

文章编号: 1001-1455(2009)05-0468-06

悬浮 RDX 炸药和铝颗粒混合粉尘爆轰的数值模拟*

洪滔, 秦承森, 林文洲

(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

摘要: 采用两相流方法对炸药颗粒直径为 $20.0\ \mu\text{m}$ 时与铝颗粒混合物的爆轰波的发展与传播过程及爆轰波参数进行了数值计算。结果表明, 在炸药粉尘中加入铝颗粒, 可以大大提高爆轰波参数。当铝颗粒直径为 $3.4\ \mu\text{m}$ 时, 尽管铝颗粒的直径较炸药颗粒直径小, 但由于炸药颗粒的点火温度低, 二者的点火时间相差不多。如果铝颗粒的直径为 $7.0\ \mu\text{m}$, 由于铝颗粒的点火滞后于炸药颗粒的点火, 混合颗粒粉尘中可能形成双波阵面的爆轰波。

关键词: 爆炸力学; 两相爆轰; 两相流; RDX 粉尘; 铝粉尘

中图分类号: O381

国标学科代码: 130·3510

文献标志码: A

1 引言

粉尘爆轰在云爆弹研究中具有重要意义。早期的云爆弹使用液体燃料, 液体燃料易挥发、毒性大。与液体燃料相比, 固体燃料具有耐储存、毒性小的优点。常用的固体燃料是高能炸药颗粒与金属颗粒的混合物。在炸药中加入的反应金属粒子通常是镁、铝, 可以增强爆炸效应, 因为金属燃烧可以释放出大量的能量, 可以增加爆炸波的强度和传递到物体或结构上总的冲量。

已往对气体-固体粉尘两相爆轰波的理论研究中通常只含有 1 种可发生化学反应的粒子, 如淀粉尘、煤炭粉尘的爆轰是工业安全中关心的课题^[1-3], 对铝粉尘的爆轰也有较多的研究^[4-7]。S. Eidelman 等^[8]对炸药粉尘的爆轰进行了数值模拟研究。

B. Veyssiere 等^[9]、U. Uphoff 等^[10]、B. A. Khasainov 等^[11]研究了含悬浮铝粉尘的氢或气态碳氢化合物与空气混合物中的爆轰波结构问题。他们认为, 在这种混合物中, 存在 3 种定常爆轰解: 拟气体爆轰、单面爆轰和双面爆轰。单面爆轰速度最大, 爆轰波由气体和固体释放出的能量支持。速度最低的是拟气体爆轰, 粒子未能释放出能量, 爆轰波仅靠气体的能量支持。在一定的条件下, 爆轰波可能出现 2 个间断的双面爆轰结构: 前导爆轰波由气体释放出的能量支持, 第 2 个间断由颗粒释放的能量支持。

本文中对悬浮 RDX 炸药和铝颗粒混合粉尘的爆轰波进行数值模拟。在这样的混合物中, 由于颗粒的物理和化学性质不同, 2 种粒子在爆轰波阵面内的点火延时不同, 化学反应的快慢也不同, 这些特性将对两相爆轰波结构和参数带来重要影响。

2 悬浮 RDX 和铝颗粒混合粉尘的爆轰模型

用两相流模型对悬浮 RDX 和铝颗粒粉尘爆轰进行数值模拟。描述气体和颗粒的运动方程是一维非定常的, 气体和固体满足各自的守恒方程, 考虑气体-固体颗粒间的质量、动量和能量的交换。

模型中假定: 颗粒均匀分布在气体中, 炸药和铝颗粒各自的初始直径相同; 单个颗粒中温度是均匀的; 颗粒所占的体积很小, 颗粒间的相互作用可以忽略; 化学反应释放的能量仅被气体吸收。

* 收稿日期: 2008-03-25; 修回日期: 2008-08-13

基金项目: 国家自然科学基金项目(10672025)

作者简介: 洪滔(1965—), 男, 博士, 研究员, 博士生导师。

以下是描述气体和颗粒的运动方程。气体的质量、动量、能量守恒方程分别为

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1 \rho_1) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_1 \rho_1 u_1) = \sum_{i=1}^2 I_d^{(i)} \tag{1}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1 \rho_1 u_1) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_1 \rho_1 u_1^2) = -\frac{\partial p}{\partial x} - \sum_{i=1}^2 F_d^{(i)} + \sum_{i=1}^2 I_d^{(i)} u_2^{(i)} \tag{2}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}[\alpha_1 \rho_1 (e_1 + 0.5u_1^2)] + \frac{\partial}{\partial x}[\alpha_1 \rho_1 u_1 (e_1 + 0.5u_1^2 + p/\rho_1)] = \\ -Q_d + Q_c - \sum_{i=1}^2 F_d^{(i)} u_2^{(i)} + \sum_{i=1}^2 I_d^{(i)} (e_2^{(i)} + 0.5u_2^{(i)2}) \end{aligned} \tag{3}$$

颗粒的质量、动量、能量守恒方程分别为

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_2^{(i)} \rho_2^{(i)}) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_2^{(i)} \rho_2^{(i)} u_2^{(i)}) = -I_d^{(i)} \tag{4}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_2^{(i)} \rho_2^{(i)} u_2^{(i)}) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_2^{(i)} \rho_2^{(i)} u_2^{(i)2}) = F_d^{(i)} - I_d^{(i)} u_2^{(i)} \tag{5}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}[\alpha_2^{(i)} \rho_2^{(i)} (e_2^{(i)} + 0.5u_2^{(i)2})] + \frac{\partial}{\partial x}[\alpha_2^{(i)} \rho_2^{(i)} u_2^{(i)2} (e_2^{(i)} + 0.5u_2^{(i)2})] = \\ Q_d^{(i)} + F_d^{(i)} u_2^{(i)} - I_d^{(i)} (e_2^{(i)} + 0.5u_2^{(i)2}) \end{aligned} \tag{6}$$

式中：下标 1、2 分别表示气体和颗粒， ρ 为密度， u 为速度， p 为压力， e 为内能， α_1 、 $\alpha_2^{(i)}$ 为气体和颗粒的体积分比，满足 $\alpha_1 + \sum_{i=1}^2 \alpha_2^{(i)} = 1$ ，其中 $i=1$ 为炸药颗粒， $i=2$ 为铝颗粒。单位体积中气体对颗粒的作用力 $F_d^{(i)} = n_i f_d^{(i)}$ ，其中

$$f_d^{(i)} = \frac{1}{2} \pi R_i^2 C_D^{(i)} \rho_1 (u_1 - u_2^{(i)}) |u_1 - u_2^{(i)}| \tag{7}$$

$$C_D^{(i)} = \begin{cases} 24(1 + Re_i^{2/3}/6)/Re_i & Re_i < 1\ 000 \\ 0.44 & Re_i \geq 1\ 000 \end{cases} \tag{8}$$

式中： n_i 是单位体积中炸药颗粒数和铝颗粒数， Re_i 为雷诺数， $Re_i = 2\rho_1 |u_1 - u_2^{(i)}| R_i / \mu_1$ ， μ_1 是气体粘性系数。两相间的对流热传导 $Q_d^{(i)} = 4\pi R_i^2 n_i q_d^{(i)}$ ，其中

$$q_d^{(i)} = \lambda_1 Nu (T_1 - T_2^{(i)}) / (2R_i) \tag{9}$$

式中： λ_1 为气体热传导系数。Nu 是 Nusselt 数，表达式为 $Nu_i = 2 + 0.459 Re_i^{0.55} Pr^{0.33}$ ，Pr 为普朗特数。

静止状态下，炸药颗粒在高温环境下由于热传导的作用，温度升高，导致点火。在两相爆轰波中，炸药颗粒在爆轰波的前导激波作用下，开始运动，并由于对流热传导开始升温。当温度升高到熔点时，气体与颗粒间的热传导导致炸药表层熔化。炸药在高温高速气流中点火并发生反应的研究结果较少，这里参考液滴在高速气流作用下被剥离的现象，认为炸药液化部分在气流作用下被剥离，并在高温气体环境中瞬时分解，释放出能量。炸药的分解反应为： $C_3H_6N_6O_6 = 3H_2O + 3CO + 3N_2$ 。产物中的 CO 与空气中的氧发生以下反应： $2CO + O_2 = 2CO_2$ 。由于炸药剥离引起单位体积内颗粒的质量变化率为

$$I_d^{(1)} = \begin{cases} 0 & T_2^{(1)} < T_m^{(1)} \\ -Q_d^{(1)} / L^{(1)} & T_2^{(1)} \geq T_m^{(1)} \end{cases} \tag{10}$$

式中： $L^{(1)}$ 、 $T_m^{(1)}$ 分别是炸药的潜热和熔点。通常铝颗粒表面被其氧化物 Al_2O_3 包裹。在加热过程中，由于铝的热胀系数比其氧化物高， Al_2O_3 容易产生破裂。对于铝颗粒在高温高速气流中的点火问题，实验和理论研究表明^[12-13]，如果激波强度足够大，当铝颗粒温度达到铝的熔点且铝完全熔化时，激波后的气流将使已有裂纹的氧化铝壳体进一步破碎，使它失去对液态铝的保护作用，铝颗粒将被点火。如果激波强度较弱，或者铝颗粒的氧化物壳体较厚，激波后的气流不能使氧化铝壳体进一步破碎，氧化铝壳体对液态铝仍有保护作用，铝颗粒的温度需达到或接近 Al_2O_3 的熔点才能被点火。本文中如果不加说明，一般采用铝温度达到铝的熔点即点火做为判据。燃烧引起单位体积内铝颗粒的质量变化率为^[12]

$$I_d^{(2)} = -4n_i\rho_2^{(2)}\pi R_2^2 \frac{dR_2}{dt} \quad (11)$$

$$\frac{1}{R_2} \frac{dR_2}{dt} = -\frac{1}{kd_{20}^m/\phi^{0.9}} \quad (12)$$

式中: d_{20} 为铝颗粒初始粒子直径, ϕ 是气体中氧气的摩尔分数, k 和 m 为常数。

气体组分的质量变化方程为

$$\frac{\partial(\rho_1\alpha_1 Y_j)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_1\alpha_1 Y_j u_1)}{\partial x} = \omega_j \quad (13)$$

气体中共有 6 种组分: $j=1$ 为 O_2 , $j=2$ 为 N_2 , $j=3$ 为 CO_2 , $j=4$ 为 H_2O , $j=5$ 为 CO , $j=6$ 为 Al_2O_3 。
 Y_j 是组分浓度, W_j 是克分子量。

$$\omega_1 = -\frac{8}{9}I_d^{(2)} + \omega'_1, \quad \omega_2 = \frac{42}{111}I_d^{(1)}, \quad \omega_4 = \frac{27}{111}I_d^{(1)}, \quad \omega_5 = \frac{42}{111}I_d^{(1)} + \omega'_5, \quad \omega_6 = \frac{17}{9}I_d^{(2)}$$

$\omega'_1, \omega_3, \omega'_5$ 与 $2CO + O_2 = 2CO_2$ 反应相关。气体的状态方程为

$$p = \rho RT \sum_{j=1}^N \frac{Y_j}{W_j} \quad (14)$$

Q_c 是化学反应释放的能量, $Q_c = \sum_{i=1}^2 I_d^{(i)} q^{(i)} + Q'$, 其中 $q^{(i)}$ ($i=1, 2$) 是单位质量的 RDX 和铝释放的能量, Q' 是 CO 与氧反应释放的能量。

用具有二阶精度的 MacCormack 差分格式加上 FCT 技术^[14] 求解两相流体力学微分方程组, 编制了求解两相系统中爆轰波发展的程序, 用于数值模拟点火后两相系统爆轰波的发展过程, 并确定爆轰波的结构和参数。

3 数值模拟结果

数值模拟中, 点火段用高温高速气体模拟, 点火段左边 $x=0$ 处为固壁条件。其他部分是炸药粉尘和空气的两相混合物。在 $0 < x \leq L_{ign}$ 区间, $p = p_{ign}^{(0)}$, $\rho = \rho_{ign}^{(0)}$, $u = u_{ign}^{(0)}$, $T = T_{ign}^{(0)}$, 这里 $T_{ign}^{(0)} = 3\ 200\ K$, $u_{ign}^{(0)} = 2\ 000\ m/s$, $\rho_{ign}^{(0)} = 2.2\ kg/m^3$ 。

计算中使用的参数: $\rho_2^{(1)} = 1\ 800\ kg/m^3$, $\rho_2^{(2)} = 2\ 700\ kg/m^3$, $q_1 = 4.67\ kJ/g$ 。考虑到铝颗粒表面的氧化层, 以及铝颗粒燃烧不能充分地燃烧^[15], q_2 是铝的燃烧热, $q_2 = \eta Q_2$, $Q_2 = 31.5\ kJ/g$, $\eta = 80\%$, $\lambda_1 = 0.1\ J/(m \cdot s \cdot K)$, $L^{(1)} = 0.58\ kJ/g$ 。

3.1 单一颗粒的数值模拟结果

分别对铝颗粒和炸药颗粒粉尘爆轰进行了数值模拟。数值模拟得到了铝颗粒浓度为 $304\ g/m^3$ 的悬浮铝粉尘的爆轰, 爆轰波速度为 $1\ 630\ m/s$ 。A. J. Tulis 等由实验结果得到实验中所用的铝粉尘的爆速为 $1\ 650\ m/s$, 数值模拟结果与实验结果符合。对浓度为 $750\ g/m^3$ 的炸药颗粒进行了数值模拟, 得到的爆轰波速度为 $1\ 800\ m/s$, 与 CJ 理论值 $1\ 870\ m/s$ ^[16] 符合。详细的数值模拟结果见文献[6, 17]。

3.2 混合粉尘爆轰波数值模拟结果

对炸药粉尘浓度为 $318\ g/m^3$ 、铝粉尘浓度为 $152\ g/m^3$ 的混合粉尘的爆轰波的发展与传播过程进行了数值模拟。同时对炸药粉尘浓度为 $318\ g/m^3$ 和铝粉尘浓度为 $152\ g/m^3$ 的单一颗粒的粉尘爆轰波也进行数值模拟, 并与混合粉尘的爆轰波进行比较。炸药颗粒直径为 $20.0\ \mu m$ 和铝颗粒直径为 $3.4\ \mu m$ 。表 1 中给出了数值模拟得到的爆轰波达到稳定状态的爆轰波速度、CJ 点的参数以及颗粒点火距离 l 。颗粒

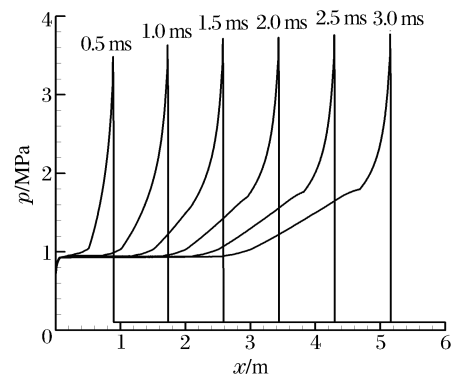


图 1 爆轰波流场中不同时刻的压力分布
Fig. 1 Pressure profile in the flow field at different times

点火距离指爆轰波中粒子开始点火的位置与前导激波的距离。从表中可以看出,与单独的炸药粉尘和铝粉尘相比,混合粉尘的爆轰波爆速,CJ 点处气体的压力、速度、温度均有提高,与单一粉尘相比,炸药和铝颗粒的点火距离减小。

表 1 混合粉尘爆轰波与单一颗粒粉尘爆轰波的结果比较

Table 1 Parameters of mixed dust detonation and single component dust detonation

粉尘	$D/(m/s)$	p_{CJ}/MPa	$\rho_{CJ}/(kg/m^3)$	$u_{CJ}/(m/s)$	T_{CJ}/K	$l^{(1)}/mm$	$l^{(2)}/mm$
炸药+铝粉尘	1 722	2.34	2.89	732	3 323	6	7
铝粉尘	1 583	1.62	2.30	656	3 028	...	9
炸药粉尘	1 529	1.63	2.67	656	2 239	9	...

图 1 是混合粉尘爆轰波相隔 0.5 ms,从 0.5 ms 至 3.0 ms 的压力分布,从图中可看出,在计算范围内,爆轰波趋于稳定。图 2 是爆轰波阵面附近的压力、温度、速度和物质组分分布。由于采用了不同的燃烧模型,2 种粒子在激波阵面后的放能过程是不同的。对炸药颗粒采用了类似液滴剥离的模型,放能过程短。对铝颗粒采用对流燃烧模型,放能过程长。从图中可看出,铝颗粒的放能过程远长于炸药的放能过程。铝颗粒的温度和速度与气体的温度和速度趋于接近。

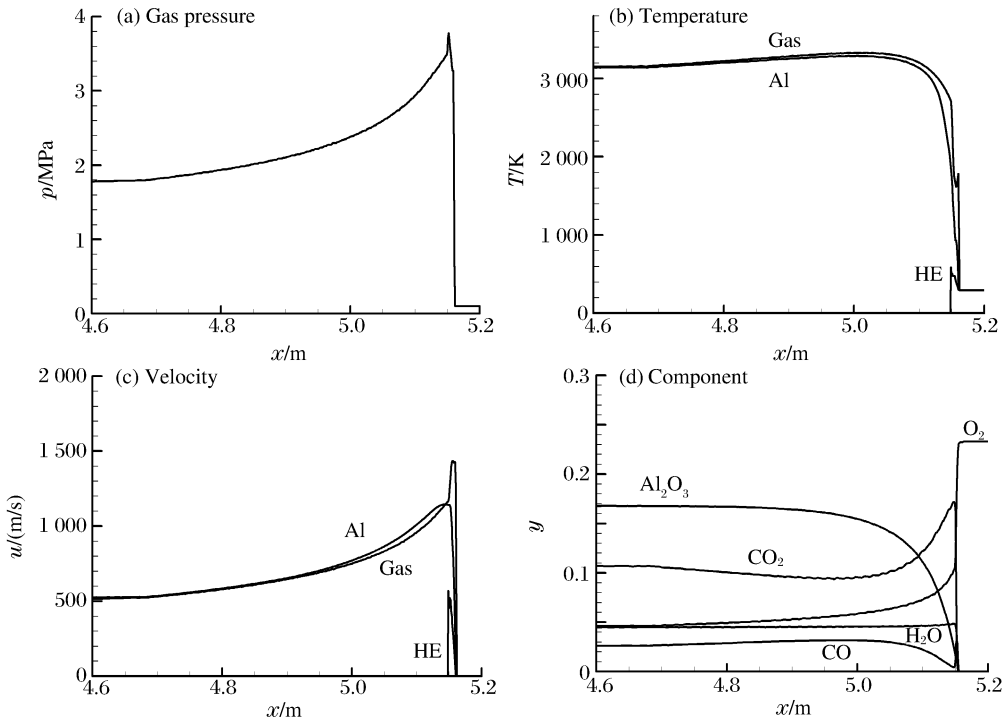


图 2 爆轰波阵面附近的压力、温度、速度和物质组分

Fig. 2 Pressure, temperature, velocity and component near shock front of detonation

对炸药粉尘浓度为 106 g/m^3 和铝颗粒粉尘浓度为 51 g/m^3 的混合粉尘中的爆轰波进行了数值模拟。并对炸药粉尘浓度为 106 g/m^3 、铝颗粒粉尘浓度为 51 g/m^3 的单一颗粒粉尘爆轰进行了数值模拟,图 3 是 3 种条件下爆轰波传播过程中波阵面压力的极值随传播距离的变化曲线。从图 3 可以看出,单一铝颗粒粉尘中未能形成爆轰波,炸药中在 6 m 的距离内形成具有振动趋势的爆轰波^[17],而混合粉尘可以形成稳定的爆轰波,压力极值远大于炸药粉尘中的爆轰波。

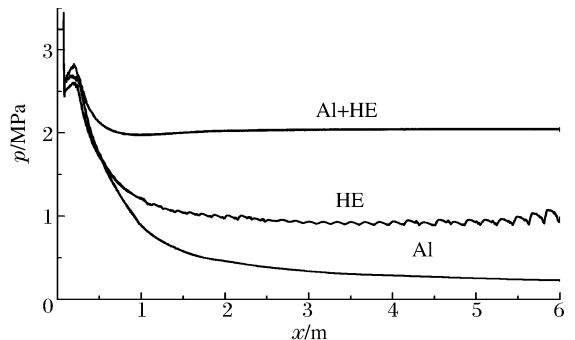


图 3 不同位置处的爆轰波阵面压力极值

Fig. 3 Peak pressure of detonation at different position

3.3 双阵面爆轰波的数值模拟结果

数值模拟结果表明,在一定的条件下,炸药和铝颗粒混合的悬浮粉尘可能形成双阵面的爆轰波。如果铝颗粒的氧化层较厚,爆轰波的前导激波后的气流不能使其破裂,需要达到氧化铝的熔点 2 300 K 时才能使颗粒中铝与氧接触,发生反应,这样铝颗粒点火时间变长。对炸药粉尘浓度为 565 g/m^3 和铝颗粒粉尘浓度 145 g/m^3 的混合粉尘的爆轰波进行了数值模拟。炸药和铝颗粒的直径分别为 $20.0 \mu\text{m}$ 和 $7.0 \mu\text{m}$ 。图 4 是间隔 0.5 ms 从 0.5 ms 到 3.5 ms 流场的压力分布,可以看到压力分布图中出现了 2 个间断面。图 5 是气体与铝颗粒在爆轰波阵面附近的速度分布。在速度图中也存在 2 个间断面。产生双波阵面的爆轰波是由 2 种放能粒子的点火和放能过程的差异造成的。炸药颗粒点火快,放能过程短,产生第 1 个间断面。炸药能量释放完毕后,铝颗粒还需要一定的时间才达到点火温度,然后释放出能量,从而产生第 2 个间断面。

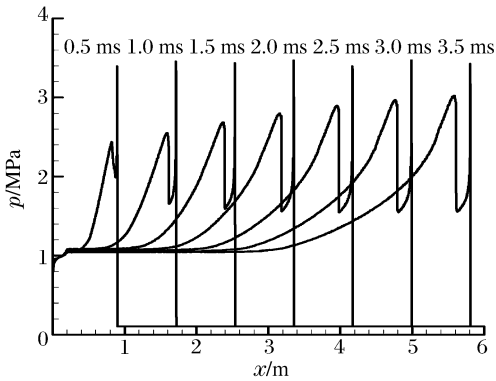


图 4 双波阵面情况下不同时刻的压力分布

Fig. 4 Double-front detonation pressure distribution at different times

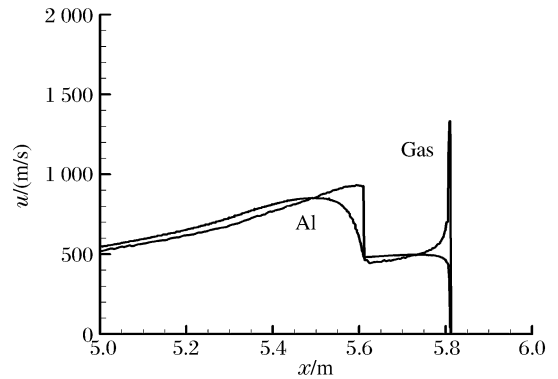


图 5 双波阵面的爆轰波阵面处的速度分布

Fig. 5 Velocity profile near shock front of double-front detonation

4 结 论

用两相流模型对含有炸药和铝颗粒的悬浮粉尘进行了数值模拟,得到混合粉尘中爆轰波发展与传播过程,并确定了爆轰波的参数。对于炸药粉尘,加入铝颗粒可以提高爆轰波速度、压力和温度。在一定的条件下,混合的炸药和铝颗粒悬浮粉尘中可能产生双波阵面的爆轰波,即在爆轰波中存在 2 个间断面。这是由于 2 种放能粒子在前导激波后的点火时间与放能的速率存在差异造成的。

参考文献:

- [1] Bielert U, Sichel M. Numerical simulation of dust explosion in pneumatic conveyors[J]. Shock Waves, 1999,9(2): 125-139.
- [2] Mintz K J. Upper explosive limit of dusts: Experimental evidence for its existence under certain circumstances[J]. Combustion and Flame, 1993,94(1/2):125-130.
- [3] Tsuboi N, Hayashi A K, Matsumoto Y. Three-dimensional parallel simulation of cornstarch-oxygen two-phase detonation[J]. Shock Waves, 2000,10(4):277-285.
- [4] Ogle R A, Beddow J K, Chen L D. An investigation of aluminum dust explosion[J]. Combustion Science and Technology, 1988,61(1/2/3):75-99.
- [5] 刘晓利,李鸿志,郭建国,等. 铝粉-空气混合物燃烧转爆轰(DDT)过程的实验研究[J]. 爆炸与冲击,1995,15(3): 217-228.
LIU Xiao-li, LI Hong-zhi, GUO Jian-guo, et al. An experimental investigation of deflagration to detonation transition (DDT) in aluminum dust-air mixture[J]. Explosion and Shock Waves, 1995,15(3):217-228.
- [6] 洪滔,秦承森. 爆轰波管中铝粉尘爆轰的数值模拟[J]. 爆炸与冲击,2004,24(3):193-200.
HONG Tao, QIN Cheng-sen. Numerical simulation of detonation of aluminum powder in explosive tubes[J]. Explosion and Shock Waves, 2004,24(3):193-200.

- [7] 洪滔,秦承森. 悬浮铝粉尘爆轰波参数[J]. 含能材料, 2004, 12(3): 129-133.
HONG Tao, QIN Cheng-sen. Parameters of detonation in suspended aluminum dust[J]. Chinese Journal of Energetic Materials, 2004, 12(3): 129-133.
- [8] Eidelman S, Yang X. Detonation wave propagation in combustible particle/air mixture with variable particle density distributions[J]. Combustion Science and Technology, 1993, 89(1/2/3/4): 201-218.
- [9] Veyssiere B, Khasainov B A. Structure and multiplicity of detonation regimes in heterogeneous hybrid mixtures[J]. Shock Waves, 1995, 4(4): 171-186.
- [10] Uphoff U, Hanel D, Roth P. Numerical modeling of detonation structure in two-phase flows[J]. Shock Waves, 1996, 6(1): 17-20.
- [11] Khasainov B A, Veyssiere B. Initiation of detonation regimes in hybrid two-phase mixtures[J]. Shock Waves, 1996, 6(1): 9-15.
- [12] Price E W. Combustion of metallized propellants[C]// Kuo K K, Summerfield M. Progress in Astronautics and Aeronautics: Fundamentals of Solid-propellant Combustion. New York: AIAA, 1984, 90: 479-513.
- [13] Tao H. Shock wave ignition of aluminum particles[C]// Sochet I. Proceedings of the 4th International Symposium on Hazards, Prevention, and Mitigation of Industrial Explosions, 2002: 105-112.
- [14] Book D L, Boris, J P, Hain K. Flux-corrected transport II: Generalization of the method[J]. Journal of Computational Physics, 1975, 18: 248-283.
- [15] 裴明敬,毛根望,胡华权,等. 含铝温压燃料性能研究[J]. 含能材料, 2007, 15(5): 441-446.
PEI Ming-jing, MAO Gen-wang, HU Hua-quan, et al. Characteristic of the thermobaric explosive contained aluminum powders[J]. Chinese Journal of Energetic Materials, 2007, 15(5): 441-446.
- [16] Tulis A J, Selman J R. Detonation tube studies of aluminum particles dispersed in air[C]// Proceedings of the 19th International Symposium on Combustion, The Combustion Institute, 1982: 655-663.
- [17] 洪滔,林文洲. 激波管中悬浮炸药粉尘爆轰的数值模拟[J]. 高压物理学报, 已接收.
HONG Tao, LIN Wen-zhou. Numerical simulation of suspended RDX dust detonation in a shock tube[J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, accepted.

Numerical simulation of detonation in suspended mixed RDX and aluminum dust

HONG Tao*, QIN Cheng-sen, LIN Wen-zhou

(Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China)

Abstract: Detonation in suspended mixed RDX and aluminum particles in air was numerically simulated with the two-phase flow model. Formation and propagation of detonation was examined and the parameters of detonation were obtained. In calculation the diameter of RDX particle is $20.0\ \mu\text{m}$. Numerical results show that aluminum particles added in high explosive dust can enhance the parameters of detonation waves. As the diameter of aluminum particles is $3.4\ \mu\text{m}$, the ignition distances of two kinds particles are almost the same. As the diameter of aluminum particle is $7.0\ \mu\text{m}$, the ignition distance of aluminum particles is much longer than that of high explosive particles, and a double front detonation can occur in the suspended mixed RDX and aluminum dust.

Key words: mechanics of explosion; two-phase detonation; two-phase flow model; RDX dust; aluminum dust

* Corresponding author: HONG Tao

E-mail address: hongtao@iapcm.ac.cn

(责任编辑 张凌云)