

玉米粉-氧气混合物中 爆轰波的数值模拟

刘晓利 李鸿志

(南京理工大学 南京 210014)

摘要 建立了描述可燃粉尘-氧气混合物爆轰波的一维两相反应流模型,用 MacCormack 有限差分格式求解了控制方程,成功地模拟了玉米粉-氧气混合物在氢-氧爆轰驱动下爆轰波的传播过程,其数值结果在接近稳态爆轰区时与实验规律有良好的一致性。

关键词 燃烧 爆轰 粉尘爆炸 数值模拟

引言

工业粉尘爆炸事故的频频发生,迫使人们致力于对其发生、发展过程及其影响因素的探索。近二十年来,国内外许多学者在理论与实验方面做了大量工作,尤其是1989年张帆^[1]利用氢氧爆轰驱动首次实现玉米粉-氧气混合物螺旋爆轰更是令人鼓舞。实验工作的成功激励着理论研究的加速。近年来,有学者进行了若干数值分析工作。1985年,Denz Lee^[2]对一维粉尘爆轰波结构进行了数值计算,他采用定常流方法,求解一组常微分方程,用以分析气固两相通过激波以后的松弛效应及其基本参数。1989年,Olim 等人^[3]采用 FCT 格式对碳-氧混合物的一维非定常两相反应流进行了数值计算,但该计算尚未达到爆轰。

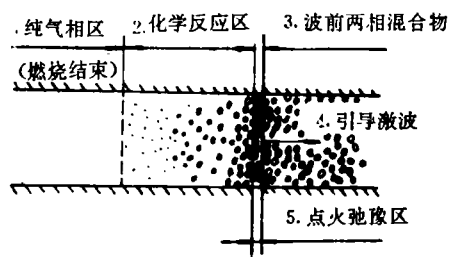
七十年代中期以来,军事领域对含能材料的燃烧转爆轰(DDT)过程的研究十分活跃,尤其是以 Krier^{[4]~[9]}为主要代表的双连续假设两相分离流模型,采用 Lax-Wendroff、MacCormack、MOL 等格式通过许多合作者十余年努力对 DDT 完成了许多成功计算。

对于工业粉尘爆轰过程,是否可以借鉴这种方法进行数值分析?作者首次尝试的结果表明,这种方法可以用于可燃粉尘爆轰波的数值模拟。

2 物理模型与基本方程

2.1 物理模型

可燃粉尘的爆轰过程是一个极为复杂的、带化学反应的多相超音速流动过程,虽然粉尘的燃烧与含能材料的燃烧在许多方面有相当大差异,但又有一些共同的力学特征,从点火燃烧开始,能量不断释放,压力波不断加强,最后发展为稳定的爆轰波。这一过程伴随着复杂的非定常、非均相、非平衡的传热、传质、对流、辐射及多相多级化学反应;包含着颗粒的蒸发、挥发、扩散及湍流运动等;如果再考虑爆轰波的结构,则实际问题又将是三维问题(如螺旋结构)。因此,目前的研究只能是在极为简化的条件下对某些基本特征进行考察,



1. Gas-phase zone; 2. Reaction zone;
3. Two-phase mixture zone;
4. Precursor shock; 5. Ignition relaxation

图1 爆轰结构简图

Fig. 1 Detonation wave structure

2.2 基本方程

2.2.1 控制方程

根据上述物理模型,可以写出一维两相反应流的控制方程组如下:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varphi_g \rho_g) + \frac{\partial}{\partial x}(\varphi_g \rho_g u_g) = \Gamma \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varphi_p \rho_p) + \frac{\partial}{\partial x}(\varphi_p \rho_p u_p) = -\Gamma \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varphi_g \rho_g u_g) + \frac{\partial}{\partial x}[\varphi_g (\rho_g u_g^2 + p)] = \Gamma u_p - D \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varphi_p \rho_p u_p) + \frac{\partial}{\partial x}[\varphi_p (\rho_p u_p^2 + p)] = -\Gamma u_p + D \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}[\varphi_g \rho_g (e_g + \frac{1}{2} u_g^2)] + \frac{\partial}{\partial x}(\varphi_g \rho_g u_g (e_g + \frac{1}{2} u_g^2 + \frac{p}{\rho_g})) \\ = \Gamma (E_{ch} + \frac{1}{2} u_p^2) - D u_p - Q \end{aligned} \quad (5)$$

$$\varphi_g + \varphi_p = 1 \quad (6)$$

其中: φ 为体积分数; ρ 为材料密度; u 为速度; p 为压力; e 为比内能; Γ 为相间质量交换; D 为相间阻力; Q 为相间传热; E_{ch} 为颗粒燃烧释放出的化学能;下标g、p分别为气相和固相。

2.2.2 辅助方程

(1) 状态方程

对于粉尘爆轰情况,最大压力一般在1~10MPa量级上,它对颗粒材料的压缩性可以忽略;固相体积分数在 10^{-3} ~ 10^{-4} 量级,超稀疏的固体颗粒对压力的贡献可以忽略,因此两相混合物的状态方程用气相状态方程代替

为此,我们建立如图1所示的物理模型,其主要假设如下:

(1)流动是一维非定常两相流,即把固体颗粒看作一种伪流体,相间质能交换仅发生在界面上,忽略湍流作用。

(2)粉尘为光滑无孔球形,尺度相同,并均匀地分布于气相之中;其点火判据是表面温度达到点火温度;其燃烧服从缩球模型,燃速符合Arrhenius公式描述的反应速率。

(3)反应产物为纯气相,即忽略灰份影响,因此化学反应方程如下:

燃料+氧气 $\Rightarrow$ 气体产物+反应热

(固) (气) (气)

(4)由于工业悬浮粉尘的浓度非常低(一般小于 10^{-2} g/cm³),因此,忽略颗粒之间的相互作用。

$$p = R\rho_g T_g \quad (7)$$

(2) 相间质量交换

假设颗粒为球形,忽略尺寸分布及灰份影响,则所燃烧的固相质量全部转化为气相,且可用单一颗粒的燃烧速度 $\dot{r}$ 来表示相间质量交换,于是单位时间单位体积内的气体生成量 Γ 为

$$\Gamma = 6\varphi_p \rho_p \dot{r} / d_p \quad (8)$$

式中: d_p 为颗粒直径; $\dot{r}$ 为颗粒线燃速。

(3) 颗粒线燃速

颗粒线燃速服从 Arrhenius 公式

$$\dot{r} = A \left[\frac{\sigma_{O_2}}{(\sigma_{O_2})_0} \right]^{s_1} \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (9)$$

其中: σ_{O_2} 为氧气浓度; E/R 为活化能; A, s_1 为燃烧参数。

(4) 相间阻力

$$D = \frac{\varphi_p}{\varphi_g} \cdot \frac{\rho_g |u_g - u_p| (u_g - u_p)}{d_p} C_f \quad (10)$$

其中,摩擦系数

$$C_f = 1.75 + 150 \frac{\varphi_p}{\varphi_g} \frac{1}{Re_p} \quad (11)$$

雷诺数

$$Re_p = \frac{d_p \rho_g |u_g - u_p|}{\mu_g} \quad (12)$$

μ_g 是气体粘性。

(5) 相间传热

只考虑对流换热形式,单位时间、单位体积内两相热交换为

$$Q = \frac{6}{d_p} \varphi_p h (T_g - T_{ps}) \quad (13)$$

其中:换热系数

$$h = (k_f / d_p) N_{up} \quad (14)$$

努谢尔系数

$$N_{up} = 2 + 0.4 Re_p^{0.7} Pr^{0.33} \quad (15)$$

Pr 为普朗特数, k_f 为导热系数。

(6) 颗粒表面温度

$$T_{ps} = T_{ps}^0 + (T - T_{ps}^0) \left[1 - e^{(h/k_f)^2 a_1 t} \left(1 - \frac{h}{k_f} \sqrt{a_1 t} \right) \right] \quad (16)$$

其中: T_{ps}^0 为颗粒初始表面温度; k_f, a_1 分别为导热系数和导温系数。

于是,我们建立起了能够求解 $\rho_g, \rho_p, u_g, u_p, T, T_{ps}, p, \Gamma, D, Q$ 十个变量的封闭方程组,结合具体的初边值条件便可进行求解。

3 数值模拟方法

3.1 差分格式

采用 MacCormack 预估校正两步显格式进行差分求解。将控制方程组(1)~(5)写成矢

量形式

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} = H \quad (17)$$

预估步:
$$U_j^{\bar{n}+1} = U_j^* - \frac{\Delta t}{\Delta x} [F_{j+1}^* - F_j^*] + \Delta t H_j^* + S_j^* \quad (18)$$

校正步:
$$U_j^{\bar{n}+1} = U_j^{\bar{n}+1} - \frac{\Delta t}{\Delta x} [F_{j+1}^{\bar{n}+1} - F_j^{\bar{n}+1}] + \Delta t H_j^{\bar{n}+1} + S_j^{\bar{n}+1} \quad (19)$$

最后:
$$U_j^{\bar{n}+1} = \frac{1}{2} [U_j^* + U_j^{\bar{n}+1}] \quad (20)$$

人工粘性:
$$S_j = C \cdot \left| \frac{\rho_{g,j+1} - 2\rho_{g,j} + \rho_{g,j-1}}{\rho_{g,j+1} + 2\rho_{g,j} + \rho_{g,j-1}} \right| \cdot (U_{j+1} - 2U_j + U_{j-1}) \quad (21)$$

C 为常数。

3.2 稳定性条件

两相混合物流动的 CFL 稳定性条件表示为

$$\{|u| + C_m\}_{\max} < \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad (22)$$

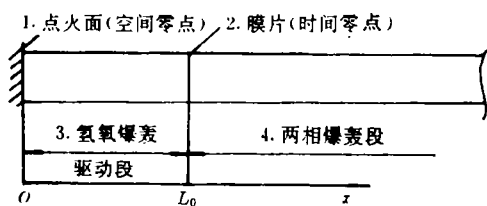
式中混合物音速由 Wallis^[10]给出公式

$$C_m = \left\{ [\varphi_g \rho_g + \varphi_s \rho_s] \left[\frac{\varphi_g}{\rho_g C_p^2} + \frac{\varphi_s}{\rho_s C_s^2} \right] \right\}^{-1/2} \quad (23)$$

由此确定时间步长

$$\Delta t = \frac{K \Delta x}{\{|u| + C_m\}_{\max}} \quad (24)$$

3.3 边界条件



1. Ignition plane ($x=0$); 2. Diaphragm ($t=0$);
3. H_2-O_2 detonation initiation section;
4. Two-phase detonation section

图2 计算区域简图

Fig. 2 Calculation zone

为了模拟文献[1]玉米粉-氧气爆轰的物理过程,可将氢氧爆轰驱动段与两相爆轰实验段连为一体考虑,以消除驱动段在破膜之后的非定常流动过程对实验段的影响,如图2所示。因此,计算域的左边界延伸到封闭端,其参量可用镜面反射法求得。右边界可根据计算区域大小的需要设置为自由出流边界。当波阵面到达时,全场计算完毕。

3.4 初始条件

当计算域内含有氢氧爆轰(纯气相)驱动段时,若要从气相爆轰点火之时开始,先计算气相爆轰,再计算两相爆轰,其困难太大,且不是我们主要目的。这里,可以将气相爆轰结束、驱动段端部破膜时作为计算起始时刻。为此,可以假设气相爆轰段的终态压力、密度、温度为均匀分布,速度为线性分布,其数值由破膜激波强度确定;同时为了保持全域计算固相的连续性,在气相爆轰段也设有固相颗粒,但体积分数小到对该区域的影响可以忽略。据此,初始条件为:

(1) 氢氧爆轰驱动段

氢氧爆轰段初始分布由文献[11]给出。

$$p(x, 0) = \left(\frac{1}{3} + \frac{2}{3} \frac{x}{L_0} \right)^3 p_2 \quad \left(\frac{1}{2} < \frac{x}{L_0} \leq 1 \right) \quad (25)$$

$$p_g(x, 0) = \left(\frac{1}{3} + \frac{2}{3} \frac{x}{L_0} \right) \rho_{g2} \quad \left(\frac{1}{2} < \frac{x}{L_0} \leq 1 \right) \quad (26)$$

$$u_g(x, 0) = \left(-1 + 2 \frac{x}{L_0} \right) u_2 \quad \left(\frac{1}{2} < \frac{x}{L_0} \leq 1 \right) \quad (27)$$

$$p(x, 0) = \frac{8}{27} p_2 \quad \left(0 \leq \frac{x}{L_0} \leq \frac{1}{2} \right) \quad (28)$$

$$\rho_g(x, 0) = \frac{2}{3} \rho_{g2} \quad \left(0 \leq \frac{x}{L_0} \leq \frac{1}{2} \right) \quad (29)$$

$$u_g(x, 0) = 0 \quad \left(0 \leq \frac{x}{L_0} \leq \frac{1}{2} \right) \quad (30)$$

$$T(x, 0) = R \rho_g(x, 0) / p(x, 0) \quad (31)$$

$$T_{ps}(x, 0) = T_{ps} \quad (32)$$

$$u_p(x, 0) = 0.5 u_g(x, 0) \quad (33)$$

$$\rho_g(x, 0) = \rho_{g1} \quad (34)$$

$$\varphi_p = 10^{-6}, \varphi_g \approx 1 \quad (35)$$

(2) 两相爆轰段

$$u_g(x, 0) = u_p(x, 0) = 0 \quad (36)$$

$$p(x, 0) = p_1 \quad (37)$$

$$\rho_g(x, 0) = \rho_{g1} \quad (38)$$

$$\rho_p(x, 0) = \rho_{p1} \quad (39)$$

$$T_{ps}(x, 0) = T(x, 0) = T_1 \quad (40)$$

$$\varphi_g(x, 0) = \varphi_{g1} \quad (41)$$

其中: L_0 为氢氧爆轰段的长度, 下标“1”和“2”分别表示激波前和 C-J 值。

(3) 氢氧爆轰 C-J 值由文献[12]给出:

$$D = 2922 \text{ m/s}; \quad p_2 = 2.13 \text{ MPa}; \quad T_2 = 4600 \text{ K}; \quad \rho_2 = 1.002 \text{ kg/m}^3;$$

$$\rho_1 = 0.536 \text{ kg/m}^3; \quad \gamma_2 = 1.149; \quad u_2 = 1360 \text{ m/s}$$

4 计算结果与分析

根据文中提出的模型, 对玉米粉-氧气混合物的爆轰波进行数值模拟。给出主要输入数据如下:

氢氧气爆轰驱动段长 $L_0 = 4.0 \text{ m}$; 两相爆轰段长 $L = 8.0 \text{ m}$; 氧气分子量 $W = 32 \times 10^{-3} \text{ kg/mol}$; 化学能 $E_{ch} = 1.273 \times 10^7 \text{ J/kg}$; 活化能 $E/R = 5800 \text{ K}$; Arrhenius 因子 $A = 8.2 \text{ m/s}$; 气体定压比热 $C_p = 916.9 \text{ J/(kg} \cdot \text{K)}$; 颗粒密度 $\rho_g = 750 \text{ kg/m}^3$; 初始颗粒直径 $d_{p0} = 10 \mu\text{m}$; 初始空隙率 $\varphi_{g0} = 0.99852$, 浓度为 1109 g/m^3 ; 点火温度 $T_{ps} = 750 \text{ K}$ 。

计算结果如图 3~图 10 所示。其中, 图 8~图 10 中, 分别考察了三种粉尘浓度(2000,

1109, 500g/m³)对爆轰波参数的影响,对应的初始空隙率 φ_0 分别为 0.9973, 0.99852, 0.9993;图3~图6的初始空隙率为 0.99852。

4.1 全场概貌

由图3~图8可见,全场参数分布明显地分成驱动段和两相爆轰段两个区域。其中,在驱动段,随着两相爆轰段化学能的释放,压力、温度上升,形成流场的反向流动,并在点火端面出现压力波的反射。

由图3看出,在驱动段破膜时,压力形成突跃,由激波升温使固体颗粒点然而放热,使得两相反应区内的压力逐步增大,并发展成为更强的爆轰波。由激波管理论可知,高压段破膜时,会形成稀疏波内传,使高压段口部压力降低;但在有粉尘燃烧提供能量补充的情况下,非但没有降低,反而出现压力上升并回传的情况,图6的温度分布亦然。

图4给出了不同点上压力时间曲线,在此我们看到,在 $x=4$ 米(即驱动段口部)处,压

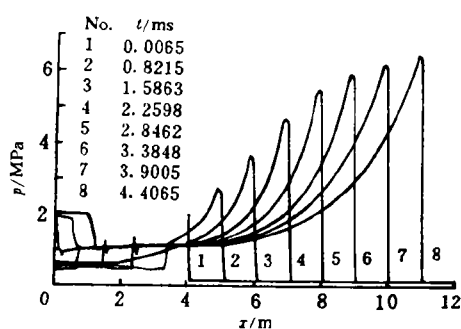


图3 压力沿轴向的分布

Fig. 3 Pressure-distance profiles

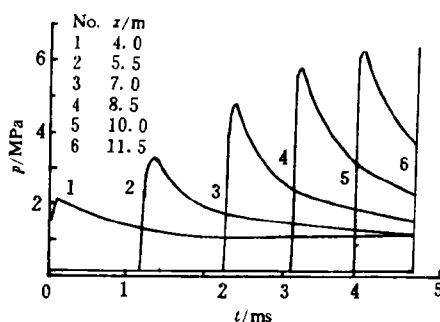


图4 不同点压力随时间变化曲线

Fig. 4 Pressure-time profiles

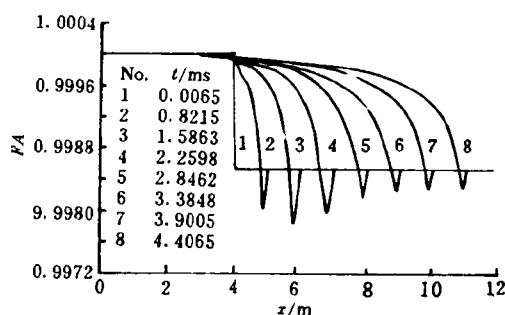


图5 空隙率 φ_0 沿轴向分布

Fig. 5 Porosity-distance profiles

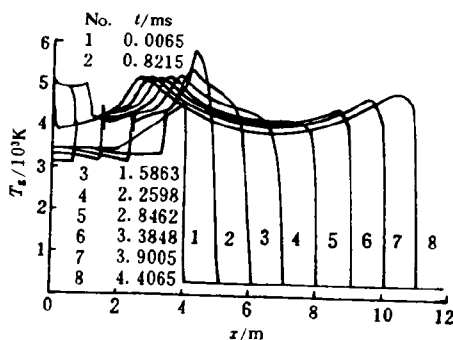


图6 气相温度沿轴向分布

Fig. 6 Temperature-distance profiles

力变化相当缓慢。

由图 5 看出,在激波阵面到达时,粉尘颗粒受到压缩而浓度增大,故空隙率 φ_s 下降;但在随后点火燃烧过程中颗粒逐步消耗,浓度减少,故空隙率 φ_s 又上升,最后颗粒烧完时, φ_s 变为 1。

由图 6 看到,温度分布在随时间增大的同时,在后期形成范围较宽的高温平衡区(4000~5000K),这是因为粉尘颗粒燃烧时间较长,放热时间亦较长,使得温度分布趋于平缓,这一点与含能材料高速燃烧放热形成的分布有较大差别。

由图 7 看到,在激波扫过之后,气相与固相之间存在的速度弛豫效应,这与颗粒两相流理论符合。随着颗粒速度增大,气相速度下降,两相速度在某些点上出现相同。但是气相速度下降较快,颗粒由于惯性,速度下降缓慢,故在相当大的范围内其颗粒速度高于气相速度,这与定常两相流的理论结果有区别。另外,我们看到,速度分布出现两个峰值,这是由于两相爆轰区内压力、温度较高,使得驱动段的气体不能迅速排出引起的(相当于出口被堵)。

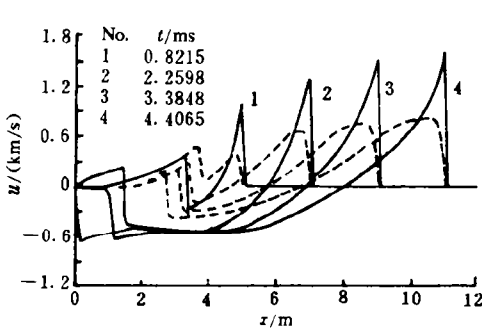


图 7 气相速度和颗粒速度分布

Fig. 7 Velocity-distance profiles

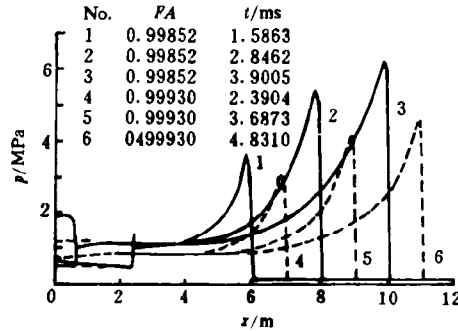


图 8 粉尘浓度(或 φ_s)对压力分布的影响

Fig. 8 Pressure-distance profiles in different porosity

4.2 粉尘浓度变化对爆轰参数的影响

图 8 给出了两种粉尘浓度(1109, 500g/m³)情况下,三个不同时刻的压力分布曲线。显然,由于颗粒浓度降低,燃烧热能亦较小,故其最大压力相应减少,这一点符合规律。

图 9 给出了三种粉尘浓度(2000, 1109, 500g/m³)情况下爆轰波速的变化情况。首先,由于粉尘浓度的增加,爆轰波速增加,这一点符合规律。其次,针对粉尘浓度为 2000g/m³ 这一情况,我们绘出了文献[1]给出的实验结果,二者相比可见,在相当大的范围上具有良好的 consistency,这说明我们提出的模型具有一定的实用性。同时也应当指出,在破膜后一米范围内,实际燃烧过程可能十分复杂,因而造成一段波速下降区;我们的模型目前还不能反映这种细节。

图 10 给出了三种浓度情况下的波阵面传播轨迹。

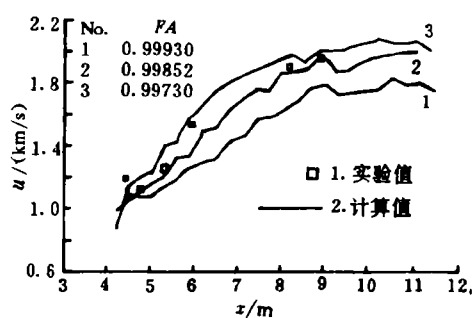
图9 粉尘浓度(或 φ_s)对波阵面速度的影响

Fig. 9 Shock velocity-distance profiles in different porosity

1. Experimental data 2. Calculation results

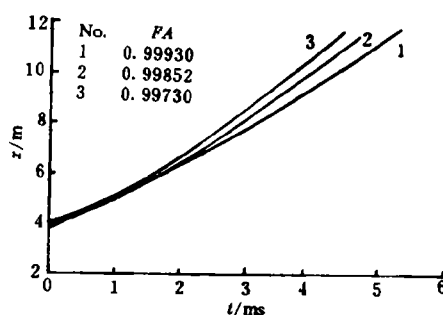
图10 粉尘浓度(或 φ_s)对波阵面轨迹的影响

Fig. 10 Distance-time profiles

in different porosity

4.3 几点看法

(1)文中计算结果,在计算区域内压力、速度均基本上达到稳态值,根据文献[1]的结果,在这一区域达到稳态。在破膜后1米范围内,计算值与实验相差较大,这一点尚需进一步研究。

(2)将最大压力值与文献[1]的结果直接比较还有困难。因为实际爆轰波呈螺旋结构,在同一截面上压力差别很大,因此,本文计算的压力只能是某种宏观的平均值,其实用意义尚待研究。

(3)点火弛豫区域:在本文中,两相爆轰波由氢氧爆轰驱动,其强度可以保证波后温度达到颗粒点火温度,故没有火焰加速继而转变为爆轰波的过程,只有爆轰波逐渐加强,发展为稳态爆轰,看不出点火延迟区域。因此,在这种情况下,只有速度弛豫效应十分明显,而点火弛豫效应较弱。

5 结 论

我们建立的一维两相反应流模型从宏观上反映了可燃粉尘-氧气混合物爆轰波的特点;数值计算与实验结果在相当大的范围上有良好的一致性,证明了该模型的合理性;现阶段完成的计算机编码将为今后进一步研究和改进提供了有益的基础,同时也具有一定的工程实用价值。

参 考 文 献

- 1 Zhang Fan, Gronig H. Detonation Study in Two-Phase Flow (Reactive Particles-Gas). In: 17th International Symposium on Shock Waves and Shock Tubes. 1989, 678~683
- 2 Denz Lee, Martin Sichel. The Chapman-Jouguet Condition and Structure of Detonations in Dust-Oxidizer Mixture. In: 10th ICDERS. 1985, 505~521
- 3 Olim M, Igra O, Mond M, Ben-Dor G. Numerical Investigation of the Flow Field behind of Shock Wave Propagating into a Carbon-Oxygen Suspension. In: 17th International Symposium on Shock Waves and Shock

- Tubcs. 1989,684~689
- 4 Krier H, Gokhale S S. Modeling of Convective Mode Combustion through Granulated Propellant to Predict Detonation Transition. AIAA J, 1978,16(2):177~183
- 5 Krier H, Kezerle J A, Gokhale S S. A Separated Two-Phase Flow Analysis to Study Deflagration-to-Detonation Transition (DDT) in Granulated Propellant. AIAA/SAE Joint Propulsion Conference 78-1013, Las Vegas, Nev. /July 25-27, 1978.
- 6 Butler P B, Krier H. Analysis of Deflagration to Detonation Transition in High-Energy Solid Propellants, Combustion and Flame. 1986,63:31~48
- 7 黄婉莉,郭汉彦.一维粉尘爆轰结构的数值计算.爆炸与冲击,1990,10(4):327~335
- 8 周彦煌,王升晨.多孔火药填充床中燃烧转爆轰(DDT)的模拟与分析.爆炸与冲击,1992,12(1):11~21
- 9 杨 涛.高装填密度火药床燃烧转爆轰的实验研究与数值模拟[博士学位论文].南京:华东工学院,1992
- 10 Wallis G B. One-Dimensional Two-Phase Flow. New York: Ma Graw-Hill Book Company, 1969. 23~26
- 11 张连玉,汪令羽,苗瑞生.爆炸气体动力学基础.北京:北京工业学院出版社,1987. 419~424
- 12 张守中.爆炸基本原理.北京:国防工业出版社,1988. 236~245

NUMERICAL SIMULATION OF DETONATION WAVES PROPAGATING IN CORN STARCH-OXYGEN MIXTURE

Liu Xiaoli, Li Hongzhi

(*Nanjing University of Science & Technology, Nanjing, 210014*)

ABSTRACT In this paper, an one-dimensional two-phase reactive flow mathematical model which describes the detonation waves propagating in a combustible dust powder-oxygen mixture is presented. The detonation wave propagation in corn starch-oxygen mixture produced by the reaction of H_2-O_2 has been solved numerically by using MacCormack scheme. The results of calculation fairly correspond with the experiment.

KEY WORDS combustion, detonation, dust explosion, numerical calculation