

文章编号: 1006-9941(2015)08-0771-05

加速老化时炸药柱内部温度场的数值模拟

孙新利, 黄桂, 赵遇春

(第二炮兵工程大学, 陕西 西安 710025)

摘要: 通过理论分析和模拟计算考察了加速老化过程中炸药热分解效应对试验炸药柱内部温度场的影响。理论分析表明影响炸药柱内部温度场的因素主要有炸药种类、试验环境温度和炸药柱尺寸。采用有限元分析软件 ANSYS 分析了 5 种高能炸药 (RDX, TATB, Tetryl, HMX, PETN) 在不同条件下的内部温度场。结果显示: 炸药种类是决定影响效果的关键因素, 试验环境温度为 110 °C 时, $\Phi 20 \text{ mm} \times 20 \text{ mm}$ 的 RDX 和 PETN 炸药柱温度偏差分别达到 2.59 °C 和 1.19 °C。而其余 3 种炸药温度偏差不明显。PETN, RDX 应合理控制试验环境温度和炸药柱尺寸以减小试验过程的温度偏差。

关键词: 炸药柱; 热分解; 加速老化试验; 有限元; 内部温度场

中图分类号: TJ45

文献标志码: A

DOI: 10.11943/j.issn.1006-9941.2015.08.012

1 引言

炸药贮存过程中普遍存在热分解现象。高能炸药分子具有易断裂成小分子而不消耗太多能量的特点, 整个分解反应是放热的^[1]。在室温条件下炸药热分解速率极低, 其热效应并不明显。但热分解速率受温度影响显著, 当温度大幅升高, 热分解速率会急剧增大, 分解热效应需要引起注意。

炸药热分解是长期的过程, 为缩短试验周期通常采用加速热老化试验的方法来研究^[2-4], 试验环境温度高于室温。根据阿仑尼乌斯公式^[2]预测: 随着温度升高, 炸药热分解速率近似以指数规律增大。所以, 加速热老化试验条件下炸药分解的热效应会急剧放大。有必要考虑热效应对试验炸药柱内部温度场的影响。

国内外的炸药加速热老化试验通常在油浴烘箱中进行, 持续时间从数日到数百日不等, 试验过程中通过有效控制导热油的温度来控制试验炸药柱的温度^[5-9], 认为炸药柱的老化温度均等于试验设定的环境温度。实质上, 炸药热分解会导致炸药内部温度高于试验环境温度, 炸药老化过程是在炸药内部温度而非试验环境温度下进行。

目前的相关研究中通常没有考虑炸药热分解对炸药柱内部温度场的影响^[5-9]。炸药自热引起的试验环境温度与炸药柱中心温度的差值属于系统误差, 有可能对炸药性能评估带来难以预测的影响。本研究旨在通过对炸药柱内部温度场的模拟计算, 考察炸药加速热老化试验过程中由分解热效应引起的温度偏差, 分析主要影响因素, 并提出减小温度偏差的措施。

2 理论分析

炸药柱内部温度场分布取决于炸药生热速率(单位时间内单位体积炸药热分解释放的热量, h) 和散热条件。综合考虑热老化试验条件的差异, 影响炸药柱内部温度场的主要因素包括以下三个方面:

(1) 炸药种类。不同炸药的表现活化能、指前因子、分解热等热动力学参数相差甚远, 在相同的试验条件下, 不同炸药的放热分解速率差别很大, 导致加速老化试验过程不同炸药柱的生热速率差别很大。

(2) 试验环境温度。炸药热分解速率可以用阿仑尼乌斯公式表示^[2],

$$k = A \cdot e^{-\frac{E}{RT}} \quad (1)$$

式中, k 为反应速率常数, s^{-1} ; T 为温度, K ; E 为反应活化能, $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$; A 为指前因子, s^{-1} ; R 为理想气体常数, $8.314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ 。从公式(1)中可以看出, 环境温度是影响炸药热分解的重要因素, 随着试验环境温度的升高, 其热分解速率将大幅提升, 生热速率增大。

收稿日期: 2014-06-05; 修回日期: 2014-09-05

作者简介: 孙新利(1963-), 男, 教授, 主要从事武器系统安全性可靠性研究。e-mail: s-xinl@sina.com

通信联系人: 黄桂(1989-), 男, 硕士研究生, 主要从事武器系统安全性可靠性研究。e-mail: julianxiaoban@163.com

(3) 炸药柱尺寸。尺寸同时影响炸药柱的生热速率和散热, 炸药柱尺寸增大, 生热速率增加, 同时, 炸药柱表面积增加, 单位时间内的散热量也将增大。

值得指出的是, 其它因素也可能影响炸药柱内部温度场, 但对于特定炸药而言, 一部分因素基本确定, 如炸药比热容、传热系数、炸药柱密度; 另一部分因素则在模拟实验过程中难以量化, 如油浴烘箱温控的灵敏度等。为简化计算模型, 突出主要矛盾, 模拟计算过程进行了以下假设:

(1) 油浴烘箱温度控制精确, 炸药柱表面导热油

温度与加速老化试验环境温度相同。

(2) 忽略炸药热分解引起的温度升高对炸药生热速率的影响, 即炸药柱的生热速率等于加速老化试验环境温度下的生热速率。

3 数值模拟结果及分析

3.1 炸药种类对炸药柱内部温度场的影响

选取了 5 种常用的高能炸药进行模拟计算, 相关参数见表 1。

由于比热容 C 随温度变化, 其值未在表 1 中列出。

表 1 5 种常用炸药的参数^[10-11]

Table 1 Parameters for five common explosives^[10-11]

explosive	$\rho^1 / \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	$\lambda^2 / \text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$	$E^3 / \text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$	$\lg(A^4) / \text{s}^{-1}$	$Q^5 / \text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$
RDX	1.70×10^3	0.292	1.63×10^5	16.9	6.47×10^5
TATB	1.94×10^3	0.544	2.15×10^5	15.1	6.48×10^5
Tetryl	1.63×10^3	0.188	1.74×10^5	16.8	3.93×10^5
HMX	1.91×10^3	0.345	3.74×10^5	33.8	3.98×10^5
PETN	1.72×10^3	0.250	1.12×10^5	10.4	2.15×10^5

Note: 1) density; 2) heat conduction coefficient; 3) activation energy; 4) pre-exponential factor; 5) decomposition heat.

根据理论分析, 温度越高, 热分解对炸药柱温度场影响越明显。前期计算表明, 试验环境温度达到 100 °C, 部分常用炸药的内部温度场开始发生明显变化, 同时在炸药加速热老化试验中, 试验环境温度经常能达到 100 °C, 故根据公式 (1) 及相关参数计算了 RDX 在 100 °C 下热分解反应速率常数 k :

$$k = 10^{16.9} e^{-\frac{1.63 \times 10^5}{8.314 \times 373.15}} = 1.85 \times 10^{-6} \text{ s}^{-1}$$

以单位体积内的炸药为研究对象, 则该炸药的摩尔数为 ρ/M , 其中, M 为炸药的摩尔质量, $\text{kg} \cdot \text{mol}^{-1}$ 。单位时间内单位体积炸药发生分解反应的摩尔数 n

$$\text{可表示为 } n = k \cdot \frac{\rho}{M}。$$

根据 h 的定义可知, h 是 n 与 RDX 的分解热 Q 的乘积, 即:

$$h = \frac{k \cdot \rho}{M} \cdot Q \quad (2)$$

将有关数据代入公式 (2), 得

$$h = 1.85 \times 10^{-6} \times \frac{6.47 \times 10^5 \times 1.7 \times 10^3}{0.222} = 9.29 \times 10^3 \text{ W} \cdot \text{m}^{-3}$$

以此为基础, 应用 ANSYS 软件^[12] 建立三维 1/4 模型, 计算 100 °C 下, $\phi 20 \text{ mm} \times 20 \text{ mm}$ 的 RDX 炸药柱内部温度场, 炸药柱边界设置为对流边界, 油类强制对流的对流换热系数约为 $50 \sim 1500 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$ ^[13], 在此

对流换热系数取最大值为 $1500 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$, 炸药柱内部传热稳定后内部温度场分布云图如图 1 所示。

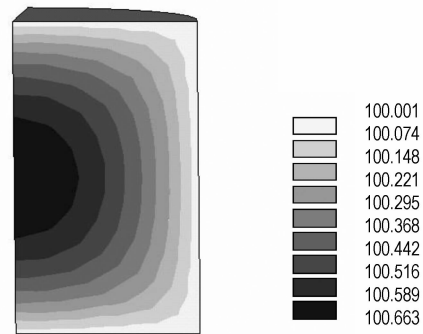


图 1 100 °C 下 RDX 炸药柱内部温度场

Fig. 1 Internal temperature field of RDX cylinder at 100 °C

根据公式 (1) 和表 1 中相关参数计算了 TATB, Tetryl, HMX 和 PETN 4 种炸药的反应速率常数, 并由公式 (2) 和相关参数计算了其生热速率, 如表 2 所示。

应用建 ANSYS 软件建立三维 1/4 模型, 计算 100 °C 下, $\phi 20 \text{ mm} \times 20 \text{ mm}$ 的 TATB, Tetryl, HMX 和 PETN 4 种炸药柱内部温度场分布, 边界条件设置与 RDX 相同, 表 3 列出了 100 °C 下 5 种炸药的稳态中心温度 T_{cen} 和温度偏差 (即中心温度与试验环境温度的差值)。

表 2 100 °C 下几种常用炸药的反应速率常数和生热速率

Table 2 Reaction rate constant (k) and heat generation rate (h) of common explosives at 100 °C

explosive	k/s^{-1}	$h/W \cdot m^{-3}$
RDX	1.85×10^{-6}	9.28×10^3
TATB	1.08×10^{-15}	5.40×10^{-9}
Tetryl	5.28×10^{-8}	9.13×10
HMX	1.30×10^{-18}	7.85×10^{-10}
PETN	5.83×10^{-6}	5.60×10^3

表 3 100 °C 下几种常用炸药柱中心温度和温度偏差

Table 3 Central temperature (T_{cen}) and temperature deviation (ΔT) of common explosive cylinders at 100 °C

explosive	T_{cen}	ΔT
RDX	100.663	0.663
TATB	100.000	0
Tetryl	100.010	0.010
HMX	100.000	0
PETN	100.464	0.464

由表 3 可知,相同试验环境温度和相同尺寸的不同炸药的中心温度存在差异。热安定性好的 HMX 和 TATB 观察不到热分解对炸药柱内部温度场的影响,而热安定性较差的 RDX 和 PETN 的温度偏差分别为 0.663 °C 和 0.464 °C。不同炸药生热速率的差异主要源于活化能和指前因子,对于活化能偏小而指前因子偏大的炸药,其高温时的热分解速率偏快,应当考虑分解热效应。

表 4 5 种炸药在不同试验环境温度下的生热速率

Table 4 Heat generation rate of five explosive cylinders at different test temperatures

 $W \cdot m^{-3}$

explosive	$T/^\circ C$					
	60	70	80	90	100	110
RDX	17.5	96.6	482	2.20×10^3	9.28×10^3	3.63×10^3
TATB	1.33×10^{-12}	1.27×10^{-11}	1.07×10^{-10}	8.03×10^{-10}	5.40×10^{-9}	3.29×10^{-8}
Tetryl	0.110	0.687	3.84	19.6	91.3	393
HMX	4.11×10^{-16}	2.10×10^{-14}	8.56×10^{-13}	2.85×10^{-11}	7.85×10^{-10}	1.82×10^{-8}
PETN	72.5	236	720	2.07×10^3	5.60×10^3	1.44×10^4

表 5 炸药柱不同试验环境温度下的温度偏差

Table 5 Temperature deviation of explosive cylinders at different test temperatures

°C

explosive	$T/^\circ C$					
	60	70	80	90	100	110
RDX	1.00×10^{-3}	7.00×10^{-3}	3.40×10^{-2}	1.57×10^{-1}	6.63×10^{-1}	2.59
TATB	0	0	0	0	0	0
Tetryl	0	1.00×10^{-4}	4.00×10^{-4}	2.00×10^{-3}	1.00×10^{-2}	4.20×10^{-2}
HMX	0	0	0	0	0	0
PETN	6.00×10^{-3}	2.10×10^{-2}	6.00×10^{-2}	1.72×10^{-1}	4.64×10^{-1}	1.19

3.2 试验环境温度对炸药柱内部温度场的影响

查阅常用炸药加速热老化试验相关资料,一般试验环境温度为 60 ~ 90 °C,部分试验环境温度达到或高于 110 °C^[2-3],据此对试验环境温度分别为 60,70,80,90,100 °C 和 110 °C 时炸药柱的内部温度场分布进行了模拟计算。炸药热分解生热速率随试验环境温度变化,根据假设 2 和公式(1)计算了不同温度下 5 种炸药柱的生热速率(表 4)。

由此求解了 5 种炸药在不同试验环境温度下的内部温度场分布,炸药柱在不同试验环境温度下炸药柱的温度偏差见表 5,温度偏差与试验环境温度 T 的关系见图 2。

由表 5 和图 2 可知,RDX 炸药柱的温度偏差随试

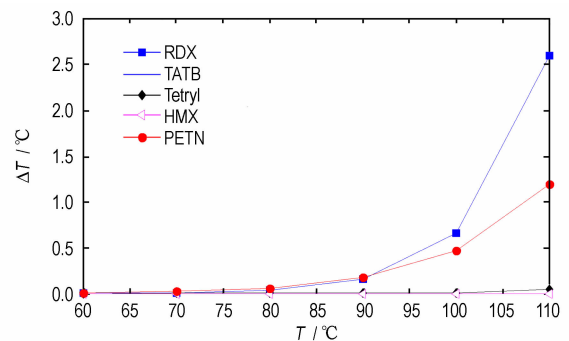


图 2 温度偏差与试验环境温度关系曲线

Fig. 2 Relationship between temperature deviation and test temperature

验环境温度变化明显, 试验环境温度每上升 10 °C, 温度偏差增加约 3 ~ 4 倍。PETN 炸药柱 110 °C 进行加速老化试验时温度偏差为 1.19 °C。在所模拟的试验环境温度范围内, Tetryl, TATB 和 HMX 炸药柱没有明显的温度偏差。温度偏差与试验环境温度关系密切, 对于热安定性差的 (RDX, PETN) 炸药, 试验环境温度越高, 热分解对炸药柱内部温度场的影响越明显。

3.3 炸药柱尺寸对内部温度场的影响

模拟试验选取 7 个直径分别为 14, 16, 18, 20, 22, 24, 26 mm 的 RDX 炸药柱, 为保证炸药柱形状相似, 固定炸药柱长径比 (高度与直径的比值) 为 1。

在试验环境温度为 100 °C 条件下, 分别应用 ANSYS 软件建立不同尺寸的炸药柱的三维模型 (生热速率数据见表 2), 求解了其内部温度场。不同尺寸炸药柱温度偏差见表 6, 在长径比为 1 的条件下, 炸药柱温度偏差和炸药柱直径的关系曲线见图 3。

温度偏差和炸药柱尺寸关系复杂, 随着炸药柱尺

寸的增大, 一方面炸药柱的体积增大, 单位时间内总生热量增加; 另一方面炸药柱的表面积增大, 单位时间内向外释放的热量增加。由表 6 和图 3 可知, RDX 和 PETN 炸药柱尺寸增大会使温度偏差升高, 但升高的幅度并不大, TATB、Tetryl 和 HMX 炸药柱在相同试验条件下没有明显的温度偏差。

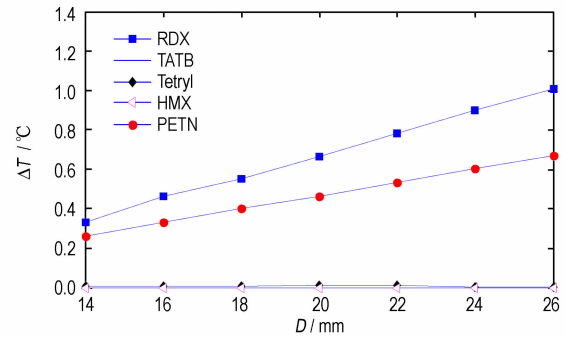


图 3 温度偏差与炸药柱直径的关系曲线

Fig. 3 Relationship between temperature deviation and diameter of explosive cylinders

表 6 不同尺寸炸药柱 100 °C 下的温度偏差

Table 6 Temperature deviation of explosive cylinders with different size at 100 °C

explosive	D/mm						
	14	16	18	20	22	24	26
RDX	0.329	0.465	0.554	0.663	0.782	0.902	1.01
TATB	0	0	0	0	0	0	0
Tetryl	5.02 × 10 ⁻³	7.00 × 10 ⁻³	8.12 × 10 ⁻³	1.00 × 10 ⁻²	1.21 × 10 ⁻²	1.30 × 10 ⁻³	1.50 × 10 ⁻³
HMX	0	0	0	0	0	0	0
PETN	0.259	0.333	0.404	0.464	0.534	0.605	0.671

对比炸药种类、试验环境温度和炸药柱尺寸三个因素的影响: 炸药种类对温度偏差起到决定性的作用, 对于热安定性好的 HMX 和 TATB 炸药柱, 无论试验环境温度和炸药柱尺寸取何值, 温度偏差均为 0 °C, 而 RDX 和 PETN 炸药柱有明显的温度偏差; 试验环境温度对温度偏差有着显著的影响, 由图 2 可知, 对于有明显温度偏差的 RDX 和 PETN 炸药柱, 试验环境温度每升高 10 °C, 温度偏差增加 3 ~ 4 倍; 炸药柱尺寸对温度偏差影响较微弱, 由图 3 可知, 对于有明显温度偏差的 RDX 和 PETN 炸药柱, 在炸药柱长径比为 1 的条件下, 温度偏差与炸药柱直径之间存在近似的线性关系。

4 结论

(1) 炸药种类是决定温度偏差的关键因素, 其决定性参数是炸药表观活化能和指前因子; 试验环境温

度对温度偏差影响显著; 试样尺寸对温度偏差的影响较微弱, 随着试样的尺寸增大, 温度偏差会相应地增大, 但增大不明显。

(2) 加速热老化试验过程中, 炸药柱放热分解引起的炸药内部温度场与试验环境温度不一致, 给试验带来误差, 应该尽量避免。对于 TATB、HMX 等热安定性好的炸药, 热分解对试样内部温度场影响极小; 对于 RDX、PETN 等热安定性相对较差的炸药, 热分解对试样内部温度场的影响则不可忽视, 应尽量降低试验环境温度 (在试验允许范围内)、减小试样尺寸降低温度偏差。

参考文献:

- [1] 舒远杰. 高能硝胺炸药的热分解 [M]. 北京: 国防工业出版社. 2010: 1-2.
SHU Yuan-jie. Thermal decomposition of nitamine high explosives [M]. Beijing: National defense industry press. 2010: 1-2
- [2] 高大元, 何松伟, 周建华, 等. JB-9014 炸药加速老化模拟研究

- [J]. 兵工学报, 2009, 30(12): 1607-1610.
- GAO Da-yuan, HE Song-wei, ZHOU Jian-hua, et al. Numerical modeling on the accelerated aging of JB-9014 explosive[J]. *Acta Armamentarii*, 2009, 30(12): 1607-1610.
- [3] 左玉芬, 雄鹰, 房永曦, 等. JOB-9003 炸药热老化寿命评估及其结构特征[J]. 化学研究与应用, 2010, 22(2): 152-155.
- ZUO Yu-fen, XIONG Ying, FANG Yong-xi, et al. Thermal aging life evaluation and structure characterization of JOB-9003 explosive[J]. *Chemical Research and Application*, 2010, 22(2): 152-155.
- [4] WANG Ning-fei, WAN Qian, SUI Xin, et al. Life prediction of NEPE propellants [J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2014(39): 102-107.
- [5] 杨国满, 胡晓棉. 时间温度效应与塑性粘结炸药的力学性能[J]. 火炸药学报, 2004, 27(1): 5-9.
- YANG Guo-man, HU Xiao-mian. The time-temperature shift factor and the mechanical properties of explosives [J]. *Chinese Journal of Explosives and Propellants*, 2004, 27(1): 5-9.
- [6] 高晓敏, 杨雪海. 炸药性能在热老化环境下的变化及其预测模拟研究[J]. 中国材料科技与设备, 2011(1): 19-23.
- GAO Xiao-min, YANG Xue-hai. Properties change, prediction and simulation of explosives under thermal aged ambient [J]. *Chinese Materials Technology and Equipments*, 2011(1): 19-23.
- [7] 韦兴文, 李敬明, 涂小珍. 热老化对 TATB 基高聚物粘结炸药力学性能的影响[J]. 含能材料, 2010, 18(2): 157-161.
- WEI Xing-wen, LI Jing-ming, TU Xiao-zhen. Effects of thermal aging on mechanical properties of PBX based on TATB [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2010, 18(2): 157-161.
- [8] Hoffman D M. Dynamic mechanical signatures of aged LX-17-1 plastic bonded explosive [J]. *Journal of Energetic Materials*, 2001, 19: 163-193.
- [9] Lenka Husakova, Zbynek Akstein. Epoxy - cyanate ester compositions as matrixes for tagging of explosives [J]. *Advances in Polymer Technology*, 2013, 33(2).
- [10] 金韶华, 松全才. 炸药理论 [M]. 陕西: 西北工业大学出版社, 2010: 55-57.
- [11] 董海山, 胡荣祖, 姚朴, 等. 含能材料热谱集 [M]. 北京: 国防工业出版社, 2002: 50-163.
- [12] 张朝晖. ANSYS 热分析工程应用 [M]. 北京: 中国铁道出版社, 2010: 53-78.
- [13] 杨世铭, 陶文栓. 传热学 [M]. 北京: 高等教育出版社, 1998: 4-5.

Numerical Simulation on Internal Temperature Field of Explosive Cylinders during Accelerated Aging Test

SUN Xin-li, HUANG Gui, ZHAO Yu-chun

(The Second Artillery Engineering University, Xi'an 710025, China)

Abstract: Thermal decomposition effects on internal temperature field of explosive cylinders during accelerated aging test was investigated by theoretical analysis, which indicated that main factors are explosive type, test temperature and sample size. Then, internal temperature field of five explosive cylinders, hexogen (RDX), triamino trinitrobenzene (TATB), Tetryl, cyclotetramethylenetetramine (HMX), pentaerythritol tetranitrate (PETN) with different size under different temperature were simulated by finite element analysis. Results show that explosive cylinder type is the key factor of the effect on internal temperature field. Temperature deviations of RDX and PETN cylinder ($\Phi 20$ mm \times 20 mm) at 110 °C are 2.59 °C and 1.19 °C, respectively. And, the test temperature and size of explosive cylinders should be rationally controlled to reduce the temperature deviation for explosive cylinders of RDX, PETN.

Key words: explosive cylinders; thermal decomposition; accelerated aging test; finite element; internal temperature field

CLC number: TJ45

Document code: A

DOI: 10.11943/j.issn.1006-9941.2015.08.012