

文章编号: 1003-1480 (2022) 02-0006-06

火工品系统传火传爆环节二次起爆过程数值模拟

吴锦涛¹, 唐科¹, 胡振兴¹, 董刚², 汪洋²

(1. 北京宇航系统工程研究所, 北京, 100076; 2. 南京理工大学瞬态物理国家重点实验室, 江苏 南京, 210094)

摘要: 针对火工品系统中典型多级序列传爆环节机理认识不清, 导致航天飞行器发射任务面临风险的问题, 从结构间隙隔离段内爆轰波的熄爆/再起爆过程的角度出发, 建立不同几何构型下的数值计算模型, 考察化学反应活性对引发二次爆轰的临界隔离段长度及临界装药长度的影响规律。研究表明, 不同几何构型下爆轰波再起爆现象的发生均通过隔离段与下游装药交界处的热点效应引发, 且临界隔离段长度随下游装药反应活性的减弱而减小; 相应地, 不同几何构型下下游装药临界长度随反应活性的变化规律更为复杂, 这是由二维流场内横波的摆动和相互碰撞所导致的。

关键词: 火工品系统; 熄爆/再起爆; 爆轰波传播; 化学反应活性

中图分类号: TJ450.2 文献标识码: A DOI: 10.3969/j.issn.1003-1480.2022.02.002

Numerical Simulation of Secondary Initiating Process of the Flame-Detonation Transmission in Aerospace Pyrotechnic System

WU Jin-tao¹, TANG Ke¹, HU Zhen-xing¹, DONG Gang², WANG Yang²

(1. Beijing Institute of Astronautical System Engineering, Beijing, 100076; 2. Key Laboratory of Transient Physics, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing, 210094)

Abstract: The mechanism of the flame-detonation transmission among multi-stage sequences in aerospace pyrotechnic system is indefinable, which leads to a great risk for launching missions. In this study, the suppression and re-initiation of detonation during its propagation process in the inert isolation of structures were investigated through both one-dimensional and two-dimensional numerical simulations, and the influences of chemical reactivity on the critical values of isolation length and explosive loading size were researched simultaneously. The results indicate that the re-initiation of detonation in both numerical dimensions are caused by the hot spot effect occurred on the interface between inert zone and reaction zone, in which the critical isolation length for detonation ignition is proportional to the reaction activity. The relationship between chemical reactivity and explosive loading size is more complicated, and the differences between one-dimensional and two-dimensional computations are determined by the oscillation and collision of transversal waves in detonation flow field.

Key words: Pyrotechnic system; Suppression and re-initiation of detonation; Propagation of detonation; Chemical reactivity

火工品系统是航天飞行器的关键分系统, 在发动机点火、结构分离和阀门开启等过程中均承担了关键作用^[1]。火工品系统的作用本质是高密度装填炸药形成的化学反应流在结构密闭容腔内的传播和发展, 其反应形式可大致分为燃烧、爆炸^[2]和爆轰^[3]类。在以

爆轰为能量传导形式的火工品序列中, 由于结构设计间隙的存在, 上游序列输出的爆轰波能量会在间隙隔离段内经历从传播到衰减, 直至接触下级序列后二次起爆的过程。为了揭示传爆环节作用/失效过程的机理, 需要对间隙隔离段内爆轰波的传播尤其是熄爆/

收稿日期: 2021-08-16

作者简介: 吴锦涛 (1990-), 男, 高级工程师, 从事先进火工品装置设计及研制。

基金项目: 国家自然科学基金项目 (NO.11702032)

再起爆的过程开展研究。

火工品系统中内装炸药的典型传爆环节十分复杂。一方面,由于激波的加载作用,活性粉末颗粒会在瞬时高温、高压和高应变率下发生剪切、断裂变形和剧烈摩擦等行为,使得颗粒的反应活化能迅速升高,引发流场内的火焰失稳^[4-6],进而在波后反应区内形成局部自爆,最终引爆下级序列实现能量传递和放大。另一方面,当爆轰波在无反应介质的惰性隔离段内发生衰减后,其能量传导形式可能发生改变,在接触下游序列发生再起爆时,流场可能出现复杂的燃烧转爆轰(Deflagration to Detonation Transition, DDT)现象^[4,7-8]。综上,间隙隔离段内颗粒炸药引发二次爆轰的过程受到多因素耦合作用的影响。

冯晓军等^[9]研究发现装药密度、管壁约束及厚度、氧化剂比例均会影响爆轰波的再起爆。Wang等^[10]针对等当量比H₂/O₂/N₂混合物的爆轰波传播过程进行了数值模拟,发现当隔离段厚度和间距小于某个临界值时,才能出现爆轰波的二次起爆。Taileb等^[11]研究发现,采用不同规格的化学反应机理时,爆轰波通过间隙隔离段前后的瞬时流场结构具有一定的差异,而流场内爆轰波的强度、传播速度以及胞格尺寸等关键量化指标并无太大区别。本课题之前的实验研究^[12]发现,典型传爆序列的输出性能由结构尺寸和装药理化特性两个因素决定。其中,结构尺寸决定了流场内爆轰波的诱导距离,而装药理化特性代表了反应体系的化学热力学属性。Tang-Yuk等^[13]研究发现,隔离段长度对二次爆轰的引发起决定作用,而这种作用高度依赖于反应介质的温度敏感性(有效活化能),且其与隔离段临界长度呈反比关系。综上所述,间隙隔离段内爆轰波的二次起爆过程受结构和内装药的耦合影响,且不同反应放热下,二次起爆对应的临界尺寸和临界装药量也不同。

本文在前期实验研究的基础上,结合数值模拟和数据分析等手段,以真实结构和装药条件下的典型传爆环节作用过程为研究对象,通过建立不同几何构型下的大规模数值计算模型,揭示结构间隙隔离段内爆轰波的二次起爆过程的发生机理,明确临界隔离段长

度和临界药量长度随化学反应活性的变化规律,澄清传爆环节出现熄爆/再起爆现象的热力学本质。

1 计算模型

1.1 控制方程和计算格式

针对火工品系统中典型传爆环节,采用欧拉(Euler)方程对其中可压缩带化学反应的高温、高压、瞬态流动过程加以描述:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial y} + W = S \quad (1)$$

式(1)中:U代表解向量;F和G分别代表x和y空间方向的对流量;W代表轴对称修正矢量;S代表化学反应源项矢量,具体表达如下:

$$U = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ E \\ \rho S \end{bmatrix} \quad F = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ (E + p)u \\ \rho u S \end{bmatrix} \quad G = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ (E + p)v \\ \rho v S \end{bmatrix}$$

$$W = \frac{\beta v}{y} \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ E + p \\ \rho S \end{bmatrix} \quad S = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dot{S} \end{bmatrix} \quad (2)$$

以上各式中: ρ 为密度; u 和 v 分别代表 x 和 y 方向的速度分量; E 为单位体积总能量, $E=p/(\gamma-1)+0.5\rho(u_2+v_2)+\rho qS$, p 为压力, γ 为比热比, q 为单位质量的总化学能, S 为反应物质量分数; β 代表构型参数,对二维平面计算问题,取 $\beta=0$ 。考虑到化学反应机理规格对爆轰波流场关键特性的量化参数取值影响较小^[11],且详细机理会耗费大量的计算用时^[14],因此,本文基于量热完全气体假设,采用单步不可逆化学反应来描述传爆环节的能量转换形式,反应形式和反应速率可以表达为:



$$\dot{S} = \frac{dS}{dt} = \rho A(1-S)\exp(-E_a / RT) \quad (4)$$

式(4)中： A 为指前因子； E_a 为反应活化能； R 为通用气体常数。

计算时采用有限差分的形式对方程进行离散求解，即将控制方程式(1)中的流动过程和化学反应过程作解耦处理。针对每个时间步长(time-step)，先不考虑化学反应，只进行流动过程的计算，再利用经过流动过程的新参数计算化学反应源项。其中，对流通量的空间导数项 $\partial F/\partial x$ 和 $\partial G/\partial y$ 采用了Local Lax-Friedrichs结合5阶WENO(weighted essentially non-oscillation)格式^[15]的算法进行求解，时间导数项 $\partial U/\partial t$ 模板等采用了3阶TVD格式的高精度Runge-Kutta法求解，化学反应源项 S 则采用了隐式常微分方程LSODE求解器进行求解。

1.2 数值计算模型

根据传爆环节的序列真实结构，提取出优化的数值计算模型，如图1所示。

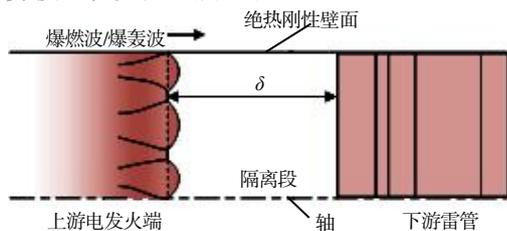


图1 传爆环节作用过程数学模型

Fig.1 The numerical model of the flame-detonation transmission among multi-stage sequences

图1上游序列通过点火花形成以爆燃/爆轰波为代表的传火/传爆过程，经中间间隙隔离段向下游传播引爆火焰雷管。考虑到各级序列的装药直径相近、反应活性不同，计算模型的下游设置为装药组成和厚度不同的等直径计算区域。

根据以上计算模型，本文针对传爆环节开展了2种几何构型的爆轰波数值模拟，即一维传爆过程和二维平面构型的传爆过程(取式(2)中 $\beta=0$)。针对一维计算，左右边界条件均采用零梯度条件；针对二维计算，采用自下而上传播的构型，其中代表上游输入和下游输出的上、下边界仍采用零梯度边界条件，而代表二维平面的左、右边界则取为绝热刚性壁面条件。

计算区域采用了均匀网格进行划分，网格尺寸保证爆轰波内的半化学反应宽度包含的网格数在10~30之间(依赖于不同的反应活化能)，这样的高分辨率

足以清晰地显示传爆的物理化学过程。一维计算选取的长度为200mm；二维计算区域的长度为60mm，宽度为3mm，与实际的结构尺寸相当。初始计算时刻，在一维计算域左端设置高温、高压区起爆形式，通过在可燃介质中的起爆形成过驱爆轰波(overdriven detonation)并衰变为稳定传播的爆轰波，模拟上级序列的输出，随后令其进入惰性隔离段来考察其发生发展。在二维平面计算域的下端，植入由经典ZND爆轰波形成的胞格爆轰波作为初始条件，让其进入惰性隔离段来考察其传爆过程。

2 计算结果分析

针对传爆环节二次起爆过程，分别开展了一维构型和二维构型的数值计算。为了在数值模拟中还原真实的传爆过程，需要在装置结构设计参数和火工品试验数据的基础上，通过反算获取与实际环节对应的上、下游介质的化学热力学参数。考虑到一维构型的计算规模较小，以此为基础开展大量参数化研究工作，以确定化学反应活化能等重要参数的合理取值范围。一维计算的局限性在于其忽略了爆轰波流场的流动过程，因而缺乏对横波摆动、传播和相互碰撞等细节的描述。因此，在一维计算所确定的热力学参数基础上，进一步开展二维构型的数值计算，以更真实地反映传爆环节爆轰波流场的化学动力学过程。

2.1 一维构型的计算结果

表1给出了不同化学反应活化能条件下，一维计算得到的临界隔离段长度 δ_{cr} 和临界药量长度 l_{cr} 的取值。

表1 一维构型下临界隔离段长度和临界药量长度随活化能的变化

$E_a/(RT_0)$	26.0	28.0	30.0	32.0	34.0
δ_{cr}/mm	34.6	19.9	12.9	4.9	1.4
l_{cr}/mm	46.9	24.9	56.0	28.2	27.9

表1中， δ_{cr} 定义为爆轰波刚好能够重新起爆的隔离段长度； l_{cr} 定义为起爆后压力峰经过下游反应区后发展为自持爆轰的最小长度。结果表明，化学反应活化能是影响传爆过程的重要参数，并显著影响隔离段长度的变化。随着活化能的提高，下游序列内装药界

面的反应活性降低,引发下游装药的爆轰能量需求更大,因而对应的临界隔离段长度更小。相应地,反应活性对临界药量长度的作用规律更为复杂。

图2为活化能 $E_a=26RT_0$,临界隔离段长度 δ_{cr} 为34.6mm时,传爆过程的压力 p 、反应进度 S 和温度 T 的变化。

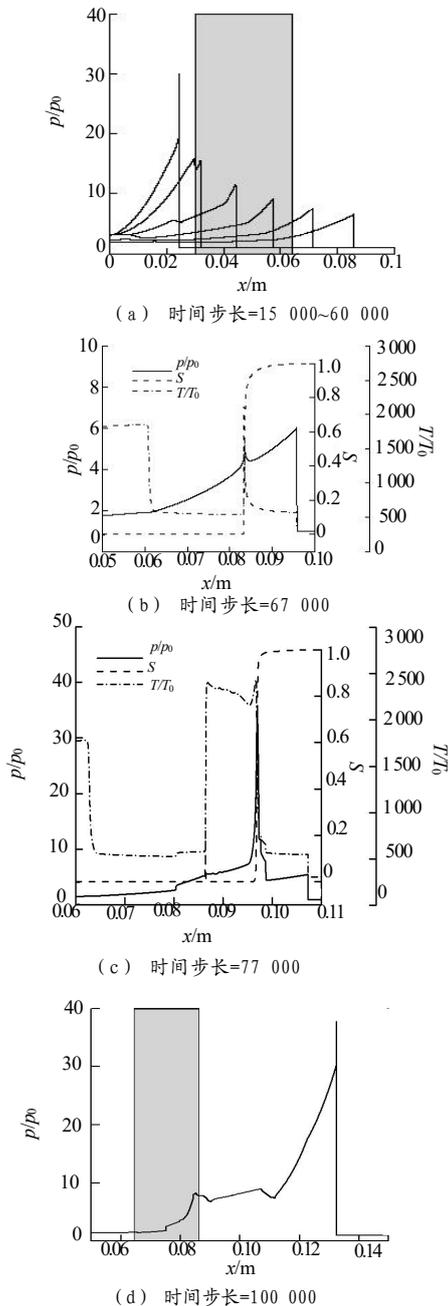


图2 不同时刻传爆过程的压力、反应进度和温度的一维变化关系(灰色区域代表惰性隔离段)

Fig.2 One-dimensional correlation among the pressure, reaction proceeding and temperature on different time-steps in the process of the flame-detonation transmission link (gray region represents the inert isolation section)

图2(a)为时间步长15 000~60 000范围内的压力变化曲线,压力峰值的不断降低代表了上游输出爆轰波在惰性隔离段内传播时的典型衰减过程。图2(b)为时间步长67 000时的化学热力学指标取值,此时流场内出现2道压力峰值,前1个压力峰值代表了上游输出并不断衰减的爆轰波,后1个压力峰值代表了火焰面与下游介质接触后引发的再起爆,该时刻温度曲线同样出现了尖峰并与压力曲线相互耦合,表明此时流场内局部“热点”的形成。图2(c)为时间步长77 000的计算结果,可以看出,首个热点($x=0.108\text{m}$ 处压力与温度曲线耦合峰值)向前传播的过程中持续引发下游介质可燃区域的失稳,并进一步在流场内触发形成二次起爆的“热点”,该热点最终发展成为图2(d)中自持传播的二次爆轰。

值得注意的是,图2(b)显示在 $x=0.084\text{m}$ 处出现的“热点”,此后并没有发展为新的爆轰波,而是在压力波继续传播一段时间后,在交界面运动至 $x=0.096\text{m}$ 附近(图2(c))时,形成了二次起爆的“热点”,并很快发展为过驱爆轰波向右传播。由图2的计算结果可知,在一维构型的计算中,爆轰波通过惰性隔离段后,是在经历两次“热点”起爆的条件下引发二次爆轰的。

2.2 二维构型的计算结果

针对二维平面构型,表2给出了不同活化能条件下计算得到的临界隔离段长度 δ_{cr} 和临界药量长度 l_{cr} 结果。

表2 二维平面构型下临界隔离段长度和临界药量长度随活化能的变化

Tab.2 The critical values for both isolation section length and loading explosive quantity in two-dimensional computations of different activation energy

$E_a/(RT_0)$	26.0	28.0	30.0	32.0	34.0
δ_{cr}/mm	27.0	19.0	15.0	9.0	5.0
l_{cr}/mm	28.2	24.6	20.9	21.3	20.4

在二维平面的各算例中,临界隔离段长度与化学反应活化能仍呈现反比的关系,而不同条件下的具体取值则略有不同。此外,不同于—维计算,二维构型下游序列的临界装药长度随着活化能的增加呈单调下降的趋势,这是因为—维计算无法表征横波(transversal wave)等爆轰波流场的二维特性,因而其二次起爆过程完全取决于热力学效应,而爆轰波的

起爆再爆受横波的摆动及相互碰撞的影响很大,一维计算忽略上述流动过程得到的计算结果,与真实情况存在一定的差异。

图3为活化能 $E_a=26RT_0$,临界隔离段长度 δ_{cr} 为27.0mm时,传爆过程的二维流场压力变化。

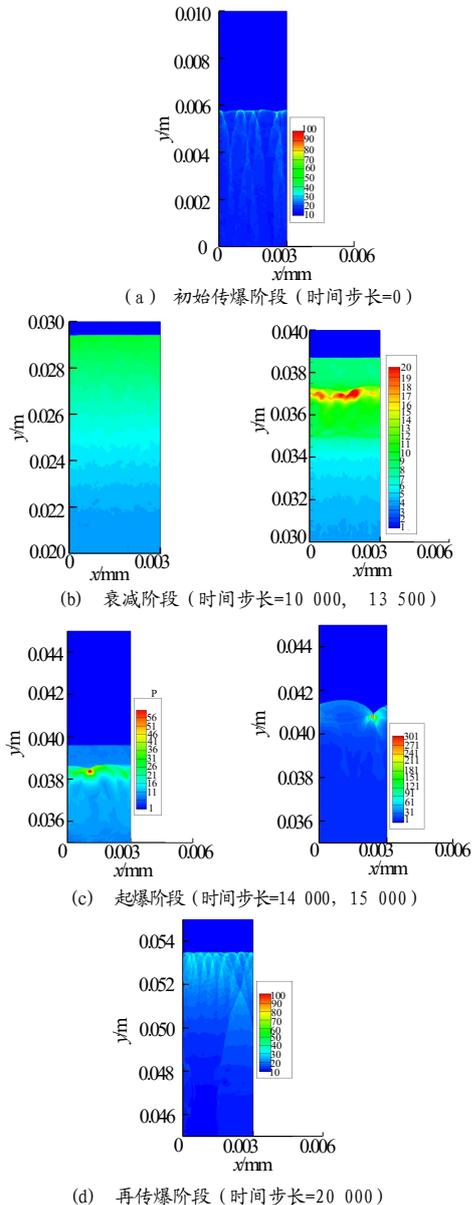


图3 不同时刻传爆过程压力的二维分布图

Fig.3 Two-dimensional distributions of pressure in the process of the flame-detonation transmission of typical time-steps

结果显示,初始传播阶段,流场上游为稳定传播的胞格爆轰波,如图3(a)所示,当爆轰波传播至 $y=0.008\text{m}$ 时进入惰性隔离段,爆轰波逐渐衰减,压力峰值下降,该衰减阶段经历了一定的时间,直至压力波穿过隔离段再次进入反应区的初期仍继续衰减,如

图3(b)所示;当时间步长为14 000时,在隔离段与反应区的交界面处(约 $y=0.0385\text{m}$)出现热点,形成高温高压区,之后发展为两个互为反向运动的横波;在时间步长为15 000时,横波的再次碰撞形成了压力更高的热点,并进一步发展为再次传爆的爆轰波,如图3(d)所示。由此可见,在二维平面构型中,下游装药界面附近热点的形成以及横波的碰撞是导致再起爆的主要原因。

对比一维和二维的计算结果发现,在活化能较低时,一维计算的临界隔离段长度比二维的长,这表明一维爆轰波的二次起爆过程更容易引发。随着活化能的逐渐增加,一维计算的隔离段临界长度逐渐变得比二维计算的结果更短,说明在较高活化能条件下,二维爆轰波再起爆更容易引发。一维和二维结果存在差异的根本原因在于二维流场内横波的相互碰撞。在二维计算中,传爆环节的二次爆轰过程不仅与热力学行为有关,还与流动过程密切相关,因而其比一维计算更能反映真实的传爆环节。需要注意的是,随着下游装药化学反应活性的减弱(活化能增高),临界装药长度反而是不断减少的。这是因为当活化能增大时,横波的不稳定性也随之增强,其摆动和碰撞等行为也更剧烈,进而导致热点在更短的距离内成长为再起爆的爆轰波,也即起爆过程经过的反应区长度更短。

3 结论

本文以火工品系统中典型多级序列的传爆环节为研究对象,考察了序列结构间隙组成的惰性隔离段内爆轰波二次起爆的发生发展经过。结果表明,隔离段和下游反应区交界处容易引发热点,这是下游再起爆的主要原因,热点的形成与界面处活性成分的分布有关,而热点成长为爆轰波则受横波摆动及相互碰撞的影响。从变化规律来看,下游装药的化学反应活性越弱,形成二次爆轰对应的临界隔离段长度和临界装药长度越小。在多级序列传爆环节的火工品装置设计中,针对不同火工品序列之间内装药剂的匹配性问题,可从正向设计的角度出发,结合大规模数值计算等研究手段,明确复杂火工品序列形成稳定爆轰并成

功引发下游装药的临界条件,以进一步提高火工品序列及分离装置的设计可靠性。

参考文献:

- [1] 刘竹生,王小军,朱学昌,王国辉,等. 航天火工装置[M].北京:中国宇航出版社,2012.
- [2] Bao Q, Fang Q, Yang S, et al. Experimental investigation on the deflagration load under unconfined methane-air explosions[J]. Fuel, 2016(185): 565-576.
- [3] Yang P, Ng H D, Teng H H. Numerical study of wedge-induced oblique detonations in unsteady flow[J]. Journal of Fluid Mechanics, 2019(876): 264-287.
- [4] Zhu R, Zhao M, Zhang H. Numerical simulation of flame acceleration and deflagration to detonation transition in ammonia-hydrogen-oxygen mixtures[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2021, 46(1): 1 273-1 287.
- [5] Xiao H, Oran E S. Flame acceleration and deflagration to detonation transition in hydrogen-air mixture in a channel with an array of obstacles of different shapes[J]. Combustion and Flame, 2020(220): 378-393.
- [6] Mazaheri K, Mahmoudi Y, Radulescu M I. Diffusion and hydrodynamic instabilities in gaseous detonations[J]. Combustion and Flame, 2012, 159(6): 2 138-2 154.
- [7] Oran E S, Gamezo V N. Origins of the deflagration-to-detonation transition in gas-phase combustion[J]. Combustion and Flame, 2007, 148(1-2): 4-47.
- [8] Gary R P, Eric M H, Matthew D H, et al. Deflagration to detonation transition in hot HMX and HMX-based polymer-bonded explosives[J]. Combustion and Flame, 2020(215): 295-308.
- [9] 冯晓军,田轩,赵娟,等. DNTF 基炸药燃烧转爆轰影响因素实验研究[J].含能材料,2018, 26(3):255-259.
- [10] Wang Y, Huang C, Deiterding R, et al. Propagation of gaseous detonation across inert layers[C]//Proceedings of the Combustion Institute,2020.
- [11] Taileb S, Josue M G. Influence of the chemical modeling on the quenching limits of gaseous detonation waves confined by an inert layer[J]. Combustion and Flame, 2020(218): 247-259.
- [12] 吴锦涛,吕一品,董刚,等.考虑 DDT 过程的传火传爆环节实验研究[J].兵器装备工程学报,2021(9):95-99,182.
- [13] Tang-Yuk K C, Lee J, et al. Detonation transmission across an inert gap[C]//The 27th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems , 2019.
- [14] Warnatz J, Mass U, Dibble R W. Combustion: physical and chemical fundamentals, modelling and simulation, experiments, pollutant formation (4th Edition)[M]. Berlin: Springer, 2006.
- [15] Balsara D S, Shu C W. Monotonicity preserving weighted essentially non-oscillatory schemes with increasingly high order of accuracy[J]. Journal of Computational Physics, 2000, 160(2): 405-52.