文章编号：1000-5773(2010)01-0015-06

悬浮 RDX 炸药粉尘爆轰的数值模拟*

洪 滔，林文洲，秦承森

（北京应用物理与计算数学研究所，北京 100088）

摘要：用两相流模型对悬浮 RDX 炸药粉尘爆轰波进行了数值模拟。RDX 炸药颗粒在爆轰波阵面后的高温高速气流中加速并升温，颗粒表面发生熔化。参考液滴在高速气流作用下剥离的效应，假设炸药熔化部分在高速气流的作用下发生剥离，破碎成极小的颗粒，瞬时发生分解反应，释放出能量支持爆轰波传播。数值模拟了在不同粒径和浓度的悬浮 RDX 炸药粉尘中爆轰波的发展与传播过程，得到了爆轰波流场中气-固两相的物理量分布，并确定了爆轰波参数。在较低的 RDX 粉尘浓度条件下，爆轰波阵面压力的峰值曲线出现振荡。当 RDX 粉尘浓度在 80～150 g/m^3 时，数值模拟得到的爆轰波阵面压力峰值曲线的振荡是规则的；当 RDX 粉尘浓度为 70 g/m^3 时，爆轰波阵面压力峰值曲线出现不规则振荡。

关键词：两相爆轰；RDX 粉尘；点火

中图分类号：O382 **文献标识码**：A

1 引 言

早期的云爆弹通常采用液体燃料，但是液体燃料易挥发，性能不稳定，不易储存且毒性大，因此新一代的云爆弹使用固-液混合燃料或固体燃料。云爆弹利用装药将其周围的可燃液体或固体粉尘（或液体-固体粉尘混合物）燃料较均匀地抛洒到一定的空间范围，液体雾粒或粉尘与空气充分混合，形成爆炸性多相混合物系统，它在二次点火冲击波作用下，利用燃料与空气反应释放出的巨大能量，发生大范围的云雾爆轰。

对于气体-液体燃料颗粒的两相爆轰已有较多的理论分析、实验和数值模拟研究[1-3]。对于用于云爆弹燃料的铝粉尘爆轰也有一些研究结果[4-5]。Eidelman 等对 RDX 粉尘爆轰进行了数值模拟研究，他们主要针对高密度的粉尘爆轰问题进行研究[6]。本工作研究悬浮 RDX 炸药粉尘的两相爆轰问题。在气-固两相爆轰中，颗粒的点火与放能过程是一个重要的问题。对于气-液两相爆轰，燃料颗粒在爆轰波阵面后的高速气流中发生剥离，形成尺寸极小的雾滴并汽化[7]，与气体中的氧发生化学反应。对于气-固两相爆轰，固体颗粒需要达到一定的点火温度才能发生化学反应[8]。RDX 炸药的熔点较低，在高温气流中发生熔化后，颗粒不再是单纯的固体。本文中提出了炸药颗粒在爆轰波阵面后放能过程的模型，对悬浮炸药粉尘中的爆轰波进行了数值模拟研究。

2 悬浮 RDX 炸药粉尘的爆轰模型

用两相流模型对悬浮 RDX 粉尘爆轰进行数值模拟。采用一维非定常运动方程描述气体和颗粒的运动，气体和固体满足各自的守恒方程，计算中考虑气体-固体颗粒的质量、动量和能量的交换。模型中假定：

* **收稿日期**：2009-02-20；**修回日期**：2009-05-26

基金项目：国家自然科学基金(10672025)；国家自然科学基金委员会-中国工程物理研究院 NSAF 联合基金重点项目(10676120)

作者简介：洪 滔(1962—)，男，博士，博士生导师，研究员，主要从事爆轰理论研究. E-mail：hongtao@iapcm.ac.cn

颗粒均匀分布在气体中,炸药颗粒的初始直径相同,单个颗粒温度是均匀的,颗粒所占的体积很小,颗粒间的相互作用可以忽略;化学反应所释放的能量仅被气体吸收。描述气体和颗粒的运动方程如下。

(1) 气体的守恒方程

质量守恒

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1\rho_1)+\frac{\partial}{\partial x}(\alpha_1\rho_1 u_1)=I_{\mathrm{d}} \tag{1}$$

动量守恒

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1\rho_1 u_1)+\frac{\partial}{\partial x}(\alpha_1\rho_1 u_1^2)=-\frac{\partial p}{\partial x}-F_{\mathrm{d}}+I_{\mathrm{d}}u_2-\frac{4}{D_{\mathrm{h}}}\tau_{\mathrm{w}} \tag{2}$$

能量守恒

$$\frac{\partial}{\partial t}[\alpha_1\rho_1(E_1+0.5u_1^2)]+\frac{\partial}{\partial x}[\alpha_1\rho_1 u_1(E_1+0.5u_1^2+\frac{p}{\rho_1})]=-Q_{\mathrm{d}}+Q_{\mathrm{e}}-F_{\mathrm{d}}u_2+I_{\mathrm{d}}(E_2+0.5u_2^2) \tag{3}$$

(2) 颗粒的守恒方程

质量守恒

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_2\rho_2)+\frac{\partial}{\partial x}(\alpha_2\rho_2 u_2)=-I_{\mathrm{d}} \tag{4}$$

动量守恒

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_2\rho_2 u_2)+\frac{\partial}{\partial x}(\alpha_2\rho_2 u_2^2)=F_{\mathrm{d}}-I_{\mathrm{d}}u_2 \tag{5}$$

能量守恒

$$\frac{\partial}{\partial t}[\alpha_2\rho_2(E_2+0.5u_2^2)]+\frac{\partial}{\partial x}[\alpha_2\rho_2 u_2(E_2+0.5u_2^2)]=Q_{\mathrm{d}}+F_{\mathrm{d}}u_2-I_{\mathrm{d}}(E_2+0.5u_2^2)-Q_{\mathrm{r}} \tag{6}$$

式中:下标“1”和下标“2”分别表示气体和颗粒;ρ 为密度,u 为速度,p 为气体压力,E 为内能,α_1、α_2 为气体和颗粒的体积分数,满足 $\alpha_1+\alpha_2=1$。气体和固体颗粒之间的作用力 F_{d}、对流热传导 Q_{d} 见文献[8]。

静止状态下,炸药颗粒在高温环境中由于热传导的作用,温度升高,导致炸药点火。在两相爆轰波中,炸药颗粒在爆轰波前导激波的作用下开始运动,并由于对流热传导开始升温。当温度升高到熔点时,表层炸药开始熔化。目前,对炸药颗粒在高温高速气流中点火并发生反应的研究结果较少,这里参考液滴在高速气流作用下被剥离的现象,认为炸药液化部分在气流的作用下被剥离,并在高温气体环境中瞬时分解,释放出能量。I_{d} 是由于炸药剥离而引起的单位体积内颗粒的质量变化率,表达式如下

$$I_{\mathrm{d}}=\begin{cases}0 & T_2<T_{\mathrm{m}}\\ -Q_{\mathrm{d}}/L & T_2\geqslant T_{\mathrm{m}}\end{cases} \tag{7}$$

式中:L 是炸药的汽化热,T_{m} 是炸药的熔点。炸药的分解反应为 $C_3H_6N_6O_6 \longrightarrow 3H_2O+3CO+3N_2$[9],产物中的部分 CO 与空气中的 O_2 发生以下反应 $2CO+O_2 \rightleftharpoons 2CO_2$。$Q_{\mathrm{e}}$ 是化学反应所释放的能量。气体组分的质量变化方程如下

$$\frac{\partial(\rho_1\alpha_1 Y_j)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}(\rho_1\alpha_1 Y_j u_1)=\omega_j \tag{8}$$

气体中共有 5 种组分:$j=1$ 为 O_2,$j=2$ 为 N_2,$j=3$ 为 CO_2,$j=4$ 为 H_2O,$j=5$ 为 CO。气体的状态方程为

$$p=\rho RT\sum_{j=1}^{N}\frac{Y_j}{W_j} \tag{9}$$

式中:Y_j 是组分浓度,W_j 是克分子量。

用具有二阶精度的 MacCormack 差分格式和 FCT 方法[10]求解两相流体力学微分方程组。编制了求解两相系统中爆轰波发展的程序,用于数值模拟点火后两相系统爆轰波的发展过程,得出爆轰波的结构和参数。

3 数值模拟结果

数值模拟中,点火段用高温高速气体模拟,其它部分是悬浮炸药粉尘和空气的两相混合物。点火段

左边为固壁条件。图 1 是直径为 30 μm、散布在空气中的粒子浓度为 750 g/m^3 的悬浮 RDX 粉尘爆轰波的数值模拟结果。图 1 中显示了时间间隔为 400 μs、从 400 至 3 200 μs 爆轰波流场的压力曲线。图 2 是爆轰波传播过程中波阵面压力的峰值曲线。结果显示,点火以后爆轰波很快趋于稳定。图 3 是爆轰波波阵面附近部分流场中的物理量分布,从图 3 中可以看到,前导激波后流场物理量的变化图像。图 3(a)是气体的压力分布,在悬浮炸药粉尘爆轰波的前导激波后是一个压缩波,在这个区域里,气体压力上升;开始化学反应后,气体压力下降,其机制见参考文献[5]。图 3(b)是气体与颗粒的速度分布。结果显示,粒子在前导激波后一直处于加速过程,粒子的速度与气体的速度有明显的差别;当图中的粒子速度显示为零时,表明粒子已经全部消耗完毕。图 3(c)是气体与粒子的温度分布。前导激波后的压缩区内,气体温度上升,在放能区,气体温度再次快速上升。图 3(d)是颗粒直径变化图。当颗粒消耗完毕时,在气体压力和速度图中对应着拐点,而气体的温度则达到极大值。

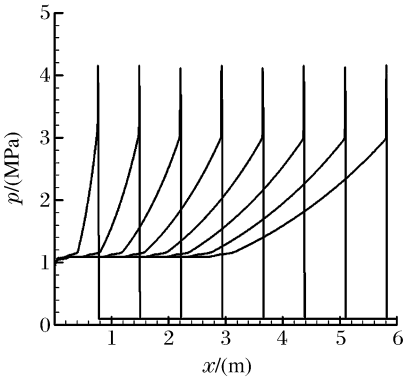


图 1　爆轰波流场中不同时刻的压力分布

Fig. 1　Pressure profile in the flow field at different times

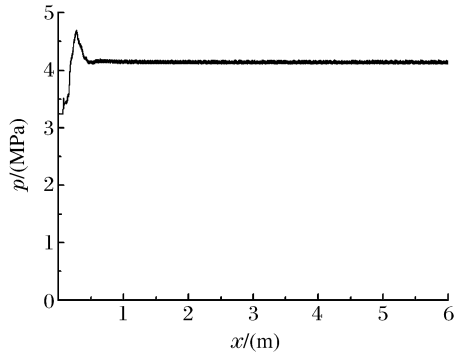
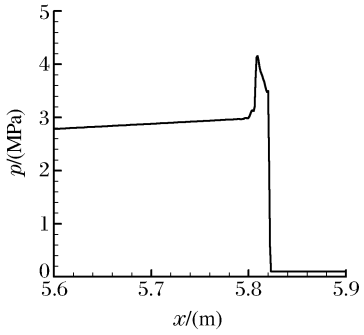
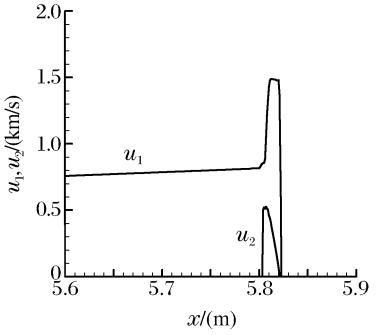


图 2　不同位置处爆轰波阵面的压力峰值

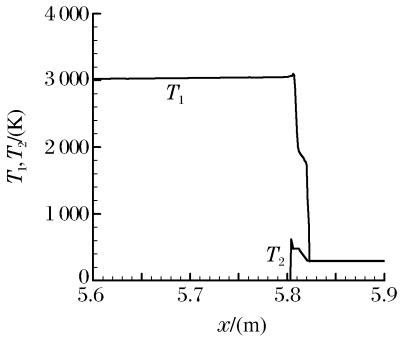
Fig. 2　Peak pressure of detonation at different position



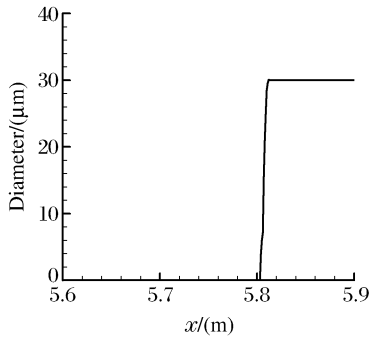
(a) Pressure distribution



(b) Velocity distribution



(c) Temperature distribution



(d) Particle diameter distribution

图 3　爆轰波流场中波阵面局部物理量分布图

Fig. 3　Parameters nearby detonation wave front

表 1 列出了由数值模拟得到的不同颗粒尺寸的悬浮 RDX 粉尘爆轰波在 CJ 点处气体的压力、密度、速度和温度值比较。在 CJ 点处满足 $D=u_1+c_1$，其中 D 为爆轰波速度，u_1 为气体速度，c_1 为气体声速。表中还列出了粒子的点火距离和反应区长度以及激波阵面到 CJ 点的距离。点火距离是指爆轰波阵面后开始点火的粒子离前导激波的距离，反应区长度是指爆轰波中粒子开始点火到粒子消耗完毕的区域。表 1 中，L_I 表示点火距离(Ignition Distance)，L_R 表示反应区(Chemical Reaction Zone)长度。从表 1 中的结果可以看出，颗粒的直径变化对爆轰波参数基本没有影响。这是因为炸药在 CJ 点之前已经完全释放出能量。

表 2 列出了不同浓度的 RDX 粉尘爆轰波参数。图 4 是爆轰波阵面的压力极值曲线。当粉尘浓度为 600、450、300 g/m^3 时，爆轰波点火后很快趋于定常状态。当粉尘浓度为 150 g/m^3 时，压力极值曲线出现振荡。

表 1 不同颗粒直径的两相爆轰波的 CJ 参数

Table 1 CJ parameters of detonation wave with different particle diameters

Particle diameter /(μm)	D /(m/s)	p_{CJ} /(MPa)	ρ_{CJ} /(kg/m^3)	u_{CJ} /(m/s)	T_{CJ} /(K)	p_{max} /(MPa)	L_I /(mm)	L_R /(mm)	L_{CJ} /(mm)
20	1795	2.91	3.50	796	3032	4.18	7	5	86
30	1801	2.93	3.52	799	3038	4.16	11	9	73
40	1802	2.93	3.52	800	3040	4.17	16	9	59
50	1801	2.92	3.52	800	3037	4.18	21	11	68

表 2 不同 RDX 粉尘浓度的两相爆轰波的 CJ 参数

Table 2 CJ parameters of detonation wave with different particle concentration

Particle concentration /(g/m^3)	D /(m/s)	p_{CJ} /(MPa)	ρ_{CJ} /(kg/m^3)	u_{CJ} /(m/s)	T_{CJ} /(K)	p_{max} /(MPa)	L_I /(mm)	L_R /(mm)
600	1739	2.53	3.24	769	2878	3.71	12	9
450	1650	2.08	2.94	722	2619	3.21	13	9
300	1508	1.57	2.63	646	2176	2.54	16	9
150	1059	0.72	2.45	428	1001	1.37	33	11

图 5 是浓度为 100 g/m^3 时爆轰波阵面的压力极值曲线。爆轰波传播 3 m 后开始出现了有规则的周期性振荡，平均波长为 32.5 cm。在达到稳定的周期性振荡阶段，爆轰波的平均速度为882 m/s。

对颗粒直径为 30 μm 时不同浓度的悬浮 RDX 粉尘两相爆轰进行了数值模拟。图 6 是浓度为 60、70、80 g/m^3 时波阵面的压力极值的分布图。从图中可以看出，浓度为 80 g/m^3 时形成规则的周期振荡的爆轰波，浓度为 70 g/m^3 时压力极值的振荡不规则，但仍能形成爆轰波。当浓度为 60 g/m^3、前导激波传播到 4 m 时，压力极值明显下降，未能形成爆轰波。

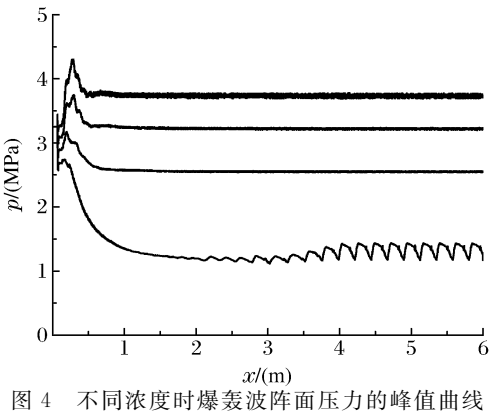


图 4 不同浓度时爆轰波阵面压力的峰值曲线

Fig. 4 Peak pressure of detonation front at different position with different concentration

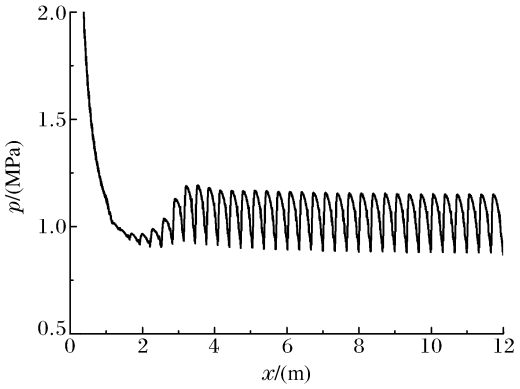


图 5　浓度为 100 g/m^3 的爆轰波压力峰值曲线

Fig. 5　Peak pressure history of detonation front with concentration of 100 g/m^3

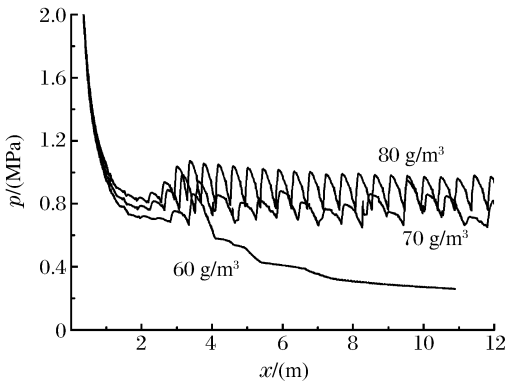


图 6　不同浓度的爆轰波压力峰值曲线

Fig. 6　Peak pressure of detonation front at different position with different concentration

4　结　论

用两相流模型对悬浮 RDX 炸药粉尘爆轰波进行了数值模拟。针对 RDX 炸药颗粒在爆轰波阵面后高温气流中被加速并升温、颗粒表面发生熔化的特点,参考液滴在气流作用下剥离的效应,假设炸药熔化部分在高速气流的作用下,与固体部分发生剥离,破碎成极小的颗粒,瞬时发生分解反应。

数值模拟得到了悬浮炸药粉尘中爆轰波的发展与传播过程,以及爆轰波流场中气、固两相的物理量分布,并确定了爆轰波参数。通过数值模拟得到了不同浓度的悬浮 RDX 粉尘的爆轰波参数。当悬浮 RDX 粉尘浓度为 80～150 g/m^3 时,数值模拟得到的爆轰波阵面压力峰值曲线出现有规则振荡的爆轰波。当 RDX 粉尘浓度为 70 g/cm^3 时,爆轰波阵面压力峰值曲线出现不规则振荡爆轰波。

在计算中,假定颗粒温度是均匀的。实际上,由于炸药颗粒的热传导系数较小,因而颗粒中的温度并非均匀分布。目前炸药的点火和反应模型需要通过一些实验研究进行改进,下一步的工作考虑炸药颗粒的温度分布,改进炸药颗粒的点火和反应模型,对悬浮炸药粉尘的两相爆轰波进行进一步的研究。

References:

[1]　Gubin S A, Sichel M. Calculation of the Detonation Velocity of a Mixture of Liquid Fuel Droplets [J]. Combus Sci Tech, 1977, 17: 109-117.

[2]　Gabrijel Z, Nicholls J A. Cylindrical Heterogeneous Detonation Waves [J]. Acta Astronautica, 1978, 5: 1051-1061.

[3]　Eidelmann S, Burcat A. Evolution of a Detonation Wave in a Cloud of Fuel Droplets: Part Ⅰ. Influence of Igniting Explosion [J]. AIAA J, 1980, 18(9): 1103-1109.

[4]　Liu X L, Li H Z, Guo J G, et al. An Experimental Investigation of Deflagration to Detonation Transition (DDT) in Aluminum Dust-Air Mixture [J]. Explosion and Shock Waves, 1995, 15(3): 217-228. (in Chinese)
刘晓利,李鸿志,郭建国,等. 铝粉-空气混合物燃烧转爆轰(DDT)过程的实验研究 [J]. 爆炸与冲击, 1995, 15(3): 217-228.

[5]　Hong T, Qin C S. Numerical Simulation of Detonation of Aluminum Powder in Explosive Tubes [J]. Explosion and Shock Waves, 2004, 24(3): 193-200. (in Chinese)
洪　滔,秦承森. 爆轰波管中铝粉尘爆轰的数值模拟 [J]. 爆炸与冲击, 2004, 24(3): 193-200.

[6]　Eidelman S, Yang X L. Detonation Wave Propagation in Combustible Particle/Air Mixture with Variable Particle Density Distributions [J]. Combst Sci Tech, 1993, 89: 201-218.

[7]　Ranger A A, Nicholls J A. Aerodynamics Shattering of Liquid Drops [J]. AIAA J, 1969, 7(2): 286-290.

[8] Tao H. Shock Wave Ignition of Aluminum Particles [J]. J Phys IV France, 2002, 12(7): 105-112.

[9] Zhang B P, Zhang Q M, Huang F L. Detonation Physics [M]. Beijing: Weapon Industry Press, 2001: 169. (in Chinese)
张宝坪, 张庆民, 黄风雷. 爆轰物理 [M]. 北京: 兵器工业出版社, 2001: 169.

[10] Book D L, Boris J P, Hain K. Flux-Corrected Transport Ⅱ: Generalization of the Method [J]. J Comput Phys, 1975, 18: 248-283.

Numerical Simulation of Suspended RDX Dust Detonation in a Shock Tube

HONG Tao, LIN Wen-Zhou, QIN Cheng-Sen

(*Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing* 100088, *China*)

Abstract: Dust detonation of of RDX particles suspended in air was numerically studied with two-phase flow model. Behind the leading shock front of detonation, RDX particles were accelerated and heated by the gas flow. Melt of RDX occurred on the surface of particles. It was assumed that melted part of particle was stripped by the gas flow and decompostion reaction happened instantaneously, during the energy is released to support the propagation of detonation wave. Development and propagation of dust detonation with different particle sizes and different concentration was numerically simulated and the parameters of detonation were obtained. Distribution of pressure, temperature, velocity behind leading shock front was calculated. Parameters of dust detonation were determined. When the concntration of RDX dust is low, pulsating mode of peak pressure history of detonation front occured. Numerical simulation results showed that when the concentration of RDX dust was between 80 g/m^3 and 150 g/m^3, history of peak pressure of detonation wave front was regular pulsating. When the concentration was 70 g/m^3, the pulsating was irregular.

Key words: two-phase detonation; RDX dust; ignition