

微喷颗粒与气体混合过程的数值模拟研究

王裴^{1)†} 孙海权¹⁾ 邵建立¹⁾ 秦承森¹⁾ 李欣竹²⁾

1) (北京应用物理与计算数学研究所计算物理实验室, 北京 100094)

2) (中国工程物理研究院流体物理研究所冲击波物理与爆轰物理实验室, 绵阳 621900)

(2012年4月1日收到; 2012年5月7日收到修改稿)

冲击波作用下金属与气体界面将发生微喷混合现象, 即金属表面产生的微喷射物质在气体中的输运过程. 提出采用散体颗粒分布代替微喷初始状态, 基于气体-颗粒两相流模型对微喷混合现象进行了模拟研究. 数值模拟给出了微喷混合的动力学演化过程, 分析了初始气体压力和颗粒尺寸因素对混合层的影响规律; 在数值模拟中发现了微喷颗粒的气动破碎现象, 这可导致颗粒尺度明显减小, 成为影响微喷混合演化性质的重要物理因素. 本文模拟结果与相关实验结果取得一致, 初步表明, 气粒两相流模型是模拟微喷混合过程的一种有效方法.

关键词: 微喷射, 两相流, 冲击, 混合

PACS: 47.27.wg, 47.61.Jd, 62.50.Ef

1 引言

当冲击波从金属自由表面卸载时, 金属表面会产生高速微喷射物质^[1], 这是材料表面或界面的一种特殊破坏形态. 在内爆压缩科学和工程领域, 微喷射物质成为引发界面混合现象的一个主要来源, 对后期的混合状态和压缩效果产生直接影响. 因此, 微喷物的产生及其与内部气体的混合过程已成为冲击波物理研究中十分重要的热点和难点问题.

至今, 人们对微喷射现象已开展大量实验和理论研究, 对于微喷射形成的不同机理及其关键影响因素有了较多认识^[1-11]. 其中, Asay等^[2,3]早在20世纪70年代就开展了铝和铅等金属样品的微喷射实验研究, 获得了微喷射质量及最大速度随沟槽角度变化的规律. 韩长生^[4]基于定常射流理论, 推导出一个估算楔形槽表面微喷射质量的半经验解析公式. 此外, 国内外陆续开展了微喷射现象的微观尺度模拟研究^[5-7], 深化了对表面几何缺陷产生喷射过程的物理认识. 近年来, Zellner等^[8,9]通过一系列实验研究发现, 随着加载压力的逐步升

高微喷射质量可出现阶段性变化规律. 与此同时, 我们针对表面沟槽模型的喷射现象开展了不同尺度的理论和模拟研究; 其中, 基于连续介质力学分析了微射流形成的一些动力学性质^[10]; 基于微观尺度模拟分析, 获得了较宽冲击压力范围内微射流喷射质量和形态的变化规律, 并分析了该过程中卸载熔化的影响机理^[11].

随着人们对微喷射现象认识的逐步深入, 微喷物与气体的混合过程开始受到广泛关注. 近年来, 美、俄、法等均开展了充气条件下的微喷混合现象的实验研究, 获得了微喷混合过程的一些基本图像认识. 如: Elias等^[12]用高速摄影、X光照相等方法研究了平面充气条件下金属锡平面样品的微喷混合过程, 实验发现微喷物将与气体形成一定厚度的混合层; Ogorodnikov等^[13]用高速纹影照相的方法观测了铅材料微喷物与气体混合的局部图像, 观察到颗粒态的微喷物以及气体波; 美国Oró等^[14]用质子照相等技术对金属锡充气微喷在氩气和氙气中的输运特性进行了观测. 然而, 目前对微喷混合过程的理论认识还很缺乏, 相关的数值模拟研究还未见详细报道. 显然, 若直接模拟气体中喷射颗

† E-mail: wangpei@iapcm.ac.cn

粒形成和演化过程存在相当难度, 不仅涉及金属颗粒化过程的复杂物理建模, 还涉及金属与气体的高密度比界面的计算处理.

考虑到微喷过程时间尺度远小于其后续的混合过程, 本文提出将微喷形成过程与其在气体中的混合过程解耦, 采用气体-颗粒两相流模型模拟微喷物与气体的混合过程. 通过在拉氏流体动力学程序中建立相关模型, 数值模拟了微喷混合过程的动力学性质, 发现微喷颗粒的气动破碎现象并分析了其对混合过程的影响. 研究结果表明, 基于气粒两相流建模是目前模拟喷射混合过程的一种有效方法.

2 模型与数值方法

一般情况下, 金属材料表面微喷形成的时间极短, 约在百微秒时间内; 而对于微喷颗粒与气体的混合过程, 会关心数十微秒内的演化行为. 因此, 本文不考虑微喷射物质的形成过程, 而是在金属表面设置一定初始密度和速度分布的颗粒, 作为微喷颗粒与气体混合过程的初始状态.

混合过程的模拟采用气体颗粒两相流方法^[15,16]. 在两相流动理论中, 当流体相为气体, 颗粒相分别是固体颗粒或液滴时, 相应地称为气固两相流动或气液两相流动; 而对于微喷射现象, 在不同的加载状态下微喷颗粒可能是固态、液态、或固液混合态, 因此, 这里统称为气粒两相流. 数值方法采用颗粒轨道模型, 采用拉格朗日方法追踪颗粒的运动, 气区流场状态通过可压缩流体的连续介质力学计算获得, 其优势在于对颗粒运动的细节比较清楚, 但计算量大. 根据对微喷射现象的已有认识, 微喷射产生的颗粒具有尺度小 (一般在几到几十微米量级), 速度高 (可达 km/s) 等特点, 高压加载下单位面积的喷射量可达 mg/cm² 量级, 相应的离散颗粒数目可达数百万个. 因此, 在本文的模拟中, 每个计算颗粒代表一组具有相同尺寸、速度的真实颗粒, 以减小计算量; 考虑到高速液态微喷颗粒在气体中可能发生再次破碎现象, 程序中通过引入液滴破碎模型对此进行模拟^[17]; 当颗粒浓度较大时, 颗粒间碰撞效应不可忽略, 程序中采用二元碰撞模型^[18], 并利用局域搜索技术以减小碰撞对的搜索时间.

颗粒相的控制方程 (公式中下标 p 代表颗粒):

$$\begin{aligned} \frac{dx_p}{dt} &= u_p, \\ \frac{du_p}{dt} &= \frac{3}{4} \frac{\rho}{\rho_p D_p} C_D (u - u_p) |\mathbf{u} - \mathbf{u}_p|. \end{aligned} \quad (1)$$

颗粒阻力系数取如下形式^[17]:

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re} & Re < 0.2, \\ \frac{24}{Re} (1 + 0.15 Re^{0.687}) & 0.2 \leq Re \leq 800, \\ 0.5 & Re > 800, \end{cases} \quad (2)$$

其中, $Re = \frac{\rho D_p |\mathbf{u} - \mathbf{u}_p|}{\mu}$.

颗粒气动破碎采用 TAB 模型, 该模型是通过与弹簧系统的比拟建立的液滴变形控制方程, 当颗粒表面偏离平衡位置的位移量大于颗粒半径一半时, 颗粒破碎为等直径的小颗粒. 模型中包含了液滴的表面张力和黏性力项:

$$\frac{d^2 y}{dt^2} = \frac{2}{3} \frac{\rho}{\rho_p} \frac{(u - u_p)^2}{r_p} - \frac{8\sigma}{\rho_p r_p^3} y - \frac{5u_p}{\rho_p r_p^2} \frac{dy}{dt}. \quad (3)$$

破碎后的液滴半径由破碎前后液滴能量守恒求得:

$$r_p' = \frac{r_p}{1 + \frac{8Ky^2}{5} + \frac{\rho_p r_p^3 (dy/dt)^2}{\sigma} \left(\frac{6K - 5}{120} \right)} \quad (4)$$

其中 $y = 2x/r_p$, $y = 2x/r_p$, r_p, r_p' 为液滴破碎前后的半径, x 为液滴表面偏离平衡位置的位移, ρ 为流场密度, u, u_p 为流场和液滴速度, σ 为液滴表面张力, μ_p 为液滴黏性.

基于上述模型和数值方法, 我们在拉氏流体动力学程序中发展了相应的气体颗粒两相流计算模块, 该计算程序的主要步骤为: 1) 基于流体动力学程序计算动态加载过程; 2) 根据界面的动力学状态, 适时引入与之相适应的具有一定初始速度和颗粒度分布的微喷颗粒; 3) 确定每个颗粒所属气体网格并获得当前流场状态; 4) 根据流场条件, 计算颗粒阻力、速度以及变形情况, 若满足破碎阈值条件, 进一步给出破碎后状态; 5) 颗粒碰撞对的搜索与碰撞判断, 若发生碰撞, 根据碰撞后状态对颗粒轨道、速度等进行修正; 6) 计算颗粒与金属飞层的相互作用; 7) 计算气相和颗粒相之间的耦合源相.

3 结果与分析

本文的计算模型设置如图 1 所示. 参考已有真空微喷射实验的加载状态, 金属样品选择铅, 通过接触爆轰加载在样品中获得约 45 GPa 加载压力; 样品表面为不同初始压力状态的氦气. 本文计算中, 参考相应实验测量结果^[18]引入喷射物的初始分布状态, 见图 2. 图 2 中实线为数值模拟获得的铅样品自由面速度曲线, 在 E 时刻开始引入微喷颗粒, 柱状图为微喷颗粒的质量-速度分布.

我们对微喷颗粒与气体的混合过程进行了系列数值模拟, 考察了不同气体压力和初始颗粒尺度对混合过程的影响. 在图 3 中, 给出了气体压力分布为 5×10^5 Pa 和 1.5×10^6 Pa 时不同时刻微喷颗粒与气体的混合图像. 图中黑色部分为微喷射颗粒, 微喷颗粒上方的浅色区域为气体波区, 微喷颗粒下方的浅色区域为基体材料. 从图 3 中可以看出, 微喷颗粒主要在气体波后的流场中运动, 在气体阻力下微喷颗粒与其形成混合层, 混合层的前进速度明显低于气体中冲击波速度; 在引入微喷颗粒早期, 混合层随着加载时间逐渐变厚, 但随着加载时间的持续增加, 混合层厚度的增加趋势逐渐减弱; 此外, 气体压力为 5×10^5 Pa 的混合层厚度明显低于 1.5×10^6 Pa 气压情况, 这表明初始充气压力是影响混合层厚度的关键因素之一.

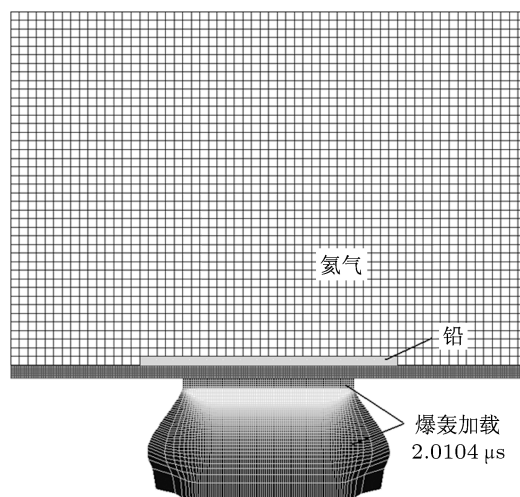


图 1 计算模型

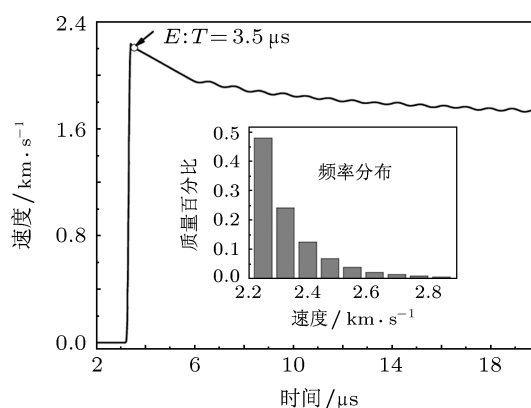


图 2 样品加载动力学过程与初始微喷颗粒设置

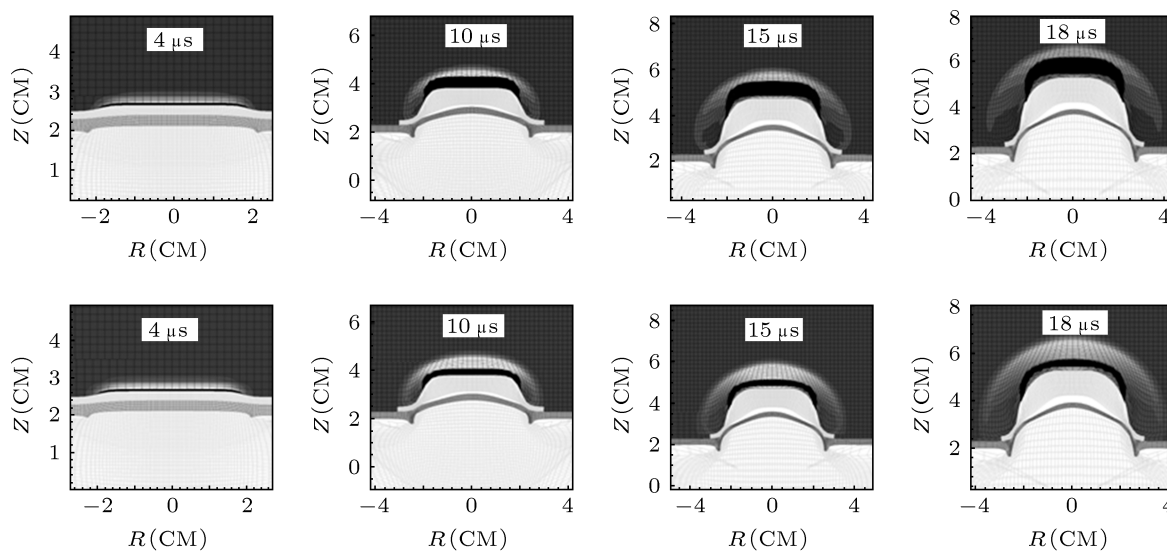


图 3 不同时刻数值模拟的图像 (上: 气体压力为 5×10^5 Pa; 下: 气体压力为 1.5×10^6 Pa)

通过对数值模拟结果的统计分析,得到了混合区头部位置随时间变化曲线,如图4所示.图4中给出了气体压力分别为 5×10^5 , 1.5×10^6 , 3.0×10^6 Pa 以及真空情况下喷射物头部位置随时间的变化,图中圆点和圆圈分别表示气压为 5×10^5 和 1.5×10^6 Pa 的实验测量结果.需要说明,根据 TAB 气动破碎模型计算结果,此时大量颗粒已经发生了再次破碎;而且,考虑颗粒破碎模型后,数值模拟得到两种气压下(实验照相时刻)混合层头部位置分别为 25.9 和 23.5 mm,与实验基本符合,这初步表明气粒两相流模型对模拟微喷混合过程的适用性.图5给出了混合区厚度随时间变化曲线,图5中三组气体压力的模拟结果均显示出,混合区厚度在早期增加速度快,随着时间推移逐步减弱;在厚度变化趋于平缓时(以 $18 \mu\text{s}$ 为例),初始 5×10^5 Pa 气压下对应的混合层厚度约 6.6 mm, 1.5×10^6 Pa 对应的混合层厚度约 3.8 mm,而 3.0×10^6 Pa 对应的混合层厚度则只有约 1.6 mm.为进一步说明此时的图像特征,我们给出了四种气压情况下(0— 30×10^5 Pa)混合图像的对比关系,如图6所示.对比结果表明,真空状态下高速微喷颗粒极为稀薄,而在充气条件下高速颗粒被明显抑制而形成混合层结构;而且随着气压的升高混合层的厚度明显变薄.

颗粒的气动破碎效应是影响混合层厚度变化的一个关键因素.对于铅材料,在 45 GPa 冲击加卸载过程中,铅样品表面层将发生熔化,因而大部分铅喷射颗粒为液态,液态金属颗粒在气体中容易进一步发生变形与破碎.图7中给出了不同气压下考虑和不考虑气动破碎效应时,喷射场头部颗粒的速度变化曲线.本文模拟中铅液滴表面张力和黏性取为熔点温度值 ($\sigma = 0.468 \text{ N/m}$, $\mu_p = 2.58 \text{ cP}$),计

算结果显示气动破碎现象发生后,颗粒可从初始尺寸减小至约 $0.35 \mu\text{m}$ (初始气压 3.0×10^6 Pa)、约 $0.65 \mu\text{m}$ (初始气压 1.5×10^6 Pa)、约 $1.45 \mu\text{m}$ (初始气压 5×10^5 Pa),这是混合层头部快速减速的重要原因;颗粒的气动破碎过程时间较短,在 $0.5 \mu\text{s}$ 以内;气体压力对破碎时间和破碎后的颗粒尺度有明显影响,气体压力越高,破碎时间越短,破碎后颗粒尺度越小.实验结果间接验证了液态微喷颗粒的

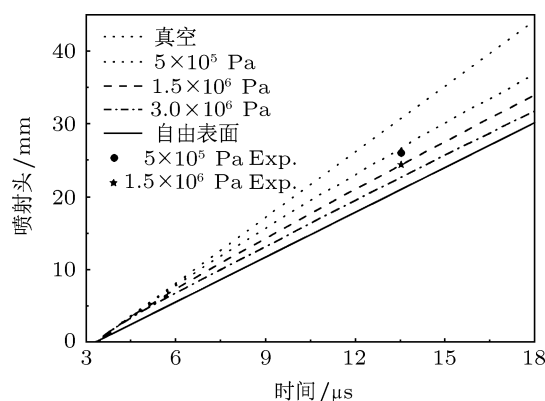


图4 混合区头部位置随时间变化曲线

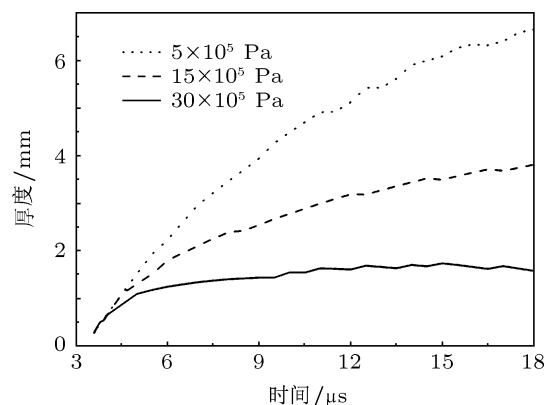


图5 混合层厚度随时间变化

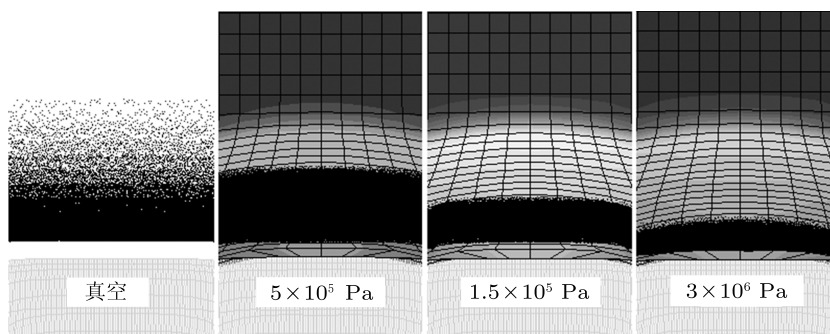


图6 不同充气压力下微喷混合厚度图像

气动破碎效应, 由于颗粒尺度是影响流场跟随性的重要因素, 尤其是可能出现亚微米尺度的颗粒, 有

必要发展更高分辨力的实验观测技术, 以获得气场中微喷颗粒尺度的直接观测.

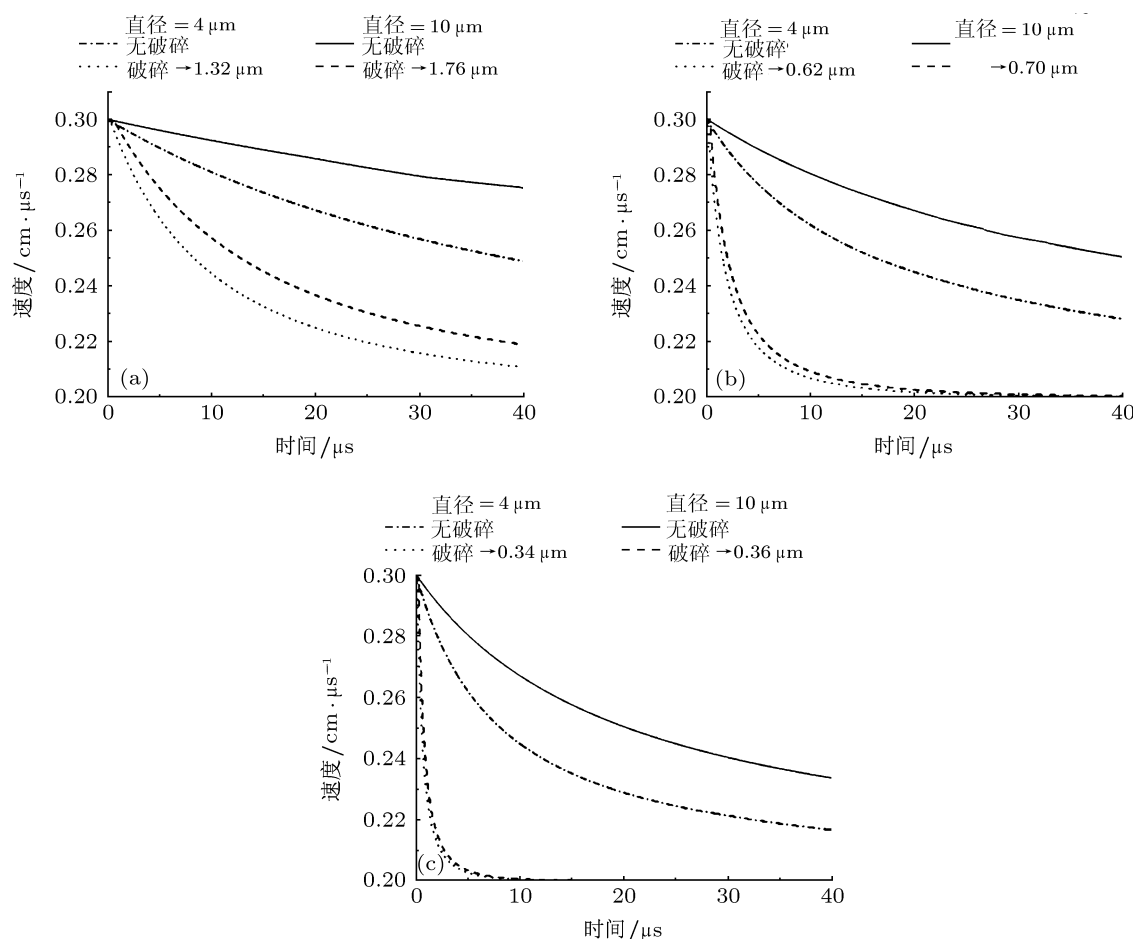


图7 喷射场头部典型尺寸颗粒速度变化曲线 (a) 5×10^5 Pa; (b) 1.5×10^6 Pa; (c) 3.0×10^6 Pa

图8给出了真空、初始气压 5×10^5 , 1.5×10^6 和 3.0×10^6 Pa 情况下混合区的密度分布曲线. 其中, 真空条件下由于不受气动阻力影响, 微喷颗粒

基本上是按震始速度自由展开; 充气条件下, 混合区被压缩, 物质密度增大, 但影响比较大的是中高速部分; 随气压的增大, 混合区密度分布有从前低后高逐步转变为均匀分布的趋势. 其主要原因是中高速部分微喷物与流场相对速度大, 颗粒气动破碎以及减速效应更明显. 需要说明的是, 由于颗粒减速规律的不同, 在运动过程中会发生颗粒间相互碰撞现象, 本文模拟采用的是刚体球完全弹性碰撞模型, 对于颗粒碰撞可能导致再次破碎以及汇聚等复杂过程, 将在后续研究中进一步深入.

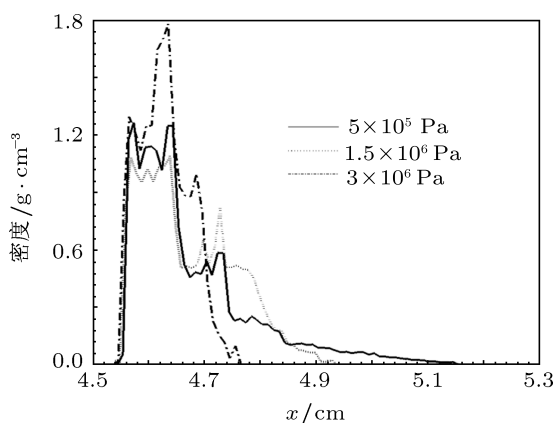


图8 冲击波出样品自由面 $10 \mu\text{s}$ 时刻混合区空间密度分布

4 结论

本文采用气体-颗粒两相流模型对微喷混合过程开展数值模拟研究, 在拉氏流体动力学程序基础

上建立了气粒两相混合数值模拟程序,以相同加载条件下的真空喷射实验测量结果作为初值条件,模拟分析了不同气体压力下微喷物与气体的混合演化过程.得到主要结论如下:1)数值模拟得到的混合层厚度与实验符合较好,初步验证了气粒两相流模型和本文数值程序对研究微喷混合过程的适用性;2)数值模拟结果给出了微喷混合的动力学演化

规律:在充气条件下高速颗粒被明显抑制而形成混合层结构,混合层厚度在早期增加速度快,随着加载时间的延长逐步减弱;随着初始气压的升高,混合层厚度明显变薄;3)在数值模拟中发现了微喷颗粒的气动破碎现象,这可导致颗粒尺度明显减小,成为影响微喷混合演化性质的重要物理因素,相关现象有待开展进一步的实验研究确认.

- [1] Walsh J M, Shreffler R G, Willig F G 1953 *J. Appl. Phys.* **24** 349
- [2] Asay J R 1976 *Material Ejection from Shock-loaded Free Surface of Aluminum and Lead* Sandia Laboratories, SAND76-0542
- [3] Asay J R, Mix L P, Perry F C 1976 *Appl. Phys. Lett.* **29** 284
- [4] Han C S 1989 *Chin. J. High Press. Phys.* **3** 234 (in Chinese) [韩长生 1989 高压物理学报 **3** 234]
- [5] Germann T C, Hammerberg J E, Holian B L 2004 *AIP Conference Proceedings* **706** 285
- [6] Chen J, Jing F Q, Zhang J L, Chen D Q 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2386 (in Chinese) [陈军, 经福谦, 张景琳, 陈栋泉 2002 物理学报 **51** 2386]
- [7] Chen Q F, Cao X L, Zhang Y, Cai L C, Chen D Q 2005 *Chin. Phys. Lett.* **22** 3151
- [8] Zellner M B, Grover M, Hammerberg J E, Hixson R S, Iverson A J, Macrum G S, Morley K B, Obst A W, Olson R T, Payton J R, Rigg P A, Routley N, Stevens G D, Turley W D, Veese L, Buttler W T 2007 *J. Appl. Phys.* **102** 013522
- [9] Zellner M B, Mcneil W V, Hammerberg J E, Hixson R S, Obst A W, Olson R T, Payton J R, Rigg P A, Routley N, Stevens G D, Turley W D, Veese L, Buttler W T 2008 *J. Appl. Phys.* **103** 123502
- [10] Wang P, Shao J L, Qin C S 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1064 (in Chinese) [王裴, 邵建立, 秦承森 2009 物理学报 **58** 1064]
- [11] Shao J L, Wang P, He A M, Qin C S 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 184701 (in Chinese) [邵建立, 王裴, 何安民, 秦承森 2012 物理学报 **61** 184701]
- [12] Elias P, Chapron P, Mondot M 1989 *Experimental study of the slowing down of shock-induced matter ejection into argon gas. in Shock Compression of Condensed Matter* (Elsevier Science Publishers) p783
- [13] Ogorodnikov V A, Ivanov A G, Mikhailov A L, Kryukov N I, Tolochko A P, Golubev V A 1998 *Combustion, Explosion, and Shock Waves* **34** 696
- [14] Oró D M, Hammerberg J E, Buttler W T, Mariam F G, Morris C, Rousculp C, Stone J B 2012 *AIP Conf. Proc.* **1426** 1351
- [15] Liu D Y 1993 *Fluid Dynamics of Two-Phase Systems* (Beijing: Higher Education Publisher) p16 (in Chinese) [刘大有 1993 二相流体动力学 (北京: 高等教育出版社) 第 16 页]
- [16] Fang D Y 1988 *Two Phase Flow Mechanics* (Changsha: Science and Technology of National Defense Publisher) p139 (in Chinese) [方丁酉 1988 两相流动力学 (长沙: 国防科技大学出版社) 第 139 页]
- [17] Liu M 2004 *Ph. D. Dissertation* (Beijing: Tsinghua University) (in Chinese) [刘敏 2004 博士学位论文 (北京: 清华大学)]

Numerical simulation on mixing process of ejecta and gas

Wang Pei^{1)†} Sun Hai-Quan¹⁾ Shao Jian-Li¹⁾ Qin Cheng-Sen¹⁾ Li Xin-Zhu²⁾

1) (*Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094, China*)

2) (*National Key Laboratory of Shock Wave and Detonation Physics, Institute of Fluid Physics,*

Chinese Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China)

(Received 1 April 2012; revised manuscript received 7 May 2012)

Abstract

Ejecta mixing takes place at the interface between metal and gas under shock loading, i.e., the transport process of ejecta from metal surface appears in the gas. In this paper, adopting disperse particles instead of the initial ejecta, we simulate the ejection mixing process according to two-phase flow of gas and particle. We give the numerical results of the evolution process of the mixing, and analyze the effects of initial gas pressure and particle size on the mixing zone. The pneumatic break is observed from the numerical simulations, which can lead to evident reduction of the particle and then become an important factor affecting the evolution of mixture; also, our simulations are consistent with the corresponding measurements, showing that the gas and particle two-phase flow model is an effective method to simulate the ejection mixing.

Keywords: ejection, two phase flow, shock, mixing

PACS: 47.27.wg, 47.61.Jd, 62.50.Ef

† E-mail: wangpei@iapcm.ac.cn