文章编号：1000-5773(2011)02-0138-05

RDX 激光点火的一维气相模型*

田占东[1]，张震宇[1]，卢芳云[1]，谭福利[2]

(1. 国防科技大学理学院技术物理研究所，湖南长沙　410073；
2. 中国工程物理研究院流体物理研究所，四川绵阳　621900)

摘要：为了研究含能材料 RDX 在激光作用下的点火特性，在 Liau 等人的工作基础上，考虑了物理参数随温度和组分浓度的变化，建立了 RDX 激光点火的气相模型。利用有限差分方法，计算了激光功率密度为 400 W/cm^2、环境压力为 0.1 MPa 时 RDX 的点火过程。结果表明：约 90% 的 RDX 以蒸发的形式进入气相，另外的 10% 在液相中发生分解；气相中随着反应物的增加和温度的升高，反应逐渐加剧，最终达到点火。计算得到的点火延迟时间为 10 ms，与已报道的研究结果基本一致。

关键词：激光点火；RDX；点火延迟时间；数值计算
中图分类号：O359　　**文献标识码**：A

1　引　言

含能材料的激光点火在航空航天以及军事领域中都有着重要的意义和应用前景。由于激光点火中的物理化学过程极其复杂，仅依靠实验研究难以获得全面深入的理解，因此，各国学者先后建立了各种数值模型来研究该问题。早期的模型以经验、半经验模型为主，在能量守恒方程中用能量释放项来描述化学反应[1]。2001 年，Liau 等人[2]将描述含能材料燃烧过程的详细化学反应动力学引入到激光点火过程中，首先建立了 RDX 气相点火的详细模型。该模型的气相反应机制包括 45 个组分 232 个反应道，凝聚相分解由两阶段反应模型描述，计算得到的点火时间与实验结果符合很好。孙同举、胡艳、翁春生等人[3-5]也建立了含能材料激光点火过程的物理模型，并进行了数值仿真，得到了一些规律性认识。

尽管 Liau 的模型[2]得到了比较合理的结果，但 Liau 并没有考虑气相中的动量守恒方程。事实上，由于化学反应造成的组分浓度变化在一定程度上改变了压力分布，进而使气相中的速度不恒定，同时，复杂的化学反应大大增加了方程的求解难度。因此，本研究在 Liau 的工作基础上，引入气相的动量守恒方程，利用描述 RDX 稳态燃烧过程的 9 组分 6 反应道的简化反应[6]，建立 RDX 的激光点火模型，分析 RDX 的激光点火过程。

2　物理模型

RDX 激光点火的物理模型如图 1 所示。模型分为凝聚相和气相，其中凝聚相包含固相和液相。在激光的加热作用下，初始固相 RDX 的温度逐渐升高，达到熔化温度后，继续吸收能量以致发生相变，形成液相 RDX。忽略固相 RDX 的反应[1]，只考虑液相 RDX 的分解和蒸发。初始气相为环境气体(本研究选择惰性气体 Ar)，随着凝聚相分解产物和蒸发产物逐渐进入气相，反应物不断累积，温度不断升高，气相中的化学反应逐渐加剧，最终发生点火。

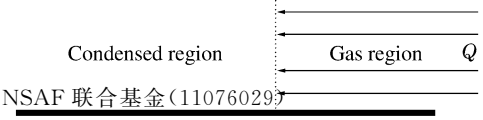


图 1　RDX 激光点火的物理模型

Fig. 1　Physical model of laser-induced ignition of RDX

*　**收稿日期**：2010-02-11；**修回日期**：2010-06-30
基金项目：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(11076029)
作者简介：田占东(1978－)，男，博士研究生，讲师，主要从事爆炸过程的数值模拟研究. E-mail：sweettzd@163.com
通讯作者：谭福利(1972－)，男，副研究员，主要从事激光与物质相互作用研究. E-mail：flt@mail.ipm.ac.cn

2.1　控制方程

以凝聚相和气相的分界面为参考点,分别建立凝聚相和气相的控制方程。

凝聚相的物理过程主要是热传导、分解和蒸发。假设:分解产物溶解在液相 RDX 中,即不改变液相的体积和密度,并且蒸发只发生在凝聚相表面处。凝聚相控制方程由能量守恒方程和组分连续性方程组成,即

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho u c_p \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x}\right) - \sum_i \dot{\omega}_i M_i H_i - Q_{\text{rad}} = 0 \tag{1}$$

$$\rho \frac{\partial w_i}{\partial t} + \rho u \frac{\partial w_i}{\partial x} = \dot{\omega}_i M_i \tag{2}$$

气相是由多种物质组成的可压缩流体,其基本物理过程包括热传导、对流、扩散、化学反应以及组分对激光能量的吸收。因此,控制方程包括质量守恒、动量守恒、能量守恒和组分连续性方程,即

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) = 0 \tag{3}$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2)}{\partial x} + \frac{\partial p}{\partial x} - \frac{4}{3}\frac{\partial}{\partial x}\left(\mu \frac{\partial u}{\partial x}\right) = 0 \tag{4}$$

$$\frac{\partial(\rho H - p)}{\partial t} - u \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\rho u H - \lambda \frac{\partial T}{\partial x}\right) + \sum_{i=1}^{N}\left[\frac{\partial(\rho w_i D_i H_i)}{\partial x}\right] - \frac{4}{3}\mu\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 - Q_{\text{g}} = 0 \tag{5}$$

$$\frac{\partial(\rho w_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u w_i)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho D_i w_i) - \dot{\omega}_i M_i = 0 \tag{6}$$

式中:ρ、u、p、T、H 分别为密度、质点速度、压力、温度和混合物的焓,c_p、μ 和 λ 分别为定压比热容、粘性系数和导热系数,H_i、w_i、M_i、$\dot{\omega}$、D_i 分别为组分 i 的焓、质量分数、分子量、摩尔生成速率及其在混合物中的扩散系数,Q_{rad} 和 Q_{g} 分别为凝聚相和气相吸收的激光能量。对于 Q_{rad} 和 Q_{g},采用 Beer 定律[2]计算,由于本研究主要针对波长为 10.6 μm 的激光,因此气相中只有 RDX 蒸气可以吸收激光能量[2]。

为了使方程组封闭,还需引入气相状态方程,这里采用理想气体状态方程,即

$$\rho = \frac{p}{RT\sum_{i=1}^{N}\frac{w_i}{M_i}} \tag{7}$$

式中:R 为普适气体常数。

液相中 RDX 的分解采用单反应道,气相中采用 9 组分 6 反应道模型[6]。

2.2　初始条件和边界条件

凝聚相左边界($-\infty$)采用 Dirichlet 边界条件,右边界(0^-)采用 Neumann 边界条件,即

$$\begin{cases} w_{\text{RDX}}\big|_{x=-\infty} = 1.0 \\ T\big|_{x=-\infty} = T_{\text{initial}} \end{cases} \tag{8}$$

$$-\lambda_{\text{c}}\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{0^-} = -\lambda_{\text{g}}\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{0^+} - \dot{m}_{\text{evap}} H_{\text{evap}} + Q_{\text{laser}}\big|_{0^+} \tag{9}$$

式中:下标 c 和 g 分别表示凝聚相和气相,$\dot{m}_{\text{evap}} H_{\text{evap}}$ 表示界面处由于蒸发产生的能量损失,Q_{laser} 为激光热流。凝聚相中的初始组分只有 RDX,初始温度为环境温度。

气相中左边界条件(0^+)和右边界条件($+\infty$)分别为

$$\begin{cases} (\rho u)\big|_{x=0^+} = (\rho u)\big|_{x=0^-} \\ T\big|_{x=0^+} = T\big|_{x=0^-} \\ w_i\big|_{x=0^+} = w_i\big|_{x=0^-} \end{cases} \tag{10}$$

$$\begin{cases} \left.\dfrac{\partial(\rho u)}{\partial x}\right|_{+\infty} = \left.\dfrac{\partial w_i}{\partial x}\right|_{+\infty} = \left.\dfrac{\partial T}{\partial x}\right|_{+\infty} = 0 \\ p\big|_{+\infty} = p_{\text{ambient}} \end{cases} \tag{11}$$

气相区域的初始气体为惰性气体 Ar,初始温度为环境温度,初始压力为环境压力。

2.3 物性参数

固相和液相 RDX 的物性参数[1]列于表 1。其中：H_{form}为标准生成焓，H_{melt}为标准熔化焓，p_{evap}为蒸发压力，T_{melt}为熔化温度。气相组分的比热、焓、粘性系数、热传导系数和扩散系数均随温度变化，因此，混合物的相应参数是温度和组分浓度的函数[7]。

表 1 RDX 的物性参数[1]

Table 1 Physical properties of RDX[1]

ρ /(g/cm^3)	c_p /[J/(kg·K)]	λ /[W/(m·K)]	H_{form}/(kJ/mol)		H_{melt}/(kJ/mol)	p_{evap}/(Pa)	T_{melt}/(K)
			Solid	Liquid			
1.8	$20.32+3.53T$	0.278	112.02	145.88	33.86	$133.32\times10^{11.87-5\,850/T}$	478

3 结果分析与讨论

基于以上理论，采用有限差分方法，编制了相应的计算程序。计算了激光功率密度为 400 W/cm^2、环境压力为 0.1 MPa、初始温度为 300 K 时 RDX 的点火过程。

图 2 为不同时刻凝聚相区域内的温度分布图。从图 2 中可以看出：由于吸收激光能量，凝聚相表面($x=0$ 处)的温度逐渐升高，2 ms 时达到熔化温度；为了满足表面的热流平衡条件，即凝聚相和气相进行能量交换，从 8 ms 开始表面温度达到稳定，并保持在 648 K 不变；凝聚相内部则由于热传导和吸收激光能量，温度不断升高。

图 3 为不同时刻气相区域内的温度分布图。在凝聚相表面达到熔化温度以前，气相温度的升高是由于热传导造成的，而气体的热传导系数较小，因此在 2 ms 以前气相区域的温度变化比较缓慢。表面熔化后，RDX 蒸气和凝聚相中的分解产物逐渐进入气相，RDX 蒸气吸收一定的激光能量，使气相温度的上升速率逐渐加快。随着温度的升高和气相组分的流动、扩散，化学反应逐渐加剧，反过来进一步促进温度迅速上升，于是气相温度最大值从 9.7 ms 时的 1 500 K 迅速增加到 10 ms 时的 3 380 K，气相发生点火，因此计算得到的 RDX 点火时间为 10 ms。相同条件下 Liau 等人[2]计算的点火时间为10 ms，Parr 等人[8]的测量结果为 8.6 ms，考虑到计算与实验的点火判据不同，可以认为本研究计算得到的点火延迟时间与实际情况基本一致。

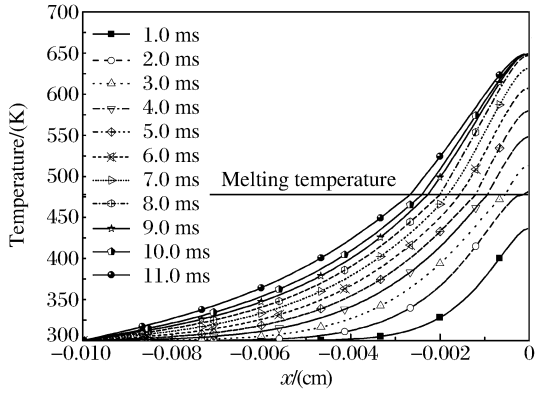


图 2 不同时刻凝聚相中的温度分布

Fig. 2 Temperature distribution in condensed region

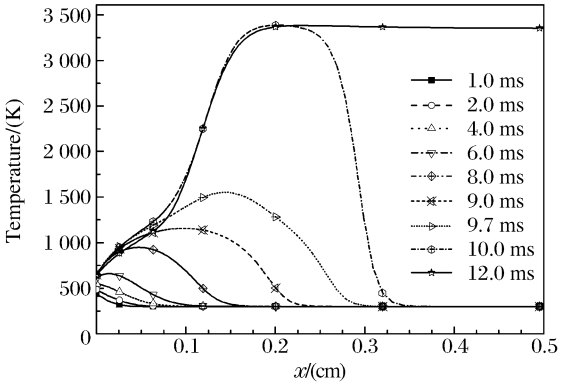


图 3 不同时刻气相中的温度分布

Fig. 3 Temperature distribution in gas region

图 4、图 5、图 6 分别为 9 ms、10 ms 和 12 ms 时气相中各组分的摩尔分数分布图。从图 4 可以看出：当 RDX 蒸气和凝聚相分解产物 H_2CNNO_2 进入气相后，初始惰性气体 Ar 被“吹离”表面，此时气相组分主要是 Ar、RDX 蒸气以及少量的 H_2CNNO_2，其余组分的含量很少(摩尔分数均不超过 0.002 5)，说明此时的化学反应比较微弱，气相中的主要物理过程依然是热传导、对流和扩散。由图 5 可知，10 ms

时气相中已经点火,并且在距表面0.2 cm 附近已经生成了较多的 N_2、CO、H_2O 以及少量的 H_2 和 CO_2,同时还有部分 RDX 未反应完毕。观察图 6 发现:12 ms 时,点火过程已经稳定,气相中的组分浓度分布基本不再发生变化,最终产物主要为 N_2、CO 和 H_2O。

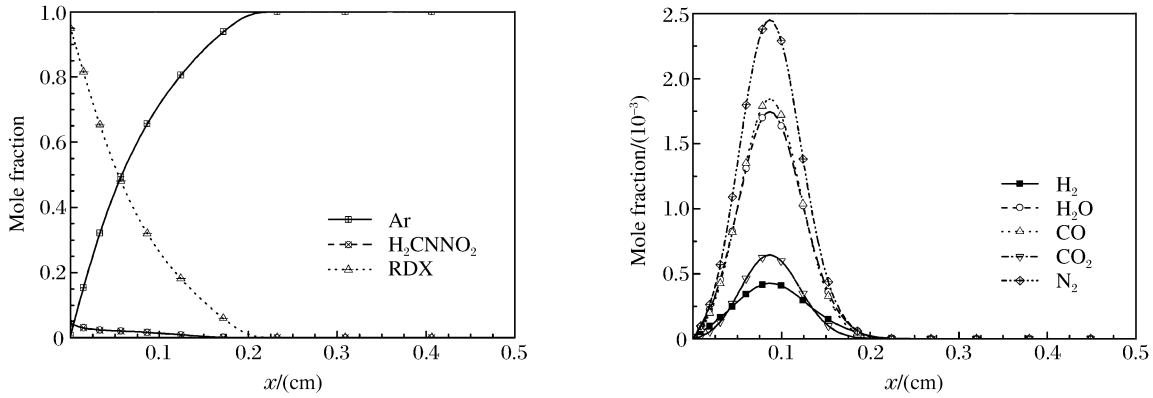


图 4　9 ms 时气相中各组分的摩尔分数分布

Fig. 4　Mole fraction distributions in gas phase at 9 ms

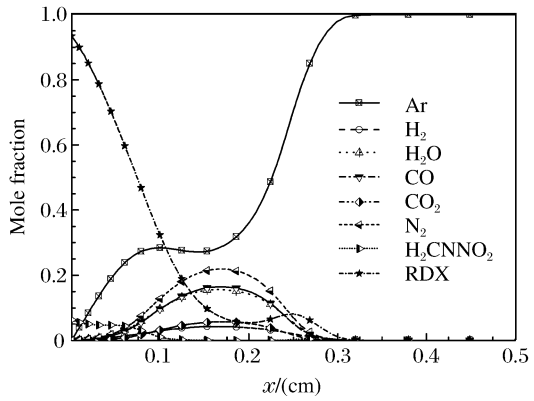


图 5　10 ms 时气相中各组分的摩尔分数分布

Fig. 5　Mole fraction distributions in gas phase at 10 ms

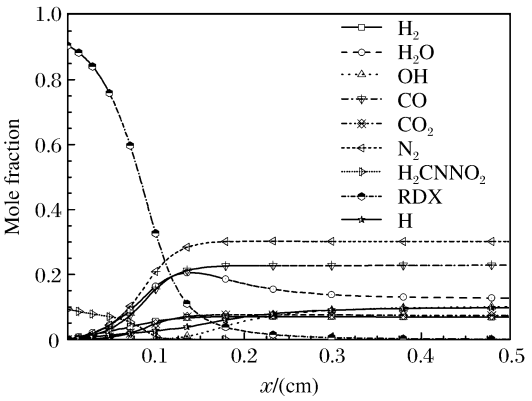


图 6　12 ms 时气相中各组分的摩尔分数分布

Fig. 6　Mole fraction distributions in gas phase at 12 ms

4　结　论

基于质量守恒、动量守恒、能量守恒和组分连续性方程,综合考虑了热传导、扩散、对流等物理过程以及材料物理参数随温度和组分浓度的变化关系,建立了含能材料 RDX 激光点火过程的气相模型,其中对物理化学过程极其复杂的气相区域采用简化的 9 组分 6 反应道模型。计算结果表明,该模型可以反映出 RDX 激光点火过程,得到的 RDX 点火时间为 10 ms,与已报道的计算和实验结果一致。

References:

[1] Beckstead M W, Puduppakkam K, Thakre P. Modeling of Combustion and Ignition of Solid-Propellant Ingredients [J]. Prog Energy Combust Sci, 2007, 33(6): 497-551.

[2] Liau Y C, Kim E S, Yang V. A Comprehensive Analysis of Laser-Induced Ignition of RDX Monopropellant [J]. Combust Flame, 2001, 126(3): 1680-1698.

[3] Sun T J, Shen R Q, Dai S Z. Numerical Simulation about the Process of Laser Ignition [J]. Applied Laser, 1996, (3): 110-112. (in Chinese)
孙同举, 沈瑞琪, 戴实之. 激光点火过程的数值模拟 [J]. 应用激光, 1996, (3): 110-112.

[4] Weng C S, Wang Z, Feng D C. A Two-Dimensional Model and Calculation for the Process of Laser Ignition [J]. Acta Armamentarii, 2005, 26(2): 169-172. (in Chinese)
翁春生, 王 震, 冯德成. 激光点火过程的二维模型及计算 [J]. 兵工学报, 2005, 26(2): 169-172.

[5] Hu Y, Ye Y H, Shen R Q. One Dimension Finite Difference Simulation of Laser Ignition [J]. Laser Technology, 2001, 25(5): 331-334. (in Chinese)
胡 艳, 叶迎华, 沈瑞琪. 激光点火过程的一维有限差分模拟 [J]. 激光技术, 2001, 25(5): 331-334.

[6] Davidson J E. Combustion Modeling of RDX, HMX and GAP with Detailed Kinetics [D]. Provo, USA: Brigham Young University, 1996: 81-91.

[7] Kee R J, Rupley F M, Miller J A. The Chemkin Thermodynamic Data Base, SAND87-8215B [R]. California: Sandia National Laboratories, 1990.

[8] Parr T P, Hanson-Parr D. RDX Ignition Flame Structure [J]. Symposium (International) on Combustion, 1998, 27 (2): 2301-2308.

One-Dimensional Gas-Phase Reaction Model of Laser-Induced Ignition of RDX

TIAN Zhan-Dong[1], ZHANG Zhen-Yu[1], LU Fang-Yun[1], TAN Fu-Li[2]

(1. *Institute of Technical Physics, College of Science, National University of Defense Technology, Changsha* 410073, *China*;
2. *Institute of Fluid Physics, CAEP, Mianyang* 621900, *China*)

Abstract: Based on the work of Liau *et al*., a one-dimensional gas-phase reaction model of laser-induced ignition of RDX was established by considering the variations of physical parameters with temperature and component concentration. Using this gas-phase reaction model and finite difference method, the ignition characteristics of RDX ignited by laser radiation of 400 W/cm^2 power density at 0.1 MPa and 300 K were investigated. The calculated results showed that about 90% RDX transform to gas phase by evaporation and the remaining 10% decompose in condensed phase. With the accumulation of reactant and increase of temperature, the reaction rate increases gradually and finally the gas phase is ignited at about 10 ms, which is consistent with the results reported in previous literatures.

Key words: laser-induced ignition; RDX; ignition delay time; numerical simulation