

文章编号: 1006-9941(2018)03-0230-07

粒径对庚烷液雾爆炸场影响的数值模拟

王景鑫, 张奇, 陈腾飞

(北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室, 北京 100081)

摘要: 为了研究液雾索特直径(D_{32})对爆炸参数的影响,以庚烷为对象,控制液雾总浓度不变($80 \text{ g} \cdot \text{m}^{-3}$),改变液雾粒径,数值模拟了爆炸容器内庚烷(C_7H_{16})液雾粒径对爆炸参数的影响。结果表明:庚烷液雾场索特直径 D_{32} 为 $0 \sim 18.1 \mu\text{m}$ 时,最大爆炸压力 p_{max} 随 D_{32} 增加逐渐减小,最大值为 1.01 MPa ,最小值为 0.9015 MPa 。最大爆炸压力上升速率随 D_{32} 增大整体呈下降趋势,在 0 处达到最大值 $0.37571 \text{ MPa} \cdot \text{ms}^{-1}$,在 $18.1 \mu\text{m}$ 处达到最小值 $0.18439 \text{ MPa} \cdot \text{ms}^{-1}$,但在 $6.81 \sim 12 \mu\text{m}$ 发生反向突变,在 $10.1 \mu\text{m}$ 处达到极大值 $0.34217 \text{ MPa} \cdot \text{ms}^{-1}$,随后恢复下降趋势。液雾的径向火焰传播速度在径向距离 15 cm 附近突然增加,在 16 cm 之后剧烈下降。最大火焰速度随液雾场 D_{32} 不同而变化, $D_{32} = 10.1, 12.9, 18.1, 6.81, 0 \mu\text{m}$ 条件下液雾场的最大火焰速度依次降低,最大值为 $5.714 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$,其后依次为 $1.737, 1.36, 1.34, 1.27 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 。

关键词: 庚烷(C_7H_{16}); 液雾; 爆炸; 数值模拟; 索特直径(D_{32})

中图分类号: TJ55; O389

文献标志码: A

DOI: 10.11943/j.issn.1006-9941.2018.03.005

1 引言

液体燃料作为化石燃料的一种,广泛应用于石油、化工、塑料和橡胶等工业生产中^[1],伴随着液体燃料云雾爆炸事故的频繁发生,液雾爆炸机理的研究对改善设备、事故预防具有重要的意义。液雾是由液滴群、液滴蒸发的气体、空气组成的混合物,爆炸威力在一定条件下高于其纯气相与空气的混合物^[2]。目前,国内外针对液雾爆炸已展开广泛研究,但研究主要集中在单个液滴的蒸发与燃烧、气相两相云雾的起爆能量和爆轰波结构等方面,对于液雾粒径的研究则相对较少。刘雪岭^[3-4]对正烷烃云雾的爆炸进行了实验研究,发现在一定的浓度范围内,与粒径在 $5 \sim 15 \mu\text{m}$ 范围之外的云雾爆炸相比,云雾粒径在 $5 \sim 15 \mu\text{m}$ 的爆炸强度较高,而且化学当量比条件,气相爆炸强度依然高于气液两相云雾。Williams^[5]预测云雾粒径为 $8 \mu\text{m} < d < 15 \mu\text{m}$ 时,存在一种“转变区域”(transition range),并指出在该区域,云雾爆炸强度会出现激增现象。Polymeropoulos^[6]通过理论计算方法对单分散云雾燃烧速率进行了研究并

预测,云雾粒径为 $5 \sim 15 \mu\text{m}$ 时,液滴燃烧速率有一个明显的增加现象。Bowen P J等^[7-11]研究发现粒径在 $7 \sim 15 \mu\text{m}$ 之间的液雾具有更高的燃烧速度,并指出“transition range”发生在 $10 \mu\text{m}$ 左右,低于 $10 \mu\text{m}$ 的液雾燃烧接近纯气相燃烧。对于 $5 \sim 15 \mu\text{m}$ 的“转变区域”,国外进行了大量的仿真和实验研究,但并没有形成统一可靠的结论被沿用^[7],国内仅有少数相关实验有所涉及^[3],并没有关于此的仿真研究。基于此,本研究利用FLUENT数值计算软件,模拟了粒径为 $0 \sim 18.1 \mu\text{m}$ 的庚烷液雾在 20 L 球形爆炸罐体内的扩散及爆炸过程,并将数值模拟与文献结果进行对比分析,以期得到粒径对庚烷液雾爆炸参数的影响规律。

2 模型的建立

2.1 建立二维模型

以图1所示的实验装置^[12]为基础,模拟 20 L 球形爆炸容器内庚烷(C_7H_{16})液雾的扩散和爆炸情况。由于 20 L 球形密闭爆炸容器为轴对称结构,为了减小计算量,将其简化为柱坐标系下的二维模型,见图2。图3为喷嘴的简化设计模型。

2.2 物理化学模型假设

研究忽略一次雾化过程,即以假定粒径的庚烷液滴在一定的压力下喷进罐体,按 20 L 罐体内燃料与空气完全燃烧反应喷进 1.6 g 的 C_7H_{16} ,忽略壁面损耗,

收稿日期: 2017-05-22; 修回日期: 2017-09-11

基金项目: 国家自然科学基金资助(11372044)

作者简介: 王景鑫(1990-),女,硕士研究生,主要从事燃料空气炸药研究。e-mail: 2974836031@qq.com

通信联系人: 张奇(1956-),男,教授,主要从事燃料空气炸药研究。e-mail: qzhang@bit.edu.cn

控制喷雾压力和浓度不变,改变初始粒径以获得不同索特直径(D_{32})的液雾场。

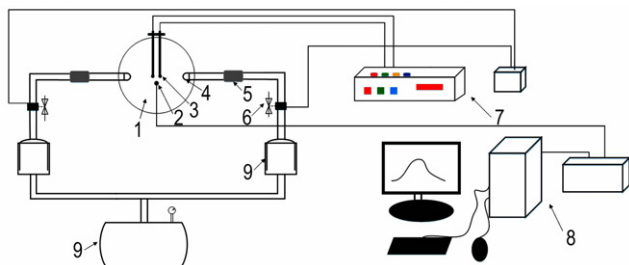


图1 模拟计算的实验装置

1—20 L 圆形爆炸装置, 2—压力传感器, 3—点火电极, 4—喷嘴, 5—储料盒, 6—电磁阀, 7—点火及控制系统, 8—信号采集系统, 9—储气室

Fig.1 Experimental apparatus of simulation

1—20 L spherical explosive device, 2—pressure sensors, 3—ignition electrode, 4—nozzle, 5—fuel container, 6—solenoid valve, 7—ignition and control system, 8—signal acquisition system, 9—air compression chamber

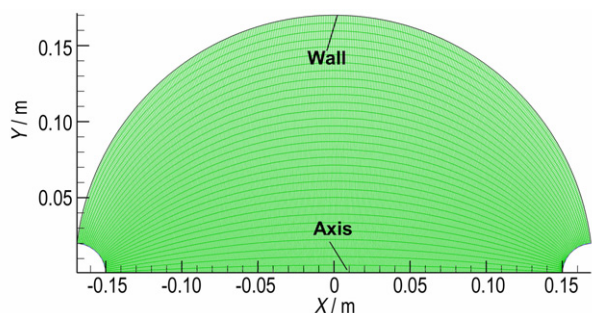


图2 球形容器简化模型

Fig.2 Simplified model of spherical vessel

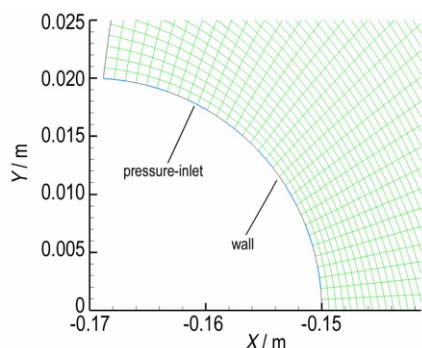


图3 喷嘴简化模型

Fig.3 Simplified model of spray nozzle

庚烷(C_7H_{16})常温下为液体,沸点 $98.5\text{ }^\circ\text{C}$ ^[3],研究假定庚烷与空气燃烧反应过程为单步不可逆的,反应方程为 $C_7H_{16} + 11O_2 \rightarrow 7CO_2 + 8H_2O$ 。因研究中所

计算的庚烷液滴粒径(微米级)较小,且有蒸发,所占体积可忽略不计,液滴扩散过程中考虑液滴之间的相互碰撞、液滴与气体之间的相互作用。为了计算精确,同时还考虑了热泳力、曳力、升力和虚拟质量力,忽略重力。 D_{32} 常在燃烧和蒸发现象中被用来代表单分散性液雾的当量直径,本研究中一律采用 D_{32} 表示液雾的粒径,见式(1)^[13]。

$$D_{32} = \frac{D_m}{1 + \alpha e^{-4\delta^2}} \quad (1)$$

式中, D_m 表示液滴的最大尺寸, m ; α 为无量纲常数,无量纲; δ 为液滴尺寸常数,无量纲。

为了与实验条件相吻合,模拟更真实的情况,研究忽略了喷雾过程中带进的空气,点火之前把爆炸罐体内的压力设置为一个标准大气压和蒸发的庚烷产生的分压的总值。

2.3 控制方程

通过求解 Navier-Stokes 偏微分方程(2)~(5)得到庚烷液雾爆炸过程中的气相流动。

质量守恒方程为:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = S_m \quad (2)$$

式中, ρ 为密度, $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$; t 为时间, s ; x_i 是空间坐标在 i 方向上的分量, m ; u_i 是速度矢量在 i 方向上的分量, $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$; S_m 为源项,为来自液滴的质量通量;

动量守恒方程为:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \rho g_i + F_i \quad (3)$$

式中, p 为静压, Pa ; τ_{ij} 是应力张量, g_i 和 F_i 分别是 i 方向上的重力体积力和外部体积力, N 。

$$\tau_{ij} = \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] + \lambda \mu \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \rho_{ij} \quad (4)$$

式中, μ 为动力粘度, $\text{N} \cdot \text{s} \cdot \text{m}^{-2}$; λ 为第二粘度,一般可取 $-2/3$ 。

能量守恒方程为:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \frac{\partial}{\partial x_i} [u_i (\rho E + p)] = \frac{\partial \left(K_{\text{eff}} \frac{\partial T}{\partial x_i} - \sum_j h_j \vec{J}_j + u_j (\tau_{ij})_{\text{eff}} \right)}{\partial x_i} + S_h \quad (5)$$

式中, K_{eff} 是有效导热系数,无量纲; $E = h - \frac{p}{\rho} + \frac{u_i^2}{2}$, h 为可压缩气体的显焓, $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$; \vec{J}_j 是物质 j 的扩散通

量, S_h 为化学反应能量源项。

液滴的扩散考虑为两相流问题, 采用了离散相模型^[14], 通过对拉氏坐标下颗粒作用力微分方程积分求解液滴的轨迹, 采用斯托克斯方程追踪(随机轨迹)轨迹模型, 颗粒所受作用力平衡方程在笛卡尔坐标系下的形式为:

$$\frac{\partial}{\partial t}(u_p) = F_D(u-u_p) + \frac{g_x}{\rho_p}(\rho_p - \rho) + F_x \quad (6)$$

式中, u 为气相速度, $m \cdot s^{-1}$; u_p 为颗粒速度, $m \cdot s^{-1}$; ρ 为气体密度, $kg \cdot m^{-3}$; ρ_p 为颗粒密度, $kg \cdot m^{-3}$;

$$F_D(u-u_p) = \frac{18\mu C_D Re}{24\rho_p d_p^2}(u-u_p) \text{ 为颗粒的单位质量拖拽}$$

曳力, N ; d_p 为颗粒直径, m ; $Re = \frac{\rho d_p |u_p - u|}{\mu}$ 为相对雷诺数(颗粒雷诺数), C_D 为拖曳力系数, 无量纲;

$$F_x = \frac{1}{2} \frac{\rho}{\rho_p} \frac{d}{dt}(u-u_p) \text{ 为附加质量力, } N。$$

液滴的传热/蒸发, 计算中使用一个简单的热平衡方程^[14](6)来关联颗粒温度 $T_p(t)$ 与颗粒表面的对流和辐射传热, 当颗粒的温度小于其蒸发温度($T_p < T_{vap}$)时, 液滴与流体之间没有质量交换, 当液滴穿过流体单元(计算网格)时, 液滴吸收(释放)的热量作为源相作用到连续相的能量方程中:

$$m_p c_p \frac{dT_p}{dt} = h A_p (T_\infty - T_p) + \varepsilon_p A_p \sigma (\theta_R^4 - T_p^4) \quad (7)$$

式中, m_p 为颗粒质量, kg ; c_p 为颗粒比热, $J \cdot (kg \cdot K)^{-1}$; A_p 为颗粒表面积, m^2 ; T_∞ 为连续相的当地温度, K ; h 为对流传热系数, $W \cdot (m^2 \cdot K)^{-1}$; ε_p 为颗粒黑度(辐射率), 无量纲; σ 为斯蒂芬孙-玻尔兹曼常数, $5.67 \times 10^{-8} W \cdot (m^2 \cdot K^4)^{-1}$; θ_R 为辐射温度, K ; 式(6)中假设颗粒内部热阻为零, 即自身温度处处一致。

当 $T_{vap} < T_p < T_{bp}$ 时, T_{bp} 为液滴的沸腾温度, 液滴温度通过自身的热平衡得出, 热平衡的计算式中把液滴的焓变与两相间的对流传热、汽化潜热联系起来:

$$m_p c_p \frac{dT}{dt} = h A_p \left\{ T_\infty - T_p + \frac{dm_p}{dt} h_{fg} + \varepsilon_p A_p \sigma (\theta_R^4 - T_p^4) \right\} \quad (8)$$

式中, c_p 为颗粒(定压)比热, $J \cdot (kg \cdot K)^{-1}$; T_p 为液滴的温度, K ; $\frac{dm_p}{dt}$ 为蒸发速率, $kg \cdot s^{-1}$; h_{fg} 为汽化潜热, $J \cdot kg^{-1}$ 。

液滴与气相流体之间传质的计算中, 液滴的蒸发量由梯度扩散^[14]确定, 即从液滴向气相的扩散率与液

滴与气流主流之间的蒸汽浓度梯度相关联:

$$N_i = k_i (C_{i,s} - C_{i,\infty}) \quad (9)$$

式中, N_i 为蒸汽的摩尔流率, $kmol \cdot (m^2 \cdot s)^{-1}$; k_i 为传质系数, $m \cdot s^{-1}$; $C_{i,s}$ 为液滴表面的蒸汽浓度, $kmol \cdot m^{-3}$; $C_{i,\infty}$ 为气相主流的蒸汽浓度, $kmol \cdot m^{-3}$; 滴表面的蒸汽分压假定等于液滴温度 T_p 所对应的饱和

和压力 p_{sat} , 则此时 $C_{i,s} = \frac{p_{sat}(T_p)}{RT_p}$, 其中 R 为普适气体常数, $8.314 J \cdot (mol \cdot K)^{-1}$ 。对于第 i 个组分, $C_{i,\infty}$ 由组分运输方程求解得到。

湍流模型采用了两方程的标准 $k-\varepsilon$ 模型^[14], 通过求解关于湍动能 k 和耗散率 ε 的守恒方程来得到流体的湍流流动, 其中 k 为湍动能, $m^2 \cdot s^{-2}$, ε 为耗散率, $m^2 \cdot s^{-3}$ 。

气相燃烧采用了有限速率/涡耗散模型^[14], 该模型考虑了化学反应和湍流混合的共同作用, 同时对 Arrhenius 反应速率 R_A 和湍流混合速率 R_E 进行计算, 并取两者中的较小值作为最终计算反应速率:

$$R = \min\{R_A, R_E\} \quad (10)$$

对于单步不可逆反应, 由 Arrhenius 公式可以得出层流化学反应速率 R_A 为:

$$R_A = Y_{fu} Y_{O_2} \rho^2 A_{fu} \exp\left(\frac{-E}{RT}\right) \quad (11)$$

式中, Y_{fu} 为燃料质量分数, 无量纲, Y_{O_2} 为氧气质量分数, 无量纲, A_{fu} 为 Arrhenius 公式中的指前因子, E 为活化能, $J \cdot mol^{-1}$, R 为普适气体常数, $8.314 J \cdot (mol \cdot K)^{-1}$ 。

涡耗散模型认为反应速率由大涡混合时间尺度 k/ε 控制, 只要湍流出现($k/\varepsilon > 1$), 反应即可进行。通过涡耗散模型计算的湍流反应速率 R_E 取燃料、氧化剂和产物三者反应速率 $R_{fu,E}$, $R_{O_2,E}$, $R_{p,E}$ 中的最小值:

$$R_E = \min\{R_{fu,E}, R_{O_2,E}, R_{p,E}\} \quad (12)$$

$$R_{fu,E} = Y_{fu} \rho A \frac{\varepsilon}{k} \quad (13)$$

$$R_{O_2,E} = Y_{O_2} \rho A \frac{\varepsilon}{\nu k} \quad (14)$$

$$R_{p,E} = Y_p \rho A B \frac{\varepsilon}{(1+\nu) k} \quad (15)$$

式中, Y_p 为反应产物的质量分数, 无量纲, ν 为氧气的化学计量系数(当燃料质量分数为 1 时), 无量纲, A, B 为经验常数, 取 4 和 0.5。

考虑气体与液滴之间的辐射传热, 辐射模型采用 P-1 辐射模型^[14]。数值计算采用 SIMPLE 算法^[14], 公式(2)~(15)均出自文献[14]。

2.4 参数设置

将 1.6 g 的庚烷在 20 ms 内喷进 20 L 球形容器之后,将压力入口 (pressure-inlet) 改成壁面 (wall), 让液雾自行静置 80 ms, 以使罐体内液雾与空气混合均匀, 100 ms 时刻在容器的几何中心处点火, 点火源设置为圆形高温区域。具体参数如表 1。

表 1 庚烷喷雾及爆炸数值模拟参数

Table 1 Numerical simulation parameters of spray and explosion for *n*-Heptane droplets

| parameters | value |
|-------------------------------|-----------------------|
| air temperature/K | 300 |
| air pressure/Pa | 1.01325×10^5 |
| pressure of spray droplets/Pa | 5.01325×10^5 |
| time of spray droplets/ms | 20 |
| ignition delay time/ms | 100 |
| ignition radius/cm | 1.5 |
| ignition temperature/K | 2000 |

3 结果与讨论

3.1 液滴的扩散

计算中控制喷雾压力不变,通过改变初始粒径,得到了索特平均直径 D_{32} 分别为 0, 6.81, 10.1, 12.9, 18.1 μm 的庚烷液雾场,液雾总浓度为 $80 \text{ g} \cdot \text{m}^{-3}$ 。为了了解液滴的分布以及液相的浓度情况,绘制了 $D_{32} = 10.1 \mu\text{m}$ 条件下液雾场内液滴在不同时刻 (5, 10, 20, 40, 80, 100 ms) 的位置分布及浓度图,见图 4。在 0~20 ms 的喷雾时间内,离散相的浓度分布梯度逐渐增大,在 20~100 ms 的静置期,没有外来气流的影响,液滴随湍流自由运动,液滴在靠近壁面处浓度较高,在对称轴位置较低,而且在 80~100 ms,罐体内液滴的分布基本稳定,在中心位置最少,液相浓度由中心到壁面逐渐增大,大部分液滴集中在壁面附近。

在喷雾的过程中,由于外来气流的影响,微米级的液滴随湍流运动具有很大的瞬时性,浓度分布不均。在静置期,液滴随湍流运动到壁面附近,受到壁面的阻碍,湍流减弱,液滴速度也降低,因此出现壁面处液滴聚集的现象。

3.2 气相庚烷浓度分布

为了研究液滴在流场内的浓度分布,选取 20 L 球罐内 0° 、 45° 、 90° 方向上具有代表向的位置作为监测区域,分布见图 5, 监测区域半径为 2 cm。图 6 为 $D_{32} = 10.1 \mu\text{m}$ 的液雾场中不同区域气相庚烷的浓度

随时间的变化曲线。

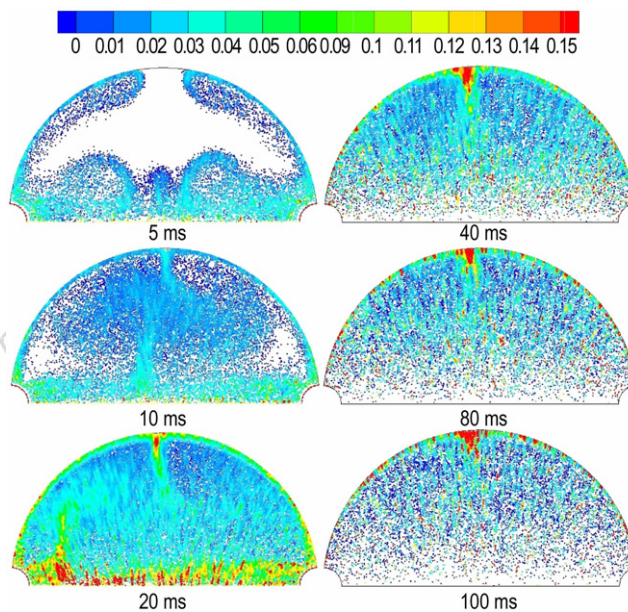


图 4 液雾场内液滴不同时刻的浓度分布 (单位: $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$) (颜色代表离散相浓度)

Fig.4 Concentration profile of *n*-heptane in the field of droplets at different time (unit: $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$) (The color represents the discrete phase concentration)

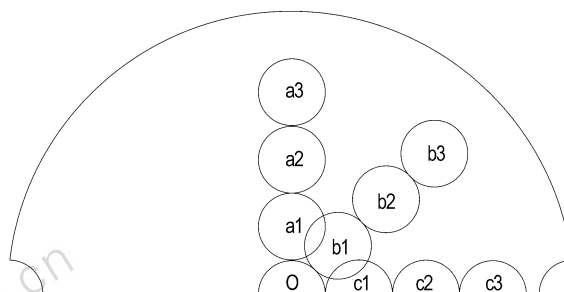


图 5 监测区域分布

Fig.5 Distribution of monitor regions

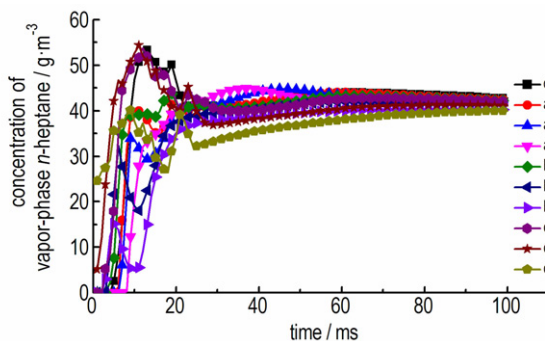


图 6 不同监测区气相庚烷浓度

Fig.6 Vapor-phase concentration of *n*-heptane in different monitor regions vs time

由图 6 可知,在喷雾阶段(0~20 ms),由于湍流的作用,气相庚烷的浓度变化比较剧烈,且随着蒸发量的增多,其浓度也逐渐增大。在静置阶段(20~100 ms),气相庚烷浓度变化趋于稳定,且在点火时刻(100 ms)时气相庚烷的浓度在液雾场内分布均匀,为 $40 \text{ g} \cdot \text{m}^{-3}$ 左右。

3.3 爆炸参数模拟

对 D_{32} 分别为 0, 6.81, 10.1, 12.9, 18.1 μm (0 代表纯气相) 的庚烷液雾场在中心点火, 计算其爆炸压力、压力上升速率、以及火焰传播速度, 见图 7 和图 8。

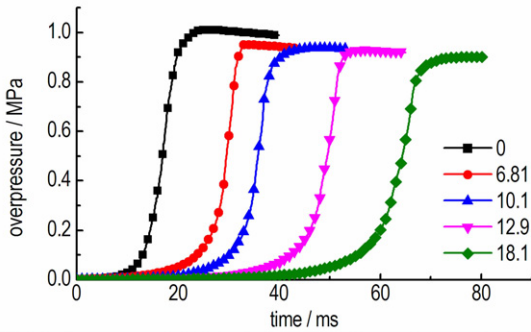


图 7 不同 D_{32} 下庚烷液雾爆炸压力随时间变化曲线

Fig.7 Curves of explosion pressure of *n*-heptane-air mixture of gas-liquid two-phase with different D_{32} vs time

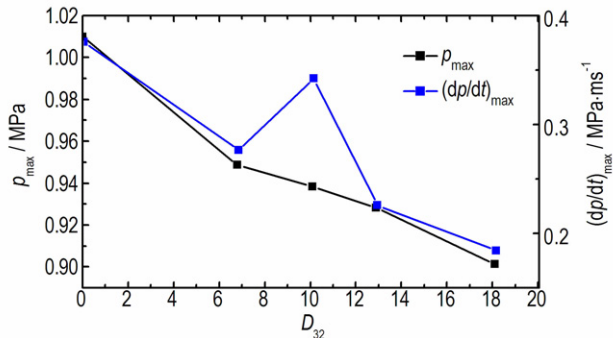
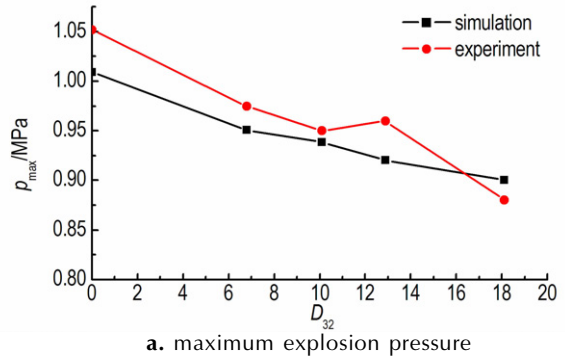


图 8 不同 D_{32} 下庚烷液雾爆炸最大爆炸压力和压力上升速率曲线

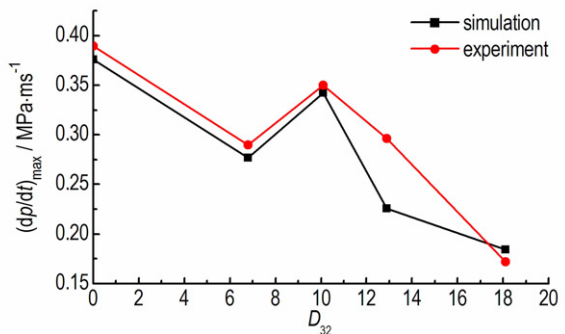
Fig.8 Curves of maximum explosion pressure/explosion pressure rise rate of *n*-heptane-air mixture of gas-liquid two-phase with different D_{32} vs time

由图 7 可知,随着庚烷液雾 D_{32} (0, 6.81, 10.1, 12.9, 18.1 μm) 逐渐增大,最大爆炸压力 p_{max} 逐渐减小,最大值为 1.01 MPa,最小值为 0.9015 MPa。图 8 中,最大爆炸压力上升速率 $(dp/dt)_{\text{max}}$ 随着庚烷液雾 D_{32} 的增大总体呈下降趋势,但在 10.1 μm 处发生反向突变,随后又恢复下降趋势, $D_{32} = 0, 6.81, 10.1, 12.9,$

18.1 μm 所对应的 $(dp/dt)_{\text{max}}$ 依次为 0.37571, 0.27672, 0.34217, 0.22599, 0.18439 $\text{MPa} \cdot \text{ms}^{-1}$ 。结果表明,在浓度 $80 \text{ g} \cdot \text{m}^{-3}$ 条件下,庚烷液雾 D_{32} 在 6.81~12.9 μm 爆炸强度出现明显的增加现象,但仍小于纯气相的爆炸强度。图 9 为不同粒径下最大爆炸压力和最大爆炸压力上升速率的模拟值与实验值^[3] 的比较,最大压力 p_{max} 和最大压力上升速率 $(dp/dt)_{\text{max}}$ 的模拟值与实验值的最大相对误差分别为 4.9% 和 23.6%。



a. maximum explosion pressure



b. maximum explosion pressure rise rate

图 9 不同 D_{32} 下爆炸压力特性的模拟值与实验值对比

Fig.9 Comparison between simulation and experimental values of *n*-heptane-air mixture of gas-liquid two-phase with different D_{32}

利用温度场随时间的变化,计算了不同 D_{32} 条件下的液雾场燃烧时容器径向(图 2 中 Y 方向)的火焰速度,结果如图 10。

由图 10 可知,火焰速度随径向距离的增加先升后降,在径向距离小于 14 cm 时,气液两相庚烷液雾的火焰传播速度均小于纯气相对应的火焰速度,而在径向距离为 14~17 cm,则反之。纯气相庚烷的火焰速度在径向距离 11 cm 处达到最大,最大值为 $1.27 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$,由于壁面阻碍了火焰的传播,所以在靠近壁面处火焰速度开始下降^[15]。同时,不同 D_{32} 的气液两相庚烷液雾的火焰速度在径向距离 15 cm 附近

发生不同程度突跃, 10.1 μm 突跃得最剧烈, $D_{32} = 6.81, 10.1, 12.9, 18.1 \mu\text{m}$ 对应的最大火焰速度分别为 1.34, 5.714, 1.737, 1.36 $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ 。这是因为靠近壁面处液滴相对比较密集, 在火焰到达此处时液滴瞬间蒸发产生大于化学计量比的燃料空气组合, 导致火焰速度突然增加, 随后由于壁面阻碍火焰传播, 火焰速度又迅速下降。

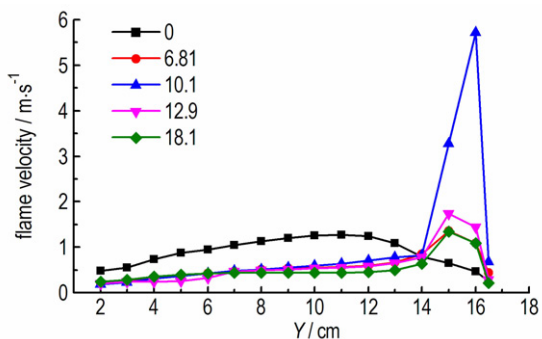


图 10 不同 D_{32} 下火焰速度随容器径向距离的变化
Fig.10 Flame velocity of different D_{32} vs radial distance of the vessel

图 11 为不同 D_{32} 对应的最大火焰速度, 由图 12 可以看出 D_{32} 的变化在 10.1 μm 处突跃, 为 5.714 $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ 。对于 5~15 μm 的液滴, 细微的气流都可能对其产生扰动^[4], 所以云雾场中液滴浓度达到绝对均匀在实际中几乎不可能, 粒径在 10.1 μm 爆炸强度出现激增的原因由于液相浓度的局部不均匀性, 导致某处液滴在更小的空间瞬间蒸发达到最大反应速度。此计算结果与文献[5]中 Williams 的预测一致。

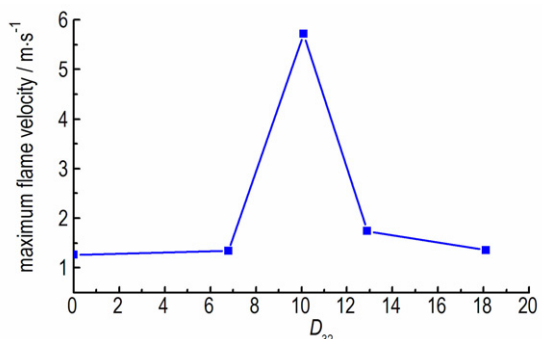


图 11 不同 D_{32} 下的最大火焰速度
Fig.11 Maximum flame velocity for different D_{32}

4 结 论

(1) 庚烷液雾场 D_{32} 为 6.81~18.1 μm 时, 液雾在自行静置 80 ms 之后, 液相浓度由容器中心到壁面逐

渐增加, 分布稳定。气相庚烷浓度分布均匀, 不同 D_{32} 液雾场中的气相庚烷浓度为 40.36~63.1 $\text{g} \cdot \text{m}^{-3}$ 。

(2) 液雾场 D_{32} 为 0~18.1 μm 时, 随着 D_{32} 的增加, 最大爆炸压力 p_{max} 逐渐减小, 最大 p_{max} 为 1.01 MPa, 最小 p_{max} 为 0.90146 MPa。最大爆炸压力上升速率 $(dp/dt)_{\text{max}}$ 随 D_{32} 的增加总体呈下降趋势, 在 $D_{32} = 0$ 处达到最大值 0.37571 MPa $\cdot \text{ms}^{-1}$, 在 18.1 μm 处达到最小值 0.18439 MPa $\cdot \text{ms}^{-1}$, 但在 $D_{32} = 10.1 \mu\text{m}$ 处发生反向突变, 达到的反向突变值为 0.34217 MPa $\cdot \text{ms}^{-1}$ 。虽然液雾场的 $(dp/dt)_{\text{max}}$ 在 $D_{32} = 10.1 \mu\text{m}$ 处发生突跃, 但仍然是纯气相 ($D_{32} = 0$) 的 $(dp/dt)_{\text{max}}$ 最大。

(3) 由不同 D_{32} 液雾场的火焰传播速度变化规律可知, 火焰速度沿径向先升后降, 火焰速度的最大值按随 D_{32} 的不同而变化, $D_{32} = 0, 6.81, 10.1, 12.9, 18.1 \mu\text{m}$ 对应的最大火焰速度值分别为 1.27, 1.34, 5.714, 1.737, 1.36 $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$, 就不同粒径液雾场所能达到的最大火焰传播速度而言, 火焰速度在 $D_{32} = 10.1 \mu\text{m}$ 处发生的突跃程度最大, 与文献[4]中 Williams 的预测一致。

参考文献:

- [1] 汪军, 马其良, 张振东. 工程燃烧学 [M]. 北京: 中国电力出版社, 2008: 27.
- [2] Gant S, Bettis R, Santon R, et al. Generation of flammable mists from high flashpoint fluids: literature review [R]. HSE Research Report RR980, 2013.
- [3] 刘雪岭. 瞬态多相云雾浓度、湍流及其爆炸物理特征实验研究 [D]. 北京: 北京理工大学, 2016. LIU Xue-ling. Experimental study on transient multiphase cloud concentration, turbulence and its explosive physical characteristics [D]. Beijing: Beijing institute of technology, 2016.
- [4] LIU Xue-ling, ZHANG Qi, WANG Yue. Influence of vapor-liquid two-phase n-Hexane/Air mixtures on flammability limit and minimum ignition energy [J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2014, 53: 12856-12865.
- [5] Williams F A. Monodisperse spray deflagration [J]. *Progress in Astronautics and Rocketry*, 1960, 2(1): 223.
- [6] Polymeropoulos C E. Flame propagation in aerosols fuel droplets, fuel vapor and air [J]. *Combustion Science and Tecnology*, 1984, 40(5-6): 217-232.
- [7] Bowen P J, Cameron L R J. Hydrocarbon aerosol explosion hazards: A review [J]. *Institution of Chemical Engineers*, 1999, 77 (Part B): 22-30.
- [8] Zabetakis M G. Flammability characteristics of combustible gases and vapors [R]. Bureau of Mine Washington DC, 1965.
- [9] Burgoyne J H, Cohen L. The effect of drop size on flame propagation in liquid aerosols. Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences [C] // The Royal Society, 1954, 221(1162): 375-392.
- [10] Faeth G M, Olson D R. The ignition of hydrocarbon fuel droplets in air [R]. *SAE Technical Paper*, 1968.

- [11] Fernando.F.Fachini.Droplet combustion[C]//19th International Congress of Mechanical Engineering, Brasilia, D F, 2007: 1-7.
- [12] 沈世磊. 流动状态下含铝气固两相爆炸的力学特征[D]. 北京: 北京理工大学, 2016.
SHEN Shi-lei. Mechanical characteristics of aluminum-gas-solid two-phase explosion under flow state[D]. Beijing: Beijing Institute of Technology, 2016.
- [13] Kenneth K. Kuo. 燃烧学原理[M]. 郑楚光, 袁建伟, 米建春. 武汉: 华中理工大学出版社, 1991: 321.
- [14] Fluent Incorporated. Fluent 6.3 user's guide[M]. Cavendish: Fluent Incorporated, 2006.
- [15] Qi Zhang, Wei Li, Da-Chao Lin, et al. Experimental study of gas deflagration temperature distribution and its measurement[J]. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 2011, 35: 503-508.

Numerical Simulation of the Influence of Partical Size on Explosion Parameters of *n*-Heptane/Air Mixtures

WANG Jing-xin, ZHANG Qi, CHEN Teng-fei

(State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

Abstract: To study the effect of Sauter diameter (D_{32}) of droplets on the explosion parameters, the effect of the droplets size of *n*-heptane (C_7H_{16}) on the explosion parameters in explosion vessel was numerically simulated, while controlling the total concentration of droplets of $80 \text{ g} \cdot \text{m}^{-3}$, when changing the droplet size. Results show that when D_{32} of *n*-heptane droplets is between 0-18.1 μm , the maximum explosion pressure p_{max} decreases gradually with the increase of D_{32} , the maximum value is 1.01 MPa and the minimum value is 0.9015 MPa. The maximum explosion pressure rise rate reveals an overall downward trend with the increase of D_{32} , which reaches the maximum value of $0.37571 \text{ MPa} \cdot \text{ms}^{-1}$ at 0 μm , and the minimum value of $0.18439 \text{ MPa} \cdot \text{ms}^{-1}$ at 18.1 μm . But in the range of 6.81-12 μm , the reverse mutation occurs, reaching the maximum value of $0.34217 \text{ MPa} \cdot \text{ms}^{-1}$ at 10.1 μm , and then restoring the downward trend. The radial flame propagation velocity of droplets suddenly increases near the radial distance of 15 cm, and then decreases sharply after 16 cm. The maximum flame velocity varies with D_{32} of droplets. Under the conditions of $D_{32} = 10.1, 12.9, 18.1, 6.81 \mu\text{m}$ and 0 μm , the maximum flame velocity of droplets field decreases successively. The maximum value is $5.714 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, followed by 1.737, 1.36, 1.34 $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ and 1.27 $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$.

Key words: *n*-heptane(C_7H_{16}); droplet; explosion; numerical simulation; Sauter diameter(D_{32})

CLC number: TJ55; O389

Document code: A

DOI: 10.11943/j.issn.1006-9941.2018.03.005