈中娥,唐承志,赵孝彬.固体推进剂的慢速烤燃行为与热分解特性的关系研究[J].含能材料,2005,13(6):393-396.
Chen Zhonge, Tang Chengzhi, Zhao Xiaobin. Relationship between slow cook-off behavior and thermal decomposition characteristics of solid propellant[J]. Chinese Journal of Energetic Materials, 2005,13(6):393-396.

[8] 赵孝彬,李军,程立国,等.固体推进剂慢速烤燃特性的影响因素研究[J].含能材料,2011,19(6):669-672.
Zhao Xiaobin, Li Jun, Cheng Liguo, et al. Influence factors of slow cook-off characteristic for solid propellant[J]. Chinese Journal of Energetic Materials, 2011,19(6):669-672.

[9] 郭锡福.底部排气弹外弹道学[M].北京:国防工业出版社,1995:125-126.

[10] Kim K, Kim C, Yoo J, et al. Test-based thermal decomposition simulation of AP/HTPB and AP/HTPE propellants[J]. Journal of Propulsion and Power, 2011,27(4):822-827.

[11] Gwak M, Jung T, Yoh J J. Friction-induced ignition modeling of energetic materials[J]. Journal of Mechanical Science and Technology, 2009,23(7):1779-1787.

[12] 沈慧,余永刚.AP/HTPB 底排推进剂的 TG 测量结果与分析[J].科学技术与工程,2013(25):7501-7504.
Shen Hui, Yu Yonggang. Study on analysis of TG measurements results of AP/HTPB base bleed propellant[J]. Science Technology and Engineering, 2013(25):7501-7504.

Simulation of cook-off for AP/HTPB composition propellant in base bleed unit at different heating rates

Li Wenfeng, Yu Yonggang, Ye Rui, Yang Houwen

(*School of Energy and Power Engineering, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing* 210094, *Jiangsu, China*)

Abstract: To investigate the characteristics of the AP/HTPB composition propellant at different heating rates in the slow cook-off, we constructed a a model consisting of two-dimensional unsteady-state heat transfer and two-step chemical reaction kinetics. The characteristics of the composition propellant at the heating rates of 3.3, 4.7 and 6 K/h were analyzed respectively. The results show that the ignition position occurs in the left side of the interface between the propellant and the gas. The heating rate has a great effect on the ignition time and the position for the composition propellant. As the heating rate increases, the ignition delay time decreases and the ignition position moves to the right. The change of the heating rate has limited impact on the ignition delay temperature.

Keywords: mechanics of explosion; heating rate; slow cook-off; base bleed; AP/HTPB

(责任编辑 王易难)