DOI: 10.11883/1001-1455(2015)06-0901-06

低温环境下甲烷爆炸流场特性模拟*

李润之[1,2],司荣军[1]

(1.中煤科工集团重庆研究院有限公司火灾爆炸防治研究分院,重庆 400037;
2.重庆大学资源与环境科学学院,重庆 400037)

摘要:在低浓度煤层气含氧液化工艺过程中,甲烷浓度会处于爆炸极限范围内,存在爆炸危险。采用流场模拟平台,对密闭容器内低温环境条件下的甲烷爆炸过程进行了数值模拟。通过研究得出:在反应体系体积及初始环境压力不变的情况下,环境温度越低,最大爆炸压力越大,到达最大爆炸压力所需时间越长;爆炸流场以化学反应区为阵面分别建立正负流动区,并不断向壁面推进,火焰传播过程受化学反应区正反馈机制的影响,在密闭容器内出现点火、加速传播、衰减传播和猝灭4个阶段;随着环境温度的降低,火焰传播速度明显降低,火焰持续时间延长。该结论可为认清低温条件下的甲烷爆炸机理及预防低浓度煤层气含氧液化工艺爆炸事故提供依据。

关键词:爆炸力学;反应速率;火焰传播;甲烷爆炸;流场;爆炸压力

中图分类号:O389　　**国标学科代码**:13035　　**文献标志码**:A

密闭容器内气体爆炸实验技术是研究气体爆炸特征参量的主要方法,但受实验条件限制,测试结果多反映气体爆炸的压力特性[1-3],少有关于密闭容器内爆炸流场变化过程及火焰/冲击波传播方面的报道,对低温环境的气体爆炸研究也没有报道。数值模拟具有快速、经济的优点,能得到一些在爆炸瞬态过程中目前实验手段所不能测试到的信息,已成为继理论分析、实验研究后另一种有力的科研工具[4-6]。

在低浓度含氧煤层气利用过程中,一直困扰煤层气大规模利用的主要因素是煤层气中可燃气体浓度太低,容易使其处于爆炸极限范围之内。深冷液化工艺过程中的低温精馏液化单元主要是在精馏塔内进行的,此时煤层气处于低温环境,甲烷可能会处于爆炸极限范围之内,其利用的安全性难以得到保证[7]。因此,本文中对密闭容器内低温环境条件下甲烷爆炸过程进行数值模拟,分析流场的结构特性,定量认识密闭容器内低温环境条件下的甲烷爆炸流场结构和火焰传播情况,为低浓度煤层气含氧液化工艺有效预防爆炸事故提供理论依据。

1　含氧液化工艺爆炸危险性分析

低温精馏液化单元是低浓度煤层气深冷液化工艺中最关键的环节,经净化后的煤层气,在深冷液化过程中,混合气体由气相变为液相,其中,转化过程是逐步进行的,各种气体的气相组分逐渐变小,直到最后全部液化。3种气体(甲烷、氧气、氮气)的沸点分别为-161.5、-183.1和-195.8 ℃,由此可见,液化过程中甲烷首先被液化,其次是氧气和氮气。因此在煤层气液化过程的某一阶段,甲烷含量必定处于爆炸极限范围内,液化过程的安全性降低。

图1为某精馏液化工艺过程液相和气相组分随温度的变化情况,从图中可以看出,在精馏塔内部不同温度条件下,气相组分甲烷的浓度是会处于爆炸极限范围内,且在此状态下,甲烷气体处于富氧状态,并有相应的液相组分,一旦遇到点火源,存在甲烷爆炸的危险性。鉴于低温情况下爆炸实验测试结果仅反映爆炸压力情况,且超低温实验操控难度较大,无法大规模、全面开展低温情况下甲烷爆炸实验,为实现对低温情况下的甲烷爆炸流场结构进行研究,对低温环境条件下甲烷爆炸特性进行了数值模拟。

* **收稿日期**:2014-11-10;**修回日期**:2014-12-12
基金项目:国家自然科学基金项目(51274238,51374235);中国博士后科学基金项目(2013M531940)
第一作者:李润之(1981—　),男,博士,副研究员,runzhi_li@126.com。

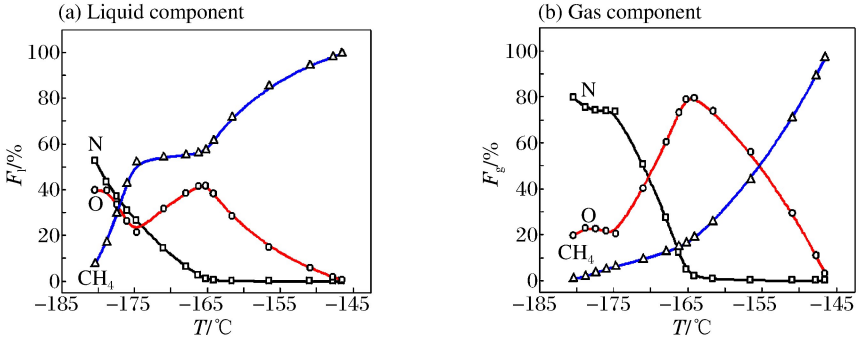

图 1 组分随温度变化情况

Fig. 1 Changes of component with temperature

2 数值模拟

2.1 计算模型

数值模拟的物理模型采用 20 L 球形气体爆炸特性实验装置的简化模型，在模拟过程中忽略罐内附属设备的影响，将密闭容器视为完全球形，由于球形实验装置具有轴对称特性，因此可将整个实验装置简化为二维轴对称模型，建立的物理模型如图 2(a)所示。使用 GAMBIT 软件划分网格，整个流场采用四边形网格进行划分，保证计算过程中的湍流黏度比与实际情况相适应，由于流场中心点火区域在点火初始时刻能量释放量较大，温度、速度、压力梯度较大，因此对该区域网格进行了局部加密，流场网格如图 2(b)所示。

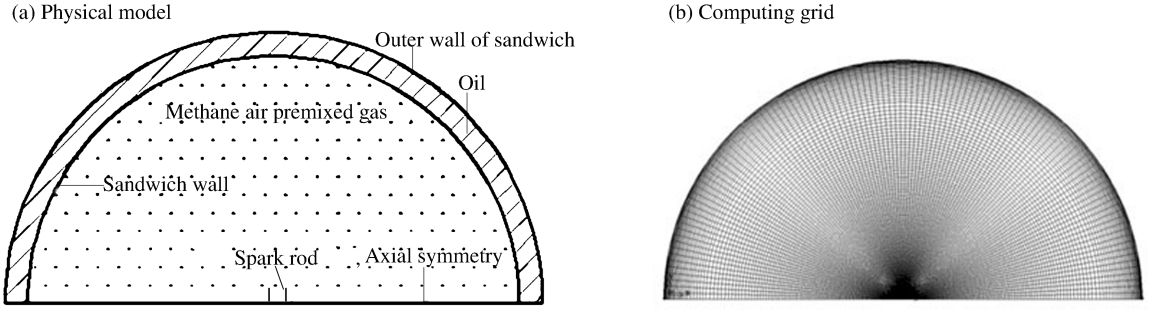

图 2 物理模型和计算网格

Fig. 2 Physical model and computing grid

2.2 数值计算方法

采用流体力学基本方程中的质量守恒方程(又称为连续性方程)、动量守恒方程(简称为动量方程)和能量守恒方程(简称为能量方程)，同时考虑到组分的化学反应作用及组分输运过程，各方程如下：

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i)+\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i Y_i)=-\frac{\partial J_i}{\partial x_j}+R_i \tag{1}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i)+\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j)=\rho f_i-\frac{\partial p}{\partial x_i}+\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \tag{2}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E)+\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho E u_j)=\rho f_j u_j-\frac{\partial}{\partial x_j}(p u_j)+\frac{\partial}{\partial x_j}(\tau_{ij} u_i)+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(k\frac{\partial T}{\partial x_j}\right)+S_E \tag{3}$$

式中：

$$\tau_{ij}=-\frac{2}{3}\frac{\partial u_k}{\partial x_k}\delta_{ij}+\mu\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}+\frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) \tag{4}$$

$$E=e+\frac{1}{2}u_i u_j \tag{5}$$

用 FLUENT 模拟软件进行基本控制方程的离散和方程的求解。模拟采用压力基瞬态求解器，压力-速度耦合方程采用 SIMPLE 算法求解，梯度差分采用 GREEN-GAUSS 节点基格式，其余待求量（包括压力、密度、动量、湍流变量以及燃烧组分标量等）空间差分均采用二阶迎风格式，时间采用的是隐式二阶格式，压力采用二阶格式，其余采用二阶迎风格式。中心点火模型是一个能量 10 J、持续 1 ms、直径 5 mm 的电火花模型。

2.3 边界条件及初始条件

壁面采用混合热边界，对流换热系数为 30 W/(m^2 · K)，自由流温度和模拟温度相同，外部辐射率为 1，外部辐射温度为 300 K，壁面厚度为 0，壁面热释放率为 0。

初始环境压力为 0.1 MPa，x 方向和 y 方向速度均为 0，甲烷质量分数为 0.053，氧气质量分数为 0.21，二氧化碳、一氧化碳以及水蒸气质量分数均为 0。初始温度即为模拟温度，湍流动能为1 m^2/s^2，湍流耗散率为1 m^2/s^3。点火区域设置于中心区域，以直径 5 mm 的高温高压火球模拟点火源，且区域内网格初始压力为 0.5 MPa，初始温度为 2 500 K，其他参数与未反应区相同，近似模拟高压放电产生的电火花区域引发的甲烷气体强迫点火。

3 计算结果及其分析

3.1 低温爆炸压力特性

图 3 为不同环境温度条件下密闭容器内爆炸压力随时间的变化情况，并与常温常压条件下的实验值进行对比。从图 3(a)中可以看出，常温常压情况下模拟结果与实验结果在爆炸压力的上升过程中具有较高的重复性，证明了所采用数值计算方法的正确性，说明该数值计算方法适用于不同温度条件下的甲烷爆炸模拟研究。将不同温度条件下的爆炸压力曲线归一化之后如图 3(b)所示，此时 5 种温度下的压力曲线在初始上升阶段几乎完全重合，比较 5 条曲线的上升曲率可以发现，环境温度越低，最大爆炸压力就越大，到达最大爆炸压力的时间就越长。

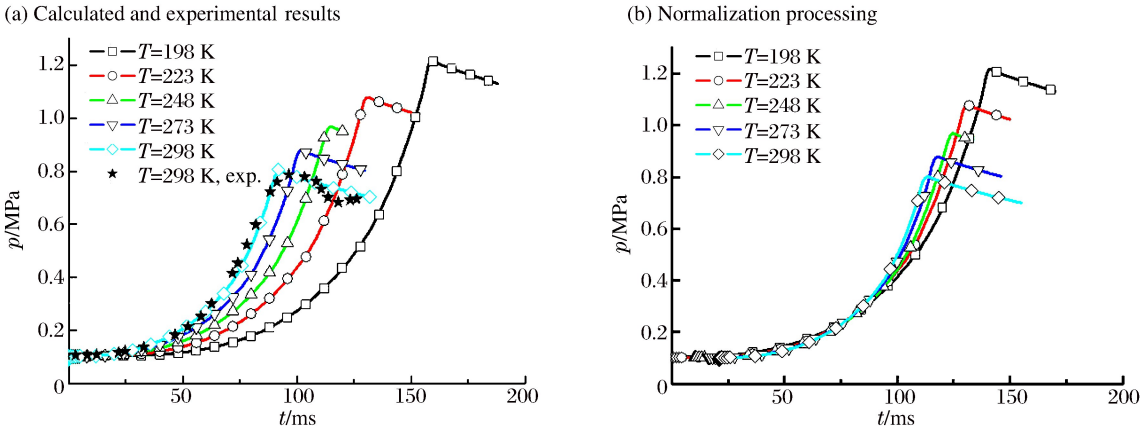

图 3 不同温度条件下的爆炸压力曲线

Fig. 3 Explosion pressure-time curves at different temperatures

表 1 中给出了不同环境温度条件下的最大爆炸压力计算值和常温条件的测试值，其中 $\varphi(CH_4)$ 为 CH_4 体积分数，p_0 为初始环境压力，T_0 为初始环境温度，p_{max} 为最大爆炸压力（这里指绝对压力）。可以看出，随着环境温度的降低，在反应体系体积和初始环境压力不变的情况下，密闭容器内气体的物质的量会逐步增大，而混合气体的最大爆炸压力也会不断上升。在本模拟条件下，环境温度从 298 K 降低到 198 K 时，最大爆炸压力从 0.80 MPa 升高到 1.20 MPa，是原来的 1.5 倍。

根据标准气体状态方程，当环境温度降低时，气体分子间的间距减小，单位空间内的物质的量增加，如果一旦甲烷发生爆炸，气体完全反应后释放的总能量会远大于常温情况，反应体系内气体在受到释放能量的作用下压缩效应更明显，因此容器内的爆炸压力就越大。

表 1 不同温度条件下的最大爆炸压力

Table 1 Maximum explosion pressure at different temperature

$\varphi(CH_4)$/%	p_0/MPa	T_0/K	p_{max}/MPa	备注
10.1	0.101	298	0.802	实验值
10.1	0.101	298	0.800	模拟值
10.1	0.101	273	0.880	模拟值
10.1	0.101	248	0.970	模拟值
10.1	0.101	223	1.060	模拟值
10.1	0.101	198	1.200	模拟值

3.2 爆炸流场结构及火焰传播分析

图 4 分别为模拟 198 K 低温条件下甲烷爆炸过程的温度场、径向速度场和化学反应速率在不同时刻的分布云图。从中可以看出，甲烷爆炸在一个极细的化学反应区内进行，并且随着爆炸的发展，化学反应区不断向壁面处推进；反应后气体温度可高达 2 000 ℃；爆炸径向流动在未反应区为正流动，而在反应区内为负流动。甲烷爆炸传播过程是一个复杂的伴随不同物质流动的化学反应过程，在化学反应区域前沿建立起火焰阵面，随着爆炸的发展过程迅速向壁面处推进；化学反应的能量释放形成压力差，并分别在反应区和未反应区形成负流动和正流动区域；随火焰阵面的推进，反应区和未反应区的大小、流动状态均发生改变。而随着环境温度的降低，其反应区和未反应区之间的温度梯度会越来越大，化学反应越激烈。

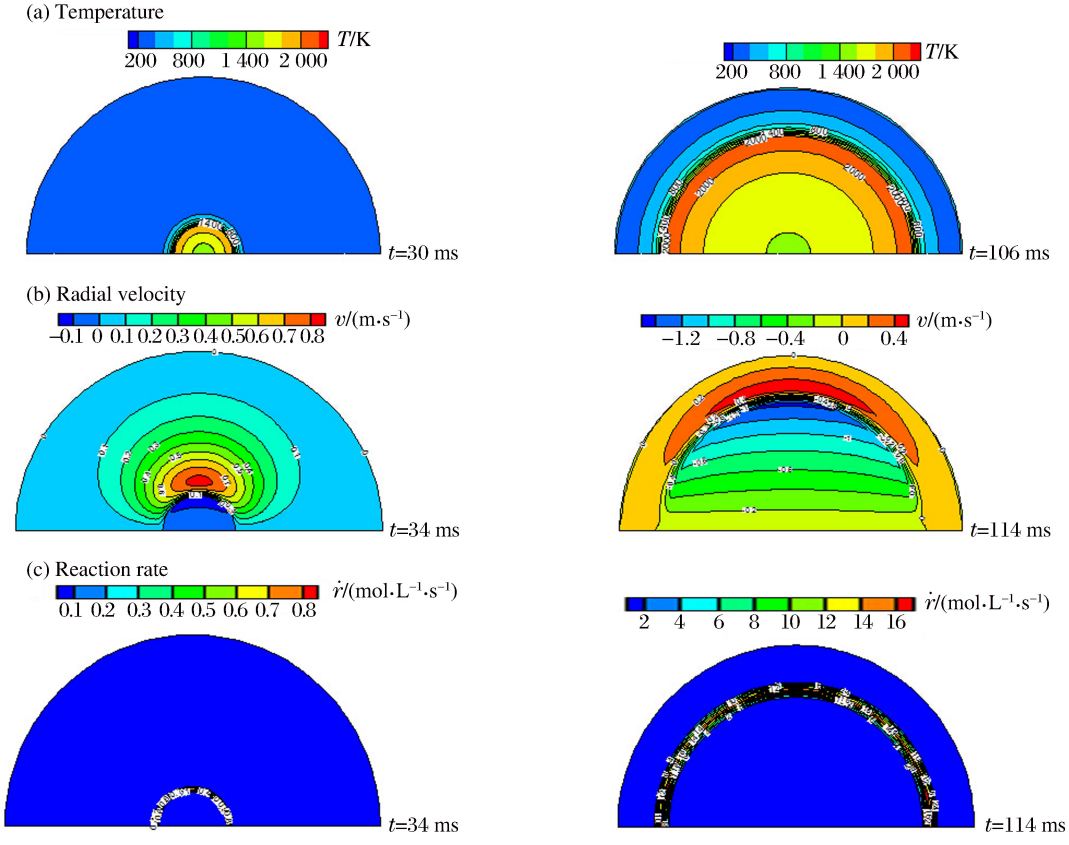

图 4 低温情况甲烷爆炸过程场量分布情况

Fig. 4 Flow field distribution of methane explosion in low temperature environment

数值模拟得出的低温情况下化学反应推进过程及流场结构的演化过程与常温常压条件下燃烧爆炸过程基本类似。而火焰传播情况是不同环境温度对爆炸微观反应过程影响的宏观体现，也是分析爆炸

传播过程中流场结构变化情况的主要参考。图 5 分别给出常温常压(298 K、0.101 MPa)和低温常压(198 K、0.101 MPa)环境条件下的火焰传播速度随时间和距离的变化情况。

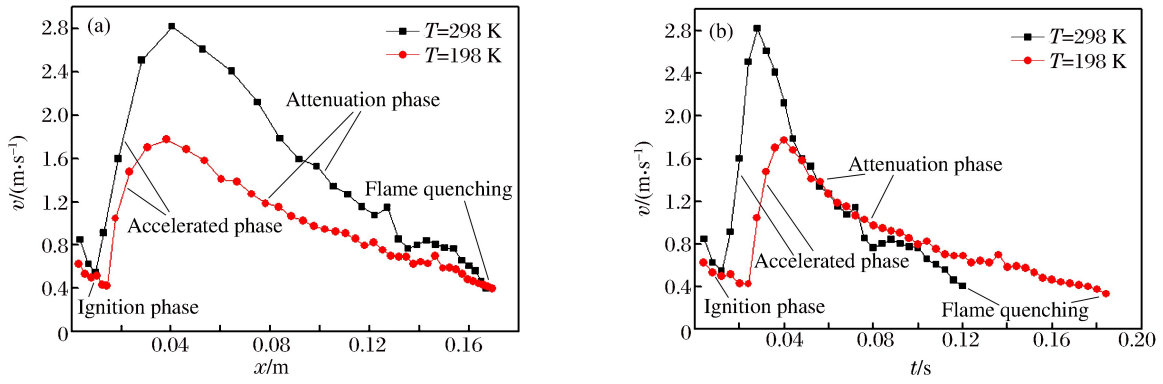

图 5 火焰传播速度

Fig. 5 Flame propagation velocities

从图 5 中可以看出,火焰传播分 4 个阶段:(1)点火阶段。在点火的中心区域,火焰以较低的速度传播,此段距离约 0～0.015 m;(2)加速传播阶段。此过程中火焰传播速度从点火阶段的较低传播速度迅速上升至最大火焰传播速度,此段位置在距点火点为 0.015～0.04 m 处;(3)衰减传播阶段。火焰传播速度逐渐从最大传播速度开始衰减,直至达到罐壁,此段处在 0.04～0.172 m 处;(4)猝灭阶段。此阶段由于火焰接触罐壁,火焰开始猝灭,直至化学反应区完全消失,火焰熄灭。

低温环境工况的火焰传播行为与常温情况下有明显的差别。在低温环境条件下,点火阶段持续时间相对于常温常压工况较长(约 22 ms),占有的区域也较大(区域半径约 14 mm),并且整个过程中的最大火焰传播速度仅为 1.78 m/s,远低于常温常压情况下 2.82 m/s,直接导致容器内火焰持续时间从 120 ms 提升至 184 ms,到达最大爆炸压力的时间从 90 ms 增长到 160 ms。其原因与物质间的初始反应活性有关,分子发生化学反应,需要吸收一定的能量破坏既有分子间的结构,并与其他分子接合,形成新的生成物。当环境温度较低时,原反应释放的能量一部分要通过一定的时间提升环境温度,才能达到与常温一致的工况。相对常温情况而言,低温环境的分子反应活性较低,反应持续时间延长,致使火焰传播速度变慢。

4 结 论

(1)在反应体系体积及初始环境压力不变的情况下,环境温度越低,最大爆炸压力越大,到达最大爆炸压力的时间越长。在本模拟条件下,环境温度由 298 K 降低到 198 K 时,最大爆炸压力从 0.80 MPa 升高到 1.20 MPa,升高到原来的 1.5 倍;到达最大爆炸压力的时间从 90 ms 增长到 160 ms,增长到原来的 1.7 倍。

(2)甲烷爆炸传播过程中,爆炸流场以化学反应区为阵面分别建立正负流动区,并不断向爆炸罐壁面推进,在密闭容器内,由于受化学反应区正反馈机制的影响,火焰传播过程可分为点火阶段、加速传播阶段、衰减传播阶段和猝灭阶段 4 个阶段。

(3)随着环境温度的降低,火焰传播速度明显降低,火焰持续时间延长。在本模拟条件下,环境温度从 298 K 降低到 198 K 时,最大火焰传播速度从 2.82 m/s 降至 1.78 m/s,降低到原来的 0.6 倍;火焰持续时间从 120 ms 延长到 184 ms,延长到原来的 1.5 倍。

参考文献:

[1] 李润之,司荣军. 瓦斯浓度对爆炸压力及压力上升速率影响[J]. 西安科技大学学报,2010,30(1):29-33.

Li Run-zhi, Si Rong-jun. Effect of gas concentration on the explosion pressure and pressure rise rate[J]. Journal of

Xi'an University of Science and Technology, 2010,30(1):29-33.
[2] 宫广东,刘庆明,白春华,等.10 m³爆炸罐中甲烷燃烧爆炸发展过程[J].实验力学,2011,26(1):91-95.
Gong Guang-dong, Liu Qing-ming, Bai Chun-hua, et al. On the development of methane combustion and explosion in a 10 m³ explosion vessel[J]. Journal of Experimental Mechanics, 2011,26(1):91-95.
[3] 邓军,程方明,罗振敏,等.湍流状态下甲烷爆炸特性的实验研究[J].中国安全科学学报,2008,18(8):85-88.
Deng Jun, Cheng Fang-ming, Luo Zhen-min, et al. Experimental study on methane explosion property in turbulent flow[J]. China Safety Science Journal, 2008,18(8):85-88.
[4] 黄子超,司荣军,张延松,等.初始温度对瓦斯爆炸特性影响的数值模拟[J].煤矿安全,2012,43(5):5-7.
Huang Zi-chao, Si Rong-jun, Zhang Yan-song, et al. Numerical simulation of the influence of initial temperature on gas explosion characteristics[J]. Safety in Coal mines, 2012,43(5):5-7.
[5] 李润之.点火能量与初始压力对瓦斯爆炸特性的影响研究[D].山东:山东科技大学,2010.
[6] Han J, Yamashita H, Yamamoto K. Numerical study on spark ignition characteristics of a methane-air mixture using detailed chemical kinetics (Effect of electrode temperature and energy channel length on flame propagation and relationship between minimum ignition energy and equivalence)[J]. Journal of Thermal Science and Technology, 2009,4(2):305-313.
[7] 王长元,张武,陈久福,等.煤矿区低浓度煤层气含氧液化工艺技术研究[J].矿业安全与环保,2011,38(4):1-3.
Wang Chang-yuan, Zhang Wu, Chen Jiu-fu, et al. Research on oxygen-containing liquefaction technology for low-concentration coal-bed gas in coal mining area[J]. Mining Safety & Environmental Protection, 2011,38(4):1-3.

Simulation study of flow field characteristics of gas explosion in low temperature environment

Li Run-zhi[1,2], Si Rong-jun[1]

(1. *Fire and Explosion Prevention Research Branch, China Coal Technology Engineering Group Chongqing Research Institute, Chongqing* 400037, *China*;
2. *College of Resources and Environmental Science, Chongqing University, Chongqing* 400044, *China*)

Abstract: The methane has a high risk of gas explosion because its concentration has come into the explosion limit range in the liquefaction process of low-concentration oxygen-bed methane. This gas explosion process was simulated on a flow field platform at low temperature in an air tight container. According to the simulation results, when the reaction system volume and environmental pressure are invariable, the lower the ambient temperature, the greater the maximum explosion pressure, and the longer the time it takes the methane gas to reach the maximum explosion pressure; the explosion flow field set up the positive and negative flow areas with chemical reaction zone as the front, and continually approaching the wall; the flame propagation process as affected by the chemical reaction is a positive feedback mechanism, and four phases—flame ignition, accelerated propagation, attenuated propagation and quenching—are found occurring in the airtight container; with the falling down of the ambient temperature, flame propagation speed decreased markedly, and the flame duration extended. The resulting conclusions provide an important basis for understanding methane explosion mechanism and preventing explosion accidents in the liquefaction process of low-concentration oxygen-bed methane under low-temperature conditions.

Key words: mechanics of explosion; reaction rate; flame propagation; methane explosion; flow field; explosion pressure

(责任编辑　曾月蓉)