

文章编号: 1006-9941(2011)04-0436-06

## 不同热通量下炸药烤燃的数值模拟

张晓立<sup>1</sup>, 洪滔<sup>1</sup>, 王金相<sup>2</sup>, 贾宪振<sup>3</sup>

(1. 北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100094; 2. 南京理工大学瞬态物理国家重点实验室, 江苏 南京 210094; 3. 西安近代化学研究所, 陕西 西安 710065)

**摘要:**以固黑铝炸药为研究对象, 针对炸药火药的烤燃试验或可能受到意外热辐射的热安定性问题, 建立了炸药热辐射的数值计算模型。采用计算流体力学软件 ANSYS FLUENT, 对几种不同的热通量  $10^4, 10^5, 10^6 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}$  下固黑铝炸药的热点火规律进行了计算, 得到了固黑铝炸药的点火时间、点火温度及点火位置。计算结果表明, 随着热通量的增大, 炸药的点火时间逐渐缩短, 点火时壳体的温度逐渐升高, 热通量对炸药的点火温度影响不大, 点火位置就在炸药柱的顶面中心。

**关键词:** 物理化学; 固黑铝炸药; 烤燃; 热通量; 点火; 数值模拟

**中图分类号:** TJ55; O64

**文献标识码:** A

**DOI:** 10.3969/j.issn.1006-9941.2011.04.019

### 1 引言

研究含能材料在热作用下的反应条件和规律, 对提高武器弹药的安全性和适应性具有十分重要的意义。一方面可以评估炸药在生产、加工、储存及应用于高温环境下的热危险性和可靠性; 另一方面有助于了解炸药的热分解反应动力学及热爆炸的过程和机制<sup>[1]</sup>。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, 难以得到系统全面的测量数据, 而针对烤燃实验进行的数值模拟计算, 根据烤燃实验条件, 可以直观地改变升温速率、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, 数值模拟的结果具有前瞻性, 可以对炸药的热点火规律进行预测。1991年, 美国 Jones 等<sup>[2]</sup>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<sup>[3]</sup>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<sup>[4]</sup>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<sup>[5-7]</sup>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; 陈朗等<sup>[8]</sup>以低熔点的 TNT 炸药为研究对象, 根据已有的 TNT 炸药烤燃实验, 建立了炸药烤燃的热反应模型, 模型除了考虑炸药热传导外, 还考虑了炸药多步化学反应、炸药相变和液态炸药的对流传热。可见针对炸药烤燃而建立的热传导及热对流 (相变融化状态下液体炸药的对流传热) 模型已经有较多研究, 而针对热辐射建立的数值计算模型还鲜有报道。

本文针对炸药火烧烤燃试验或可能受到外界意外热辐射的热安定性问题, 建立了固黑铝炸药 (GHL) 热辐射的计算模型, 对几种不同热通量条件下固黑铝炸药的热点火过程进行了三维数值模拟计算, 分析了热通量对炸药热反应过程的影响。

### 2 数值计算模型

图 1 为固黑铝炸药热辐射计算模型示意图。计算模型主要由固黑铝炸药柱和钢壳两部分组成。药柱直径 240 mm, 高 60 mm; 钢壳壁厚为 30 mm。在药柱直径范围内, 由钢壳顶部进行加热, 同时记录壳体壁面温度。计算中假设壳体侧壁及底面均为绝热边界, 主要记录 9 个特征点的温度变化, 1 点为钢壳顶面中心, 2 点为炸药顶面中心, 3 点、4 点为炸药柱轴线上等间距内部点, 5 点为炸药底面中心, 6 点为钢壳底面中心, 7 点位于炸药装药半径的二分之一处, 8 点为炸药柱侧壁上的点, 9 点为钢壳外壁上的点。

收稿日期: 2010-09-26; 修回日期: 2010-11-16

作者简介: 张晓立 (1979-), 男, 博士, 主要从事炸药热安定性及冲击动力学研究。e-mail: leory.cnnj@yahoo.com.cn

通讯作者: 洪滔 (1965-), 男, 研究员, 博导, 主要从事爆炸力学研究。e-mail: Hongtao@iapcm.ac.cn

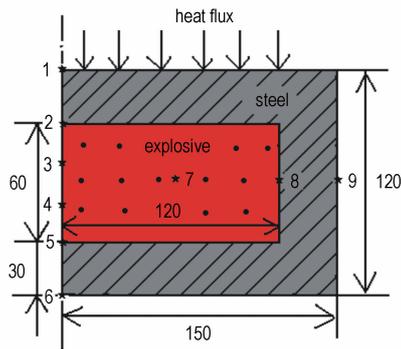


图1 计算模型示意图

Fig. 1 Schematic drawing of the calculation model

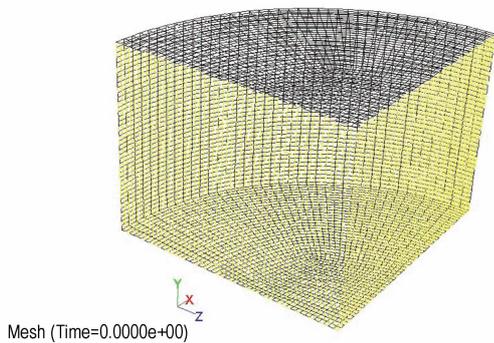


图2 计算网格图

Fig. 2 Calculation grid of model

建立计算模型,作如下假设:

- (1) 炸药及钢壳在整个模拟过程中为固态,不考虑炸药的相变影响;
- (2) 药柱和钢壳之间无间隙;
- (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,不随温度变化而发生变化。

计算模型方程为:

$$\rho c \frac{dT}{dt} = \lambda \nabla^2 T + S \quad (1)$$

其中,  $\rho$  为物质密度,  $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ;  $c$  为比热,  $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ;  $T$  为温度,  $\text{K}$ ;  $t$  为时间,  $\text{s}$ ;  $\lambda$  为导热系数,  $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ;  $S$  为源项。由 Arrhenius 反应速率方程

$$S = \rho Q Z (1 - \alpha)^n \exp(-E/RT) \quad (2)$$

式中,  $S$  是炸药自热反应放热源项;  $\rho$  为炸药的密度,  $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ;  $Q$  为反应热,  $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1}$ ;  $Z$  为指前因子,  $\text{s}^{-1}$ ;  $\alpha$  为已反应炸药分数;  $n$  为反应级数;  $E$  为活化能,  $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$ ;  $R$  为普适气体常数,  $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ 。本研究采用 FLUENT 进行计算,源项以用户自定义函数

(UDF) 的形式加载到 FLUENT 中进行求解。

通过流体力学软件 ANSYS FLUENT, 对  $10^4, 10^5, 10^6 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}$  三种不同热通量下的固黑铝炸药的热辐射进行了三维数值模拟计算。计算的初始温度为  $300 \text{ K}$ 。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 (UDF) 形式加载到软件中进行计算。计算模型为圆柱形, 为减小计算量, 建立四分之一模型。计算中钢采用热传导模型, 固黑铝 (GHL) 炸药采用零级 Arrhenius 反应速率模型, 图 2 为计算网格图。计算采用 PISO 算法, 即压力的隐式算子分割算法。PISO 算法使用了预测-修正-再修正三步, 加快单个迭代步中的收敛速度。对于瞬态问题, Fluent 的用户手册<sup>[9]</sup> 推荐 PISO 算法, 因此, 本研究采用 PISO 算法进行模拟计算。表 1 为固黑铝炸药和钢壳的物性参数<sup>[10]</sup>。

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: GHL is RDX-based cast-cured aluminized explosive, some parameters of GHL are obtained from References [11-14].

根据文献 [10], 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, 因此, 本研究采用了该活化能和指前因子进行计算。为了验证本文数值计算方法的准确性和有效性, 首先采用文献 [10] 的方法建模, 利用该活化能及指前因子计算升温速率为  $1 \text{ K} \cdot \text{min}^{-1}$  时特征点 1 号的温度时间曲线 (如图 3 所示), 将计算值与实验值对比。由图 3 可知, 本文计算得到的结果与实验值基本吻合, 同时也与文献 [10] 的结果较为吻合。另外本文还计算了当升温速率为  $10 \text{ K} \cdot \text{min}^{-1}$  时特征点的温度-时间曲线, 如图 4 所示。由图 4 可知, 其点火时间为  $1338 \text{ s}$ , 点火温度为  $526 \text{ K}$ , 点火时壳体温度为  $530 \text{ K}$ , 而文献 [10] 得到的点火时间为  $1330.6 \text{ s}$ , 点火温度为  $529 \text{ K}$ , 点火时壳体温度为  $528 \text{ K}$ , 双方数据吻合度较好。由此可见, 本文针对固黑铝炸药所采用的活化能、指前因子、材料的物性参数及 FLUENT 用户自定义函数的设置而进行的计算是准确可靠的。

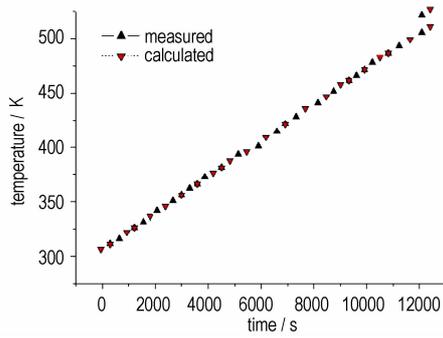


图3 升温速率为  $1 \text{ K} \cdot \text{min}^{-1}$  时 1 号特征点的计算值与实验值的对比

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

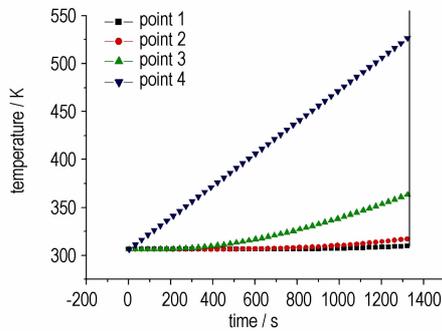
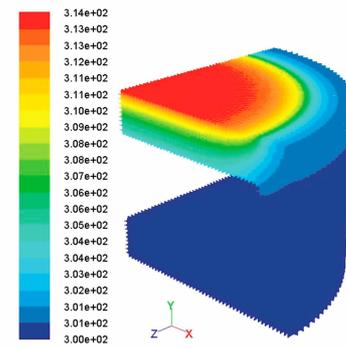


图4 升温速率为  $10 \text{ K} \cdot \text{min}^{-1}$  时特征点的温度-时间曲线

Fig. 4  $T-t$  curves of the diagnostic points at heating rate of  $10 \text{ K} \cdot \text{min}^{-1}$

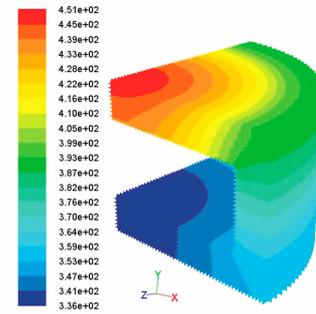
### 3 结果与讨论

图 5 为当热流量为  $10^4 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}$  时钢壳在各个时刻 100, 4900, 9110, 9120 s 的温度分布云图, 可见在外界热辐射的作用下, 钢壳温度从顶部, 经侧壁向钢壳底部逐渐升高。图 6 为炸药在相应时刻 100, 4900, 9110, 9120 s 的温度分布云图。由图 6 可知, 炸药的温度亦随着钢壳的温度变化, 从顶部和侧面向炸药内部逐渐升高, 炸药装药的中下段温度升高较慢, 炸药顶面中心的温度最高, 为点火区域。图 7 为烤燃装置在不同热通量下轴向各特征点的温度时程曲线, 可见当热通量较小时, 特征点的温升曲线斜率相差不大, 而当热通量较大时, 特征点的温升曲线斜率相差明显增大。当热通量为  $10^4 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}$  时, 壳体受热引起炸药自热反应的缓慢放热使得炸药柱的温度也缓慢上升, 1 点和 2 点的温升斜率相差很小, 2 点为炸药柱温度最高的点, 从 8500 s 到点火 (9120 s), 斜率突然变得很大, 炸药自热反应加剧, 2 点温度急剧上升。当



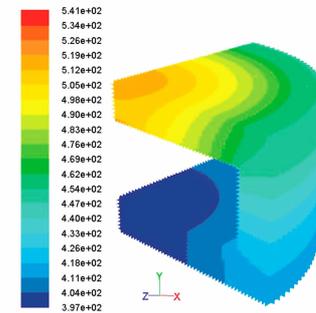
Contours of Static Temperature (k) (Time=1.0000e+02)

a. 100 s



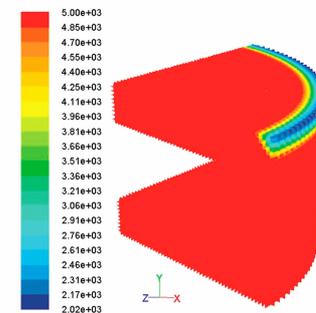
Contours of Static Temperature (k) (Time=4.9000e+03)

b. 4900 s



Contours of Static Temperature (k) (Time=9.1100e+03)

c. 9110 s

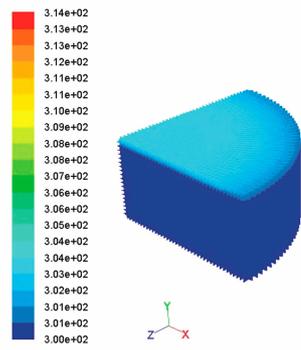


Contours of Static Temperature (k) (Time=9.1200e+03)

d. 9120 s

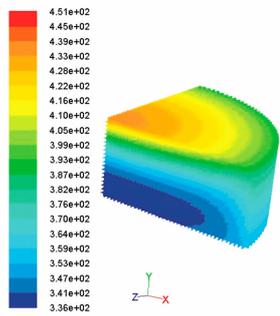
图5 钢壳在不同时刻的温度分布云图

Fig. 5 Temperature distribution on the steel confinement different times



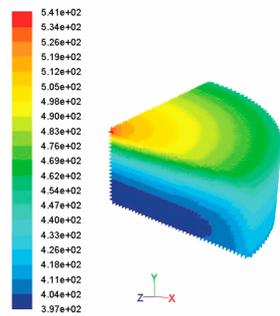
Contours of Static Temperature (k) (Time=1.0000e+02)

a. 100 s



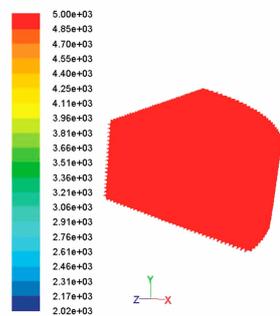
Contours of Static Temperature (k) (Time=4.9000e+03)

b. 4900 s



Contours of Static Temperature (k) (Time=9.1100e+03)

c. 9110 s



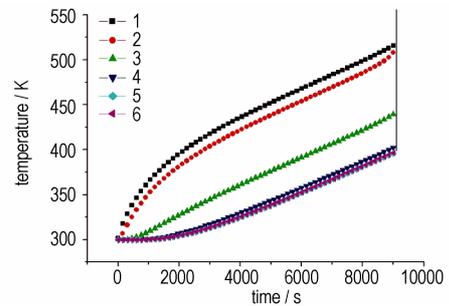
Contours of Static Temperature (k) (Time=9.1200e+03)

d. 9120 s

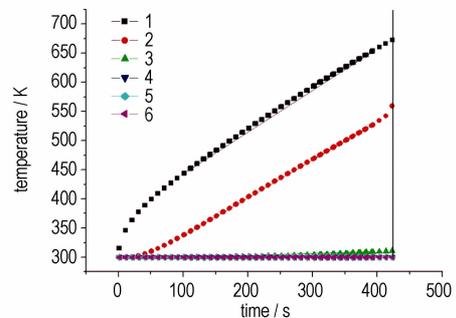
图6 炸药在各时刻的温度分布云图

Fig.6 Temperature distribution on the explosive at different times

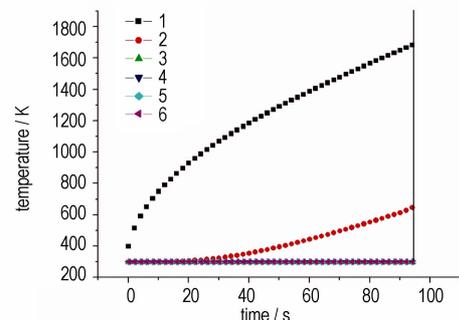
热通量为 $10^6 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}$ 时,各特征点温升曲线斜率相差很大,1点为钢壳直接受热,温度升高最快,而其他特征点温度尚未明显升高,温升曲线斜率很小,炸药的顶面中心已经点火。当热通量分别为 $10^4, 10^5, 10^6 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}$ 时,炸药的点火时间分别为9120,425,94.9 s,点火温度分别为534.8,529.2,532.8 K,热点火时钢壳顶面中心的温度分别为518.2,673.3,1687.9 K。图8为计算模型在不同热通量下径向特征点的温度时程曲线。由图8可见,起初与轴向特征点的温度分布类似,随着热通量的增大,各特征点斜率差呈增大的趋势,而当热通量较大时,各特征点的温度变化都不大,炸药即发生点火,当热通量为 $10^6 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}$ 时,由于点火时间较短,炸药内部特征点的温度几乎没有变化。



a.  $10^4 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}$



b.  $10^5 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}$



c.  $10^6 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}$

图7 烤燃装置不同热通量下轴向温度时程曲线

Fig.7 History curves of the axial temperature of the cook-off device

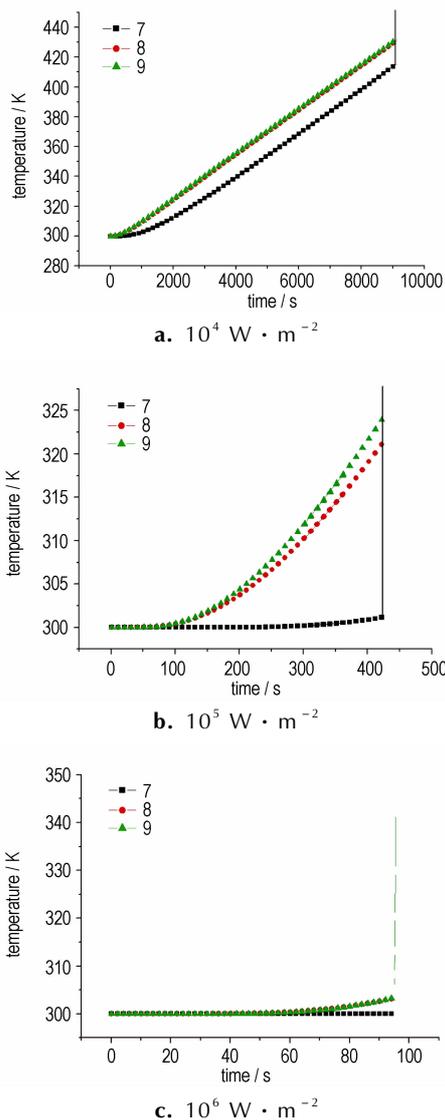


图8 烤燃装置不同热通量下径向温度时程曲线

Fig. 8 History curves of the radial temperature of the cook-off device

表2 不同热通量下炸药的点火时间、点火温度及点火时壳体温度

Table 2 Ignition temperature, time to ignition and shell temperature at different heat flux

heat flux / $\text{W} \cdot \text{m}^{-2}$	time to ignition / s	ignition temperature / K	shell temperature at igniting / K
$10^4$	9120	534.8	518.2
$10^5$	425	529.2	673.3
$10^6$	94.9	532.8	1687.9

表2为数值模拟的不同热通量下炸药的点火时间、点火温度及点火时钢壳的温度。由表2可知,随着热通量的增大,炸药的点火时间逐渐缩短,炸药点火

时,钢壳温度(钢壳顶面中心温度)逐渐升高,热通量对点火温度的影响不大,点火温度均在530 K左右。当热通量较小时,温度场分布比较均匀,所需的点火时间比较长,而热通量较大时温度场分布不均匀,炸药和钢壳的温度梯度相差较大,炸药内部局部可能快速达到点火温度,因此点火时间缩短。

## 4 结论

针对炸药可能受到意外热辐射的安定性问题,建立了封装在壁厚为30 mm的钢壳内的直径为240 mm、高为60 mm的固黑铝炸药柱状装药的计算模型,采用 $10^4, 10^5, 10^6 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}$ 三种不同的热通量对其进行了三维数值模拟。结果表明,热通量对点火时间及点火时的壳体温度影响较大。随着热通量的增大,炸药的点火时间缩短,点火时壳体温度逐渐升高,热通量对炸药的点火温度影响不大,点火位置就在炸药柱的顶部中心。

## 参考文献:

- [1] 荆松吉,张振宇. 炸药圆柱体烤燃二维数值模拟[J]. 含能材料, 2004,12(增刊): 512-515.  
JING Song-ji, ZHANG Zhen-yu. 2D numerical simulation of cook-off test of explosive cylinder[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials(Hanneng Cailiao)*, 2004,12(Supplement): 512-515.
- [2] Jones D A, Parker R P. Heat flow calculations for the small-scale cook-off bomb test. AD-A236829[R]: 1991.
- [3] 冯长根,张蕊,陈朗. RDX炸药热烤燃(cook-off)实验及数值模拟[J]. 含能材料,2004,12(4): 193-198.  
FENG Chang-gen, ZHANG Rui, CHEN Lang. The cook-off test and its numerical simulation of RDX[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials(Hanneng Cailiao)*, 2004,12(4): 193-198.
- [4] Howard W M, McClelland M A, Knap J, et al. ALE3D simulation of gap closure and surface ignition for cook-off modeling; CA94551[P]. 2006.
- [5] 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.
- [6] Yoh J J. High-end modeling and simulation of cook-off of HMX-based energetic materials. LNCS 3984[R]: 2006.
- [7] 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.
- [8] 陈朗,王沛,冯长根. 考虑相变的炸药烤燃数值模拟计算[J]. 含能材料,2009,17(5): 568-573.  
CHEN Lang, WANG Pei, FENG Chang-gen. Numerical simulation of cook-off about phase transition of explosive[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials(Hanneng Cailiao)*, 2009,17(5): 568-573.
- [9] Fluent Inc. FLUENT User's Guide[S]. Fluent Inc., 2006.
- [10] 王沛,陈朗,冯长根. 不同升温速率下炸药烤燃模拟计算分析[J].

- 含能材料,2009,17(1): 46-49.
- WANG Pei, CHEN Lang, FENG Chang-gen. Numerical simulation of cook-off for explosive at different heating rates[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials*(*Hanneng Cailiao*), 2009, 17(1): 46-49.
- [11] Erikson W W, Schmitt R G, Atwood A L, et al. Coupled thermal-chemical-mechanical modeling of validation cook-off 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. Cook-off 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, Malenschein J L, Nichols A L, et al. ALE3D model predictions and materials characterization for the cook-off 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, Malenschein J L, et al. Towards a predictive thermal explosion model for energetic materials[J]. *Journal of Computer-Aided Materials Design*, 2003(10): 175-189.

## Numerical Simulation of Cook-off for Explosive at Different Heat Fluxes

ZHANG Xiao-li<sup>1</sup>, HONG Tao<sup>1</sup>, WANG Jin-xiang<sup>2</sup>, JIA Xian-zhen<sup>3</sup>

(1. Institute of Applied Physics and Calculating Mathematics, Beijing 100094, China; 2. State Key Laboratory of Transient Physics, NUST, Nanjing 210094, China; 3. Xi'an Modern Chemistry Research Institution, Xi'an 710065, China)

**Abstract:** A thermal reaction model of explosive was established for the cook-off test under the thermal condition of fire and thermal stability consideration of the explosive with the unexpected thermal radiation. The RDX-based cast cured alumnized (GHL) explosive was selected to investigate the characteristics of thermal ignition of the explosive at heat flux of  $10^4$ ,  $10^5$ ,  $10^6$   $W \cdot m^{-2}$ , respectively. The calculation is conducted by means of the CFD software (ANSYS FLUENT) and the time to ignition, the ignition temperature and the ignition location were obtained. Results show that the ignition time of explosive decreases and the shell temperature increases with increasing of heat flux. The ignition temperature is slightly affected by heat flux. The ignition location is center of the upper center of the explosive.

**Key words:** physical chemistry; RDX-based cast cured alumnized explosive; cook-off; heat flux; ignition; numerical simulation

**CLC number:** TJ55; O64

**Document code:** A

**DOI:** 10.3969/j.issn.1006-9941.2011.04.019

读者·作者·编者

## 42 届 ICT 国际年会会讯

第 42 届 ICT 国际年会于 2011 年 6 月 29 日到 7 月 1 日在德国卡尔斯鲁厄举行。今年年会的主题是“烟火剂、推进剂、炸药的模拟与表征”。大会正式开幕前,全体成员集体对今年年初病故的著名爆轰学专家 M. Held 博士表示了哀悼。来自近 30 个国家的二百多名含能材料领域的专家分别就“反应行为的试验表征、燃烧与爆轰的先进诊断、反应行为的数值模拟”等专题进行了为期三天的热烈交流与讨论。国内的中物院化工材料研究所,航天 42 所等单位派代表参加了年会。来自中物院化工材料研究所的李明博士以“化工材料研究所的降感含能晶体研究进展”为题做了大会报告,赢得了与会各国专家的高度兴趣与关注。据悉,第 43 届 ICT 国际年会将于 2012 年 6 月 26 日至 29 日在卡尔斯鲁厄举行。

(《含能材料》编辑部 供稿)