球型密闭容器中铝粉 爆炸机理的研究

范宝春 丁大玉 浦以康 3 汤明钧 (南京理工大学 南京 210014) (a) 中国科学院力学研究所 北京 100080)

摘要 对中心点火球型密闭容器中的铝粉爆炸进行了实验和理论两方面的研究。实验采用20立升的球。除测量压力外,还通过系踪平均法测试了流场的湍流强度,并利用电子显微镜和 X 光衍射仪分析了铝粉及其燃烧后残渣的形状和组分。文中对20立升和50立升球型容器中铝粉燃烧的全过程进行了数值模拟。对于可测量的量如压力和压力上升速率,计算结果与实验结果基本相符。基于反应区外质点的熵几乎不变这一事实,对计算获得的参数剖面还进行了理论分析。

关键词 粉尘爆炸 非均相燃烧 湍流燃烧 数值模拟

1 引言

据文献报道,工业上逐年增多的粉尘爆炸灾害,近60%是铝粉导致的爆炸,故铝粉爆炸机理的研究在粉尘爆炸研究中占有特殊的地位。中心点火球型密闭容器常被用来研究这类现象。它可以向人们提供可靠的有参考价值的数据。由于测试手段限制,实验费用昂贵等原因,实验研究的深度和广度都受到相当限制,故适当的数值模拟对于揭示铝粉爆炸机理也是十分必要的。通过实验研究、理论分析和数值模拟三方面结合的分析和研究,讨论了密闭容器中铝粉爆炸的机理。

容器中的铝粉燃烧过程是带化学反应的两相流动过程,其守恒方程是一组含对流项、扩散项和化学反应源项的偏微分方程组。为了适应实验研究的规模,数值模拟必须在较大的区域内进行。因此本文不但对相应的方程进行了变换,而且还在计算过程中采用物理分裂格式、自适应网格等技术。数值模拟的结果描绘了不同时刻容器内的流场结构,且与某些可测量的实验结果吻合较好。

2 实验

实验所采用的球型密闭容器如图1所示。在高压气体作用下,粉尘室的粉尘通过环形扬尘管吹入容器内,以形成浓度和湍流度在空间均匀分布的粉尘云。粉尘浓度是根据吹入的粉尘质量和容器的体积来计算的。湍流度是在容器内无粉尘的情况下用热线风速仪测量且取其系踪平均值来表示的。

国家自然科学基金资助项目。1992年10月22日收到原稿,1993年2月28日收到修改稿。



测量值 计算值

仪分析其残渣,如图 3 所示。其主要成份为三氧化二铝 (Al_2O_3) ,但仍含有 20%左右的未燃 铝粉,这说明容器内仍有不少铝粉未能点火燃烧。

测试容器内压力变化的采集系统由 FTS2100 应变压力传感器和 DM-21000 多通道瞬态记录仪组成,测试结果见图 4 和图 5。

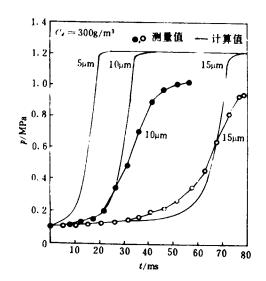
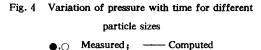


图 4 不同直径的颗粒燃烧时,容器内压力 随时间的变化曲线



150 (g) 100 10μm 15μm 15μm 15μm 15μm 15μm 15μm

 $C_2 = 300 \text{g/m}^3$

图 5 不同直径的颗粒燃烧时,容器内压力上升速率随时间的变化曲线

Fig. 5 Variation of pressure rise rate with time for different particle sizes

●,○ Measured; —— Computed

3 基本方程组

为了使问题简化,基于如下基本假设:

- 1. 铝粉为大小一致的球型颗粒,点火前在空间均匀分布。
- 2. 对于微细铝粉悬浮流,因密闭容器中各组元的质点运动速度始终较小,故采用单流体模型即忽略两相间的温度差和速度差,而将铝粉视作混合流体中的一种组分,并设该混合物作一维球对称流动。
 - 3. 可压缩流作低 Mach 数流动时,可以认为压力在全容器内均匀分布。
- 4. 气体为 Chapman 气体,即 γ =const, ρ μ=const,其中 γ 为绝热指数,μ 为气体的粘性系数。
- 5. 只考虑质量、动量和能量输运的湍流脉动的二阶关联项,且采用 Boussineq 公式使之模化。化学反应速率公式中的脉动量皆被忽略。且令层流的和湍流的 Prandtl 数、Schmidt 数和 Lewis 数皆为 1。

于是有守恒方程:

连续方程
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (\rho u r^2) = 0 \tag{1}$$

动量方程
$$p = p(t)$$
 (2)

能量方程
$$\rho c_{r}(\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial r}) = \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t} + \frac{1}{r^{2}} \frac{\partial}{\partial r} (\bar{k}r^{2} \frac{\partial T}{\partial r}) + \dot{r}_{\mathsf{A}\mathsf{I}}\theta_{\mathsf{A}\mathsf{I}}$$
 (3)

组元方程
$$\rho(\frac{\partial Y_i}{\partial t} + u \frac{\partial Y_i}{\partial r}) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[\overline{D} \rho r^2 \frac{\partial Y_i}{\partial r} \right] + \dot{r}. \tag{4}$$

状态方程
$$pw = R\rho T$$
 (5)

其中: $\bar{k}=k+k_1+k_R$, $\bar{D}=D+D_T$,k 为热传导系数,D 为质量扩散系数,脚标"T"表示湍流,脚标"R"表示辐射,Y.为组分i 的质量分数,r 表示化学反应速率, Q_A]为单位质量的铝粉燃烧释放的热量,其余的符号具有通常的含义。各参量皆为 Favre 平均值。

为消去方程(3)中的 dp/dt 项,引入下列变换[1]

$$\varphi = T p^{(1-\gamma)/2}$$

于是方程(3)写成

$$\rho c_{r} p^{(\gamma-1)/\gamma} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} + u \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right) = p^{(\gamma-1)/\gamma} \frac{1}{r^{2}} \frac{\partial}{\partial r} (\bar{k} r^{2} \frac{\partial \varphi}{\partial r}) + \dot{r}_{Al} Q_{Al}$$
 (6)

对上述方程组进行 Lagrangian 变换,即

$$\zeta = \frac{4\pi}{M_0} \int_0^r \rho r^2 \mathrm{d}r$$

其中,M₀ 为容器内总质量,于是有方程

$$\frac{\partial A}{\partial t} = \alpha \frac{\partial}{\partial \zeta} \left[z \frac{\partial A}{\partial \zeta} \right] + S \tag{7}$$

其中: $A = (Y_{Al}, Y_{O_2}, \varphi)^T$, $S = (\frac{\dot{r}_{Al}}{\rho}, \frac{\beta \dot{r}_{Al}}{\rho}, \frac{\dot{r}_{Al}Q_{Al}}{\rho c_* p^{(\gamma-1)/\gamma}})^T$, $Z = (r^4D^*, r^4D^*, r^4k^*)^T$, $D^* = \overline{D}/D = \gamma_T/\gamma$ +1, $k^* = \bar{k}/k = 1 + \gamma_T/\gamma + \frac{k_B}{k}$, $\gamma = \mu/\rho$, $\alpha = (4\pi)^2 \rho \mu/M_0^2$, β 为化学反应计量系数,上标"T"表示转置。

采用文献[2]提出的铝粉燃烧模型,即铝粉由一系列均相和非均相反应组成,而反应速度的决定步骤为氧化铝(AlO)表面的非均相反应。其化学反应方程式为

根据各基元化学反应方程式和 Arrhenius 反应速率表达形式可以推得单位体积混合物中铝粉的质量消耗率为

$$\dot{\tau}_{AI} = -\frac{6(Y_{AI}^{0})^{1/3}}{\rho_{AI}D_{s}} \overline{A} \exp(-E/RT) \rho^{5/2} Y_{AI}^{5/3} Y_{O_{2}}^{1/2}$$
(8)

其中:上标"0"表示点火后的初始状态,D,为铝粉粒直径, \overline{A} 为频率因子, \overline{E} 为活化能。

方程(6)中辐射热传导系数 kg 可采用如下近似方程。

$$k_{\rm R} = (16/3)(\sigma/a_{\rm R})T^3$$

其中:σ为 Stefan-Boltzmann 常数,ag 为 Rosseland 平均吸收系数。

湍流运动粘度 γ_T 可以写成, $\gamma_T = 11 \gamma R_{ct}^{0.56}$,其中 R_{cT} 表示湍流 Reynolds 数。

根据守恒方程还可以推得火焰传播速度 54 为

$$s_f = \frac{M_0}{4\pi r_{t,0}} \frac{\mathrm{d}\zeta_f}{\mathrm{d}t} \tag{9}$$

其中: $\int_0^{\varsigma_f} \frac{dY_{Al}}{dt} d\zeta = -\frac{c_V V_0}{RQ_{Al}} \frac{dp}{dt}$, V_0 为容器体积, 脚标"f"表示火焰阵面。

上述诸方程的初始条件为

$$p^{0} = p_{0} + \frac{R}{c_{\nu}V_{0}}E_{ig} + \frac{R}{c_{\nu}V_{0}}M_{b}^{0}(Y_{AL\,u}^{0} - Y_{AL\,b}^{0})Q_{Al}$$
 (10)

$$(p^0)^{1/\gamma}V_0 \frac{M_0 - M_b^0}{M_0} = p_0^{1/\gamma}V_0 \left[1 - \left(\frac{r_f^0}{R_0}\right)^3\right]$$
 (11)

$$\rho_b^0 = \frac{M_b^0}{4\pi (r_f^0)^3/3} \tag{12}$$

$$\rho_a^0 = \frac{M_0 - M_b^0}{4\pi [R_0^3 - (r_1^2)^3]/3} \tag{13}$$

$$T_{\mathbf{u}}^{0} = \frac{p^{0}w}{R\rho_{\mathbf{u}}^{0}} \quad \text{fl} \quad T_{\mathbf{b}}^{0} = \frac{p^{0}w}{R\rho_{\mathbf{b}}^{0}}$$
 (14)

其中:脚标"0"表示点火前容器内的状态,上标"0"表示点火时的初始状态,脚标"u"和"b"分别表示未燃和已燃状态, B₄表示点火能, B₆表示容器半径。

方程的边界条件,在r=0和 $r=R_0$ 处有

$$\frac{\partial Y_i}{\partial r} = 0 \, \pi \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \tag{15}$$

4 计算方法

方程(7)是带源项的扩散方程,为了简化计算,采用物理分裂格式[3]。该格式将反映复杂物理化学过程的微分方程分裂成一系列与简单过程有关的方程。对于每一简单过程可选用最合适的计算格式。方程(7)可分裂为反应过程和扩散过程,前者有方程 $\partial A/\partial t = S$,采用四阶 Runge-Kutta 法其算符记作 $L_S(\Delta t)$,后者有方程 $\partial A/\partial t = \alpha \frac{\partial}{\partial \zeta}(z \frac{\partial A}{\partial \zeta})$,采用 Crank-Nicolson 方法,其算符记作 $L_D(\Delta t)$ 。于是方程(7)的计算格式为

$$L(\Delta t) = L_{S}(\frac{\Delta t}{2})L_{D}(\Delta t)L_{S}(\frac{\Delta t}{2})$$
 (16)

Lagrangian 变换的目的是使方程中的对流项消失以减少数值振荡。若在此坐标中采用均匀的计算网格,由于火焰阵面后流团的膨胀,在转换为 Eulerian 坐标时,该区域的网格变得特别稀疏,这与人们的愿望正相反。为克服此缺点,采用了自适应网格^[4],在火焰阵面处网格自动加细。

表 1 铝的热力学和化学性质

Table 1 Thermal and chemical properties of aluminum

密度	比热	燃烧热	活化能	频率因子
/(kg/m³)	/(J/kg. K)	/(J/kg)	/(kJ/mol)	$/[(m \cdot (m^3kg)^{1/2}/s]$
2.7×10 ³	9. 87×10 ²	3. 1×10 ⁷	8. 2×10 ⁴	1. 5×10 ⁶

利用上述方法对直径分别为 5µm,10µm 和 15µm 的铝粉颗粒在 20 立升的球型容器中以及 5µm 的铝粉颗粒在 50 立升的球型容器中的爆炸问题进行了模拟。铝粉的主要参数

列于表 1[5]。

5 结果与讨论

5.1 压力和压力上升速率

图 4 和图 5 是根据计算结果与实验结果绘制的压力-时间变化曲线和压力变化率 (dp/dt)-时间变化曲线。两种结果趋势一致,且具有一定程度的吻合。两者的差异主要由于计算时未考虑管壁损失和铝粉的不完全燃烧。 而残渣分析表明仅 80% 左右的铝粉被燃烧。

评估粉尘爆炸特性的重要参数为最大压力 p_{max} 和最大压力上升速率 $(dp/dt)_{max}$,最大压力 p_{max} 是指铝粉完全燃烧后容器内的压力,故有

$$p_{\mathrm{max}} = p_0 + \frac{R}{c_{\mathrm{\ell}} V_0} E_{\mathrm{ig}} + \frac{R}{c_{\mathrm{\ell}}} C_{\mathrm{D}} Q_{\mathrm{Ai}}$$

其中 C_0 为铝粉的初始浓度。根据此式,颗粒直径不影响最大压力 p_{max} 。数值计算结果与此相符。但实验结果表明颗粒愈大, p_{max} 愈小,这说明大颗粒铝粉容易沉降,而不易完全燃烧。

反应区的边界 dY_A/dr 很小(参见图 6),若将其忽略,可推得方程

$$\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t} = \frac{6Q_{\rm Al}R(Y_{\rm Al,u}^0)^{1/3}}{c_{\rm V}V_0D_{\rm p}\rho_{\rm Al}}\overline{A}\int_{\xi_{\rm m}}^{\xi_{\rm b}}\rho^{3/2}Y_{\rm Al}^{5/2}Y_{\rm O_2}^{1/2}\exp(-\frac{E}{RT})\mathrm{d}\zeta$$

从该式可以看出,dp/dt 与颗粒初始直径 D,和容器体积 V_0 有关。图 5 和图 7 分别反映了颗粒直径和容器体积对 dp/dt 曲线的影响。计算和实验结果都表明随着颗粒直径增大, $(dp/dt)_{max}$ 减小,但该值出现的时间增大,计算结果还表明容器体积增大也使 $(dp/dt)_{max}$ 减小,出现的时间增大。

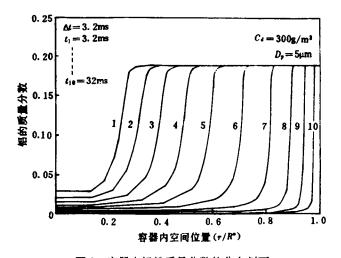


图 6 容器内铝粉质量分数的分布剖面 Fig. 6 Mass fraction distribution profiles of aluminum

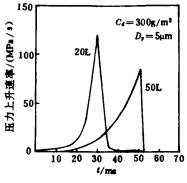


图 7 不同体积的容器内,压力上升 速率随时间的变化曲线

Fig. 7 Variation of pressure rise rate with time for different vessel sizes

5.2 产物内的温度分布

图 8为φ的分布曲线,显然流场可以分为未燃区、燃烧区和已燃区。燃烧区外φ=

const,根据其定义它表示流场中质点作等熵流动,故有等熵方程

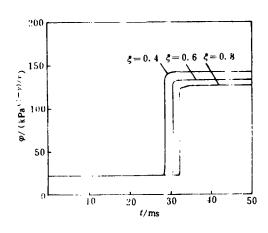
$$T_{
m u} = T_{
m u}^0 (rac{p_{
m u}}{p_0})^{(\gamma-1)/\gamma} \quad ext{fi} \quad T_{
m b} = T_{
m u} (rac{p_{
m b}}{p_{
m u}})^{(\gamma-1)/\gamma}$$

击

其中:T_b 和 p_b 表示燃烧后质点的当前温度与当前压力,T_u 和 p_u 表示该质点燃烧时的温度和压力。将上述方程代入能量守恒方程有

$$T_{\rm b} = T_{\rm u}^{\rm 0}(\frac{p_{\rm b}}{p^{\rm 0}})^{(\gamma-1)/\gamma} + \frac{\theta_{\rm Al}}{c_{\rm p}}(Y_{\rm Al,u} - Y_{\rm Al,b})(\frac{p_{\rm b}}{p_{\rm u}})^{(\gamma-1)/\gamma}$$

该式说明已燃区质点的当前温度决定于质点的当前压力和该质点燃烧时的压力。由于容器内的压力是随时间变化的,不同质点对应于不同的 p_u ,故产物内的温度分布是不均匀的。燃烧初期,(dp/dt)较小,即容器内压力随时间的变化不显著,因此产物内的温度近于均匀分布。但后来 dp/dt 变化剧烈,产物内的温度分布曲线也随之变得陡峭,由于早燃烧的质点对应的 p_u 较小,故当前温度较高,这种现象称为 Mach 效应^[7]。图 9 是根据计算结果绘制的温度分布曲线,它明显地反映了上述规律。



0 2000 0 2000 0 11 0 2000 0 1000

图 8 流团的 φ 值随时间的变化曲线

图 9 容器内温度分布剖面

Fig. 8 Variation of φ of fluid element with time

Fig. 9 Temperature distribution profiles in vessel

5.3 其它参数

图 10 是根据计算结果绘制的密度分布曲线。燃烧时因流团膨胀致使火焰两侧流场受到压缩,因此在向器壁和容器中心两个方向上密度增加。随着火焰的传播,波前质点所受到的压缩作用愈来愈强,因此密度的增加也愈来愈显著。

图 11 为不同时刻的速度剖面。由于未燃物和已燃物受到压缩,故质点分别向壁面和容器中心运动。运动的速度随质点与火焰阵面间距离的增大而减小,在壁面和容器中心处衰减为零。

图 12 为点火后火焰传播速度随时间变化的曲线。由方程(9)可知 s_f 与 dp/dt 有关,比较该图与图 5,两者的变化趋势类似。初始阶段,火焰传播速度几乎为常数,随后迅速增长。由于管壁的压缩作用,火焰接近壁面时传播速度急剧下降。

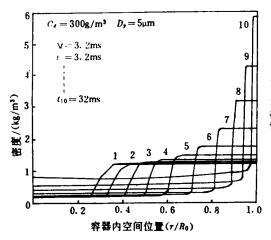


图 10 容器内密度分布剖面

Fig. 10 Density distribution profiles in vessel

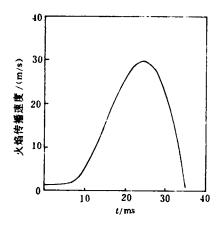


图 12 火焰传播速度随时间的变化曲线 Fig. 12 Variation of flame speed with time

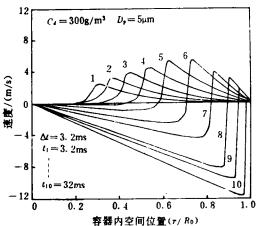


图 11 容器内质点速度分布剖面

Fig. 11 Velocity distribution profiles in vessel

6 结 论

从实验、数值模拟和理论分析三个方面 对密闭容器中的铝粉爆炸现象进行了研究和 讨论。实验中可测量的量如容器内的压力和 压力上升速率与计算结果基本相符。数值计 算还给出了另外一些实验中未能测试的物理 量的分布与变化曲线,此外通过数值计算反 映了容器体积对流场参数的影响。计算所反 映的趋势和规律与文中进行的理论分析结果 相符。

还有一些重要的因素如湍流、点火延迟、 两相间的相互作用、燃烧不完全等这里都未 能充分考虑,还有待于进一步研究和探讨。

参考文献

- 1 Ramos J I. AIAA J, 1983, 21:415~422
- 2 Markstein G H. The Combustion Institute. In: 11th Symp(Inter) on Combust, 1960. $219\sim234$
- 3 Yanneko N N. The Method of Fractional Steps. [s. 1]:Spinger Verlag, 1971. 14~41
- 4 Dwyer H A. AIAA, 1979. 79~146
- 5 Ogle R A, Chen L D, Butler P B. Combust. Sci and Tech, 1988,61:75~99
- 6 Zeldovich Ya B, et al. The Mathematical Theory of Combustion and Explosions. [s. 1]: Plenum, 1985. 472 ~473

THE INVESTIGATION OF ALUMINUM DUST EXPLOSION IN A SPHERICAL CLOSED VESSEL

Fan Baochun, Ding Dayu, Pu Yikang ^{a)}, Tang Minjun
(Nanjing University of Science and Technology, Nanjing, 210014)

(a Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100080)

ABSTRACT An aluminum dust explosion in a spherical closed vessel with central ignition has been investigated both experimentally and theoretically.

Experiments were conducted in a standard 20-liter vessel. Except measurements of pressure, the turbulence parameters were determined by using an ensemble average technique and a scanning electron microscope and a X-ray spectrograph were used to analyse aluminum particles and its combustion residues.

The numerical simulation has been performed for 20-liter and 50-liter spherical vessels. It is shown from calculated results that entropy of an element of mixture outside reaction zone keeps almost constant, then the feature of parameter profiles can be discussed theoretically. Computed results of pressure and pressure rise rate in a vessel are in agreement with experiment results. **KEY WORDS** dust explosion, heterogeneous combustion, turbulent combustion, numerical simulation.