文章编号:1000-5773(2013)03-0367-05

RDX的一维快烤燃模型及计算*

田占东[1],张震宇[1],卢芳云[1],赵剑衡[2],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:以RDX(黑索金)为研究对象,基于气相点火机制,建立了强激光辐照金属密封炸药装置的快烤燃模型。模型包括金属壳体、气隙和炸药3部分,利用气隙的热传导描述金属和炸药之间的非理想热接触,考虑了炸药的分解、熔化和蒸发过程,采用多组分、多通道反应机制描述化学反应过程。编制了相应的计算程序,对RDX的激光快烤燃过程进行了数值计算,结果表明,RDX的快烤燃过程大致可以分为惰性热传导、温度和气相反应物的累积以及快速化学反应,直至点火几个阶段。

关键词:快烤燃;黑索金(RDX);点火时间;数值计算
中图分类号:O359 **文献标识码**:A

1 引 言

烤燃是炸药热安全性研究的重要内容之一,根据加热速率的不同,烤燃可分为慢烤燃和快烤燃两种类型,慢烤燃的点火延迟时间一般以小时或天计,快烤燃的点火延迟时间为秒或分钟量级。

Beckstead等[1]用整体化学反应动力学模型计算了1~30 min的烤燃,模型预测的点火时间与实验结果吻合,但未考虑增压效应。Meredith[2]基于激光点火模型,考虑了详细的化学反应过程,将金属壳体的影响以边界条件的形式引入,对HMX(奥克托金)的快烤燃过程进行了模拟。张旭[3]采用固体推进剂作为燃料,开展了带2 mm厚约束钢壳的PBX(高聚物粘结炸药)快速烤燃小尺寸实验,结果表明,固体推进剂燃烧会在短时间内引起炸药点火燃烧反应,但不会发生猛烈的爆燃或爆轰现象,并计算了炸药在点火之前的温度分布。王伟平等[4]利用实验,研究了激光对金属背面含能材料的点火阈值问题,钟明[5]应用界面接触热阻描述金属和炸药之间的非理想热接触,计算了激光辐照金属和炸药双层结构的温度场分布。

尽管国内外对快烤燃过程有了一定的研究,但在模型方面的研究依然不够成熟,尤其是缺少对快烤燃全过程进行数值分析的手段。本研究主要考虑强激光辐照下,金属密封装置内炸药的响应问题,旨在建立一个能够描述从惰性加热到炸药熔化、分解直至点火全过程的模型(该模型以黑索金(RDX)的激光点火模型[6]为基础),并利用该模型对RDX快烤燃过程进行模拟。

2 模型描述

当强激光(或其它外部热源)辐照金属壳体后,壳体吸收外部能量,温度不断升高。热量向装置内部传递,使壳体内部和炸药温度也不断上升,在加热速率较快的情况下,金属壳体和炸药内部都存在着较

* **收稿日期**:2011-03-08;**修回日期**:2011-06-06
基金项目:国家自然科学基金委-中国工程物理研究院联合基金(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:赵剑衡(1969—),男,博士,研究员,主要从事激光与物质相互作用研究. E-mail:jianh_zhao@sina.com

大的温度梯度。炸药中与壳体相接触部分温度最高，经过一个惰性加热期，炸药表面达到熔化温度后继续吸收热量，发生熔化、分解、蒸发，随着温度的升高和气体反应物的累积，分解出来的气体反应逐渐加剧，直至发生点火，导致壳体内部压力升高，使得壳体变形并最终破裂。

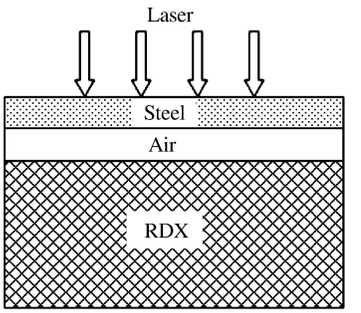


图 1 快烤燃模型示意图

Fig. 1 Schematic of 1-D fast cook-off model

实际上快烤燃过程是三维的，根据上面的描述可简化为一维[2]，结构示意图如图 1 所示，整个模型包括 3 部分：壳体（一般为钢）、空气隙和炸药。

钢壳吸收激光能量并向内部传递，其控制方程是惰性热传导方程为

$$\rho_s c_{p,s} \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda_s \frac{\partial T}{\partial x}\right) = 0 \tag{1}$$

装药过程中一般会在钢壳和炸药之间存在一个气隙，即使初始不存在，由于金属和炸药热膨胀系数的不同，在加热膨胀过程中也会产生一个气隙。在本研究模型中，气隙的作用有两个：一方面，RDX 的分解产物进入气隙，并在其中发生剧烈的化学反应，也就是说，在快烤燃过程中，气体的化学反应在点火过程起决定性作用；另一方面，气体的热传导系数较低，用气体的导热来描述钢壳和炸药之间的非理想热接触，而不是通过接触热阻或热阻层。当炸药熔化、分解、蒸发之后，RDX 蒸气和分解产物进入气隙中，因此气隙中的物质是多组分混合气体，主要的物理过程包括热传导、对流、扩散和化学反应，控制方程为质量守恒、动量守恒、能量守恒和组分连续性方程为

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) = 0 \tag{2}$$

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

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial p}{\partial t} - u\frac{\partial p}{\partial x} + \rho u c_p \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}\left[\lambda \frac{\partial T}{\partial x}\right] + \sum_{k=1}^{N} \rho Y_k V_k c_{pk} \frac{\partial T}{\partial x} + \sum_{k=1}^{N} \dot{\omega}_k W_k h_k - \frac{4}{3}\mu \left[\frac{\partial u}{\partial x}\right]^2 = 0 \tag{4}$$

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho u \frac{\partial Y_k}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho V_k Y_k) - \dot{\omega}_k W_k = 0 \tag{5}$$

固相 RDX 和熔化后的液相 RDX 统称为凝聚相，凝聚相的主要物理过程包括热传导、分解反应和蒸发，控制方程为能量守恒和组分连续性方程为

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho u c_p \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x}\right) - \sum_k \dot{\omega}_k W_k h_k = 0 \tag{6}$$

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho u \frac{\partial Y_k}{\partial x} = \dot{\omega}_k W_k \tag{7}$$

式中：ρ、u、p、T、h 分别表示密度、质点速度、压力、温度和焓，c_p、μ 和 λ 是定压比热、粘性系数和热传导系数，Y_k、W_k、$\dot{\omega}_k$、V_k 分别是组分 k 的质量分数、分子量、摩尔生成速率及其在混合物中的扩散系数。下标 s 表示钢壳，下标 k 表示组分。

凝聚相/气隙界面和气隙/钢壳界面条件为温度连续、热流密度连续。气体产物之间的化学反应采用 9 组分 6 反应道描述[7]，钢壳的物性参数取自文献[5]，凝聚相 RDX 的物性参数取自文献[8]，气体组分的物性参数随温度变化，因此，气体混合物的参数是温度和组分浓度的函数，参数值取自文献[9-10]。

3 结果分析与讨论

根据上面建立的模型，采用有限差分方法编制了计算程序，对金属密封 RDX 炸药装置的激光快烤燃过程进行了数值计算。

3.1　快烤燃过程分析

首先计算了壳体厚度 0.1 cm、气隙尺寸 0.005 cm、激光强度为 800 W/cm^2 的情况，初始温度 300 K。图 2 给出了不同时刻炸药、气隙和钢壳中的温度分布，选择凝聚相和气隙的界面为零点，因此，钢壳的空间范围是 0.005～0.105 cm，气隙的空间范围是 0～0.005 cm，炸药的空间范围是－0.1～0 cm（炸药的尺寸应与实际装置有关，但在快速加热条件下，炸药中只有表面温度会出现明显的升高，因此本研究中选择的炸药厚度是 0.1 cm）。热流施加在壳体上之后，首先是惰性加热期，在这段时间内，壳体、气隙和炸药中由于惰性热传导，温度不断升高，由于气体的热传导系数最小，而钢壳的热传导系数最大，所以在惰性加热阶段，钢壳中的温度梯度最小，气体中的温度梯度最大。随着炸药中温度的升高，炸药表面发生熔化、分解、蒸发，分解和蒸发产物逐渐进入气隙中。在 636.8 ms 时，气隙中的温度急剧升高，说明此时气隙中的化学反应释放出了大量能量，使得气隙温度迅速升高，发生气相点火。这一点从图 3 和图 4 给出的两个不同时刻气隙中的组分质量分数分布也可以反映出来。

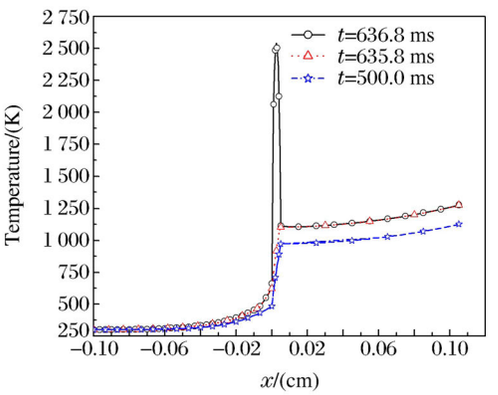


图 2　不同时刻的温度分布

Fig. 2　Temperature distribution at different times

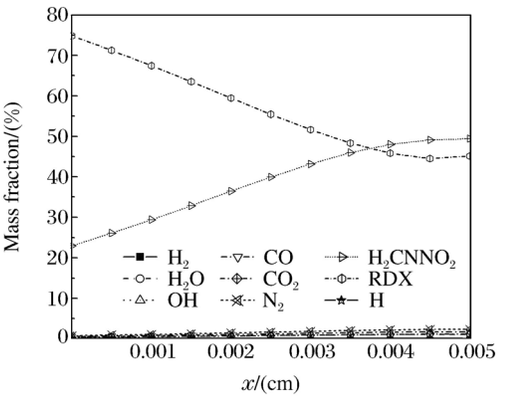


图 3　635.8 ms 时气隙中组分的质量分数

Fig. 3　Mass fraction distribution in gas phase at 635.8 ms

如图 3 所示，在 635.8 ms 时，气隙中的主要组分是液相 RDX 的分解产物 H_2CNNO_2 和蒸发物 RDX 蒸气，其它组分很少，进一步说明此时化学反应依然很微弱，这个阶段主要是温度和反应物的累积过程，为进一步的化学反应做准备。在 1 ms 之后（图 4），气隙中的组分发生了很大的变化，说明已经发生了剧烈的化学反应，最终产物的主要成分包括 H_2O、CO、N_2 和 CO_2。

图 5 给出的是气隙中的压力随时间的变化。压力的变化主要由两个因素决定：温度和化学反应。温度升高使压力增加，化学反应生成小分子产物，使气相中的组分摩尔浓度增加，同样导致了压力的升高。

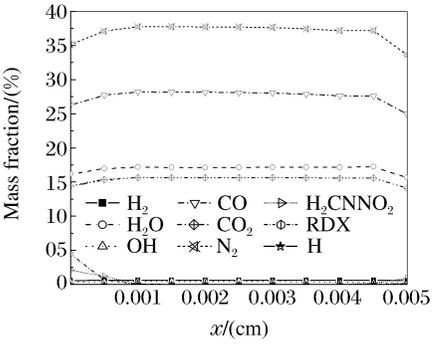


图 4　636.8 ms 时气隙中组分的质量分数

Fig. 4　Mass fraction distribution in gas phase at 636.8 ms

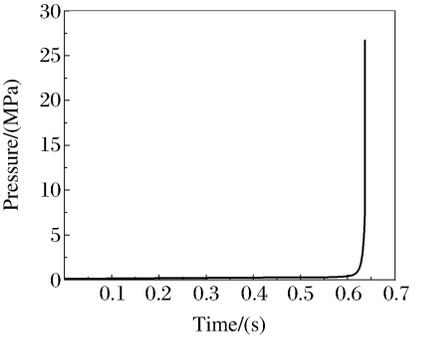


图 5　气隙中压力随时间的变化

Fig. 5　Pressure history in gas phase

从图 5 中可以发现，在大约 630 ms 之前，压力的增加很缓慢，说明温度的影响并不大，当气隙中温度和反应物的累积达到一定程度，反应逐渐加剧，最终导致气相发生点火，压力迅速增加，计算终止。从压力变化曲线来看，气相点火导致压力迅速升高的时间相对于整个过程来说时间很短，可以判断，在计算终止后的极短时间内，压力就会增加到壳体破裂的程度。根据上面的分析可以得出结论，该情况的点火时间为 636.8 ms。

3.2 气隙尺寸和壳体厚度的影响

图 6 给出的是气隙尺寸为 0.01 cm 时(其余计算条件与 3.1 节相同)，气隙中压力随时间变化的曲线。通过与图 5 的比较可以看出，压力的变化规律基本相同，所不同的是压力迅速升高的时间，可以判断该情况的点火时间是 872.5 ms，相对气隙尺寸 0.005 cm 时增加了 235.7 ms。可见，增加了气隙尺寸，降低了传入炸药的热流，使炸药温度的升高变得缓慢，导致点火时间增加。

图 7 给出的是钢壳厚度为 0.2 cm 时(其余计算条件与 3.1 节相同)，气隙中压力随时间变化的曲线，点火时间为 1.455 7 s。

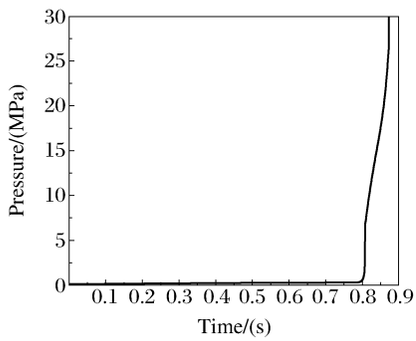


图 6 气隙为 0.01 cm 时压力随时间的变化

Fig. 6 Pressure history in gas phase (Gas width of 0.01 cm)

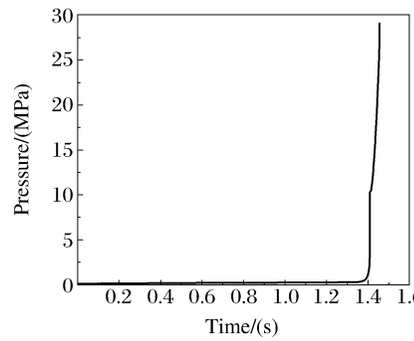


图 7 钢壳厚度为 0.2 cm 时压力随时间的变化

Fig. 7 Pressure history in gas phase (Steel thickness of 0.2 cm)

4 结 论

基于 RDX 的激光点火模型，建立了 RDX 的快烤燃模型，并根据建立的模型，编制了相应的计算程序，对 RDX 激光快烤燃从惰性加热到熔化、分解直至点火全过程进行了数值计算。计算结果能够反映出快烤燃过程的主要特性。但是由于缺少可利用的实验数据，计算结果的准确性还有待进一步验证。本研究模型认为，气相中的燃烧反应是快烤燃的基本反应形式，而凝聚相炸药的反应对点火过程的影响较小，要求凝聚相炸药中存在明显的温度梯度，只有靠近表面的炸药才会发生明显的分解，分解产物进入气相继续反应，直至点火。因此，本模型主要适用于加热速率很快的情况。

References:

[1] Beckstead M W, Hendershot R J. Calculated conditions for fast cook-off [C]//36th JANNAF Combustion Meeting. Cocoa Beach, FL, 1999: 123-132.

[2] Meredith K V. Ignition modeling of HMX in laser-induced and fast-cookoff environments [D]. Brigham: Brigham Young University, 2003.

[3] Zhang X, Gu Y, Zhang Y P, et al. Numerical simulation and experimental study of fast cook off of TATB based PBX explosive [J]. Chinese Journal of Energetic Materials, 2010, 18(5): 551-557. (in Chinese)
张 旭, 谷 岩, 张远平, 等. TATB 基 PBX 的快速烤燃实验与数值模拟 [J]. 含能材料, 2010, 18(5): 551-557.

[4] Wang W P, Tan F L, Zhang K X, et al. Ignition threshold of metal covered energetic material by laser beam [J].

Laser Technology,2001,25(3):199-202. (in Chinese)
王伟平,谭福利,张可星,等. 激光对金属背面含能材料的点火阈值 [J]. 激光技术,2001,25(3):199-202.

[5] Zhong M,Luo D W,Zhu Z J,et al. Numerical simulation of temperature field of metal/explosive materials irradiated by laser [J]. High Power Laser and Particle Beams,2000,12(2):137-140. (in Chinese)
钟　明,罗大为,朱柞金,等. 激光辐照金属/炸药复合介质温度场的数值模拟 [J]. 强激光与粒子,2000,12(2):137-140.

[6] Tian Z D,Zhang Z Y,Lu F Y,et al. One dimensional gas-phase reaction model of laser-induced ignition of RDX [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics,2011,25(2):138-142. (in Chinese)
田占东,张震宇,卢芳云,等. RDX 激光点火的一维气相模型 [J]. 高压物理学报,2011,25(2):138-142.

[7] Davidson J E. Combustion modeling of RDX,HMX and GAP with detailed kinetics [D]. Brigham:Brigham Young University,1996:81-91.

[8] Beckstead M W,Puduppakkam K,Thakre P. Modeling of combustion and ignition of solid-propellant ingredients [J]. Prog Energ Combust Sci,2007,33:497-551.

[9] Kee R J,Rupley F M,Miller J A. The chemkin thermodynamic data base,SAND 87-8215B [R]. Livermore,CA,USA:Sandia National Labs,1990.

[10] Cloutman L D. A selected library of transport coefficients for combustion and plasma physics applications,UCRL-ID-139893 [R]. Livermore,USA:Lawrence Livermore National Laboratory,2000.

One-Dimensional Model and Calculation for Fast Cook-off of RDX

TIAN Zhan-Dong[1],ZHANG Zhen-Yu[1],LU Fang-Yun[1],
ZHAO Jian-Heng[2],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 gas-phase reaction mechanism,a fast cook-off model was established to study the process of RDX in a confined vessel irradiated by laser. The model considers steel vessel,air gap and condensed explosives. The heat conduction in air gap was used to describe the nonideal thermal contact. The process of decomposition,melting and evaporation in condensed RDX,and the reaction of multi-species and multi-steps in air gap were considered in model calculation by use of finite difference. Results show that the fast cook-off process of RDX can be approximately divided into three stages:inert heating,accumulation of reactants and increase of temperature,and ignition caused by rapid chemical reaction.

Key words:fast cook-off;RDX;ignition time;numerical simulation