

RDX 激光点火特性数值分析

田占东¹, 卢芳云¹, 张震宇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: 用数值模拟分析计算了黑索今(RDX)的激光点火过程。结果表明,RDX 经加热、熔化、分解、蒸发,反应物进入气相后,随反应物的积累,温度和气相反应速率的增加,气相被点着。讨论了环境压力和激光功率密度对点火延迟时间和临界点火距离的影响,计算所得的点火延迟时间与文献报道的研究结果一致。

关键词: 物理化学; 激光点火; 黑索今(RDX); 点火延迟时间; 临界点火距离

中图分类号: TJ55; O64

文献标识码: A

DOI: 10.3969/j.issn.1006-9941.2012.01.013

1 引言

含能材料在激光等外界能量作用下的点火涉及一系列复杂的物理化学过程,仅仅靠实验研究难以对其有一个全面的理解,因此,建立各种数值模型分析点火过程已成为主要研究方法之一。Kumar 等^[1]建立了均质推进剂辐射点火模型,指出气相反应起着重要作用。Ritchie 等^[2]通过建立的一维气相模型对 XM39 进行点火理论研究,发现分解反应主要由温度决定,与压力关系不大。Liau 等^[3]将描述含能材料燃烧过程的详细化学反应动力学引入到激光点火过程中,建立了 RDX 气相点火的详细模型,点火时间与实验结果符合很好。孙同举等^[4]用一阶向前差分算法模拟了药剂的点火特性。胡艳等^[5]通过一维有限差分方法分析了含能材料的点火特性,得到了激光参数和药剂性能对点火过程的影响。

Liau 等人的工作代表了激光点火模型的发展趋势^[6],但是缺少气相动量守恒使气相化学反应导致的局部压力变化无法反映出来。本文在 Liau 等人的模型基础上,引入气相动量守恒,同时采用简化的气相化学反应对 RDX 的激光点火过程进行了数值计算,分析

了环境压力、激光功率密度对 RDX 激光点火过程的影响。由于可利用的实验数据较少,文中仅对点火延迟时间与文献结果进行了比较。

2 RDX 激光点火过程分析

激光对含能材料的作用可分为热作用、冲击作用、电离作用和光化学作用等,激光条件不同时,含能材料的点火机理也不同,本文研究的激光功率密度范围为 $10^2 \sim 10^3 \text{ W} \cdot \text{cm}^{-2}$,因此只考虑激光的热作用。

初始处于常温常态下的固相 RDX 受到激光辐照后,材料吸收激光的能量,导致温度不断升高。由于激光能量密度较高,所以在固相 RDX 中存在较大的温度梯度,只有在辐照面附近一个较窄的区域内温度升高较快。例如激光功率密度为 $400 \text{ W} \cdot \text{cm}^{-2}$,在 1.6 ms 时辐照表面的温度达到 477.7 K(接近熔化温度),而 RDX 内部发生明显温升的厚度不超过 0.008 cm,如图 1 所示,图中 X 表示空间尺寸, $X=0.0$ 为辐照面, X 为负值表示凝聚相 RDX。

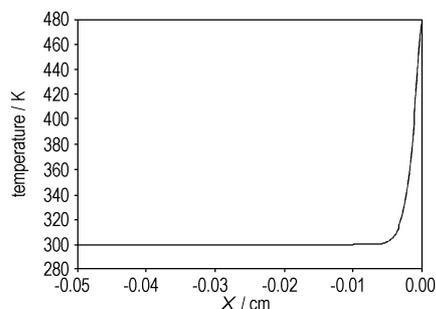


图 1 固相 RDX 中的温度分布

Fig. 1 Temperature distribution in solid RDX

收稿日期: 2011-03-07; 修回日期: 2011-07-10

基金项目: 国家自然科学基金-中国工程物理研究院联合基金项目(11076029)

作者简介: 田占东(1978-),男,讲师,博士研究生。从事爆炸过程数值模拟研究。e-mail: sweettzd@163.com

通讯联系人: 赵剑衡(1969-),男,博士,研究员。从事激光与物质相互作用研究。e-mail: jianh_zhao@sina.com

当固相 RDX 表面温度达到熔化温度后, 继续吸收激光能量, 就会发生熔化, 形成液相区域, 固相和液相统称为凝聚相。凝聚相 RDX 逐渐发生分解和蒸发, 分解产物和蒸发产物进入气相, 使得 RDX 的激光点火过程中包含固相、液相和气相区域三部分。

凝聚相的物理过程包括热传导、分解、蒸发以及对激光能量的吸收。

气相区域初始为环境气体, 随着液相区域的分解和蒸发, 气相区域逐渐被 RDX 蒸汽和分解产物所充斥。随着反应物的累积和温度的不断升高, 气相区域中的化学反应逐渐加剧, 导致气相发生点火。点火的位置通常距凝聚相表面有一定距离, 点火之后火焰逐渐靠近凝聚相表面, 最终达到一种稳定的状态。

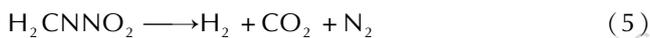
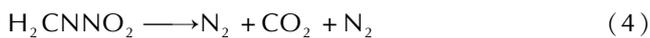
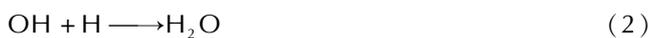
气相中的物理化学过程比较复杂, 除了热传导, 组分对激光能量的吸收以外, 还包括对流、扩散以及复杂的化学反应。

根据上面的描述可建立数学模型。凝聚相的控制方程是能量守恒方程和组分连续性方程, 气相的控制方程是质量守恒、动量守恒、能量守恒和组分连续性方程, 结合相应的边界条件和气相状态方程(文中采用理想气体状态方程), 构成封闭方程组^[6]。

凝聚相中的分解反应方程为^[7]



气相中的化学反应采用描述 RDX 燃烧过程的简化的反应机制^[7]



反应(1)~(7)的反应速率常数与温度相关, 遵循 Arrhenius 定律。化学反应的贡献在控制方程中以组分生成速率的形式表现出来。

固相和液相 RDX 物性参数包括密度、比热容、热传导系数, 取自文献[9]。气相的物性参数包括定压比热容、粘性系数、热传导系数、扩散系数以及组分的分子量和焓, 考虑了温度对组物性参数的影响, 参数值主要取自文献[10]。

计算中需要采用一定的点火判据, 本文把气相中的最高温度接近绝热火焰温度的时间作为点火延迟时间^[6]。

3 结果分析与讨论

基于上述模型, 对激光功率密度 $400 \text{ W} \cdot \text{cm}^{-2}$ 、环境压力 0.2 MPa 、初始温度 300 K 时 RDX 的激光点火过程进行了计算, 结果如图 2~图 5 所示。

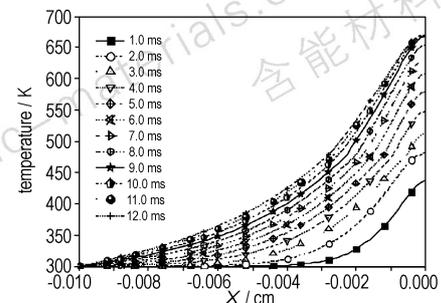


图 2 不同时刻凝聚相中的温度分布

Fig. 2 Temperature distribution in condensed region at different time

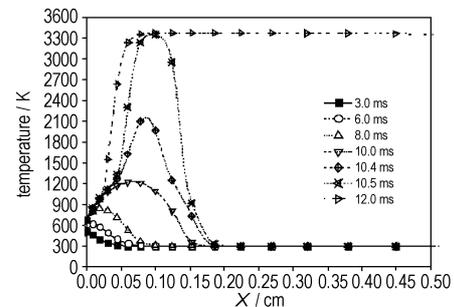


图 3 不同时刻气相中的温度分布

Fig. 3 Temperature distribution in gas region at different time

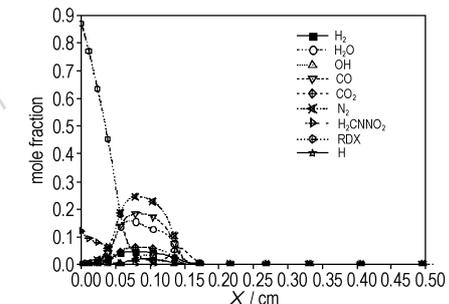


图 4 10 ms 时气相中的组分摩尔分数分布

Fig. 4 Mole fraction distribution in gas phase at 10 ms

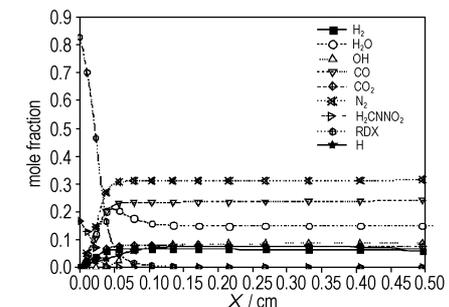


图 5 12 ms 时气相中的组分摩尔分数分布

Fig. 5 Mole fraction distribution in gas phase at 12 ms

在激光辐照下,整个区域(凝聚相和气相)的温度开始升高。在凝聚相(图2)中,凝聚相-气相界面处由于吸收能量最多温度上升最快,在2 ms时已接近熔化温度478 K。从9 ms开始,界面温度达到稳定,这是因为尽管界面不断吸收激光能量,但是蒸发过程需要消耗一部分能量,同时还要与气相进行能量交换。气相(图3)在2 ms以前温度最大值在界面处,这一阶段主要是由于热传导使温度升高。凝聚相开始熔化、蒸发以后,RDX蒸汽和凝聚相分解产物 H_2CNNO_2 逐渐进入气相并开始发生化学反应,同时RDX蒸汽可以吸收一定的激光能量,使气相温度进一步升高,最大值点逐渐远离界面。随着反应物的累积和温度的不断升高,气相中的化学反应逐渐加剧,导致温度迅速升高。如图3所示,在10.5 ms时,在距界面0.095 cm处,温度达到3300 K,此时气相发生点火。

从组分的摩尔分数分布图(图4和图5)可以看出,RDX主要以蒸发的形式进入气相,在凝聚相中仅有15%左右分解为 H_2CNNO_2 。在10 ms时,气相中局部发生了化学反应,到12 ms时,整个气相都已经发生了激烈的化学反应,反应产物以 N_2 、CO和 H_2O 为主。

环境压力0.1 MPa、初始温度300 K时激光功率密度对点火延迟时间和临界点火距离(点火位置与凝聚相-气相界面的距离)的影响如图6和图7所示。

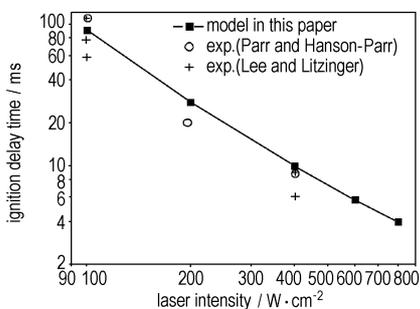


图6 点火延迟时间和激光功率密度的关系

Fig. 6 Relationship between ignition delay time and laser power intensity

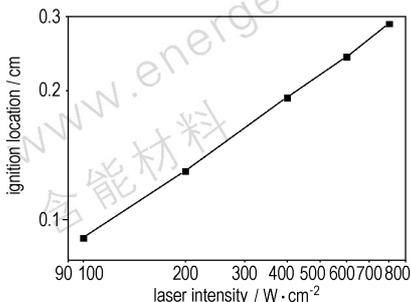


图7 临界点火距离和激光功率密度的关系

Fig. 7 Relationship between critical ignition distance and laser power density

决定点火延迟时间的因素主要有两个:凝聚相的温升和气相的反应。这两个因素之间又存在一定的关联,凝聚相温升越高,进入气相的反应物越多,使气相的反应越快,导致点火延迟时间缩短。因此,随着激光功率密度的增加,凝聚相吸收能量速率增加,使得温升加快,进一步导致气相反应加快,点火延迟时间迅速缩短。由图6可见,激光功率密度由 $100 W \cdot cm^{-2}$ 增加至 $800 W \cdot cm^{-2}$,点火延迟时间由90 ms降低至4 ms。图6还给出了Parr和Hanson-Parr^[11]以及Lee和Litzinger^[9]等人的实验结果,在激光功率密度较高时,计算结果略高于实验结果,考虑到实验结果的分散性和点火判据的不同,可以认为本文的计算结果与实验结果基本一致。

由图7可见,激光功率密度由 $100 W \cdot cm^{-2}$ 增加至 $800 W \cdot cm^{-2}$,临界点火距离由0.09069 cm增加至0.2882 cm。这主要是由于在高激光功率密度情况下,凝聚相吸热速率增加,凝聚相-气相界面处产生的气体流动速度增加,使临界点火距离增加。

激光功率密度 $400 W \cdot cm^{-2}$ 、初始温度300 K时环境压力对点火延迟时间和临界点火距离的影响如图8所示。由图8可见,环境压力由0.1 MPa增加到2 MPa,点火延迟时间由10 ms增加至12.4 ms,临界点火距离由0.1929 cm减小至0.01260 cm。分析认为:一方面,压力的增加使液相RDX的蒸发减弱,导致凝聚相中的反应物需要更多时间的累积,同时,压力增加使得气体密度增加,以至于温度上升的趋势减弱,使得点火延迟时间增加;另一方面,压力的增加使气相速度降低,气相反应物更加集中,从而使气相反应速率提高,所以火焰面向凝聚相表面移动,有利于反应的进行。因此,点火时间对压力不敏感,临界点火距离对压力很敏感。

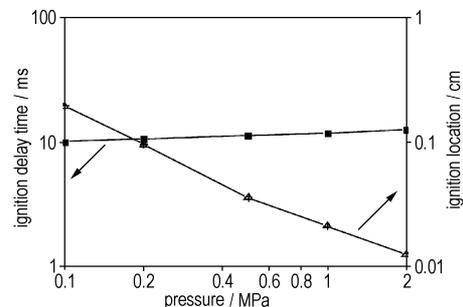


图8 点火延迟时间和临界点火距离与和压力的关系

Fig. 8 A plot of ignition delay time and critical ignition distance vs pressure

4 结 论

RDX 在激光作用下经历惰性加热、熔化、分解与蒸发、气相反应直至点火几个阶段, 本文考虑了凝聚相和气相中较为详细的物理化学过程, 用 RDX 燃烧反应的简化化学反应模型描述 RDX 点火过程中的化学反应, 利用数值计算对该过程进行了分析。

在激光作用下, 凝聚相中的温度不断升高, 且存在明显的温度梯度, 仅在靠近表面的一个薄层内存在明显的温升。经过一段时间的温度和组分累积期后, 气相中距离表面一定距离处的组分浓度发生剧烈变化, 同时温度迅速升高至 3000 K 以上, 表明在该位置处气相发生点火。

讨论了激光功率密度和环境压力对 RDX 激光点火特性的影响。结果表明, 环境压力 0.1 MPa 时激光功率密度由 $100 \text{ W} \cdot \text{cm}^{-2}$ 增加至 $800 \text{ W} \cdot \text{cm}^{-2}$, 点火延迟时间由 90 ms 降低至 4 ms, 临界点火距离由 0.09069 cm 增加至 0.2882 cm; 激光功率密度为 $400 \text{ W} \cdot \text{cm}^{-2}$ 时, 环境压力由 0.1 MPa 增加至 2 MPa, 点火延迟时间仅仅由 10 ms 增加至 12.4 ms, 临界点火距离由 0.1929 cm 减小至 0.01260 cm。因此, 激光功率密度是影响点火延迟时间的主要因素, 激光功率密度和环境压力同时影响着临界点火距离。

参考文献:

- [1] Kumar R K, Hermance C E. Role of gas phase reactions during radiant ignition of solid propellants[J]. *Combustions Science and Technology*, 1976, 14(46): 169–175.

- [2] Ritehie S J, Thynell S T, Kuo K K. Modeling and experiments of laser-induced ignition of nitramine propellants. AIAA95-2862 [R], 1995.
- [3] Liao Y C, Kim E S, Yang V. A comprehensive analysis of laser-induced ignition of RDX monopropellant[J]. *Combust Flame*, 2001, 126: 1680–1698.
- [4] 孙同举, 沈瑞琪, 戴实之. 激光点火过程数值模拟[J]. *应用激光*, 1996(3): 110–112.
SUN Tong-ju, SHEN Rui-qi, DAI Shi-zhi. Numerical simulation about the process of laser ignition [J]. *Applied Laser*, 1996, (3): 110–112.
- [5] 胡艳, 叶迎华, 沈瑞琪. 激光点火过程的一维有限差分模拟[J]. *激光技术*, 2001, 25(5): 331–334.
HU Yan, YE Ying-hua, SHEN Rui-qi. One dimension finite difference simulation of laser ignition[J]. *Laser technology*, 2001, 25(5): 331–334.
- [6] Meredith K V. Ignition modeling of HMX in laser-induced and fast-cookoff environments[D]. Ph. D. Dissertation, Provo UT: Brigham Young University, 2003.
- [7] Davidson J E. Combustion modeling of RDX, HMX and GAP with detailed kinetics[D]. Brigham Young University, 1996: 81–91.
- [8] 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.
TIAN Zhan-dong, ZHANG Zhen-yu, LU Fang-yun, 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.
- [9] Beckstead M W, Puduppakkam K, Thakre P. Modeling of combustion and ignition of solid-propellant ingredients[J]. *Progress in Energy and Combustion Science*, 2007, 33(6): 497–551.
- [10] Kee R J, Rupley F M, Miller J A. The chemkin thermodynamic data base [R]. Sandia National Laboratories Report SAND87-8215B, 1990.
- [11] Parr T P, Hanson-Parr D M. RDX ignition flame structure[C]// 27th Symposium (International) on Combustion. Pittsburgh: The Combustion Institute, 1998: 2301–2308.

Numerical Analysis of Laser Ignition Characteristics of RDX

TIAN Zhan-dong¹, LU Fang-yun¹, ZHANG Zhen-yu¹, ZHAO Jian-heng², TAN Fu-li²

(1. Institute of Technical Physics, College of Science, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China; 2. Institute of Fluid Physics, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China)

Abstract: The process of laser ignition of RDX was calculated using numerical simulation. The results show that the gas phase is ignited with the accumulation of reactant and the increase of temperature and reaction rate in the gas phase after undergoing a series of processes of heating, melting, decomposing, vaporizing and flowing into gas-phase for RDX. The effect of environment pressure and laser power density on ignition delay time and critical ignition distance was discussed. The calculated ignition delay time is consistent with the results reported in previous literatures.

Key words: physical chemistry; laser ignition; RDX; ignition delay time; critical ignition distance

CLC number: TJ55; O64

Document code: A

DOI: 10.3969/j.issn.1006-9941.2012.01.013