

文章编号:1006-9941(2009)01-0046-04

不同升温速率下炸药烤燃模拟计算分析

王 沛, 陈 朗, 冯长根

(北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室, 北京 100081)

摘要:为了研究不同升温速率条件下炸药热反应规律,建立了炸药烤燃模型,利用计算流体力学软件,对固黑铝炸药(GHL)在不同升温速率下的烤燃过程进行了数值模拟计算。采用 Arrhenius 定律描述炸药自热反应,根据在 $1 \text{ K} \cdot \text{min}^{-1}$ 升温速率下固黑铝炸药烤燃实验测量的温度-时间曲线,确定了固黑铝炸药的活化能和指前因子分别为 $180.2 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ 和 2.1674 s^{-1} ; 分别对 $3.3 \text{ K} \cdot \text{h}^{-1}$, $1 \text{ K} \cdot \text{min}^{-1}$, $3 \text{ K} \cdot \text{min}^{-1}$ 和 $10 \text{ K} \cdot \text{min}^{-1}$ 四种不同升温速率下固黑铝炸药烤燃过程进行了数值模拟计算分析。结果表明,升温速率对炸药点火时间和点火位置有很大影响。升温速率增大,炸药点火时间缩短,点火位置从炸药内部移向炸药边缘。升温速率对炸药点火温度影响很小,但慢速烤燃下炸药点火时的环境温度比快速烤燃低。

关键词:物理化学; 固黑铝炸药(GHL); 烤燃; 点火; 数值模拟

中图分类号:TJ55; O64

文献标识码:A

1 引 言

研究不同烤燃条件下炸药热反应规律,对炸药装药设计和安全性评价具有重要的意义。目前主要采用烤燃实验和数值模拟计算两种方法研究炸药烤燃现象。烤燃实验能够直接有效地评价炸药热安全特性,但成本高,研究周期长,测量数据也有限。数值模拟计算可方便地改变升温速率,装药尺寸和约束等烤燃条件,对炸药热反应过程进行综合分析。1991年,美国 Jones 等^[1]用 Fortran 语言开发的 HEAT 软件对小型烤燃弹(SCB)实验进行了一维计算。此后,人们进行了大量烤燃数值模拟研究。冯长根^[2]等对不同环境温度下 RDX 的烤燃过程进行了数值模拟计算。Howard 等^[3]对炸药慢速烤燃($2 \text{ }^\circ\text{C} \cdot \text{h}^{-1}$)进行了模拟计算,计算中考虑了炸药和壳体之间空气层对烤燃过程的影响。Yoh 等^[4-6]在 LX-10* 炸药烤燃模拟计算中考虑了壳体形变和破裂,分析了炸药反应剧烈程度。

本文建立了固黑铝炸药(GHL)烤燃计算模型,对几种不同升温速率下固黑铝炸药的烤燃过程进行了三维数值模拟计算,分析了升温速率对炸药热反应过程的影响。

2 数值模拟计算

固黑铝炸药烤燃装置简图如图 1 所示。烤燃装置

主要由固黑铝炸药柱和钢壳两部分组成。药柱直径 120 mm,长 300 mm; 钢壳壁厚为 3 mm。实验中采用电加热器对壳体侧壁进行加热,同时测量壳体壁面温度。计算中设壳体侧壁为加热边界,主要观测 4 个特征点的温度变化。1 号点在壳体壁面 1/2 高处,2 号点在炸药中心横面上 1/2 半径位置,3 号点在炸药中心点,4 号点在炸药顶部 1/2 半径处。1 号点位置也是实验温度测量位置。

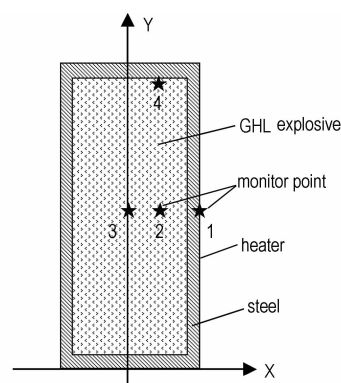


图 1 炸药烤燃装置简图

Fig. 1 Schematic of geometry of cook-off bomb

为建立计算模型,对固黑铝炸药烤燃过程进行如下假设:

- (1) 炸药为固态不发生相变;
- (2) 药柱和弹体间无空隙;
- (3) 炸药的自热反应遵循 Arrhenius 方程;
- (4) 炸药和钢壳的物理化学参数均为常数,不随温度变化。

收稿日期:2008-05-06;修回日期:2008-09-09

作者简介:王沛(1977-),女,博士研究生,研究方向为炸药安全性分析。
e-mail: appyzjh@163.com

在直角坐标系中,动量、质量、能量方程通用的形式为^[7]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \phi) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right] + S \quad (1)$$

ϕ 是通用的变量,代表质量、动量、能量等, ρ 代表流体密度, Γ 是通用的扩散系数, S 代表炸药自热反应源项,可用 Arrhenius 方程来表述^[8]:

$$S = \rho Q Z \alpha \exp(-E/RT) \quad (2)$$

式中, S 是炸药自热反应放热源项; ρ 为炸药元件的密度, $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$; Q 为反应热, $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1}$; Z 为指前因子, s^{-1} ; α 为反应分数; E 为活化能, $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$; R 为普适气体常数, $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ 。

炸药壳体侧壁为加热边界。根据炸药慢速和快速烤燃实验的特征,分别对 $3.3 \text{ K} \cdot \text{h}^{-1}$, $1 \text{ K} \cdot \text{min}^{-1}$, $3 \text{ K} \cdot \text{min}^{-1}$ 和 $10 \text{ K} \cdot \text{min}^{-1}$ 四种不同加热条件下固黑铝炸药的烤燃进行计算。升温速率为 $3.3 \text{ K} \cdot \text{h}^{-1}$ 时为慢速烤燃,升温速率为 $10 \text{ K} \cdot \text{min}^{-1}$ 时则为快速烤燃。计算的初始温度为 306.5 K 。

采用计算流体力学软件 Fluent 对炸药烤燃过程进行数值模拟计算,炸药自热反应源项通过 C 语言编写为子程序以自定义函数形式加载到软件中进行计算^[9]。

由于烤燃装置为圆柱形,为减小计算量建立四分之一模型。图 2 为计算网格图。表 1 为固黑铝炸药和钢壳的物性参数。

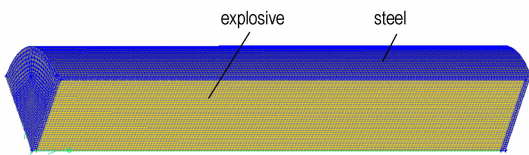


图 2 计算网格图

Fig. 2 Calculation grid of model

表 1 材料的物性参数

Table 1 Parameters of materials

materials	density $/\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	thermal capacity $/\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$	thermal conductivity $/\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$	reaction heat $/\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$
GHL	1660	1330	0.454	7854000
steel	8030	502.48	16.27	-

Note: The composition of GHL is similar to PBXN-109, some parameters of GHL are obtained from Reference [10-13].

3 计算结果及分析

3.1 计算参数的确定

由于在不同反应过程中,炸药的活化能和指前因子并不相同^[14],故确定活化能和指前因子是炸药烤燃数

值模拟计算的关键所在。本文以固黑铝炸药烤燃实验测量的炸药壳体温度曲线为依据,通过计算曲线和实验曲线的对比,来确定炸药的活化能和指前因子。已有文献[10-13]表明,固黑铝炸药活化能的取值范围为 $141.1 \sim 197 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$,指前因子为 $1.821 \times 10^8 \sim 1.905 \times 10^{19} \text{ s}^{-1}$ 。计算结果显示当活化能和指前因子分别为 $180.2 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ 和 $2.1674 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ 时,计算壳体温度-时间曲线与实验曲线相吻合,如图 3 所示。因此,以此作为固黑铝炸药的活化能和指前因子。

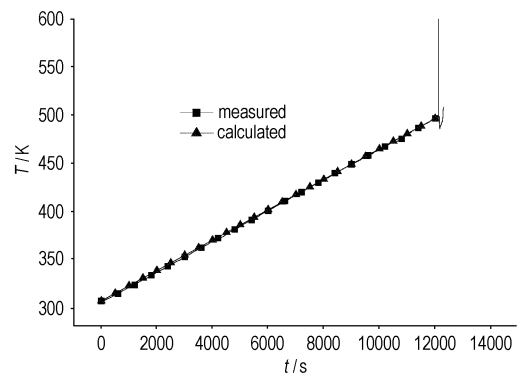


图 3 升温速率为 $1 \text{ K} \cdot \text{min}^{-1}$ 时,1 号点的计算值与实验值比较

Fig. 3 Measured and calculated $T-t$ curves of point 1 at heating rate of $1 \text{ K} \cdot \text{min}^{-1}$

3.2 不同升温速率下炸药烤燃特征分析

图 4 为升温速率 $3.3 \text{ K} \cdot \text{h}^{-1}$ 下,不同时刻炸药柱纵向截面的温度分布。2000 s 时,在外热源作用下,壳体温度已经升高,炸药内部温度变化不大。160000 s 时,由于内部炸药自热分解产生大量热量来不及向周围释放,致使炸药中间区域温度上升相对较快。166574 s 时,炸药中心温度最高,即将达到点火温度。药柱点火位置在药柱中心。

图 5 是升温速率为 $1 \text{ K} \cdot \text{min}^{-1}$ 时,固黑铝炸药柱纵向截面的温度分布。5000 s 时,热量向炸药内部传递,炸药柱温度升高,药柱内部温度等值线呈椭圆形分布,此时热分解反应比较缓慢,热量主要还是由外加热源提供。12123.2 s 时,炸药高温区域集中在药柱上下底面附近狭小的环状区域,这一区域为炸药点火区域。

图 6 为 $3 \text{ K} \cdot \text{min}^{-1}$ 升温速率时,不同时刻固黑铝炸药柱纵向截面的温度分布。该升温速率下炸药柱的温度变化情况和升温速率为 $1 \text{ K} \cdot \text{min}^{-1}$ 时相似。800 s 时,外热源提供的热量向炸药内部传递,炸药柱外部炸药温度明显升高,药柱内部温度变化不大。4151.4 s 时,炸药高温区域在药柱上下底面附近狭小的环形区域,该区域为炸药发生点火的区域。

图7是升温速率为 $10\text{ K}\cdot\text{min}^{-1}$ 时,不同时刻黑铝炸药柱纵向截面的温度分布。100 s时,由于加热速度较快,壳体温度已达到 323 K ,炸药边缘温度有所升高,而内部温度几乎没有变化,仍为初始时的 306.5 K 。1330.6 s时,高温区域集中在炸药柱外缘位置。炸药点火发生在炸药柱面边缘位置。

图8为四种不同升温速率下,四个特征点和点火点的温度-时间曲线。可以看出,在升温速率较低情况下,即慢速烤燃条件下,四个特征点的温度曲线斜率相差不大;但在升温速率较快情况下,即快速烤燃下,四个特征点的温度曲线斜率相差较大。当升温速率为

$3.3\text{ K}\cdot\text{h}^{-1}$ 时,外热源加热十分缓慢,壳体温度升高也很慢,同时炸药缓慢的自热反应引起炸药柱温度缓慢上升,因此1号点(壳体壁面点)和3号点(点火点)的温度曲线斜率相差不大;在3号点曲线上,从160000 s至点火,斜率突然增大,原因是炸药自热反应加剧,引起该点温度快速上升。当升温速率为 $10\text{ K}\cdot\text{min}^{-1}$ 时,几个特征点的温度曲线斜率相差很大。外热源直接对壳体加热,1号点(壳体壁面点)温度上升较快,曲线斜率较大;3号点(中心点)温度没有明显变化,曲线斜率很小。2号和4号点温度曲线斜率介于1号和3号点之间。可见在炸药点火发生时,热量还没传递到炸药柱中心。

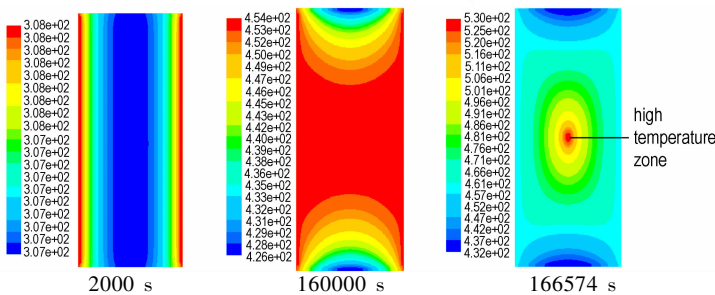


图4 升温速率为 $3.3\text{ K}\cdot\text{h}^{-1}$ 时,不同时刻炸药柱和壳体纵向截面温度分布
Fig. 4 Temperature distribution on bomb section at heating rate of $3.3\text{ K}\cdot\text{h}^{-1}$ with different time

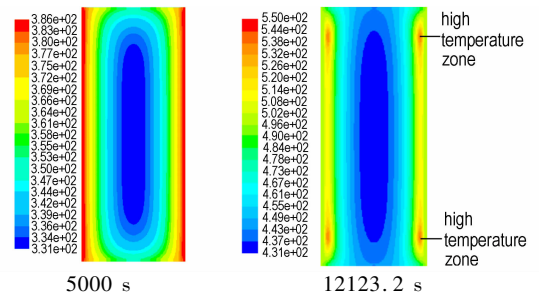


图5 升温速率为 $1\text{ K}\cdot\text{min}^{-1}$ 时,不同时刻炸药柱和壳体纵向截面温度分布
Fig. 5 Temperature distribution on bomb section at heating rate of $1\text{ K}\cdot\text{min}^{-1}$ with different time

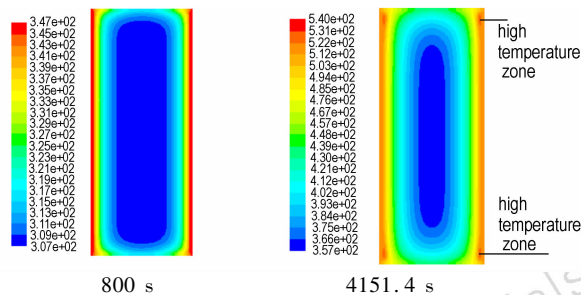


图6 升温速率为 $3\text{ K}\cdot\text{min}^{-1}$ 时,不同时刻炸药柱和壳体纵向截面温度分布
Fig. 6 Temperature distribution on bomb section at heating rate of $3\text{ K}\cdot\text{min}^{-1}$ with different time

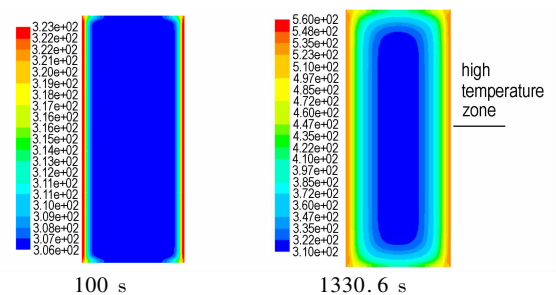


图7 升温速率为 $10\text{ K}\cdot\text{min}^{-1}$ 时,不同时刻炸药柱和壳体纵向截面温度分布
Fig. 7 Temperature distribution on bomb section at heating rate of $10\text{ K}\cdot\text{min}^{-1}$ with different time

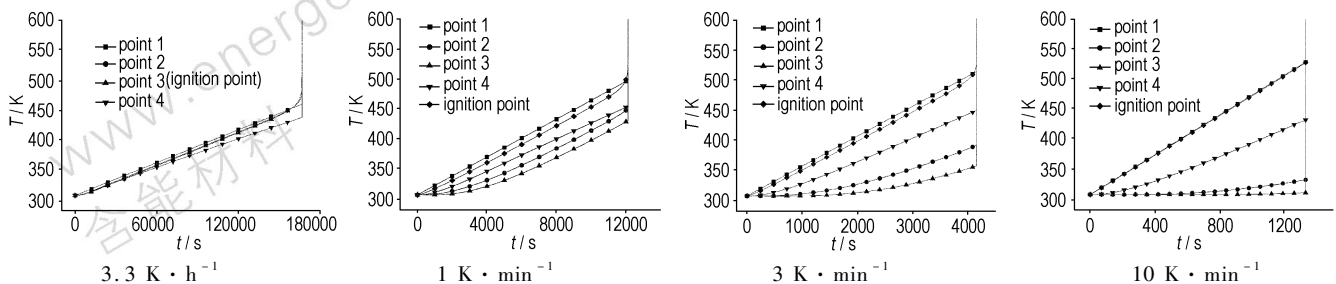


图8 不同升温速率下炸药柱特征点和点火点的温度-时间曲线
Fig. 8 $T-t$ curves of the monitored points at different heating rates

表 2 为模拟计算得到的在四种不同升温速率下固黑铝炸药的点火时间、点火温度和点火时的壳体温度。由表 2 看出,升温速率对点火温度影响不大,四种升温速率下炸药点火温度都在 530 K 左右。随着升温速率的增大,固黑铝药柱的点火时间缩短,升温速率为 $3.3 \text{ K} \cdot \text{h}^{-1}$ 时药柱的点火时间为 166574 s (46.27 h), 升温速率为 $10 \text{ K} \cdot \text{min}^{-1}$ 时药柱的点火时间为 1330.6 s (22.2 min)。随着升温速率的增加,炸药点火时的壳体温度(点火时壁面温度)升高;升温速率为 $3.3 \text{ K} \cdot \text{h}^{-1}$ 时,炸药点火时的环境温度为 459 K,而升温速率为 $10 \text{ K} \cdot \text{min}^{-1}$ 下炸药点火时壳体温度为 528 K;说明在慢烤条件下炸药点火时的环境温度低,危险性更大。

表 2 不同升温速率下炸药的点火时间、点火温度和点火时的壳体温度

Table 2 Ignition temperature, ignition time of explosive and shell temperature at igniting at different heating rates

heating rate	$3.3 \text{ K} \cdot \text{h}^{-1}$	$1 \text{ K} \cdot \text{min}^{-1}$	$3 \text{ K} \cdot \text{min}^{-1}$	$10 \text{ K} \cdot \text{min}^{-1}$
ignition time/s	166574	12123.2	4151.4	1330.6
ignition temperature/K	530	532	527	529
shell temperature at igniting/K	459	498	514	528

4 结 论

在炸药烤燃过程中,升温速率对炸药点火时间和点火位置有很大影响。升温速率增大,炸药点火时间缩短。在慢速烤燃情况下,点火位置在炸药内部;随着升温速率增大,点火位置会移向炸药边缘。快速烤燃时,一般是在炸药表面点火。升温速率对炸药点火温度影响很小,但慢速烤燃下炸药点火时的环境温度比快速烤燃时低。

参考文献:

- [1] Jones D A, Parker R P. Heat flow calculations for the small-scale cook-off bomb test [R]. AD-A236829: 1991.
- [2] 冯长根, 张蕊, 陈朗. RDX 炸药热烤 (cook-off) 实验及数值模拟 [J]. 含能材料, 2004, 12(4): 193-198.
- [3] Howard W M, McClelland M A, Knap J, et al. ALE3D simulation of gap closure and surface ignition for cook-off modeling [C]. CA 94551, 2006.
- [4] Yoh J J, McClelland M A, Maienschein J L, et al. Simulating thermal explosion of RDX-based explosives: Model comparison with experiment [J]. *Journal of Applied Physics*, 2005, 97(8): 1-11.
- [5] Yoh J J. High-end modeling and simulation of cookoff of HMX-based energetic materials [R]. LNCS 3984: 2006.
- [6] Yoh J J, McClelland M A, Maienschein J L, et al. Test-based thermal explosion model for HMX [J]. *Proceeding of the Combustion Institute*, 2007(31): 2353-2359.
- [7] 王福军. 计算流体力学分析 [M]. 北京: 清华大学出版社, 2004.
- [8] WANG Fu-jun. Analysis of computational fluid dynamics [M]. Beijing: Tsinghua University Press, 2004.
- [9] Wang Pei, Chen Lang, Wang Yan, et al. Numerical simulation of explosive cook-off at different heating rate [C] // 2007 International Autumn Seminar on Propellants, Explosives and Pyrotechnics (2007IASPEP).
- [10] Fluent Inc. FLUENT User's Guide. Fluent Inc., 2006.
- [11] Erikson W W, Schmitt R G, Atwood A 1, et al. Coupled thermal-chemical-mechanical modeling of validation cookoff experiments [C] // JANNAF 37th Combustion and 19th Propulsion Systems Hazards Subcommittees Joint Meeting, Monterey, CA, 2000.
- [12] McClelland M A, Tran T D, Cunningham B J, et al. Cookoff response of PBXN-109: Material characterization and ALE3D thermal predictions [C] // 50th Joint Army-Navy NASA Air Force (JANNAF) Propulsion Meeting, Salt Lake City, Utah, 2001.
- [13] McClelland M A, Maienschein J L, Nichols A L, et al. ALE3D model predictions and materials characterization for the cookoff response of PBXN-109 [C] // Joint Army Navy NASA Air Force 38th Combustions Subcommittee, 26th Airbreathing Propulsion Subcommittee, 20th Propulsion Systems Hazards Subcommittee and 2nd Modeling and Simulation Subcommittee Joint Meeting, Destin, FL, 2002.
- [14] Yoh J J, McClelland M A, Maienschein J L, et al. Towards a predictive thermal explosion model for energetic materials [J]. *Journal of Computer-Aided Materials Design*, 2003(10): 175-189.
- [15] 傅献彩, 沈文霞, 姚天扬. 物理化学 [M]. 北京: 高等教育出版社, 1997.
- [16] FU Xian-cai, SHEN Wen-xia, YAO Tian-yang. Physical Chemistry [M]. Beijing: Advanced Education Press, 1997.

(下转 54 页)

Reaction Rule for Explosive under Different Shape Warhead Impact in Steven Test

DAI Xiao-gan, SHEN Chun-ying, WEN Yu-shi, XIANG Yong
(Institute of Chemical Materials, CAEP, Mianyang 621900, China)

Abstract: Steven test for PBX-2 explosive was made by using little blunt warhead, pin shape warhead and plane projectiles of 2.0 kg. The pressure change was measured by manganin pressure gauges and poly vinylidene fluoride (PVDF) piezofilm stress gauge. Ignition process was analyzed by high-speed motion pictures. The reaction overpressure of explosive was obtained by blast pressure gauges. Reaction for explosive was analyzed under different shape warhead impacts in Steven test. The results show that explosive reaction is more intensive because of strong shear band under plane impact in Steven test, and reaction degree for PBX-2 explosive is higher under plane warhead.

Key words: explosion mechanics; Steven test; explosive safety; impact sensitivity

(上接 49 页)

Numerical Simulation of Cook-off for Explosive at Different Heating Rates

WANG Pei, CHEN Lang, FENG Chang-gen
(State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

Abstract: A cook-off model of explosive was established to investigate the characteristics of explosive thermal reaction at different heating rates. The numerical simulation was employed to model the cook-off process for GHL explosive at different heating rates by computational fluid dynamics (CFD) software. The decomposition reaction of explosive was described by Arrhenius-equation. According to $T-t$ curves of cook-off test at heating rate of $1 \text{ K} \cdot \text{min}^{-1}$, the activation energy and frequency factor were confirmed. The calculations were conducted to simulate the cook-off tests for GHL explosive at heating rates of $3.3 \text{ K} \cdot \text{h}^{-1}$, $1 \text{ K} \cdot \text{min}^{-1}$, $3 \text{ K} \cdot \text{min}^{-1}$ and $10 \text{ K} \cdot \text{min}^{-1}$, respectively. The results show that the external heating rate has much influence on the ignition time and ignition location. The ignition time of explosive decreases and ignition location removes from the interior to the edge of explosive cylinder with increasing of the heating rate. The ignition temperature is slightly affected by the heating rate. The environment temperature at igniting in slow cook-off test is lower than that in fast cook-off test.

Key words: physical chemistry; GHL explosive; cook-off; ignition; numerical simulation