

高能固体推进剂燃烧转爆轰 (DDT) 研究综述

杨 涛 张为华 方丁酉

(国防科技大学航天技术系, 长沙, 410073)

摘 要: 以固体火箭发动机装药安全性为背景, 从高能固体推进剂的燃烧转爆轰 (简称 DDT) 危险性、燃烧转爆轰机理和燃烧转爆轰的模拟三方面对该问题的研究工作进行了综述, 重点讨论了 DDT 过程中起关键作用的动态压缩现象、压缩燃烧和热点形成机理, 以及 DDT 建模中的本构关系和封闭问题, 指出了今后进一步研究的方向。

主题词: 固体火箭推进剂, 高能推进剂, 燃烧, 爆轰, 述评

分类号: V435.12

A REVIEW ON DEFLAGRATION TO DETONATION TRANSITION (DDT) FOR HIGH ENERGY PROPELLANT

Yang Tao Zhang Weihua Fang Dingyou

(Dept. of Aerospace Technology, National Univ. of Defense Technology, Changsha, 410073)

Abstract: The hazards, the mechanism of Deflagration to Detonation Transition (DDT) and the numerical simulation of DDT for a high energy solid propellant are reviewed with a view of grain safety consideration of solid rocket motor. The key processes in DDT such as dynamic compaction, compressive combustion, hot spot formation, constitutive models and closure are specially discussed in this paper. The subjects for future research are proposed.

Subject terms: Solid rocket propellant, High energy propellant, Combustion, Detonation, Review

1 引 言

约束条件下粒状含能材料燃烧转爆轰是一个复杂的物理-化学过程, 受很多因素影响, 包括约束条件的强度、颗粒尺寸、颗粒床可渗透性、推进剂冲击波敏感性和燃烧过程中的能量释放速率。DDT 研究的早期工作集中在用实验方法探讨 DDT 的危险性, 典型的实验装置是钢管约束的 DDT 管, 通过对诱导爆轰长度的测量, 得到不同实验条件下各种推进剂燃烧转爆轰危险区。Bernecker^[1]对此作了评述, 此后, 研究的重点在探求燃烧转爆轰机理和对这一过程进行模拟。

2 燃烧转爆轰机理研究

DDT 机理研究的第一阶段, 主要通过 DDT 管实验来研究 DDT 现象, 除了传统的厚壁钢管外, 还用一种透明 Lexan 管。所用光学诊断技术有光纤/光电管装置、高速摄影、分幅照像、

* 本文 1995 年 5 月 13 日收到

多通道脉冲 X 射线等。实验发现 DDT 过程由以下七个阶段组成:从点火具点燃到推进剂装药着火、点火/传导燃烧、对流燃烧、压缩燃烧(热点)、冲击波形成、压缩燃烧和爆轰。以上七个阶段在 DDT 过程中的出现和所占的地位,便构成了机理之间的不同。主要有两种机理^[1,2],在机理 I 中,已燃区的加速燃烧使点火具附近压力上升,连续发送出一系列压缩波,这些压缩波会汇聚成具有一定强度的致密波,致密波会压实颗粒床并改变对流火焰峰的传播速度。如果压力上升速率能驱使致密波发展成一个强冲击波,则颗粒床将由冲击压缩点燃而形成爆轰。在机理 II 中,燃烧造成的能量释放很慢,压力沿整个诱导爆轰长度增加平缓,但颗粒床的压实现象依然相当严重。某一时刻,在药床中的某点会突然发生剧烈的化学反应并伴有强冲击波向前后两个方向传播,这种类似于热爆炸的现象似乎是由于致密波压实药床,由于摩擦、剪切作用和塑形变形使局部形成热点而引起的。上面两种模型中,颗粒床的力学响应似乎对 DDT 起着控制作用,其表现在无论对流燃烧是否迅速,颗粒床中都存在严重的动态压缩现象,在一定条件下,动态压缩会诱发含能材料的化学反应并导致爆轰。

由于认识到动态压缩在 DDT 过程中的重要作用,研究重点开始转向第二阶段,研究现象本质的模拟。Sandusky 和 Liddiard^[3]设计了一系列实验来模拟各阶段的动态压缩现象,其中最有代表性的是活塞驱动的压缩实验,实验装置如图 1 所示。由火药燃烧产生的高压燃气驱动活塞撞击在多孔药床上,多孔介质有惰性介质和几种不同火、炸药和推进剂,药床约束管有低约束的 Lexan 管,强约束的铝管和钢管。所用诊断技术有分幅照像和脉冲 X 射线,微波干涉计,管壁压力传感器和离子探针。这一实验可模拟 DDT 最后阶段的动态压缩和压缩燃烧。用低速活塞(速度小于 300 m/s)撞击多孔床发现:①稳态致密波速度小于 600 m/s,这一速度低于固相材料中的音速(3000 m/s);②当活塞速度足够大时,含能材料中出现压缩引起的燃烧,且满足: $\tau^2 \Delta t = \text{const}$ 。这里 τ 为测得的被压缩固相中的应力, Δt 为药床被撞击到出现火焰的时间间隔。

此后,各研究机构纷纷展开了对动态压缩现象的模拟。Baer^[4]首先模拟了惰性致密波的传播,即没有考虑致密波诱发的化学反应。Krier^[5]用两相流理论对致密波的结构进行了分析,模型中引用了 Baer^[6]导出的固相体积分数守恒方程来模拟两相介质的动态压缩。

$$\frac{\partial \varphi_p}{\partial t} + u_p \frac{\partial \varphi_p}{\partial x} = \frac{\varphi_g \varphi_p}{\mu_c} (p_p - f_p - (p_g - f_g)) + \frac{\Gamma_p}{\rho_p} \quad (1)$$

式中下标 g、p 分别代表气相和固相, φ 为体积分数, p 为压力, f 为界面应力, ρ 为密度, Γ 为相间质量交换速率, μ_c 为颗粒材料的压缩粘性,是一个常数,定义了压缩过程中固相应力及体积分数达到平衡的松弛时间。模型中描述可压缩固体的状态方程是 Tait 方程

$$e_p = (p_p + \rho_{p0}s)/[(\gamma_p - 1)\rho_p] \quad (2)$$

其中 e 为内能, γ 是比热比, s 为非理想固体参数。Krier 的分析结果显示,在不考虑化学反应时,致密波的结构和厚度完全由材料压缩粘性和相间力不平衡决定;对具有理想状态关系的固体,致密波传播的最小速度是当地固相音速,任何亚音速致密波都是非理想固体的直接结果。

在 1989 年的美国 JANNAF 推进系统危险性会议上,对动态压缩模拟问题展开了专题讨论,很多学者提出了各自的模型来模拟单基药 WC-140 和双基推进剂 TS-3659 的动态压缩实验,特别是压缩诱发的燃烧现象。

粒状推进剂向最终的气态燃烧产物的转化过程是一个非常复杂的过程, 目前对这一过程还未完全了解, 通常的做法是用一个依赖于压力的经验燃速公式来表示颗粒的燃烧, 燃速公

式来自密闭爆发器的实验, 这一模型对于模拟压缩燃烧过于简化了。作为改进, Kooker^[7,8]假设了一个如下所示的两步反应模型 (见图 2)。

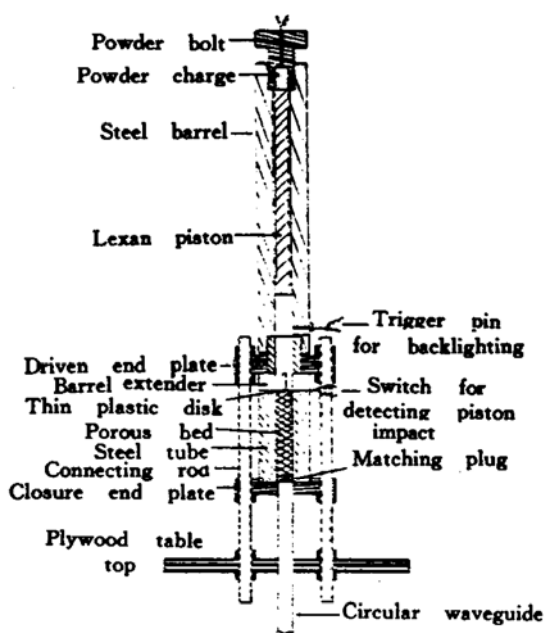


Fig. 1 Schematic of apparatus for dynamic compaction

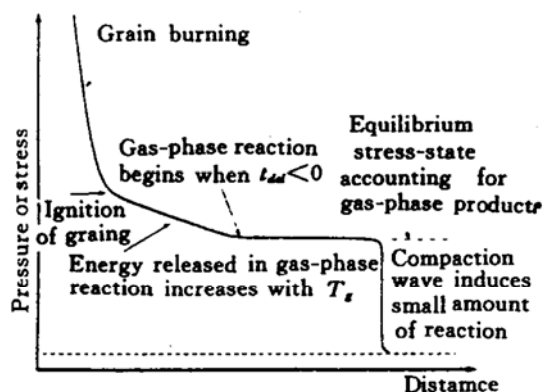


Fig. 2 Illustration of compaction wave induced compressive combustion

当 $p_g < p_{tr}$ 时, $S \rightarrow R1 \rightarrow R2$; $p_g > p_{tr}$ 时, $S \rightarrow R2$ 。

式中 S 代表固体推进剂, $R1$ 为中间气体产物, $R2$ 为最终燃烧产物, p_{tr} 为转换压力。它把致密波处理成一个没有厚度的冲击波阵面, 经过致密波后, 颗粒床被压缩, 并诱发少量推进剂的化学反应, 反应生成中间气体成份 $R1$ 。中间产物经过延迟时间 t_{del} 后, 转化成最终产物 $R2$ 并释放剩余能量。气相化学反应使气体混合物压力和温度上升, 加快了气体向固相的传热。当推进剂颗粒表面温度达到着火温度时, 推进剂开始着火燃烧。当气体压力低于某一转变压力 p_{tr} 时, 推进剂首先分解成中间产物 $R1$ 再经气相反应成最终产物 $R2$, 若气相压力大于 p_{tr} 时, 推进剂一步转化为最终产物。延迟时间取决于气相压力, 由下式确定

$$dt_{del}/dt = - (p_g/p_{g0})^2 \quad (3)$$

气相反应释放的燃气是气相温度的函数, 当 $t_{del} > 0.0$ 时, $m_{gr} = 0.0$; $t_{del} < 0.0$ 时, $m_{gr} = c_1 \exp(-c_2/T_g)$ 。式中 c_1 和 c_2 是要估计的常数。

其它几种模型在形式上与 Kooker 模型虽有差别, 但基本上都是从 Sandusky 动态压缩实验出发, 引进一个与压力有关的延迟时间, 在此时间之后开始化学反应, 或逐步释放能量, 或瞬时释放全部能量。显然, 这些模型建立的化学反应与气相压力、温度和延迟时间的关系都是为了和实验结果拟合, 是表象的, 不能回答凝相反应和气相反应的内部机理。后来, Kang 等又提出了一个冲击波压缩多孔床形成热点的热力模型^[9]。他们用一个孤立球形气孔来模拟多孔床的空隙, 如图 3 所示, 包含气孔的球形凝聚相含能材料内外径分别为 $a(t)$, $b(t)$, 气孔体积和固相体积分别为 V_g 和 V_p , 则多孔床的空隙率为: $\phi = V_g/(V_g + V_p) = (a/b)^3$ 。控制方程包括气孔和周围固相的能量平衡, 同时考虑了粘弹性加热, 有限速率化学反应, 以及气

孔和固相的热交换等热过程。结果发现,粘弹性加热是冲击波点燃多孔床的重要机理,此外,初始空隙率与孔径,以及材料粘性对热点形成有很大影响。此后, Belmas^[10]亦建立了一个基于微观结构小孔塌陷的热点模型。Embid 和 Majda^[11]建立了一个渐近模型来模拟含能材料中的热点形成和增长过程。这些工作从微观结构热学与力学的分析,使得对压缩燃烧与热点机理的研究有了很大前进。与热点形成不同,另一类热力学分析主要考虑火焰传播过程中热激励和应力波对固体颗粒的作用,提出了颗粒破碎模型^[12,13],认为颗粒破碎导致了局部的快速热释放,此模型有待于进一步实验的数据来完善。

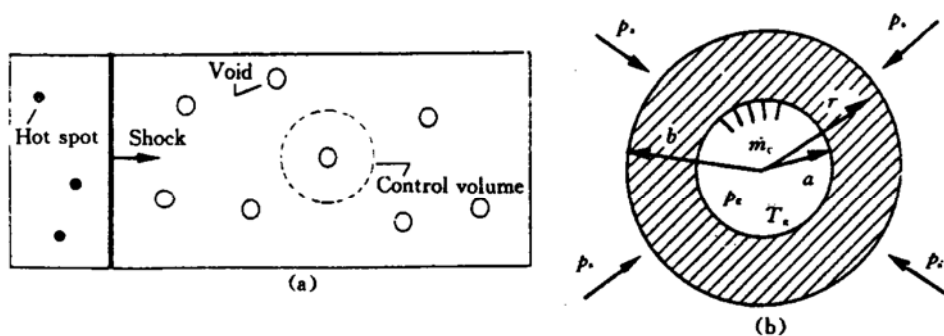


Fig. 3 Illustration of shock-induced hot spot formation in porous

3 燃烧转爆轰模拟

两相连续混合流理论被广泛用来研究反应性多孔材料中的燃烧转爆轰问题,该理论的一个基本前提是混合物可分离成两种彼此分离且连续的相,每一相除了在交界面与其它相作用外,其性质与该相单独存在时一样。根据这些假设,对每相写出质量、动量、能量方程时只需在单相守恒方程中加入反应两相作用的相,这些项模拟了两相间的质量、动量、能量传递。对气、固两相写出如下形式的守恒方程

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_i \varphi) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_i \varphi u_i) = \Gamma_i \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_i \varphi u_i) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_i \varphi u_i^2 + p_i \varphi) = \Gamma_i u_p + D_i \quad (5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}[\rho_i \varphi (e_i + u_i^2/2)] + \frac{\partial}{\partial x}[\rho_i \varphi u_i (e_i + u_i^2/2 + p_i/\rho_i)] = \Gamma_i (e_p + u_p^2/2) + D_i u_p + Q_i \quad (6)$$

式中 ρ , φ , u , p , e 分别代表密度、体积分数、速度、压力和内能,下标 i 分别取 g 和 p 代表气相和固相, Γ , D , Q 分别表示相间质量交换,动量交换和能量交换。按两相混合流假设,相间交换项满足

$$\Gamma_g + \Gamma_p = 0; \quad D_g + D_p = 0; \quad Q_g + Q_p = 0 \quad (7)$$

相间作用项的具体形式是引起争论的中心,其选择应满足一定的基本准则,包括:混合物控制方程守恒,即将各项的守恒方程代数相加后,相间作用项全部消失;满足热力学第二定律,即两相混合物的熵不减,使得两相模型能预测含能颗粒材料中的爆轰;符合为确定相

间作用项而进行的特定实验的结果;使得在某些极限情况下,由两相模型预测的结果与实际符合;在初始条件下,模型预测到一个平衡态,即环境状态。选择相间作用项要同时满足上述所有准则是困难的。Gough 和 Kuo 的模型中,相间作用项完全由实验确定,不满足混合物方程守恒准则,也不总满足熵不减条件。但目前很难在爆轰条件下作实验测定相间作用项,通常相间质量交换是基于密闭爆发器的实验,相间阻力和相间传热是在冷流条件下测出的。Pwoers^[14]等认为,既然在粒状含能材料中观察到两相爆轰现象,所以相间作用项应该使建立的两相模型能够预测到这一现象,因此在他们的模型中,相间作用项的形式采用 Baer^[6]等由两相混合物的热力学第二定律推导的相间作用项的函数形式,其中的参数通过和 DDT 实验数据拟合来确定。

DDT 建模中另一个引起争议的问题是方程组的封闭问题。模型中的未知数有各相的体积分数 φ , 密度 ρ , 速度 u , 压力 p , 内能 e 10 个, 现控制方程有各相的质量守恒, 动量守恒, 能量守恒和状态方程, 根据两相连续流假设 $\varphi_g + \varphi_p = 1$ 。因方程个数是 9 个, 还要补充一个方程使其封闭。大多数模型都用到相间力平衡假设: $p_p = p_g + p_e$, 相间平衡应力 p_e 是颗粒床中孔隙率的函数, 在不考虑颗粒的弹塑性变形时, 平衡应力即是颗粒间应力, 通常用准静态压缩实验确定^[15,16]。另一类模型是基于 Carroll 和 Holt^[17]的分析, 认为在压缩过程中, 孔隙的塌陷发生在三个相, 即弹性相, 弹-塑性相和塑性相, 每相对应一个平衡应力, 平衡应力取决于孔隙率、屈服强度和剪切模量。

封闭方程组的另一模型是由 Baer 引进的固相体积分数的守恒方程 (2), 式中界面应力按 Baer 的定义为

$$f_i = \rho_i \varphi \partial \psi / \partial \varphi \quad (8)$$

这里 ψ 为 Helmholtz 自由能。显然模型中考虑了相间力的不平衡, 但目前给出的自由能并不是体积分数的函数, 故实际的做法是用颗粒间应力表示界面应力。

应该指出, 因 DDT 过程是由多阶段组成的, 故各阶段对应的本构关系应该不同, 如在对流燃烧阶段, 相间质量交换只由固相燃烧引起, 而在压缩燃烧阶段, 相间质量交换由气相反应和固相反应两者引起。由于对 DDT 过程的各阶段机理还未完全弄清, 目前还不能分阶段给出所有的本构关系, 这是有待于进一步开展的工作。

DDT 模型是一组偏微分方程, 需要数值求解, 因 DDT 过程是一个伴随有强冲击波的两相化学反应流, 解决激波捕获和克服刚性是数值模拟的关键。Baer^[6]等用 MOL (Method of Lines) 方法求解了这一问题, 基本思想是在网格的每个节点用中心差分将空间导数离散, 得到一个庞大的常微分方程组, 然后解这组常微分方程, 线方法对计算机的速度和存储空间都有一定的要求。作者用 MacCormack 格式和自适应网格技术数值求解了这组方程^[18], 通过自适应网格使冲击波处的网格自动加密, 而总的网格数不变, 这样可大大节省机时, 提高捕获激波精度。图 4 给出了一个算例, 对装填密度为 95% TMD 的 HMX, 快速燃烧压实药床, 在火焰峰前形成一个不透气的“塞子”, 在这一致密波和火焰峰的相交处, 热点释放能量并很快形成了爆轰波。

4 有待于进一步研究的课题

DDT 过程的关键是对流燃烧和压缩燃烧 (颗粒破碎, 热点形成)。因此, 多孔药床中对流

燃烧机理的研究^[19]仍是今后研究的课题,要考查火焰在药粒孔隙间的渗透、传热点火和三维燃烧特性,特别要确定在弱的约束条件下,破碎的推进剂药床中能否形成充分的压力增加速率以引起爆轰,这对发动机的安全性是很重要的。

现有的 DDT 模型中开始注意到热点形成的概念,但热点模型均是基于热与力的观点,对控制热点成核,增长与聚结的微观物理化学机理方面知之甚少。另外,DDT 模型中有关推进剂燃烧的化学描述只是表象的,没有反映化学机理的本质,而且,在整个 DDT 过程中引用了同一个化学反应模型,用同一组参数描述药粒低压下燃烧和高压下热点的分解,这显然是不合适的。因在冲击波的强动载荷作用下,药粒将破碎,可以想象化学键被打破并导致药粒表面自由基或离子的产生,这一现象对选择代表药粒表面的化学反应有深刻影响。化学键在药粒受到强剪切的区域亦会被打破,而这种剪切反应被认为引起了冲击波向爆轰的快速转变。很显然,有必要对推进剂在强动载荷下的基本化学机理进行详细了解,最近在光学诊断方面的进展,如光谱学和量子化学,对解决这一问题是很有帮助的。

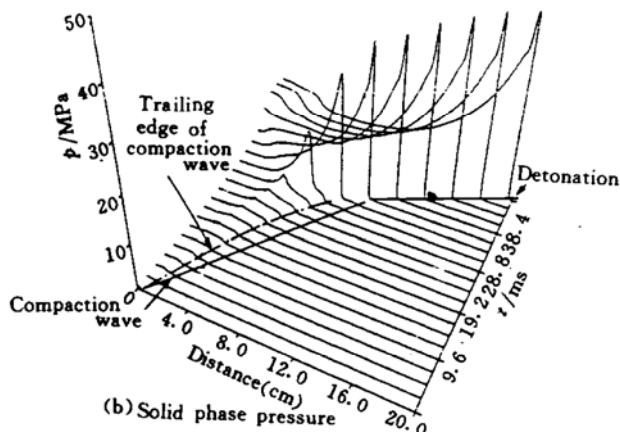
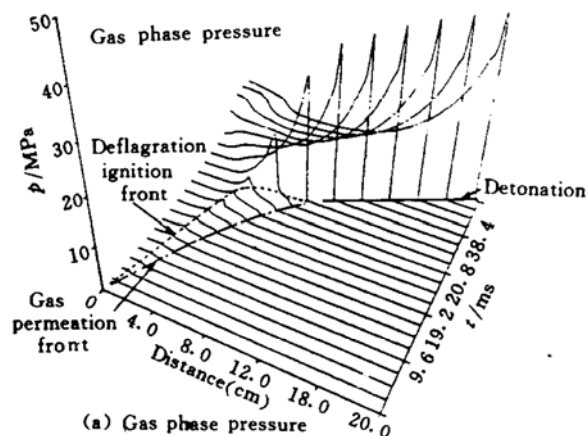


Fig. 4 Pressure wave profiles in
DDT for 95% dense HMX

(a) Gas-phase pressure (b) Solid-phase pressure

参 考 文 献

- 1 Bernecker R R. The deflagration to detonation transition process for high energy propellants a review. AIAA J, 1986, 24 (1): 82~91
- 2 Bernecker R R et al. Deflagration to detonation transition studies of porous explosive charges in plastic tubes. Proceedings of Seventh Symp. (Int.) on Detonation, Nswc MP 82-334, 1982: 119-138
- 3 Sandusky H W, Liddiard T P. Dynamic compaction of porous beds. AD-A 164 883, or NSWC TR 83-246
- 4 Baer M R. Numerical studies of dynamic compaction of inert and energetic granular materials. J Appl Mech, 1988, 55: 36-43
- 5 Powers J M, Stewart D S, Krier H. Analysis of detonation structure in porous explosives. AD A 204 254
- 6 Baer M R, Nunziato J W. A two-phase mixture theory for the deflagration to detonation transition in reactive granular materials. Int J Multiphase Flow, 1986, 12: 861-889
- 7 Kooker D E. A workshop summary of model predictions of the piston driven compaction experiment. AD-A 213 330
- 8 Kooker D E. Modeling of compaction wave behavior in confined granular energetic material. AD-A 226 435
- 9 Kang J, Butler P B, Baer M R. A thermomechanical analysis of hot spot formation in condensed phase energetic material. Combustion and Flame, 1992, 89: 117-139

- 10 Belmas R et al. A hot spot model based on microstructural pore collapse. *Propellants Explos, Pyrotech*, 1993, 18 (4): 217-222
- 11 Embid P F, Majda A J. An asymptotic theory for hot spot formation and transition to detonation for reactive granular materials. *Combustion and Flame*, 1992, 89: 17-36
- 12 Yang Tao et al. Effects of propellant fracture on the transition from deflagration to detonation transition. *AIAA* 94-3038
- 13 Hesieh T ang Kim K. Numerical simulation of deflagration to detonation transition for TS-3659 propellant. Ninth Symp. (Int.) on Detonation, Portland, Oregon, Preprint, 1989, I: 329-340
- 14 Power J M, Stewart D D, Krier H. Theory of two-phase detonation-part 1: modeling. *Combustion and Flame*, 1990, 80: 264-279
- 15 Elban W L. Quasi-Static compaction study of coarse HMX explosive. *Power Technology*. 1986, 46: 181~193
- 16 杨涛, 金志明, 栗保民. 火药床的准静态压缩研究. *高压物理学报*, 1992, 6 (2): 136-142
- 17 CARroll M M, Holt A J. Static and dynamic pore-collapse relations for ductile porous materials. *Applied Physics*, 1972, 43 (4): 1627~1636
- 18 杨涛, 金志明. 高密实颗粒床燃烧转爆轰的数值模拟. *推进技术*, 1994 (6): 76-82
- 19 杨涛, 金志明. 发射药颗粒床中对流燃烧的实验研究. *航空动力学报*, 1994, 9 (4): 282-386



缩尺超燃冲压发动机的初始试验

给出了日本国家航空航天实验室缩尺超燃冲压发动机初始试验结果。这些试验是在日本国航空航天实验室的角田研究中心 (NAL-KRC) 的冲压发动机试验设备 (RJTF) 上, 以 $M=4$ 和 $M=6$ 的模拟飞行状态进行。燃料用等离子点火器成功地点燃, 并在 $M=4$ 的状态下维持稳定燃烧。可是, 对于 $M=6$ 的状态, 只是部分地获得燃烧。试验结果包括壁压测量和壁温测量, 用测力系统和视频观察获得的推力、升力和力矩测量。讨论了由这些结果导出的发动机的工作特性和性能。

龙玉珍供稿