

化学爆炸条件下钚气溶胶扩散数值模拟

霍勇刚¹, 姚弘毅¹, 蔡幸福¹, 姜仁强², 路志勇³

(1. 火箭军工程大学, 陕西 西安 710025;

2. 火箭军装备部驻绵阳地区第二代表室, 四川 绵阳 621700;

3. 96921 部队, 北京 100015)

摘 要: 为了更加准确地描述化学爆炸后钚气溶胶的扩散过程以及分布规律, 在化学爆炸过程仿真计算的基础上, 建立了化学爆炸源项简化模型, 提出了基于稠密离散相模型 (Dense Discrete Phase Model, DDPM) 的仿真方法。通过比对 Green Field 2 实验数据验证了方法的准确性, 开展了化学爆炸条件下钚气溶胶的扩散行为数值模拟, 讨论了钚气溶胶颗粒分布规律以及压力、速度的变化规律。结果表明: 钚气溶胶扩散分布呈现蘑菇云状, 粒径较大颗粒集中在烟云茎部或地面, 粒径较小颗粒集中在烟云内部及顶部; 化学爆炸后烟云内压力变化主要在 0.1 s 以前, 烟云中心线上呈上升涡环状; 颗粒速度分布呈喷涌状, 并在激波到达时迅速达到最大值, 而后缓慢下降。

关键词: 钚气溶胶; 稠密离散相模型; 源项; 气溶胶颗粒; 气溶胶扩散

中图分类号: TJ410

文献标志码: A

文章编号: 2097-2741(2024)02-025-007

Numerical Simulation of Plutonium Aerosol Diffusion after Chemical Explosion

HUO Yonggang¹, YAO Hongyi¹, CAI Xingfu¹,

JIANG Renqiang², LU Zhiyong³

(1. Rocket Force University of Engineering, Xi'an 710000, Shaanxi;

2. 2nd Representative Office, Armament Department of Rocket Force Stationed in Mianyang, Mianyang 621700, Sichuan;

3. Troops No.96921, Beijing 100015)

ABSTRACT: In order to describe the diffusion process and distribution law of plutonium aerosol after chemical explosion more accurately, a simplified model of chemical explosion source term was established based on the simulation calculation of chemical explosion process. Consequently, a simulation method based on dense discrete phase model (DDPM) was proposed. The accuracy of the method was verified by comparing with experimental data of Green Field 2. Then, the numerical simulation of the diffusion behavior of plutonium aerosol after chemical explosion was carried out to study the distribution law of plutonium aerosol particles and the variation. Results showed that the plutonium aerosol particles diffuse in a mushroom cloud shape. The larger particles are concentrated in the stem of the smoke cloud or on the ground, while the smaller particles

收稿日期: 2024-02-21

第一作者: 霍勇刚 (1975—), 男, 副教授, 主要从事辐射防护研究。E-mail: huoarmy@163.com。

引用格式: 霍勇刚, 姚弘毅, 蔡幸福, 等. 化学爆炸条件下钚气溶胶扩散数值模拟[J]. 火箭军工程大学学报, 2024, 38 (2): 25-31.

are concentrated in the interior and top of the smoke cloud. The pressure mainly changes within the first 0.1 s after the explosion, and an upward vortex ring appears in the center line. The particle velocity distribution is gushing. The velocity reaches the maximum rapidly when the shock wave arrives, and then decreases slowly.

KEYWORDS: plutonium aerosol; DDPM; source term; aerosol particles; aerosol diffusion

炸药包裹钚材料在发生化学爆炸（化爆）时，由于高温高压，其中的钚会气溶胶化并形成放射性烟云。钚气溶胶被人体吸入肺中会导致 α 内照射，产生致命危害^[1]。针对化学爆炸的典型实验研究有美国的 Operation Roller Coaster (ORC) 实验^[2]以及以色列的 Green Field (GF) 实验，其中，ORC 实验的主要研究内容为钚气溶胶扩散，GF 实验主要研究爆炸烟云扩散过程。由于 ORC 实验烟云上升数据不全，因此，常采用 GF 实验的烟云爆高数据对建立的模型进行验证，引用 ORC 实验的钚气溶胶粒径质量分布等信息。

钚气溶胶从形成到扩散可以分为 3 个过程：爆轰条件下钚气溶胶形成阶段、钚气溶胶烟团形成与上升阶段、钚气溶胶大气扩散阶段^[3]。目前，对第 3 阶段，可以运用高斯扩散模型^[4]、拉格朗日扩散模型^[5]、气象预测模型^[6]等手段进行模拟研究。袁涛等^[7]利用 Autodyn 软件对第 1 阶段进行了爆轰过程模拟，并建立了化爆源项模型。段中山等^[8]利用 Fluent 对化爆烟云进行了仿真模拟，并结合烟云扩散数据进行对比。郝海彤等^[9]利用 OpenFOAM 软件对爆炸烟云流场进行了模拟研究。不同于其他气溶胶粒子，钚气溶胶具有质量大、粒径大的特点，且在烟云初始形成阶段的气溶胶体积分数较大，粒子之间相互作用明显，离散相模型 (Discrete Phase Model, DPM) 已不能准确描述初期钚气溶胶扩散情况。而稠密离散相模型 (Dense DPM, DDPM) 考虑了颗粒间相互作用以及颗粒与流体作用^[10]，更适合化学爆炸条件下的钚气溶胶扩散模拟研究。

为了更准确研究化爆条件下钚气溶胶扩散过程，本文基于 Autodyn 软件对化爆初始阶段进行仿真，并构建了简化源项模型，对 DDPM 模型用于本问题的可行性进行验证。而后利用 DDPM 模型对化爆条件下钚气溶胶扩散情况进行数值模拟。

1 计算模型

DDPM 模型是一种混合欧拉-拉格朗日多相模

型。该模型考虑了颗粒之间的相互作用及颗粒与流体间的作用，通过碰撞模型来代替 DPM 模型中的软球模型。在欧拉框架下处理气相运动，求解包含两相体积分数的 Navier-Stokes 方程；在拉格朗日框架下处理颗粒相运动；颗粒-颗粒相互作用基于颗粒流动力学理论 (Kinetic Theory of Granular Flow, KTGF)。

1.1 连续相控制方程

化爆气溶胶扩散过程中的连续相为空气，其运动可以通过 Navier-Stokes 方程描述为

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_g \rho_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g) &= \\ -\alpha_g \nabla p + \nabla (\bar{\tau}_g) + \varepsilon \rho_g \mathbf{g} + K_{gs} (\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_g) \end{aligned}$$

式中： α_g 为气体体积分数； ρ_g 为气体密度； p 为压力； $\mathbf{v}_g$ 和 $\mathbf{v}_s$ 为气体和颗粒速度； t 为时间； $\bar{\tau}$ 为黏性应力项； $\mathbf{g}$ 为重力矢量； K_{gs} 为空气与粒子间的动量交换系数； ε 为湍流模型的湍动能耗散率。

1.2 离散相控制方程

本文中的离散相为钚气溶胶颗粒，需要通过求解拉格朗日坐标系下基于牛顿第二定律的控制方程来获得粒子运动情况：

$$\begin{aligned} m_s \frac{d\mathbf{v}_s}{dt} &= m_s \frac{\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s}{\tau_r} + m_s \frac{\mathbf{g} (\rho_s - \rho_g)}{\rho_s} + \mathbf{F} \\ \tau_r &= \frac{\rho_s d_s^2}{18 \mu_g C_D Re_s} \\ Re_s &= \frac{\rho_g d_s |\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_g|}{\mu_g} \end{aligned}$$

式中： m_s 为粒子质量； ρ_s 为粒子密度； $\mathbf{F}$ 为颗粒间相互作用力； τ_r 为粒子弛豫时间； Re_s 为相对雷诺数； d_s 为粒子直径； μ 为连续相黏度； C_D 为阻力系数。

1.3 曳力模型

曳力是气相和固相间的重要作用力，主要作用为传递两相间的动量。Gidaspow 模型是一种描述流固交换系数的曳力模型，是 Wen and Yu 模型与 Ergun 方程的结合^[11]，表达式为

$$K_{gs} = \begin{cases} \frac{3}{4} C_D \frac{\alpha_s \alpha_g \rho_g |v_s - v_g|}{d_s} \alpha_g^{-2.65}, & \alpha_s \leq 0.2 \\ 150 \frac{\alpha_s (1 - \alpha_g) \mu_g}{\alpha_g d_s^2} + \\ 1.75 \frac{\rho_g \alpha_s |v_s - v_g|}{d_s}, & \alpha_s > 0.2 \end{cases}$$

$$C_D = \frac{24}{\alpha_g Re_s} [1 + 0.15 (\alpha_g Re_s)^{0.687}]$$

式中: K_{gs} 为流固交换系数。

2 化爆源项仿真计算

化爆后气溶胶扩散模拟需要化爆源项分布作为初始输入。炸药发生化学爆炸并压缩内部钆材料形成钆气溶胶的过程是一个复杂且快速的过程^[12]。本文采用 TNT 炸药在地面爆炸的模拟数据作为简化, 仿真得到化爆 1 ms 后的源项分布。

2.1 爆炸源项仿真

利用 Autodyn 软件对 2D Euler 空气-TNT 模型求解, 得到 TNT 爆炸发生 1ms 时源项的压力、速度、密度分布情况。

2D Euler 空气-TNT 模型参数如下: (1) 空气域范围为 4 m × 8 m, 气压为 101 325 Pa, 比内能为 206 800 J/kg; (2) 球体 TNT 装药, 炸药密度为 1 630 kg/m³, 半径为 0.113 m; (3) 以化爆中心地面投影点为原点, x 方向为水平方向, y 为垂直地面方向。

2.2 仿真结果及模型构建

对二维化爆源项进行仿真, 结果如图 1 所示。

可以看出, 在 $t = 1$ ms 时, 爆炸的压力、密度、速度分布都出现了较为明显的双层结构。其中, 内层为负压环境, 外层为超压环境。

根据图 1 化爆源项的分布特征, 构建如图 2 所示化爆源项简化模型, 模型基本参数如表 1 所示。

3 模型验证

由于针对钆材料化爆开展的研究较少, 因此, 本文基于 2006 年至 2009 年在以色列进行的爆炸烟云实验, 即 Green Field 系列实验得到的爆炸烟云数据^[13]对化爆气溶胶仿真模型进行验证。其中, GF2 实验对 2 kg、5 kg、10 kg、20 kg 和 50 kg TNT 的爆炸烟云数据进行了收集。

使用 DDPM 方法在化爆源项简化模型的基础上对 10 kg TNT 爆炸后的烟云上升过程进行仿真。

结果与 GF2 实验的烟云高度对比如图 3 所示。

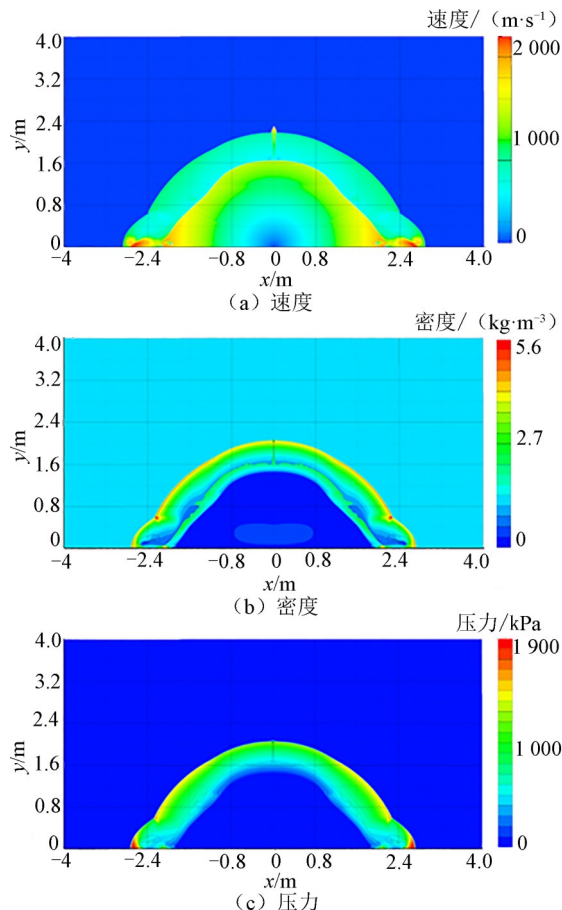


图 1 $t = 1$ ms 时的化爆源项分布

Fig. 1 $t = 1$ ms, the chemical explosion source term distribution

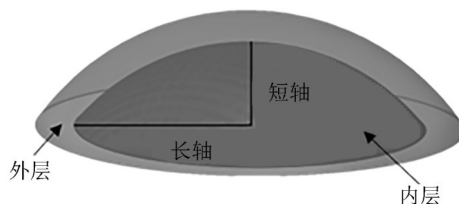


图 2 化爆源项简化模型

Fig. 2 Simplified model of explosion source term

表 1 化爆源项简化模型参数

Tab. 1 Parameters of chemical explosion source term simplified model

位置	长轴/mm	短轴/mm	压力/kPa	速度/(m·s ⁻¹)
内层	2 000	1 500	20	1 500
外层	2 500	1 800	1 000	1 000

由图 3 可以看出, 仿真所得烟云高度与 GF2 实验的数据基本一致。将化爆烟云气溶胶扩散仿真结果与 GF2 实验数据进行独立样本 T 检验, 检验结果为 $t = 0.533$, 处于 $[-2.04, 3.11]$ 的 95% 置

信区间,验证了本文构建的化爆烟云气溶胶仿真模型比较准确。

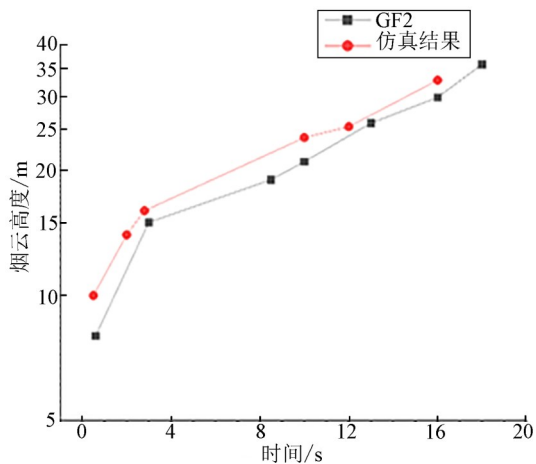


图 3 仿真结果与 GF2 实验烟云高度对比

Fig. 4 Comparison of simulation results and GF2 experiment results of the cloud height

4 数值模拟设置

4.1 计算模型设置

计算域设置为底面直径 100 m、高 100 m 的圆柱体区域,化爆源项模型位于底部中心。整体采用六面体结构化网格,空气域网格边长为 0.75 m。由于爆炸源项仿真结果显示内层与外层密度之比为 1:10,因此,调整源项模型内外层网格数之比为 3 460:33 986。计算域网格设置见图 4。

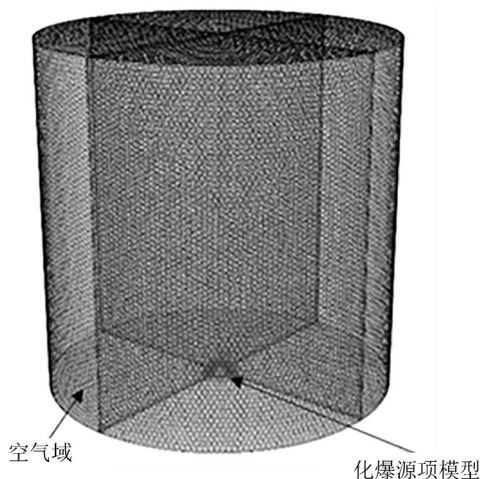


图 4 计算域网格设置

Fig. 4 Computing domain grid settings

4.2 粒子参数及边界参数

设置钚气溶胶粒子的密度为 $1.8 \times 10^7 \text{ kg/m}^3$,粒径为 $1 \sim 200 \mu\text{m}$,质量流量为 $1 \times 10^2 \text{ kg/s}$ 。粒子

粒径分布采用 Rosin-Rammler 分布^[14],用下式描述粒径与质量分数的关系

$$Y_d = \exp(-d/\bar{d})^n$$

式中: $\bar{d}$ 为平均粒径; n 为尺寸分布指数。

ORC 实验中钚气溶胶粒径的积累质量分布^[15]如图 5 所示,且实验中钚气溶胶释放率 (Aerosol Release Fraction, ARF) 为 100%^[16]。

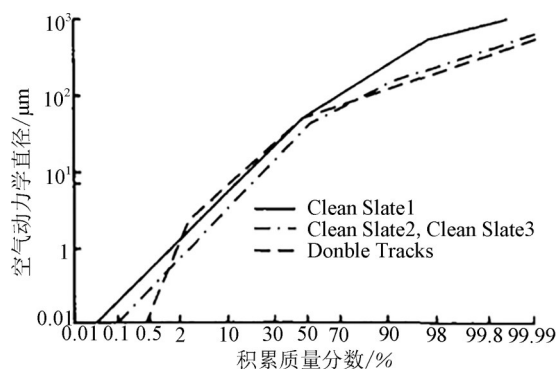


图 5 ORC 实验钚气溶胶粒径的积累质量分布^[15]

Fig. 5 Accumulated mass distribution of plutonium aerosol particle size in ORC^[15]

根据 ORC 实验中的钚气溶胶粒径数据,假设仿真中钚材料全部气溶胶化,气溶胶粒径范围设置为 $1 \sim 200 \mu\text{m}$ 。初始空气域气压为标准大气压,密度为 1.29 kg/m^3 ,采用理想气体状态方程描述。离散相释放源为构建的化爆源项简化模型。

5 仿真结果

基于上述化爆简化模型及计算模型设置,对化爆后钚气溶胶扩散过程进行仿真计算,并对钚气溶胶颗粒分布、计算域压力分布以及粒子速度分布进行分析。

5.1 颗粒分布

不同粒径的钚气溶胶颗粒在扩散过程中由于体积与质量的影响会扩散至不同的区域。图 6 为不同粒径的钚气溶胶在化爆后不同时刻的分布情况。

由图 6 可以看出:在钚气溶胶扩散的初期,粒径大 (粒径 $\geq 50 \mu\text{m}$) 的颗粒由于质量较大、动量较大的原因,会迅速向外扩散;粒径小 (粒径 $< 50 \mu\text{m}$) 的颗粒扩散距离较小,主要在烟云内部运动,由于受到负压涡环的影响,一部分从底部开始翻滚上升,另一部分跟随近地面湍流向外扩散。

爆炸开始 5 s 后,粒径大的颗粒受重力影响的沉降作用开始显现,粒径 $> 120 \mu\text{m}$ 的粒子直接从

半空中开始沉降, 粒径 $\leq 120 \mu\text{m}$ 跟随烟云上升一段时间后从烟云茎部沉降, 粒径 $\leq 60 \mu\text{m}$ 的粒子则继续开始缓慢上升和扩散运动。

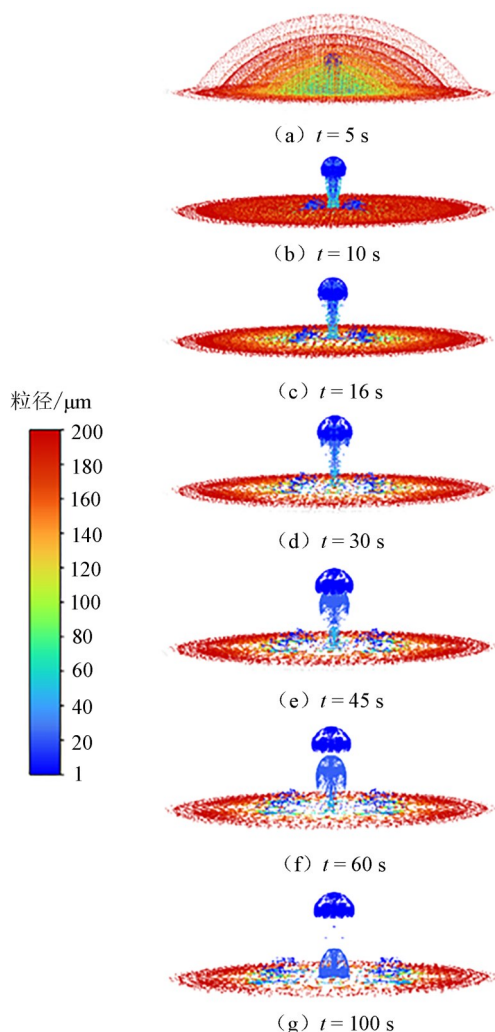


图6 不同时刻钚气溶胶粒径分布

Fig. 6 Plutonium aerosol particle size distributions at different times

30 s后, 在烟云上升部分, 粒径 $> 10 \mu\text{m}$ 的颗粒停止上升并逐渐沉降; 粒径 $\leq 10 \mu\text{m}$ 的颗粒则继续上升, 但上升速度持续放缓, 烟云形成分层。

5.2 压力分布

选取化爆中心点正上方 1 m、3 m、5 m、20 m 处作为观察点。图7为各观察点的压力随时间变化情况。可以看出, 压力变化的过程主要集中在 0.1 s 以前, 而后压力逐渐达到平衡。图8为计算域在不同时刻的相对压力分布。

可以看出, 在气溶胶扩散初始阶段, 爆炸产生的负压区逐渐上升, 并在中心轴两侧形成了涡环, 这也是烟云顶部蘑菇云形状形成的原因。压

力变化是烟云上升及气溶胶扩散的重要因素, 具有时间尺度短、变化快的特点。

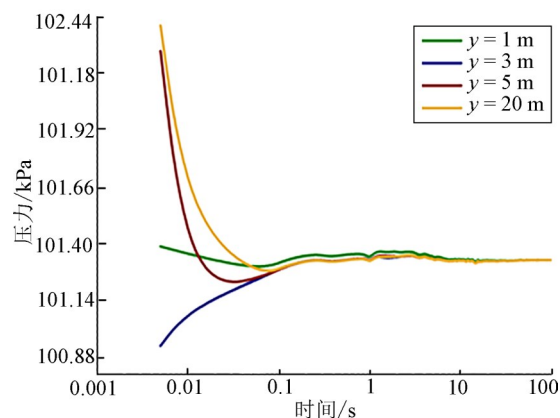


图7 各观察点压力随时间变化曲线

Fig. 7 Change curves of pressure with time at each observation point

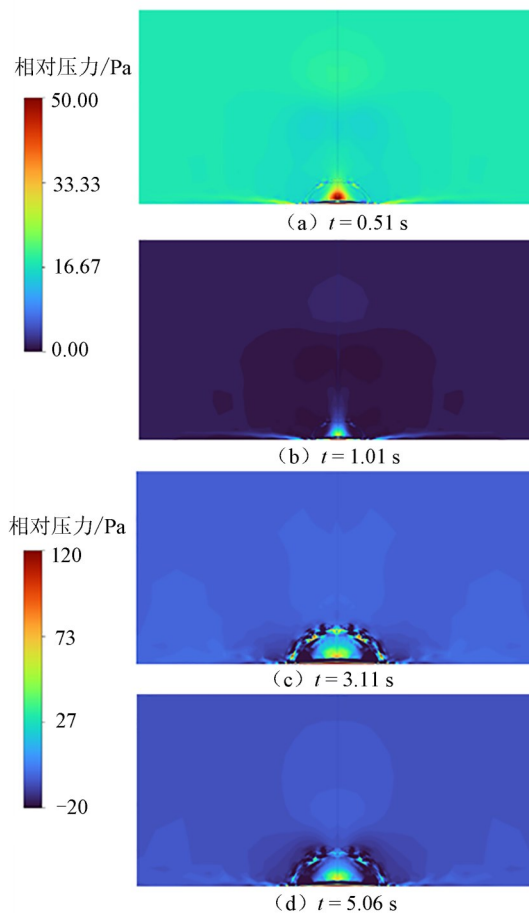


图8 不同时刻相对压力分布

Fig. 8 Relative pressure distribution at different times

5.3 速度分布

图9为各观察点气溶胶粒子速度随时间变化情况。可以看出, 各观察点气溶胶粒子的速度分布

体现为源项模型以外的空气域距离源项较近的观察点速度更大,爆炸的激波到达时速度迅速达到最大,而后缓慢下降。

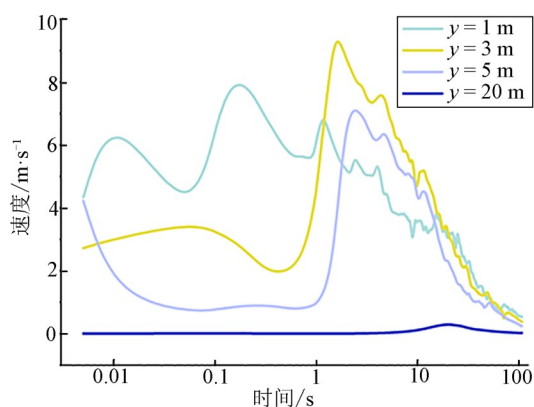


图 9 各观察点粒子速度随时间变化

Fig. 9 Changes of velocity with time at each observation point

发生化爆后,各时刻速度分布如图 10 所示。

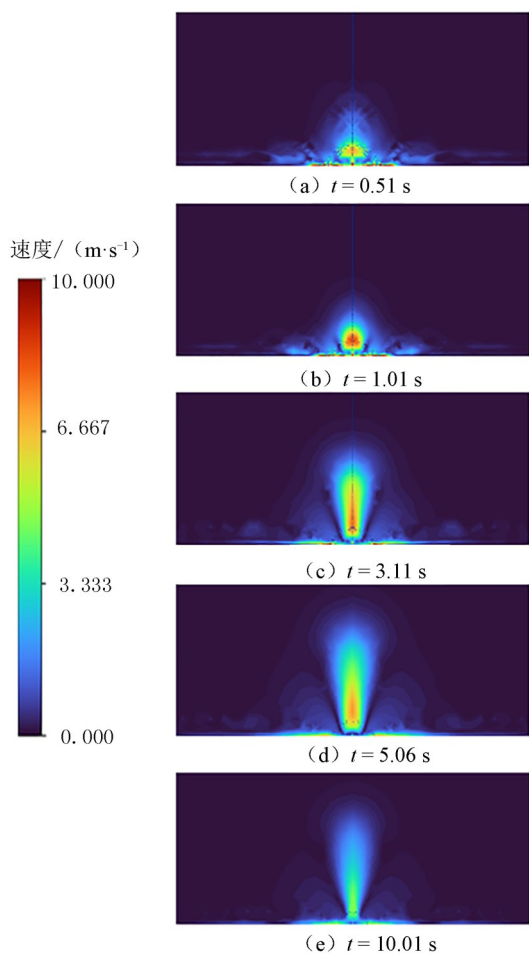


图 10 不同时刻的粒子速度分布

Fig. 10 Velocity distribution at different times

可以看出,在烟云形成及上升的过程中,烟云内部的气溶胶速度显著大于顶部及底部的气溶胶速度。这也是烟云上升的重要原因。10 s后颗粒速度逐渐减小,烟云上升速度也逐渐放缓。

6 结论

在化爆源项仿真计算的基础上,构建了化爆源项简化模型。通过 DDPM 模型对爆炸烟云上升过程进行了模拟,结果与 GF 实验数据基本一致,说明本文源项模型和模拟方法正确。基于 DDPM 模型对化爆条件下钚气溶胶的初期扩散进行了数值模拟。得出结论如下:钚气溶胶扩散分布呈现出显著的蘑菇云形状,其中,粒径较大的颗粒集中在烟云茎部或迅速沉降至地面,粒径较小颗粒集中在烟云顶部;化爆后压力变化主要在 0.1 s 以前;扩散初期源项中心的负压区上升并形成涡环结构;上升中颗粒的速度分布呈喷涌状,并在激波到达时速度迅速达到最大,而后缓慢下降。

参考文献:

- [1] MIAN Z, RAMANA M V, RAJARAMAN R. Plutonium dispersal and health hazards from nuclear weapon accidents[J]. Current Science, 2001, 80(10): 1275-1284.
- [2] STEELE C M, WALD T L, CHANIN D I. Plutonium explosive dispersal modeling using the MACCS2 computer code[R]. Los Alamos, NM, USA: Los Alamos National Lab.(LANL), 1998.
- [3] BROWN R C, KOLB C E, Conant J A, et al. Source characterization model (SCM): A predictive capability for the source terms of residual energetic material from burning and/or detonation activities: ART-RR-1384[R]. MA, USA: Cambridge, 2004.
- [4] 唐秀欢, 杨宁, 包利红, 等. 核武器运输炸药爆炸事故气溶胶扩散数值模拟[J]. 安全与环境学报, 2014, 14(1): 142-148.
TANG X H, YANG N, BAO L H, et al. Numerical simulation of aerosol dispersion with the explosive's detonation in the process of nuclear weapon transportation[J]. Journal of Safety and Environment, 2014, 14(1): 142-148.
- [5] HASZPRA T. Time-reversibility in atmospheric dispersion[J]. Atmosphere, 2016, 7(1): 11.

- [6] ARTHUR R S, LUNDQUIST K A, MIROCHA J D, et al. Simulating nuclear cloud rise within a realistic atmosphere using the Weather Research and Forecasting model[J]. *Atmospheric Environment*, 2021, 254: 118363.
- [7] 袁涛, 罗永锋, 尚爱国, 等. 爆炸烟云中粒子运动的数值模拟[J]. *爆炸与冲击*, 2013, 33(5): 556-560. YUAN T, LUO Y F, SHANG A G, et al. Numerical study on particle motion in explosion buoyant puff[J]. *Explosion and Shock Waves*, 2013, 33(5): 556-560.
- [8] 段中山, 过惠平, 冯孝杰, 等. 爆炸烟云扩散的时空分布模型及特性[J]. *爆炸与冲击*, 2019, 39(5): 84-91. DUAN Z S, GUO H P, FENG X J, et al. Temporal and spatial distribution models of explosive cloud diffusion and their characteristics[J]. *Explosion and Shock Waves*, 2019, 39(5): 84-91.
- [9] 郝海彤, 刘伟, 郑毅, 等. 基于OpenFOAM的爆炸烟云扩散模拟研究[J]. *核电子学与探测技术*, 2022, 42(4): 739-744. HAO H T, LIU W, ZHENG Y, et al. Simulation of explosive cloud diffusion based on OpenFOAM[J]. *Nuclear Electronics & Detection Technology*, 2022, 42(4): 739-744.
- [10] POURARIA H, DARIHAKI F, PARK K H, et al. CFD modelling of the influence of particle loading on erosion using dense discrete particle model[J]. *Wear*, 2020, 460-461: 203450.
- [11] GIDASPOW D, LI F, HUANG J A. CFD simulator for multiphase flow in reservoirs and pipes[J]. *Powder Technology*, 2013, 242: 2-12.
- [12] TURNER J S. Buoyant plumes and thermals [J]. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 1969, 1(1): 29-44.
- [13] SHARON A, HALEVY I, SATTINGER D, et al. Cloud rise model for radiological dispersal devices events[J]. *Atmospheric Environment*, 2012, 54: 603-610.
- [14] VESILIND P A. The Rosin-Rammler particle size distribution[J]. *Resource Recovery and Conservation*, 1980, 5(3): 275-277.
- [15] 刘文杰, 胡八一, 李庆忠. 核事故条件下钚气溶胶源项研究综述[J]. *安全与环境学报*, 2011, 11(5): 259-263. LIU W J, HU B Y, LI Q Z. Review of plutonium aerosol source-term in nuclear accident[J]. *Journal of Safety and Environment*, 2011, 11(5): 259-263.
- [16] STEPHENS D R. Source terms for plutonium aerosolization from nuclear weapon accidents[R]. Livermore, CA, USA: Lawrence Livermore National Lab.(LLNL), 1995.

通信作者及其研究团队介绍

霍勇刚, 男, 博士, 1975年生。火箭军工程大学副教授, 硕士生导师, 主要研究方向为辐射防护与核安全。现为中国辐射物理学会理事。获军队科技进步二等奖2项, 三等奖3项, 国家发明专利5项; 获国家教学成果二等奖1项, 军队优秀教学成果一等奖1项; 出版学术专著1部, 被SCI、EI等检索的学术论文20余篇。