

文章编号: 1001-246X(2013)01-0044-09

# 真实比热模型中铝粉尘两相爆轰波的数值研究

滕宏辉, 杨 旻, 姜宗林

(中国科学院力学研究所 高温气体动力学国家重点实验室, 北京 100190)

摘 要: 采用多流体模型对铝粉尘两相爆轰波进行数值模拟, 研究颗粒能量计算方法对起爆和传播过程的影响. 以前的固相颗粒能量的计算一般采用固定比热方法, 本文采用随温度变化的真实比热. 由于铝颗粒及其产物氧化铝的比热变化很大, 模拟得到的爆轰波的速度、压力和波后参数变化和采用固定比热存在较大的差异. 变比热计算得到的爆轰波压力、传播速度和实验结果更加接近, 而固定比热的计算方法会对这些参数造成高估. 对爆轰波的形成进行研究, 发现起爆距离主要受起爆能量影响, 但是相对于固定比热模型, 采用变比热模型得到的起爆距离较短.

关键词: 气固两相; 爆轰波; 铝粉尘; 比热

中图分类号: O381

文献标识码: A

## 0 引言

铝粉可以作为一种高能燃料, 在炸药和固体推进剂中有着广泛的应用. 铝粉最剧烈的燃烧形式是铝粉尘两相爆轰波, 通过激波压缩自点火, 能够在波后迅速释放出大量热量. 铝粉尘两相爆轰波的研究不仅对于工业粉尘爆炸的预防和防护具有重要意义, 而且在高超声速推进领域有着巨大的应用潜力. 由于铝粉尘的燃烧过程涉及到保护膜破裂, 固体铝颗粒的液化和气化等非常复杂的过程, 铝粉尘爆轰波受到颗粒尺度影响很大, 和气相爆轰波存在着较大的差别<sup>[1-3]</sup>. 流场中的铝粉尘尺度非常小, 对其燃烧过程进行测量比较困难, 因此近些年主要利用数值模拟方法对铝粉尘两相爆轰波进行研究. Benkiewicz 等<sup>[4]</sup>采用两反应模型对铝粉尘爆轰波的传播进行数值模拟, 研究了粉尘的颗粒直径对于爆轰波波面结构和胞格尺度的影响. Federov 等<sup>[5]</sup>对铝粉尘爆轰波的绕射进行数值研究, 并通过和气相爆轰波绕射对比, 分析了铝粉尘参数对爆轰波传播的影响. 洪滔等<sup>[6]</sup>采用两相流模型对爆轰管中的铝粉尘爆轰波进行数值模拟, 改进了铝颗粒的点火模型, 研究了管壁耗散、粒子表面粗糙度对于爆轰波起爆和传播的影响.

虽然对于铝粉尘爆轰波的研究已经取得了很大的进展, 但是目前数值模拟结果和实验结果仍然存在着较大的差距. 过去几十年, 在 CFD 领域取得了较大的进展, 对于激波、湍流等问题已经找到了比较好的方法<sup>[7]</sup>, 但是对于多相流的研究仍然很不成熟. 由于实验难以进行精确的测量, 数值模拟通常采用的化学反应模型过于简单. 两相爆轰波后的燃烧涉及到复杂的相间相互作用, 其燃烧机理和燃烧特性是非常复杂的. Lynch 等<sup>[8]</sup>研究发现, 直径 10 微米以下的铝颗粒燃烧已经开始从扩散燃烧逐渐转变为动力燃烧, 而通常能够形成爆轰波的铝颗粒直径在 5 微米以下. 因此, 对于爆轰波后铝粉尘的燃烧模型需要改进. Zhang 等<sup>[9]</sup>提出了混合燃烧模型, 考虑了表面动力燃烧对于爆轰波的影响, 并用这个模型对爆轰波进行了数值模拟. 但是上述混合燃烧模型在一些方面做了简化, 导致温度等宏观参数和实验结果相差很大. 本文对这个模型进行改进, 利用改进的混合燃烧模型对爆轰波进行数值模拟, 研究铝粉尘两相爆轰波的特征.

## 1 气固两相流的多流体模型

$$\frac{\partial U_g}{\partial t} + \frac{\partial E_g}{\partial x} = S_g + H_g, \quad (1)$$

收稿日期: 2012-03-14; 修回日期: 2012-06-04

基金项目: 国家自然科学基金(90916028)资助项目

作者简介: 滕宏辉(1981-), 男, 汉族, 河南商丘, 副研究员, 理学博士, 研究方向激波与爆轰物理, E-mail: hhteng@imech.ac.cn

$$U_g = [\rho_1 \quad \cdots \quad \rho_n \quad \rho u \quad \rho E]^T, \quad (2)$$

$$E_g = [\rho_1 u \quad \cdots \quad \rho_n u \quad \rho u^2 + p \quad (\rho E + p) u]^T, \quad (3)$$

$$S_g = [\dot{\omega}_1 \quad \cdots \quad \dot{\omega}_n \quad 0 \quad 0]^T, \quad (4)$$

$$H_g = [0 \quad \cdots \quad 0 \quad -u_p J_p - f_x \quad -E_p J_p - u_p f_x - Q_d + q_p J_p]^T, \quad (5)$$

其中  $\rho E = \rho e + (1/2) \rho u^2$ ,  $p = \sum_{i=1}^n \rho_i RT/w_i$ ;  $S_g$  为化学反应源项,  $\dot{\omega}_i$  表示气相组元发生化学反应的质量变化率;  $H_g$  为气体颗粒相互作用源项,  $u_p$  表示颗粒速度,  $J_p = \sum_{i=1}^m J_i$  表示从固相到气相总体质量转化率,  $E_p$  表示转化为气相部分的固体颗粒的总能,  $f_x$  表示固体颗粒作用于气体的阻力,  $Q_d$  表示气固两相间的对流传热,  $q_p$  表示固体颗粒燃烧释放的热量.

对于固体颗粒相, 采用多流体模型, 即将颗粒处理为连续介质的流体, 其控制方程如下:

$$\frac{\partial U_p}{\partial t} + \frac{\partial E_p}{\partial x} = S_p + H_p, \quad (6)$$

$$U_p = [\sigma_1 \quad \cdots \quad \sigma_m \quad \sigma u \quad \sigma E_p \quad n_1 \quad \cdots \quad n_m]^T, \quad (7)$$

$$E_p = [\sigma_1 u_p \quad \cdots \quad \sigma_m u_p \quad \sigma u_p^2 \quad \sigma E_p \quad n_1 u_p \quad \cdots \quad n_m u_p]^T, \quad (8)$$

$$S_p = [J_1 \quad \cdots \quad J_n \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad \cdots \quad 0]^T, \quad (9)$$

$$H_p = [0 \quad \cdots \quad 0 \quad u_p J_p + f \quad E_p J_p + u_p f_x + Q_d \quad 0 \quad \cdots \quad 0]^T, \quad (10)$$

其中  $\sigma E_p = \sigma e_p + (1/2) \sigma u_p^2$ , 其中  $\sigma = \sum_{i=1}^m \sigma_i$  表示固体颗粒的空间平均密度. 和气体控制方程不同, 颗粒相的控制方程需要附加颗粒数守恒项,  $n_i$  表示各个组分的颗粒数. 它建立了空间平均密度  $\sigma_i$  和固体颗粒本身密度  $\rho_{pi}$  之间的联系  $n_i = 6\sigma_i / (\pi \rho_{pi} d_{pi}^3)$ , 其中  $d_{pi}$  为颗粒的直径. 气固两相间的作用力为

$$f_x = C_d \sum_{i=1}^m n_i \frac{\pi d_{pi}^2}{4} \rho (u - u_p) \sqrt{(u - u_p)^2 / 2}, \quad (11)$$

其中阻力系数  $C_d = \frac{24}{Re_s} \left(1 + \frac{1}{6} Re_s^{2/3}\right)$ . 气固两相间的热传导可写为

$$Q_d = \sum_{i=1}^m n_i \pi d_{pi} Nu \lambda (T - T_p), \quad (12)$$

其中  $Nu = 2.0 + 0.459 Re_s^{0.55} Pr^{0.33}$ , 滑移雷诺数为  $Re_s = \frac{\rho \sqrt{(u - u_p)^2}}{\mu} \sum_{i=1}^m d_{pi}$ .

## 2 铝粉尘的混合燃烧模型

对于铝粉尘燃烧的数值模拟, 通常采用扩散燃烧的化学反应模型. Beckstead<sup>[10]</sup> 综合众多实验结果, 提出了铝颗粒的扩散燃烧模型, 得到了广泛的应用. 然而, 小尺度的铝颗粒不仅存在扩散燃烧, 而且存在动力燃烧, 其燃烧模型比较复杂<sup>[11]</sup>. Zhang 等<sup>[9]</sup> 提出了混合燃烧模型, 综合考虑了扩散燃烧和动力燃烧对于小尺度铝颗粒的影响. 在这种模型中, 铝颗粒的燃烧速度可写为

$$J_1 = -n_1 \pi d_{p1}^2 k_1 = -n_1 \pi d_{p1}^2 \frac{\nu_1 W_1}{\nu_{oxi} W_{oxi}} k, \quad (13)$$

$$k = k_d (C_{oxi} - C_{oxi \beta}), \quad k = k_s C_{oxi \beta}, \quad (14)$$

其中  $k_1$  和  $k$  分别表示铝颗粒和氧化气体的反应速率,  $k_d$  和  $k_s$  分别表示扩散燃烧和动力燃烧的速率.  $\nu, W, C_{oxi}, C_{oxi \beta}$  分别表示化学反应当量, 反应物摩尔质量, 扩散燃烧区氧化气体摩尔浓度和扩散燃烧区内层即粒子表面氧化气体摩尔浓度. 从方程(14)可以导出

$$k = \frac{k_d k_s}{k_d + k_s} C_{oxi}. \quad (15)$$

对于扩散燃烧, 其反应速率为

$$k_d = \frac{\nu_{\text{oxi}} W_{\text{oxi}}}{\nu_1 W_1} \frac{\rho_{p1} d_{p1}}{2 C_{\text{total}} K d_{p1}^2} (1 + 0.276 Re_s^{1/2} Pr^{1/3}). \quad (16)$$

对于动力燃烧,其反应速率为

$$k_s = k_0 e^{-E/RT_s}, \quad (17)$$

其中  $C_{\text{total}}$  表示气体的总摩尔浓度,  $d_{p1}$  表示燃料粒子的初始直径,  $T_s = (T + T_p) / 2$  表示动力燃烧的等效反应温度,  $K$  和  $k_0$  是反应常数.

采用式(15)~(17),可以计算不同直径的粒子在不同温度下的反应速率.图1显示了在铝颗粒溶化温度 933 K 和汽化温度 2 792 K 时,不同直径的粒子燃烧速度.在本文计算的模型<sup>[9]</sup>中  $K = 4 \times 10^6 \text{ s} \cdot \text{m}^{-2}$ ,  $k_0 = 1.2 \times 10^3 \text{ kg} \cdot \text{m} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ ,  $E = 71.7 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ .对于混合燃烧模型,其总体的化学反应速率主要依赖于扩散和动力燃烧反应中较小的速率.对比图1(a)和(b)可以看到,扩散燃烧速率随着直径的减小而增加,但是温度对其影响很小,因此在该模型中可以不考虑;动力燃烧速率和直径无关,但是随着温度的增加变化很大.混合燃烧模型的总体速率对于较大直径的粒子趋向于其扩散燃烧速率,而对于较小直径的粒子趋向于其动力燃烧速率.对于铝粉尘爆轰波研究的粒子,即直径范围 1~5 微米量级铝颗粒的燃烧速率,可以看到在低温时扩散燃烧速率远大于动力燃烧速率,因此低温燃烧反应是动力燃烧主导的(kinetic-controlled reaction),而高温燃烧反应是扩散燃烧主导的(diffusion-controlled reaction).以往的燃烧模型主要采取单一的扩散主导燃烧模型进行模拟,会带来较大的误差.

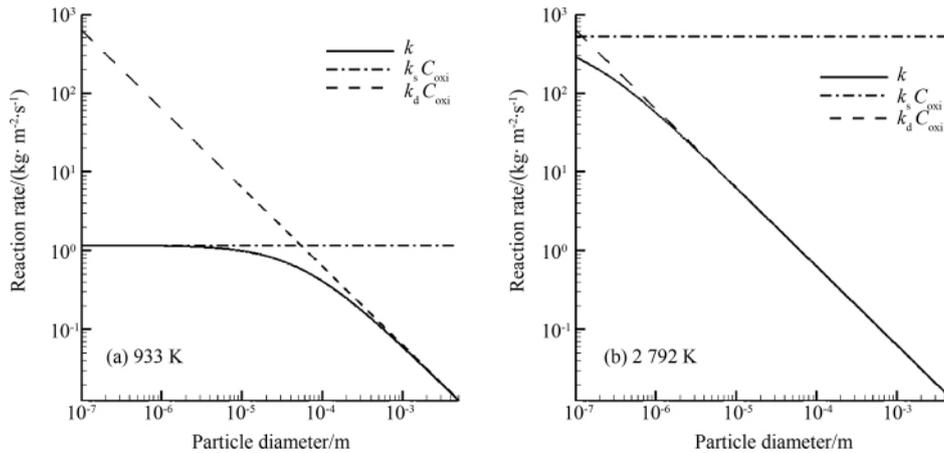


图 1 不同粒子直径对于化学反应速率的影响

Fig. 1 Chemical reaction rates with different particle diameters

Zhang 等<sup>[9]</sup>采用上述模型对爆轰波的起爆和传播进行了数值模拟.由于引入了动力燃烧过程,因此可以对较低温度下的燃烧过程进行模拟,从而用于研究爆轰波的起爆过程.然而,该模型在计算固体颗粒能量时,采用了固定的比热,有可能引起较大的误差.在比热不变的情况下,固体颗粒温度的计算方程为

$$T_p = \begin{cases} e_p / c_{pV}, & e_p \leq c_{pV} T_{p,m}, \\ T_{p,m}, & c_{pV} T_{p,m} < e_p \leq c_{pV} T_{p,m} + L_m, \\ (e_p - L_m) / c_{pV}, & c_{pV} T_{p,m} + L_m < e_p \leq c_{pV} T_{p,b} + L_m, \\ T_{p,b}, & c_{pV} T_{p,b} + L_m < e_p \leq c_{pV} T_{p,b} + L_m + L_b, \\ (e_p - L_m - L_b) / c_{pV}, & e_p > c_{pV} T_{p,b} + L_m + L_b, \end{cases} \quad (18)$$

其中  $c_{pV}$  为颗粒的比热,  $L_m$  为融化潜热,  $L_b$  为气化潜热,  $T_{p,m}$  为融化温度,  $T_{p,b}$  为气化温度.然而,颗粒的比热随着温度的变化会发生很大的变化,从而给模拟带来较大的误差.由于比热随温度的变化比较复杂,难以用解析函数的形式表达出来,NASA 建立了数据库<sup>[12]</sup>采用多项式拟合的方式给出了比热的数值.图2显示了铝和氧化铝的比热随着温度的变化而改变的曲线,其中突变是由于固体融化成为液体导致的.可以看到固体颗粒的比热随着温度的增加而迅速增加,而融化成为液体之后比热比基本保持不变.温度为 300 K 时金属铝的

比热约为  $24.2 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ , 900 K 时约为  $32.3 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ , 而温度大于 933 K 的液态铝其比热突变为  $31.8 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ . 温度为 300 K 时氧化铝的比热容约为  $79.3 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ , 2300 K 时约为  $138.8 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ , 而温度大于 2327 K 的液态铝其比热容突变为  $192.5 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ . 因此, 对于上述中的比热比  $c_{pV}$ , 要采用平均比热  $\bar{c}_{pV}(T_p)$  代替.

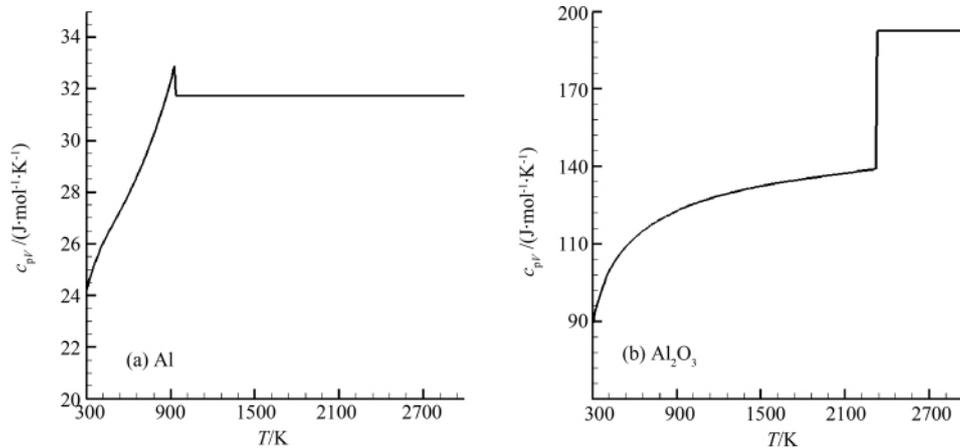


图 2 铝和氧化铝的比热容随温度的变化

Fig. 2 Heat capacities of (a) Al and (b)  $\text{Al}_2\text{O}_3$  as functions of temperature

在本文的数值模拟中, 气体组元为  $\text{O}_2$  和  $\text{N}_2$ , 固体组元为  $\text{Al}(s)$  和  $\text{Al}_2\text{O}_3(s)$ . 其中铝粉尘的燃烧速率通过上述反应模型计算, 然后根据化学反应当量比计算  $\text{O}_2$  消耗量和  $\text{Al}_2\text{O}_3(s)$  生成量. 由于铝粉尘的燃烧过程中相变非常复杂, 对其详细的物理、化学过程进行模拟暂时难以实现. 相变过程在计算中通过固体状态方程 (18) 中的潜热影响能量方程, 进而影响整个流动. 由于  $\text{Al}_2\text{O}_3(s)$  潜热较小, 一般不予考虑,  $\text{Al}(s)$  的融化潜热和气化潜热分别为  $10.7 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$  和  $290 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ . 铝粉尘燃烧的放热量为  $838 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ ,  $Pr$  数固定为 0.72. 气相和固相控制方程均采用了 DCD 格式<sup>[13]</sup> 进行离散, 能够很好的避免非物理振荡. 均匀网格尺度为 0.001 m, 以前的模拟证明该燃烧模型对于这个尺寸的网格可以实现网格无关性的计算<sup>[9]</sup>.

### 3 数值模拟结果和讨论

图 3 显示利用混合燃烧模型和采用变比热容的混合燃烧模型, 对铝粉空气混合气体中爆轰波传播数值模拟结果. 参考以前的实验结果选取计算参数<sup>[14]</sup>, 波前气体的压力和温度分别为  $p_0 = 2.5 \times 1.013 \times 10^5 \text{ Pa}$ ,

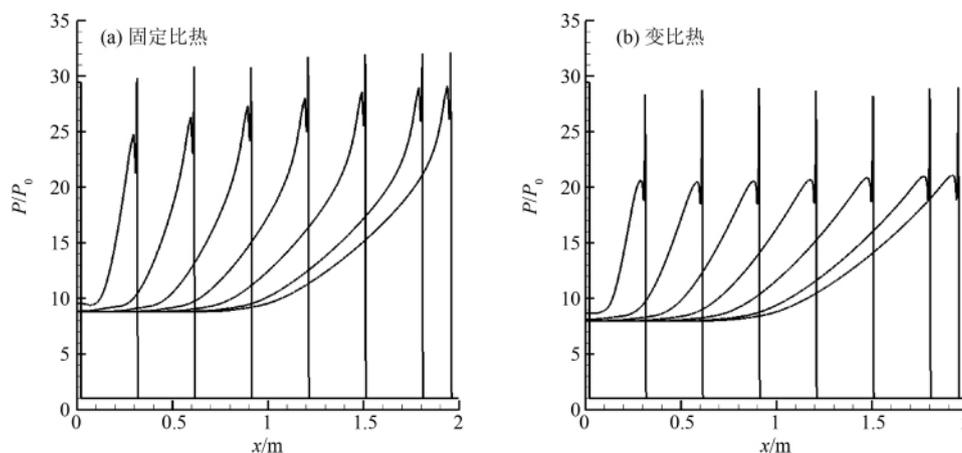


图 3 混合燃烧模型中比热对于铝粉尘爆轰波影响

Fig. 3 Effects of (a) fixed, (b) realistic heat capacities in hybrid combustion model

$T_0 = 300$  K, 铝粉粒子初始直径为  $2.0 \mu\text{m}$ , 平均密度为  $\sigma_{\text{Al}} = 1250 \text{ g}\cdot\text{m}^{-3}$ . 其中图 3(a) 的计算采用的比热是 300 K 时  $\text{Al}(\text{s})$  和  $\text{Al}_2\text{O}_3(\text{s})$  的比热, 而图 3(b) 的计算采用的比热是随温度变化的. 可以看到两种情况下波后压力的变化是基本相似的, 都是在激波作用下先形成一个较高的压力峰值, 然后压力衰减, 在颗粒相作用下形成第二个压力峰值. 但是比热的变化对于两相爆轰波有着很大的影响, 对于变比热的两相爆轰波, 两个压力峰值都比固定比热的情况下要低. 表 1 通过爆轰波传播速度和最高压力将数值模拟的结果和实验结果进行对比, 可以看到数值模拟结果和实验结果存在一定差异, 但是变比热的条件下, 无论是爆轰波传播速度还是最高压力都有明显的改善. 实验和数值结果的差异是不可避免的, 这是由于波后铝粉尘的燃烧非常复杂, 目前还难以建立精确的化学反应模型, 在数值模拟中只能近似处理. 然而, 数值结果显示比热比的改变能够有效的提高数值模拟的精度, 这是非常有意义的. 可以看到爆轰波传播速度的误差从 17.7% 降低到 9.6%, 而最高压力数值模拟结果已经和实验结果的上限比较接近. 在 CJ 理论中传播速度取决于爆轰波后的燃烧放热量, 由于铝粉尘点火延迟时间比较长, 相当于一部分燃料的燃烧不能用于支持爆轰波的传播. 再加上铝颗粒外壳覆盖有氧化物薄膜等因素, 也影响了波后放热, 导致在数值模拟中高估了爆轰波的传播速度. 波后的最高压力主要取决于爆轰波的传播速度和局部的气体状态参数, 爆轰波的传播速度导致波后最高压力被高估. 但是混合燃烧模型中没有考虑铝粉尘的气化对于压力的影响, 因此这个因素导致最高压力被一定程度的低估. 两者共同作用下最高压力的计算结果和实验结果相比误差较小.

表 1 数值模拟和实验得到的两相爆轰波速度和最高压力

Table 1 Detonation velocities and peak pressures in numerical and experimental results

	速度 / ( $\text{km}\cdot\text{s}^{-1}$ )	压力 / ( $p/p_0$ )
固定比热	173.0	32.8
变比热	161.1	28.8
实验	147.0	26.0 - 28.4

图 4 显示了采用变比热计算得到的铝粉尘爆轰波后的压力、温度、速度和密度分布, 可以看到和气相爆

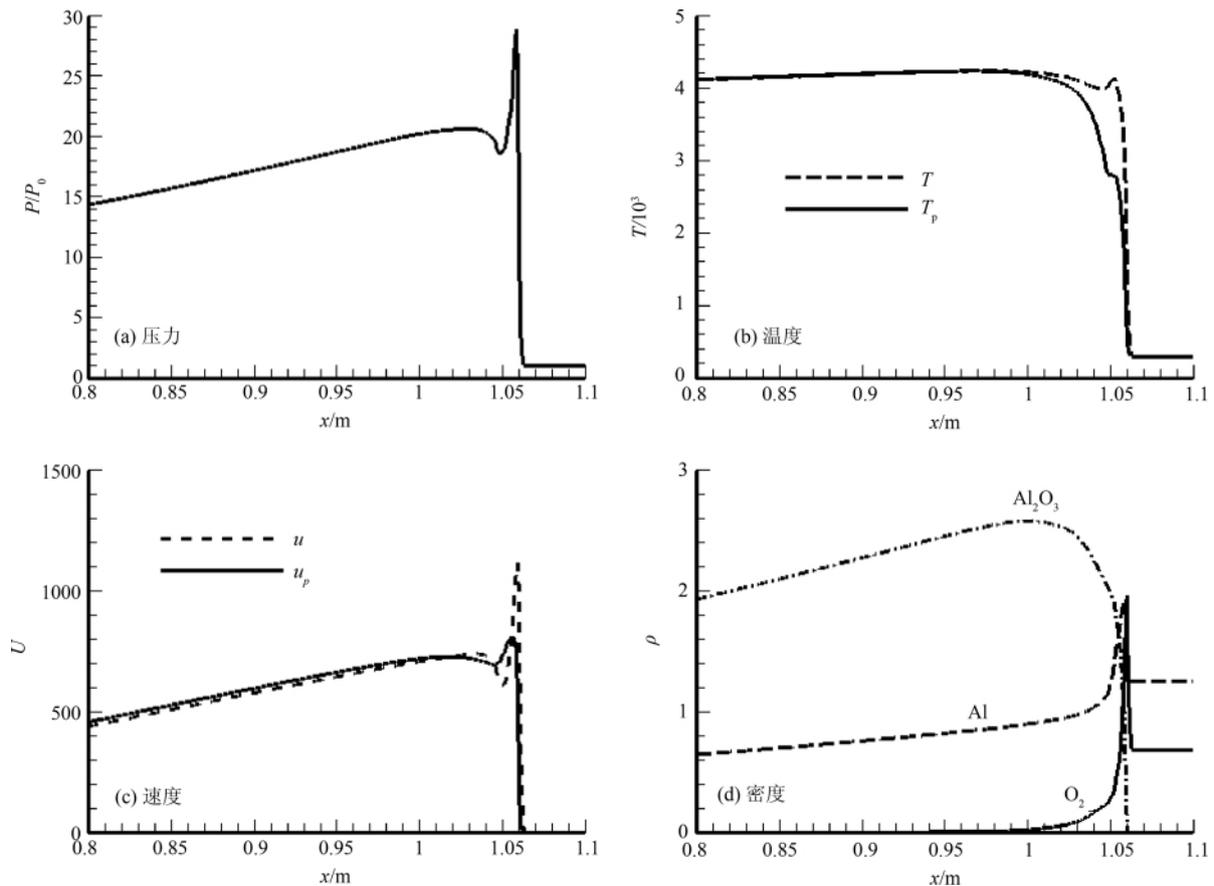


图 4 铝粉尘爆轰波后的压力、温度、速度和密度分布

Fig. 4 (a) Pressure, (b) temperature, (c) velocity and (d) density profiles of Al dusty detonation

轰波存在显著的差异<sup>[15]</sup>. 在压力曲线上可以看到激波后方存在一个先降低后升高的过程,如图 4(a)所示. 这是由于相对于气相燃料铝粉尘的燃烧速度比较慢,激波和燃烧的耦合比较弱从而在波后形成了第二个压力峰值. 波后的温度和速度分布显示激波后方存在一个铝粉尘燃烧的弛豫过程,如图 4(b)和(c)所示. 波前的气体通过激波温度  $T$  和速度  $u$  迅速增加,但是波前的固体颗粒穿过激波之后的温度  $T_p$  和速度  $u_p$  的增加过程相对较慢. 图 4(b)显示在波后约 0.05 m 距离内,固体颗粒的温度都低于气体温度,而且在略低于 3 000 K 时可以明显地观察到气化潜热导致的温度平台. 在辐射传热的作用下,颗粒温度逐渐趋向于气体温度,最后两者基本相同. 波后速度的弛豫是一个更加复杂的过程. 首先激波压缩的作用相对于气体和颗粒存在差异,导致波后速度的峰值并非同时出现,而是粒子速度峰值出现较晚,如图 4(c)所示. 进而压力的降低导致了速度的变化,同样气体速度降低较快而粒子的速度降低较慢. 然而在燃烧作用下压力重新升高的过程中,粒子和气体也重新加速,这个过程中粒子的速度第二个峰值出现依然晚于气体速度相应的峰值. 从图 4(c)显示的速度的加速、减速、再加速过程可以看出,粒子的速度变化相对于气体有一个明显的迟滞过程,这也是气固两相流中固体颗粒运动的一个特点. 图 4(d)显示了三种组元的平均密度变化,由于流场是富燃贫氧的,波后会残留一定量的铝粉而氧气被完全消耗,同时形成大量的  $\text{Al}_2\text{O}_3(\text{s})$  颗粒. 综上所述,由于铝粉尘燃烧速度、输运特性的一些特点,导致铝粉尘两相爆轰波和气相爆轰波存在较大的差异. 这种差异导致了在波后压力曲线的第二个峰值,以及复杂的温度、速度弛豫过程.

相对于传统的两相扩散燃烧模型,混合燃烧模型的一个特点是能够对两相爆轰波的形成过程进行数值模拟. 这是由于在点火之后爆轰波形成之前,流场温度比较低,传统的扩散燃烧模型对于这种过程无法进行模拟,只能模拟爆轰波形成之后的传播过程. 这种起爆过程往往伴有剧烈的爆炸和高马赫数激波和形成,类似于气相爆轰波的热点起爆,是一种比较复杂的过程. 图 5 显示了粉尘爆轰波的起爆过程. 其中为了表示起爆初期的较低压力纵坐标采用了对数坐标系,图中平行于  $x$  轴的横线对应爆轰波稳定传播的波峰压力. 可以看到在变比热和固定比热两种情况下都能够形成爆轰波. 虽然爆轰波形成的位置、最高压力等存在一定的差异,但是起爆的基本现象是一致的. 它们都是在前导激波后方形形成新的压缩波,然后发展成为强激波并形成过驱动爆轰波,最后逐渐衰减形成稳定传播的两相爆轰波. 这种现象和实验结果是类似,而传统的扩散燃烧模型得到结果显示激波是逐渐增强的. 然而,对比图 5(a)和(b)发现金属粒子的比热处理方法会对起爆过程产生较大的影响. 在固定比热情况下,在被激波压缩的高温气体会形成一个压力波峰,但是这个波峰并没有直接导致爆轰波起爆,而是其后形成的第二个波峰导致了爆轰波起爆,如图 5(a)所示. 采用变比热的情况下,第一个压力波峰就直接发展成为了过驱动爆轰波,没有形成第二个压力波峰,如图 5(b)所示. 起爆过程的这种差别源于不同的比热处理方法,因此有必要对产生这种差别的原因进行分析.

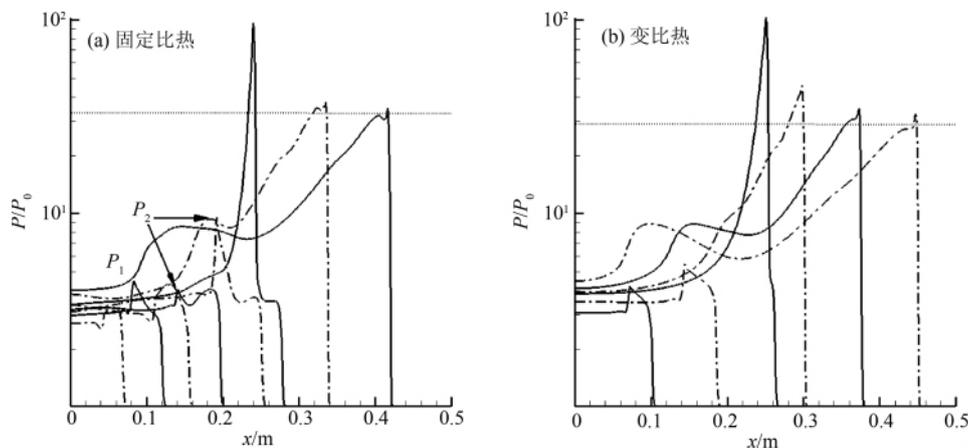


图 5 铝粉尘爆轰波的起爆过程

Fig. 5 Al dusty detonation initiation with different heat capacities: (a) fixed, (b) realistic

图 6 和图 7 分别显示了两种起爆过程中的压力和温度分布. 可以看到由于采用了固定比热,点火后图 6 得到的温度比图 7 的温度要高很多,在温度曲线上形成一个明显的凸起. 这个高温区同时在压力曲线上形成

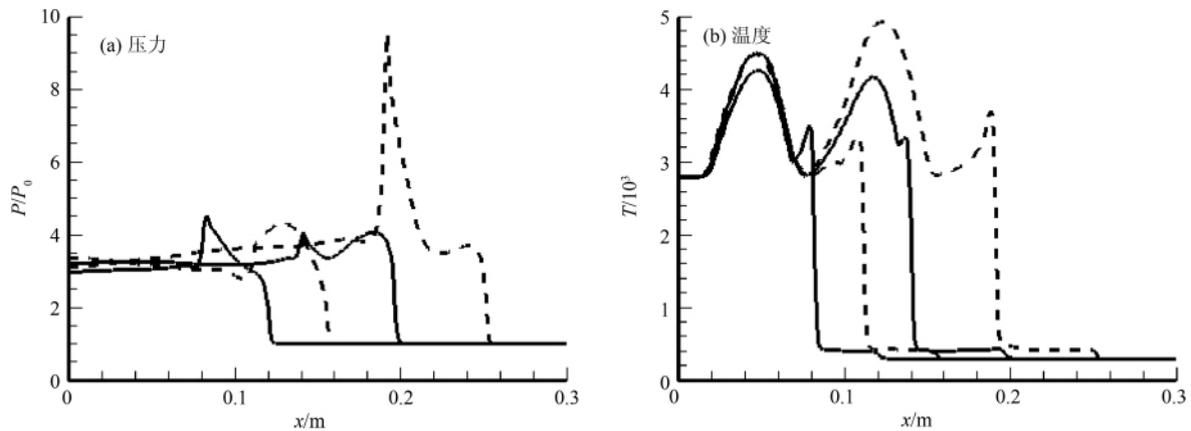


图 6 固定比热铝粉尘爆轰波的起爆流场的压力和温度

Fig. 6 Pressure and temperature of detonation initiation with fixed heat capacities

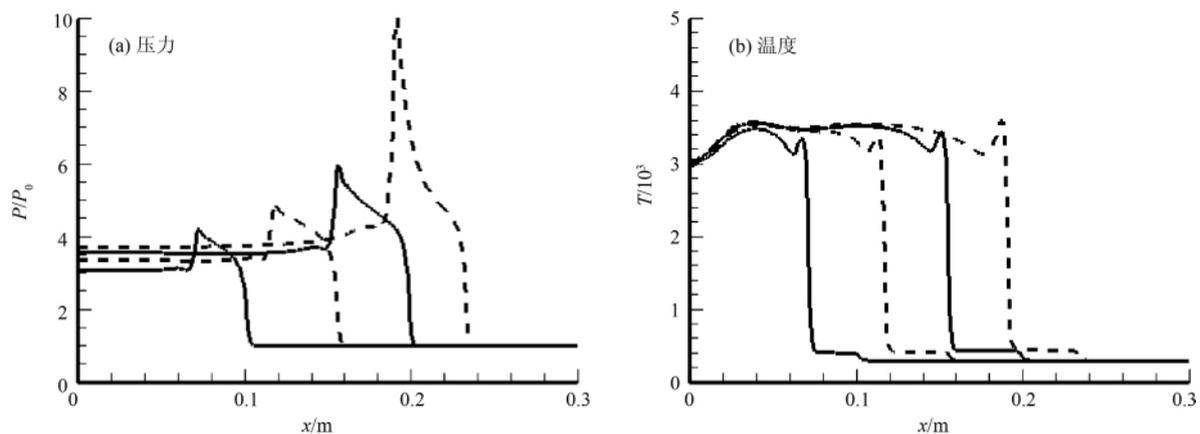


图 7 变比热铝粉尘爆轰波的起爆流场的压力和温度

Fig. 7 Pressure and temperature of detonation initiation with realistic heat capacities

了一个较强的稀疏波,阻碍了燃烧波的加速.图7所示的变比热的计算结果在压力曲线上也存在稀疏波,但是其强度比较小,因此不能阻止爆轰波的形成.图6显示的第一个压力峰值在稀疏波的作用下衰减,形成压缩波,但是压缩波和燃烧带作用会形成第二个压力峰值,进而发展为爆轰波.导致这两种起爆过程的差异主要在于前导激波后方的气体中,温度和压力的耦合关系.由于固定比热比情况下对于温度的高估,导致负压力梯度的出现和第一个压力峰值起爆的失败.

为了研究点火能量对于起爆过程的影响,采用了两组不同的点火区参数组合.第一组采取理想化学当量比的氢气空气混合气体在  $2.5 \times 1.013 \times 10^5$  Pa 情况下绝热等容燃烧的压力和温度作为点火区参数,第二组气体氢气和空气的当量比为 0.5,仍然在  $2.5 \times 1.013 \times 10^5$  Pa 情况下绝热等容燃烧,得到的压力和温度作为点火区参数.高温高压区的长度为 1 mm,详细的点火压力、点火温度和起爆距离如表 2 所示.其中起爆距离的定义是波后的爆炸产生的波峰向前赶上前导激波的位置.可以看到在两种情况下固定比热计算得到的起爆距离都要大于变比热计算得到的起爆距离,这和上文对于起爆过程的分析也是一致的.点火能量对于起爆距离也有较大的影响,在点火能量较大的情况下起爆比较迅速,起爆距离较短,反之起爆距离较长.这和气相爆轰波的点火起爆规律也是基本一致的.

表 2 不同的起爆能量对应的起爆距离

Table 2 Initiation run-up distance with different energies

	点火压力 /Pa	点火温度 /K	起爆距离/m (固定比热)	起爆距离/m (变比热)
1	$20.3 \times 1.013 \times 10^5$	2 816	0.29	0.27
2	$15.6 \times 1.013 \times 10^5$	2 004	0.38	0.36

## 4 结论

采用双流体模型对于铝粉尘爆轰波进行数值模拟,研究了一维爆轰波的起爆和传播过程.以前的模拟中主要采用扩散燃烧模型,铝颗粒的比热采取固定值进行计算.本文采取混合燃烧模型,并在此基础上研究了固体颗粒比热的变化对于爆轰波参数的影响.由于铝颗粒及其产物氧化铝的比热变化很大,模拟得到的爆轰波的速度、压力和波后参数变化和采用固定比热存在较大的差异.采用变比热的计算方法,得到的爆轰波压力和传播速度和实验结果更加接近.在对爆轰波的形成研究过程中,发现起爆能量和比热计算方法都会影响起爆距离,但是起爆能量影响更大.采用变比热的计算方法,爆轰波起爆距离较短,但是两者差距并不大.铝粉尘爆轰波的数值模拟还不成熟,由于金属铝颗粒燃烧的复杂性,目前的模型很难对真正的物理化学过程进行模拟.本文主要是通过数值结果的对比,研究比热的计算方法对于爆轰波的影响,从而为更精细的燃烧模型和数值方法的建立提供参考.

## 参 考 文 献

- [1] Tulis A J, Selman J R. Detonation tube studies of aluminum particles dispersed in air [J]. Symposium (International) on Combustion, 1982, **19** (1): 655-663.
- [2] Borisov A A. Dynamic structure of detonation in gaseous and dispersed media [M]//Borisov A A, Khasainov B A, Saneev E L, et al. On the detonation of aluminum suspensions in air and in oxygen. Dordrecht, The Netherlands: Kluwer Academic, 1991: 215-253.
- [3] Zhang F, Grönig H, van de Ven A. DDT and detonation waves in dust-air mixtures [J]. Shock Waves, 2001, **11** (1): 53-71.
- [4] Benkiewicz K, Hayashi A K. Two-dimensional numerical simulations of multi-headed detonations in oxygen-aluminum mixtures using an adaptive mesh refinement [J]. Shock Waves, 2003, **13** (5): 385-402.
- [5] Fedorov A V, Kratova Y V, Khmel T A. Shock and detonation wave diffraction at a sudden expansion in gas-particle mixtures [J]. Shock Waves, 2008, **18** (4): 281-290.
- [6] Hong Tao, Qin Chengsen. Numerical simulation of dust detonation of aluminum powder in explosive tubes [J]. Explosion and Shock Waves, 2004, **24** (3): 193-200.
- [7] Yan Chao, Yu Jian, Xu Jinglei, et al. On the achievements and prospects for the methods of computational fluid dynamics [J]. Advances in Mechanics, 2011, **41** (5): 562-589.
- [8] Lynch P, Krier H, Glumac N. A correlation for burn time of aluminum particles in the transition regime [J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2009, **32** (2): 1887-1893.
- [9] Zhang F, Gerrard K, Ripley R C. Reaction mechanism of aluminum-particle-air detonation [J]. Journal of Propulsion and Power, 2009, **25** (4): 845-858.
- [10] Brooks K P, Beckstead M W. Dynamics of aluminum combustion [J]. Journal of Propulsion and Power, 1995, **11** (4): 769-780.
- [11] Richard A Yetter, Grant A Risha, Steven F Son. Metal particle combustion and nanotechnology [J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2009, **32** (2): 1819-1838.
- [12] McBride B J, Zehe M J, Gordon S. NASA Glenn coefficients for calculating thermodynamic properties of individual species [R]. TP 2002-211556, NASA, 2002.
- [13] Jiang Z L. On dispersion-controlled principles for non-oscillatory shock capturing schemes [J]. Acta Mechanica Sinica, 2004, **20** (1): 1-15.
- [14] Zhang F, Murray S B, Gerrard K B. Aluminum particles-air detonation at elevated pressures [J]. Shock Waves, 2006, **15** (5): 313-324.
- [15] Teng Honghui, Jiang Zonglin. Numerical investigation of one-dimensional overdriven detonation initiation [J]. Chinese J Comput Phys, 2008, **25** (1): 58-64.

## Realistic Heat Capacity Effects in Two Phase Aluminum Dust Detonations

TENG Honghui , YANG Yang , JIANG Zonglin

( *State Key Lab of High Temperature Gas Dynamics , Institute of Mechanics , Chinese Academy of Sciences , Beijing 100190 , China* )

**Abstract:** Two phase detonations of aluminum dust are simulated in a multi-fluid model to study particle energy calculation methods. In previous studies heat capacities of solid particles are constants , while realistic heat capacities change with temperature. In this simulation , effects of realistic heat capacities are studied. Numerical results show that detonation parameters are influenced significantly. The results with realistic capacities are close to experiments , while the results with fixed capacities overestimate pressure and detonation velocity. In detonation initiation , run-up distance is mainly decide by ignition energy , while realistic effect makes the distance shorter than that in the fixed heat capacity case.

**Key words:** gas-solid two phase; detonation; aluminum dust; heat capacity

---

**Received date:** 2012 - 03 - 14; **Revised date:** 2012 - 06 - 04