文章编号:1006-9941(2019)05-0371-06

# 模块装药快速烤燃特性的数值预测

刘 静,余永刚

(南京理工大学能源与动力工程学院,江苏南京 210094)

摘 要: 为了研究模块装药的热安全性,基于可燃药盒材料和单基药的化学反应机理,建立了模块装药的二维非稳态烤燃模型。 在外界升温速率为1~10 K·min<sup>-1</sup>下,分析了模块装药的快速烤燃响应特性。结果表明,模块装药最初的着火位置均是在靠近可燃 药盒内壁面左右两侧的单基药中,点火区为两个环形响应区。随着升温速率的提高,环形响应区将从单基药内向药盒内壁面方向移 动,但外界升温速率的变化对模块装药点火位置的影响较小。在1,6,10 K·min<sup>-1</sup>升温速率下,单基药发生烤燃响应的点火温度分 别为458.2,453.9 K和455.7 K,与文献中实验所测得的点火温度(443~463 K)基本吻合。外界升温速率的变化对模块装药发生烤 燃响应的点火温度影响较小,但随着升温速率的提高,模块装药发生烤燃响应的点火时间呈指数型衰减。

关键词·模块装药:快速烤燃:数值模拟

中图分类号: TI55

文献标志码・A

DOI: 10.11943/CIEM2018178

#### 1 引言

模块装药对武器装备综合性能的提高,有极其重 要的作用。模块装药技术实现了发射装药刚性化和模 块化,满足了自动装填和快速反应能力等技术需求。 但是模块装药在制造、存贮、运输及实战环境中可能会 遭到热、火焰等意外热激励作用,存在引燃的危险,导 致模块装药燃烧或者爆炸,将造成严重的生命财产损 失。随着计算机技术的发展,通过含能材料烤燃过程 的数值计算,能够精确了解含能材料发生烤燃响应的 位置、温度和时间,从而为含能材料的热安全性分析提 供理论支撑。目前关于烤燃特性的研究主要集中在炸 药和推进剂<sup>[1-3]</sup>。Hameed等<sup>[4]</sup>对填充双基发射药的 7.62 mm 口径枪弹进行烤燃实验,结果表明,双基发 射药的烤燃响应温度为424.5~426.5K,烤燃响应时 间低于 300 s。Ho S Y 等<sup>[5]</sup>利用超小型烤燃弹(SSCB) 装置,对比研究了快速(1.2 K·s<sup>-1</sup>)和慢速(0.1 K·s<sup>-1</sup>)

收稿日期: 2018-07-03: 修回日期: 2018-08-16 网络出版日期: 2018-10-31 基金项目,国家自然科学基金资助(51176076) 作者简介:刘静(1994-),女,硕士研究生,主要从事模块装药热安 全性研究。e-mail:lj\_941020@163.com 通信联系人: 余永刚(1963-), 男, 教授, 博士生导师, 主要从事含 能材料燃烧理论与技术研究。e-mail:yygnjust801@163.com 引用本文:刘静,余永刚. 模块装药快速烤燃特性的数值预测[]]. 含能材料,2019,27(5):371-376.

烤燃条件下高氯酸铵/端羟基聚丁二烯(AP/HTPB)推 进剂的反应剧烈程度。李文凤等<sup>[6]</sup>研究了AP/HTPB 复合推进剂的快速烤燃特性。杨丽侠等[7]研究了在快 速和慢速烤燃条件下,典型发射药的易损性响应特性 和影响因素。20世纪末,胡晓棉等[8]设计了有关直列 式火工品安全性烤燃试验装置,通过实验测量计算出 了直列式火工品的安全装药量。陈晨等<sup>[9]</sup>自行设计了 烤燃实验装置,获得了双芳-3发射药的自燃延滞期、 点火温度和动力学参数。

现有模块装药的研究主要侧重于总体结构设计和 综合弹道性能等,对热安全性关注不够。本研究基于 单基药和可燃药盒材料的化学反应机理,建立模块装 药二维非稳态烤燃模型,分析其在1~10 K·min<sup>-1</sup>升温 速率下的快速烤燃响应特征。

## 2 物理模型

模块装药一般由可燃药盒、中心传火管、火药、空气 腔、点火药袋和密封纸板等构成,根据模块装药的结构 特点,建立简化的二维烤燃模型,并做出如下基本假设:

(1) 加榴炮模块药盒内一般装填单基药(含氮量 12%的硝化纤维素),假设单基药和可燃药盒材料的 自热反应速率遵循 Arrhenius 定律<sup>[10]</sup>。

(2) 考虑到模块装药内空气腔较小,忽略空气的

<sup>11</sup>U ling, YU Yong-gang, Numerical Prediction of Fast Cook-off Characteristics for Modular Charges[1], Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao), 2019,27(5):371-376

对流效应。

(3)不考虑中心传火管壁面上点火药袋对烤燃过 程的影响。

(4)可燃药盒材料假设为均质、各向同性的材料, 并且在着火前为固态,不考虑相变影响。

(5)将可燃药盒内的单基药和空气看作是多孔介 质,其中单基药药粒为圆柱体,且为各向同性材料,随机 堆放在药盒中,并在着火前为固态,不考虑相变影响。

(6) 各材料的物性参数及化学动力学参数取为常数。

## 3 数学模型及计算方法

### 3.1 基本方程

基于Arrhenius定律,模块装药的分解反应机理<sup>[11]</sup>:

硝化棉 
$$\longrightarrow$$
 最终产物 (2)

其中,反应速率 $R_1$ 和 $R_2$ 为如下形式:

$$R_1 = A_1 \exp\left(-\frac{E_1}{RT}\right)\rho_1 \tag{3}$$

$$R_2 = A_2 \exp\left(-\frac{E_2}{RT}\right)\rho_2 \tag{4}$$

式中, $A_1$ 和 $A_2$ 为指前因子, $s^{-1}$ ; $E_1$ 和 $E_2$ 为活化能, kJ·mol<sup>-1</sup>; $\rho_1$ 和 $\rho_2$ 分别为可燃药盒材料和单基药的密度,kg·m<sup>-3</sup>;R为气体摩尔常数,8.314 J·mol<sup>-1</sup>·K<sup>-1</sup>。

固相能量方程[12]

$$\rho_1 c_1 \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_1 \left( \frac{\partial T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right) + R_1 Q_1$$
(5)

$$\rho_{t}c_{t}\frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_{t}\left(\frac{\partial T}{\partial r^{2}} + \frac{1}{r}\frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^{2}T}{\partial x^{2}}\right) + R_{2}Q_{2}$$
(6)

其中

$$c_{t} = \varepsilon \rho_{g} c_{g} + (1 - \varepsilon) \rho_{2} c_{2}$$

$$(7)$$

$$\lambda_{t} = \varepsilon \lambda_{g} + (1 - \varepsilon) \lambda_{2}$$
(8)

$$\rho_{t} = \varepsilon \rho_{g} + (1 - \varepsilon) \rho_{2} \tag{9}$$

式中, $\rho_1$ 、 $\rho_2$ 、 $\rho_1$ 和 $\rho_g$ 分别为可燃药盒材料、单基药、多孔 介质和空气的密度,kg·m<sup>-3</sup>; $c_1$ 、 $c_2$ 、 $c_1$ 和 $c_g$ 分别为可燃药 盒材料、单基药、多孔介质和空气的比热容,J·kg<sup>-1</sup>·K<sup>-1</sup>;  $\lambda_1$ 、 $\lambda_2$ 、 $\lambda_1$ 和 $\lambda_g$ 分别为可燃药盒材料、单基药、多孔介质 和空气的导热系数,W·m<sup>-1</sup>·K<sup>-1</sup>;Q<sub>1</sub>和Q<sub>2</sub>分别为可燃 药盒材料和单基药的反应热,kJ·kg<sup>-1</sup>; $\varepsilon$ 为多孔介质的 孔隙率。

## 3.2 边界条件和初始条件

可燃药盒材料外壁面加热条件:

$$T_{\rm s} = T_0 + \alpha t \tag{10}$$

式中, $T_0$ 为环境温度,293 K。 $\alpha$ 为升温速率,K·min<sup>-1</sup>;  $T_s$ 为可燃药盒材料外壁温度,K;t为时间,s。

各相邻区域固相交界面满足温度连续和热流连续 条件:

$$T_{r=r_{a}}^{a} = T_{r=r_{b}}^{b}$$
 (11)

$$T_{x=x_a}^{a} = T_{x=x_b}^{b} \tag{12}$$

$$\lambda_{a} \frac{\partial T^{a}}{\partial r} \bigg|_{r=r_{a}} = \lambda_{b} \frac{\partial T^{b}}{\partial r} \bigg|_{r=r_{b}}$$
(13)

式中,下标 a 和 b 代表任意交界面处相邻的两种固相 材料。

## 3.3 计算方法及网格划分

针对模块装药建立二维烤燃模型。某模块装药的 模型如图1所示。可燃药盒外径为130mm,高为 100mm,盒壁厚为2.5mm。中心传火管内径为30mm, 管壁厚为2.5mm。硬纸板厚度为1mm。在忽略点 火药袋的影响时,模块装药模型为二维轴对称结构,根 据基本假设,计算时采用1/2模型进行计算。划分网 格时均采用四边形网格,选取3种网格数进行网格无 关性验证,其验证结果如表1所示,最终选取73416个 网格单元进行后续模拟计算。本次模拟计算中利用用 户自定义函数(UDF)的 DEFINE\_SOURCE 宏引入公 式的能量方程源项,利用 DEFINE\_PROFILE 宏引入外 界加热边界条件,密度和动量采用一阶迎风格式,能量 采用二阶迎风格式。为研究模块装药内部烤燃特性, 选取点A、B、C、D、E为研究特征点,点A为可燃药盒内



图1 模块装药结构示意图(单位:mm)

Fig. 1 Schematic diagram of structure for modular charge (unit:mm)

#### 表1 10 K·min<sup>-1</sup>下的网格数和着火温度的关系

**Table 1** The relationship between the number of mesh and the ignition temperature at a heating rate of  $10 \text{ K} \cdot \text{min}^{-1}$ 

number of mesh	ignition temperature / K
51340.0	452.6
73416.0	455.7
100598.0	455.7

壁中点,坐标(x,r)为A(50.0,62.5)mm;点B为单基 药中点,坐标为B(50.0,40.0)mm;点C为中心传火管 外壁中点,坐标为C(50.0,17.5)mm;点D为中心传火 管内壁中点,坐标为D(50.0,15.0)mm;点E为烤燃响 应区域,它的坐标由后续计算结果确定。根据假设建 立的计算模型对模块装药烤燃过程进行数值计算,当 模块装药内的某点温度出现跃变,即曲线的拐点出现 时,下一时刻该点温度可骤然升高到1000 K以上,那 么将此刻的时间定义为模块装药的烤燃响应时间,此 时模块装药内该点温度即为烤燃响应温度,最高温度 所在的区域即为烤燃响应区域。

# 4 计算结果与分析

## 4.1 模块装药温度时空分布特性

针对快速烤燃条件下,选取1,3,5,6,10 K·min<sup>-1</sup>五 种升温速率进行数值计算,分析其在快速烤燃条件下的 热响应特性,其中可燃药盒是由硝化棉纸卷制而成。材 料的动力学参数及物性参数<sup>[13-15]</sup>如表2、表3所示。 图2为3种典型升温速率下模块装药在不同时刻



图2 三种升温速率下模块装药温度时空分布云图



表2 二种材料的动力学参数[13-14]

 Table 2
 The kinetic parameters of two kinds of materials<sup>[13-14]</sup>

material	A / s <sup>-1</sup>	E / kJ∙mol <sup>-1</sup>	$Q / kJ \cdot kg^{-1}$
combustible cartridge	$5.754 \times 10^{15}$	163.8	928.0
nitrocellulose	$7.917 \times 10^{12}$	120.5	1856.0

#### 表3 二种材料的物性参数[15]

 Table 3 Physical property parameters of two kinds of materials<sup>[15]</sup>

material	ho / kg·m <sup>-3</sup>	$\lambda / W \cdot cm^{-1} \cdot K^{-1}$	$c/ J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$
combustible cartridge	1100.0	14.0	1534.0
nitrocellulose	1600.0	14.2	1131.0
cardboard	1250.0	14.0	1880.0

的温度分布云图。从图 2a可知,1 K·min<sup>-1</sup>下,在加热 阶段前期,热量向结构内部传递速度较慢,可燃药盒材 料外壁面与单基药内部的温度差随着时间的增加而逐 渐增大。当时间进行到 4047.0 s时,其内外最大温差 达到 64.0 K。当可燃药盒外壁面温度继续升高,单基 药进行缓慢的自热反应。当加热进行到 4200.1 s时, 此时在靠近可燃药盒内壁面的单基药附近左右两侧各 产生一个圆形的高温区域,此处的温度已经高于可燃 药盒外壁面的温度,这说明单基药因自热反应所释放 的热量不能及时地扩散,导致反应过程加速,从而形成 高温响应区,模块装药即将发生烤燃响应。升温速率 为1 K·min<sup>-1</sup>下模块装药的左上角烤燃响应区中心坐 标(*x*,*r*)约为(6.9,58.1)mm。

由图 2b 和图 2c 可知,6 K·min<sup>-1</sup>和10 K·min<sup>-1</sup>升 温速率下模块装药的烤燃响应过程均与升温速率为 1 K·min<sup>-1</sup>时的烤燃响应过程类似。升温速率为 6 K·min<sup>-1</sup>的烤燃响应时间为932.7 s,左上角响应区 域中心坐标(*x*,*r*)约为(4.0,61.0)mm。升温速率为 10 K·min<sup>-1</sup>的烤燃响应时间为615.2 s,左上角响应区 域中心坐标(*x*,*r*)约为(3.6,61.5)mm。

由上述分析可知,三种升温速率下,模块装药发生 烤燃响应的区域均是在靠近可燃药盒内壁面左右两侧 的单基药中,着火区为两个环形响应区。随着外界升 温速率的提高,模块装药最初着火的位置略有变化,但 是对其影响较小。

## 4.2 模块装药中特征点温度随时间的变化关系

图 2 为 A、B、C、D、E 五个观测点的温度云图,由 图 2 可读出各点的温度随时间的变化曲线,如图 3 所 示。从图 3 可见,由于模块装药中所有材料的导热系 数都较小,热量向单基药内部传递的速度较慢,所以在 三种升温速率下模块装药中心传火管外壁中点C和中 心传火管内壁中点D的升温速率最小。可燃药盒内 壁中点A和E在烤燃响应发生之前温度相差较小,当 接近烤燃响应时刻,烤燃响应区域E的温度上升速率 会急剧增大,当烤燃响应区域热量开始瞬间释放,即 模块装药发生烤燃热响应。在1,6,10 K·min<sup>-1</sup>三种 升温速率下,模块装药发生烤燃响应的着火温度分别 为458.2,453.9,455.7 K,和文献[11]中实验测量的 单基药着火温度(443~463 K)进行对比,基本吻合。 由此可知,在这3种的升温速率下,外界升温速率的 变化对模块装药发生烤燃响应的着火温度影响较小。



图3 不同升温速率下各监测点的升温曲线

**Fig.3** Temperature rise curves of the monitoring points at different heating rates

含能材料

#### 4.3 模块装药烤燃响应时间与升温速率的关系

图 4 为模块装药烤燃响应时间随升温速率变化的 关系图。由图 4 可知,在1,3,5,6 K·min<sup>-1</sup>和10 K·min<sup>-1</sup> 五种升温速率下,模块装药发生烤燃响应时间的计算 值分别为4200.1,1600.6,1084.2,932.7 s和615.2 s。



图 4 模块装药烤燃响应时间与升温速率的关系 Fig.4 Relation between the cook-off response time of modular charge and the heating rate

从图4可知,随着升温速率的提高,模块装药发生 烤燃响应的时间呈指数型衰减,其拟合公式为:

 $t = 6593.2113 \times e^{-\frac{\alpha}{1.56063}} + 714.9592 (R^2 = 0.99173)$ 

## 5 结论

(1)在1,6,10 K·min<sup>-1</sup>三种升温速率下,模块装药 最初的着火位置均是在靠近可燃药盒内壁面左右两侧 的单基药中,着火区为两个环形响应区。其左侧的着火 区域中心坐标(*x*,*r*)依次为(6.9,58.1),(4.0,61.0)mm 和(3.6,61.5)mm。随着升温速率的提高,环形响应区 将从单基药内向药盒内壁面方向移动,但影响较小。

(2)在1,6,10 K·min<sup>-1</sup>三种升温速率下,模块装 药发生烤燃响应的时间分别为4200.1,932.7, 615.2 s,发生烤燃响应的着火温度分别为458.2, 453.9,455.7 K。随着升温速率的提高,模块装药发生 烤燃响应的着火时间呈指数型衰减。外界升温速率的 变化对模块装药发生烤燃响应的着火温度影响较小。

#### 参考文献:

- Terrones G, Souto, W Burkett, et al. The effect of cook-off on the bulk permeability of a plastic bonded explosive[J]. *Propellants Explosives Pyrotechnics*, 2006, 31(5): 333–342.
- [2] 张旭,谷岩,张远平,等.TATB基PBX的快速烤燃实验与数值模 拟[J].含能材料,2010,18(5):551-557.
   ZHANG Xu, GU Yan, ZHANG Yuan-ping, et al. Numerical simulation and experimental study of fast cook-off of TATB-based PBX explosive[J].Chinese Journal of Energetic Materials(Hanneng Cailiao),2010,18(5):551-557.

- [3] Aydemir E, Ulas A. A numerical study on the thermal initiation of a confined explosive in 2-D geometry [J]. *Journal of Hazardous Materials*, 2011, 186(1): 396-400.
- [4] Hameed A, Azavedo M, Pitcher P. Experimental investigation of a cook-off temperature in a hot barrel[J]. *Defence Technolo*gy, 2014, 10(2): 86–91.
- [5] Ho S Y, Ferschl T, Foureur J. Correlation of cook-off behavior of rocket propellants with thermo-mechanical and thermochemical properties[R], ADA274983,1993.
- [6] 李文凤, 余永刚, 叶锐.底排药快速烤燃特性的数值模拟[J]. 含能材料, 2016, 24(10): 941-946.
  LI Wen-feng, YU Yong-gang, YE Rui. Numerical simulation of fast cook-off characteristics for base bleeding propellant [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials* (*Hanneng Cailiao*), 2016, 24(10): 941-946.
- [7] 杨丽侠,张邹邹,刘来东.发射装药热刺激下的易损性响应试验研究[J].火炸药学报,2008,31(3):71-74.
  YANG Li-xia, ZHANG Zou-zou, LIU Lai-dong. Experimental study on vulnerability response of propelling charge to thermal stimuli [J]. *Chinese Journal of Explosives and Propellants*, 2008, 31(3): 71-74.
- [8] 胡晓棉,谢高弟.直列式火工品装药的热烤试验设计及其研究
  [J].北京理工大学学报, 1998, 18(5): 638-641.
  HU Xiao-mian, XIE Gao-di .Study on design of cook-off test for explosives used in in-line system[J]. Journal of Beijing Institute of Technology, 1998, 18(5): 638-641.
- [9] 陈晨, 路桂娥, 江劲勇,等. 双芳-3 发射药热安全性的实验研究
  [J]. 火炸药学报, 2014, 37(3): 70-73.
  CHEN Chen, LU Gui-e, JIANG Jin-yong, et al. Experimental research on the thermal safety of SF-3 gun propellant[J]. Chinese Journal of Explosives and Propellants, 2014, 37(3): 70-73.
- [10] 傅维镳,张永廉,王清安.燃烧学[M].高等教育出版社,1989: 42-48.

FU Wei-biao, ZHANG Yong-lian, WANG Qing-an. Combustion theory[M]. Higher Education Press, 1989:42-48.

- [11] 刘子如.含能材料热分析[M].北京:国防工业出版社,2008.
   LIU Zi-ru. Thermal analyses for energetic materials[M]. Beijing: National Defend Industry Press,2008.
- [12] 杨世铭,陶文铨.传热学.第4版[M].高等教育出版社,2006. 41-44.

YANG Shi-ming, TAO Wen-quan. Heat transfer. Fourth edition [M]. Higher Education Press, 2006: 41-44.

- [13] 朱一举,丁黎,常海,等.等温量热法研究 9/7 单基药的热分解行为[J].火工品,2015(1):38-40.
  ZHU Yi-ju, DING Li, CHANG Hai, et al. Study on thermal behavior of 9/7 singl-base propellant by isothermal calorimetric method[J]. *Initiators and Pyrotechnics*, 2015(1): 38-40.
- [14] 姚二岗,胡荣祖,赵凤起,等.用DSC曲线数据估算硝化棉的CnB和表观经验级数自催化分解反应热爆炸临界温升速率[J].火炸药学报,2013,36(5):72-76.
  YAO Er-gang, HU Rong-zu, ZHAO Feng-qi, et al. Estimation of the critical rate of temperature rise for thermal explosion of C<sub>n</sub>B and apparent empiric-order autocatalytic decomposing reaction of nitrocellulose from DSC curves[J]. Chinese Journal of Explosives and Propellants,2013,36(5):72-76.
- [15] 彭亚晶,王勇,刘玉强,等.硝化纤维含能材料热物性参数的测量与分析[J].含能材料,2013(6):760-764.

#### CHINESE JOURNAL OF ENERGETIC MATERIALS

含能材料

PENG Ya-jing, WANG Yong, LIU Yu-qiang, et al. Measurement and analysis of thermal physical parameters on nitrocellulose energetic materials[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials*(*Hanneng Cailiao*), 2013(6): 760–764.

#### Numerical Prediction of Fast Cook-off Characteristics for Modular Charges

#### LIU Jing, YU Yong-gang

(School of Energy and Power Engineering, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing 210094, China)

**Abstract:** To investigate the thermal safety of modular charge, based on the chemical reaction mechanism of combustible cartridge material and single-base propellant, a two-dimensional unsteady state cook-off model of modular charge was established. The fast cook-off response characteristics of modular charge were analyzed at the external heating rates of  $1-10 \text{ K} \cdot \text{min}^{-1}$ . The results show that the initial ignition position of modular charges is all in single-base propellant on the left and right sides near the inner wall surface of combustible cartridge material, and the ignition zones are two circular response zones. With increasing the heating rate, the circular response zone will move from the inside of single-base propellant to the inner wall of combustible cartridge material, but the change in external heating rates has little effect on the ignition position of modular charge. At the heating rates of 1, 6 K  $\cdot \text{min}^{-1}$  and 10 K  $\cdot \text{min}^{-1}$ , the temperatures occurring the cook-off response of single-base propellant are 458.2, 453.9 K and 455.7 K, respectively, which are basically consistent with the ignition temperatures (443–463 K) measured by experiments. The change in external heating rate has little effect on the ignition temperature occurring the cook-off response of modular charge in external heating rate has little effect on the ignition temperatures (443–463 K) measured by experiments. The change in external heating rate has little effect on the ignition temperature occurring the cook-off response of modular charge, but the ignition time occurring the cook-off response of modular charge reveals an exponential decay with increasing the heating rate.

Key words:modular charge; fast cook-off; numerical simulationCLC number:TJ55Document code:A

DOI: 10.11943/CJEM2018178

(责编:张琪)