DOI: 10.11883/bzycj-2016-0262 文章编号: 1001-1455(2018)03-0541-08

油气在持续热壁下热着火发生的数值模拟*

吴松林[1],杜 扬[2],欧益宏[2],张培理[2],梁建军[2]
(1.陆军勤务学院基础部,重庆 401311;
2.陆军勤务学院供油工程系,重庆 401311)

摘要: 为了对油气在持续热壁下热着火发生过程进行数值模拟,耦合化学动力学模型、流体动力学模型及辐射传热模型,建立了油气热着火的统一模型。基于实验工况,模拟了受限空间中油气在持续热壁条件下热着火发生过程,并分析了温度、压力流场的演变特征,以及不同位置处温度、压力、层流速度、湍流速度和组分质量分数的变化曲线。通过模拟,发现油气热着火过程存在 3 个阶段,分别为加热初始阶段、加热中间阶段和热着火发生阶段。不同阶段存在的主要原因是化学反应和流动的主导作用不同。

关键词: 油气;统一模型;热着火;持续热壁;化学动力学;流体动力学;辐射传热
中图分类号: O381 **国标学科代码**: 13035 **文献标志码**: A

可燃气体着火过程的影响因素、燃烧特性、传播特性等一直是安全领域的研究热点,已取得了许多成果。其中对单质可燃气体的研究成果较多,对混合可燃气体的研究较少,如油气。油气是一种主要由轻质烷烃组成的混合物。混合物的研究较困难,如对汽油燃烧特性的研究,往往采用其替代物进行研究[1-3]。Du 等[4]已通过实验研究了油气着火的影响因素,欧益宏等[5]、杜扬等[6]、Ou 等[7]已通过实验研究了受限空间爆炸的传播特性。但受实验条件限制,某些研究还有待深入,如温度、压力、火焰速度、湍流变化速度、组分变化速度等参数的演变特征。数值模拟是研究可燃气体着火、爆炸过程的一种有效方法,如 Bi 等[8]、Wang 等[9]、Skjold 等[10]研究了具有某种特殊几何结构的封闭管道内的气体爆炸过程,Sarli 等[11]研究了有障碍物直管道内的气体爆炸过程。通过数值模拟能获得采用实验方法不能测试和观察到的一些信息,而且还具有安全、经济的特点。但是数值模拟的关键是建立恰当的模型、反应机理和初始条件。吴松林等[12]对油气的化学反应机理进行了简化,为油气着火、爆炸的数值模拟奠定了基础。本文中,基于油气简化机理[12]和实验结果[13],将油气化学动力学、辐射模型和传质相互耦合,通过建立统一控制方程组模型,选择适当的数值解法和初始条件,对持续热壁条件下油气热着火的发生进行数值模拟,以期获得的相关数值结果可作为实验结果的有益补充和启发进一步探讨。

1 统一控制方程组模型和数值解法

基于实验背景,对受限空间中油气热着火的发生作如下假设:(1)混合气体处于绝热环境中,受限空间与外界的热量传递可忽略;(2)混合气体处于可压缩、低马赫数的二维流动状态;(3)黏性耗散、压缩功的影响可忽略。

油气着火过程是流动过程和组分化学反应过程的耦合。在受限空间持续热壁加热情况下,还要同时考虑热壁与气体之间的对流换热、气体间能量的辐射。因此,对油气热着火需要同时建立化学反应模型、对流换热模型、辐射模型以及综合上述模型的流场控制方程组模型。对化学反应采用吴松林等[12]提出的 47 个组分、100 个基元反应的油气简化机理;对辐射模型采用 P-1 模型;对加热热壁与可燃气体的对流采用牛顿冷却公式;其他的控制方程有连续方程、动量方程、能量方程、组分方程、k 方程、ε 方程。化学反应和流场方程通过组分和能量关系直接耦合,辐射模型、对流换热方程与能量方程直接耦合。

* **收稿日期**: 2016-08-25; **修回日期**: 2017-04-07
基金项目: 重庆市基础与前沿研究项目(cstc2013jcyjA00006)
第一作者: 吴松林(1973—),男,博士,教授,wusonglin100@163.com。

统一模型中基本方程组可表示为瞬态项、对流项、扩散项和源项组成通用输运方程：

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\boldsymbol{\varphi})+\mathrm{div}\ (\rho\boldsymbol{u}\boldsymbol{\varphi})=\mathrm{div}\left(\boldsymbol{\Gamma}\cdot\frac{\partial\boldsymbol{\varphi}}{\partial x}\right)+\boldsymbol{S}$$

式中：$\boldsymbol{\varphi}$ 代表温度、质量分数、单位体积的能量和单位体积的动量等控制变量，$\boldsymbol{\Gamma}$ 为对应的交换系数，$\boldsymbol{S}$ 为对应的源项，$\boldsymbol{u}$ 为气体的速度。

由于这类方程相互耦合，有强烈的非线性，特别是源项，因此，采用迭代法进行数值求解，即将方程表示为节点的迭代关系，把连续的基本方程离散化，获得迭代方程。在计算方法上采用有限体积法，在体积域采用混合格式，时间域上采用向后差分格式对控制方程进行离散。控制方程的分离式解法如图 1 所示。

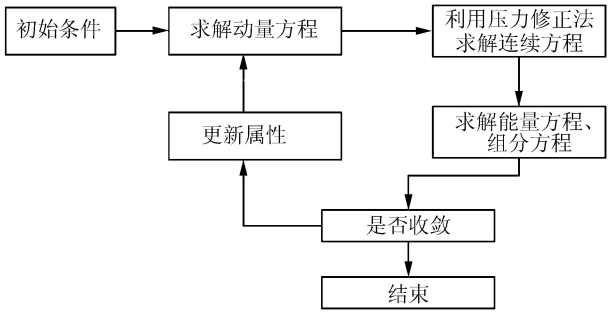


图 1 方程组的分离式解法示意图

Fig. 1 Schematic diagram for segregated solving equations

2 初始条件及结果验证

数值模拟区域采用和实验[13]一致的1 700 mm×400 mm绝热受限空间，如图 2 所示。模拟区域共分 1 400 个单元、2 910 个内部面、1 511 个点。初始压强为一个标准大气压，环境温度为 300 K，热壁温度为 2 000 K。初始组分如表 1 所示。以下通过油气热着火发生过程的流场特征和某些点参数的变化曲线来分析着火特征，选取的 7 个点位置见图 2。图 3 中给出了通过数值模拟获得的热壁表面 3 个点的温度变化曲线。当热爆炸发生时，热壁表面的临界温度为 880 K，这与实验结果 877 K[13]基本一致。

表 1 初始组分

Table 1 Initial components

初始组分	质量分数	摩尔分数	摩尔浓度/(mol·cm^{-3})
CH_4	0.01	0.018 2	7.45×10^{-7}
C_2H_6	0.01	0.009 7	3.98×10^{-7}
C_3H_8	0.01	0.006 6	2.71×10^{-7}
C_4H_{10}	0.01	0.005 0	2.05×10^{-7}
n-C_7H_{16}	0.01	0.002 9	1.19×10^{-7}
i-C_8H_{18}	0.01	0.002 6	1.04×10^{-7}
O_2	0.21	0.192 1	7.85×10^{-6}
N_2	0.73	0.763 0	3.12×10^{-5}

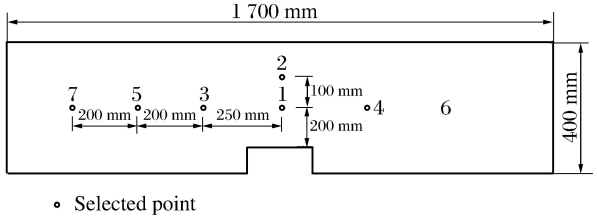


图 2 实验台架内选点的位置

Fig. 2 Selected positions in experimental bench

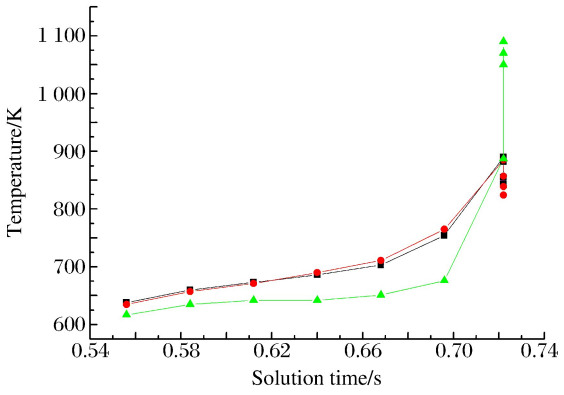


图 3 热着火发生时热壁表面的临界温度

Fig. 3 Critical temperature of the hot wall surface when thermal ignition occurs

3　数值结果及分析

3.1　温度

3.1.1　温度场变化过程

选取有代表性的 6 个时间点来刻画温度场和参数的变化过程，如表 2 所示，表中 t 为时间，n 为计算步数，T_{max} 为最高温度，p_{max} 为最高压力，$v_{x,max}$ 为最高横向速度，$v_{y,max}$ 为最高纵向速度，I 为最大扰动强度，其温度场模拟结果如图 4 所示。

表 2　热着火过程的 6 个时间点的基本参数

Table 2　Basic parameters of the thermal ignition process at 6 time points

时间点	t/ms	n	T_{max}/K	p_{max}/Pa	$v_{x,max}$/(m·s^{-1})	$v_{y,max}$/(m·s^{-1})	I/%
No. 1	100.09	10 000	452.12	10 484.3	4.93	4.76	280.551
No. 2	413.06	63 000	581.78	92 218.8	66.89	52.59	2 435.931
No. 3	413.53	64 800	844.91	127 912.0	109.51	55.40	2 812.672
No. 4	413.53	80 000	872.86	144 851.9	100.20	42.66	2 266.638
No. 5	413.53	100 000	914.99	179 834.6	99.01	40.38	2 195.186
No. 6	414.06	587 200	1271.99	381 857.6	306.55	142.44	14 418.030

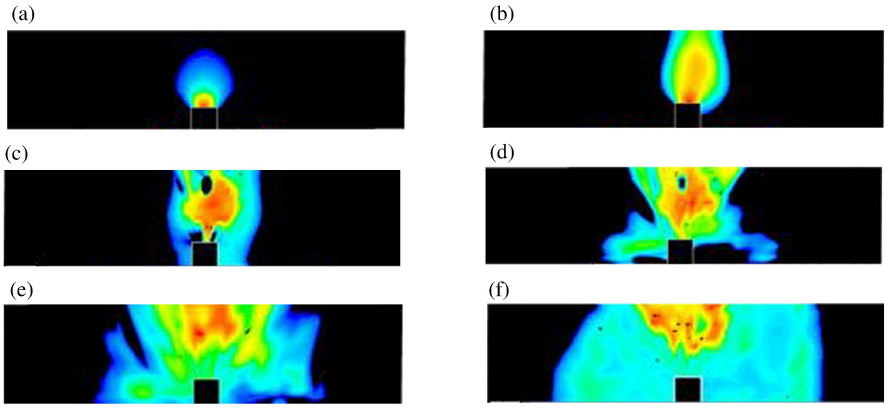


图 4　油气热着火温度场模拟图

Fig. 4　Simulated temperature-field diagrams of gasoline-air thermal ignition

图 4(a)显示热对流换热和热辐射后，加热壁上空温度场呈笔尖状，气体流动和升温同时发生；图 4(b)温度场显然受到了流动的影响，其形状有所变化，向一侧倾斜，这同实验的可视化结果[13]完全一致；图 4(c)～(e)显示的现象几乎是瞬间完成的，热着火已经发生，形成燃烧核，同时显示了温度场变化过程也是化学反应和流动的耦合过程，使得燃烧向上和向两侧扩张；图 4(f)显示已经形成了次级燃烧火焰，向两侧扩张，弱冲击波也已经形成。

3.1.2　不同位置的温度突变

图 5 为 7 个测试点的温度变化曲线。从图 5 可知：

(1)温度存在突变现象，整个热着火发生过程可分成两段，分别为温度受加热壁和缓慢氧化放热影响的温度缓慢上升过程，以及热着火发生后温度跃升过程；

(2)在温度缓慢上升过程阶段，7 个空间点的温度基本呈现与空间相关上升，空间对称两侧的温度并不一定对称；

(3)在温度缓慢上升过程阶段，受流场的影响，7 个点的温度稳定上升；

(4)从图 5(b)可以发现，尽管起燃时间很短，但还存在 2 个小的温度突变阶段，说明起燃中存在非线性特性，其原因需要深入研究；

(5)受流场影响，燃烧过程呈现不对称性。

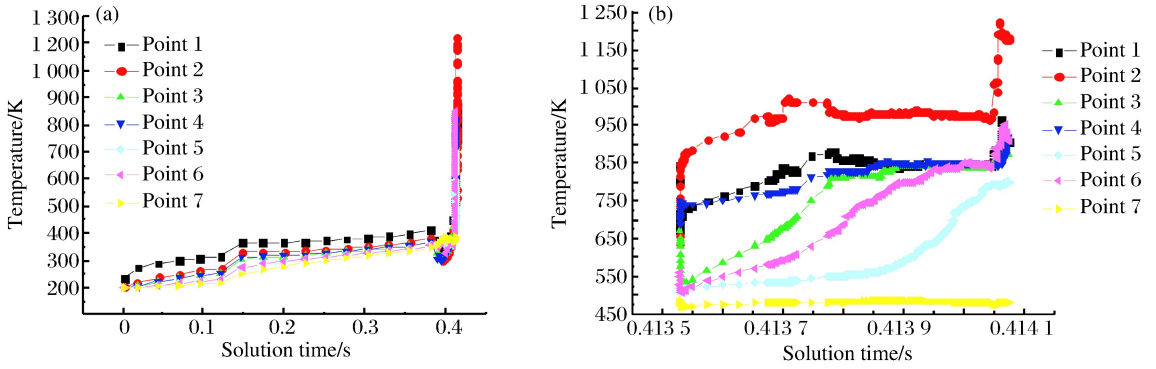


图 5 7 个空间点的温度变化曲线

Fig. 5 Temperature curves of 7 spatial points

3.2 压力

3.2.1 压力变化过程

选取与温度场同样的 6 个时间点，作受限空间的压力等值线，如图 6 所示。图 6(a)中，随着气体受热壁影响，压力开始在热壁上方上升，压缩受限空间的气体，使得受限空间的气体开始向四周流动。从图 6(b)、(c)开始，热着火发生了，压力等值线开始变得稠密。模拟数据结果显示最大压力有 1 个多大气压，这与实验结果基本一致[13]。图 6(d)中，压力等值线较弯曲，压缩两侧的气体，形状不规则。图 6(e)和(f)的等值线在两侧非常稠密，说明随着气体燃烧强度的增大，两侧的弱冲击波已经形成。但是，燃烧火焰还主要在热壁的中上部，最高压力还处于中间，燃烧化学反应和气体流动的强烈耦合还需要更大的空间，所以总的压力并不高，模拟数据显示最高压力有 3 个多大气压。

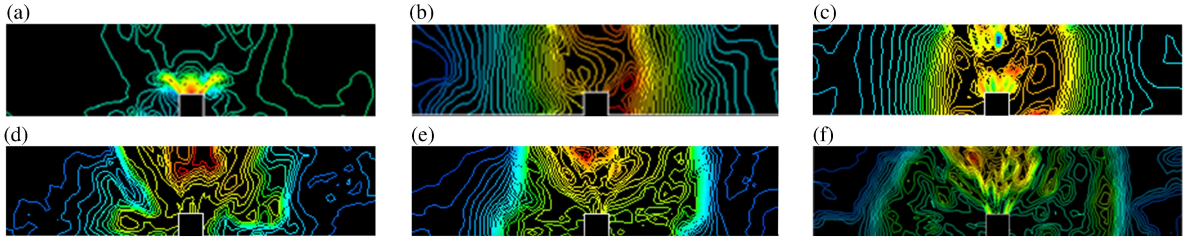


图 6 热着火压力等值线

Fig. 6 Pressure contours of thermal ignition

3.2.2 不同位置压力突变

图 7 是 7 个点的压力变化曲线，从图 7 可知：(1)热着火发生前，7 个点的压力变化不大；(2)热着火发生后，压力也存在阶段性突变特征。在同一时刻，7 个点的压力不同，存在很大的差别；(3)从模拟的最后时刻的压力来看，第 3～6 点的压力很接近，而第 7 点压力很低，这也说明弱冲击波正在形成。

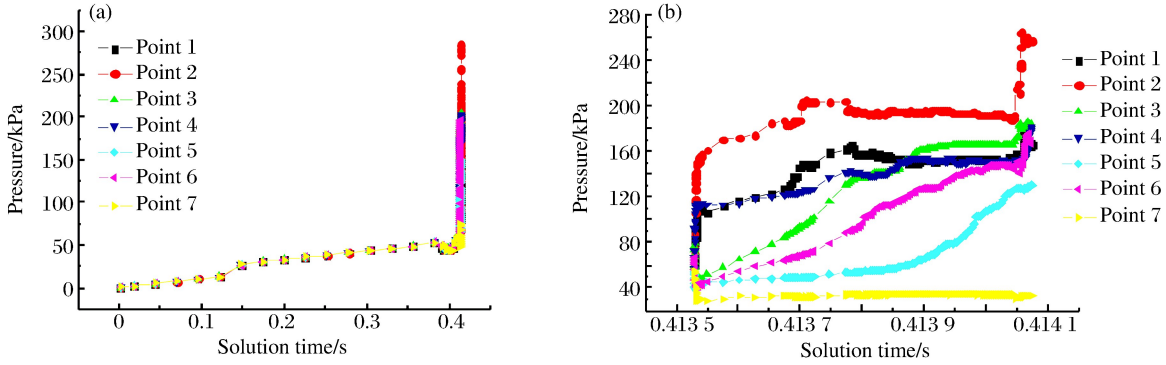


图 7 7 个点的压力变化曲线

Fig. 7 Pressure variation curves at 7 spatial points

3.3　主要组分质量变化

3.3.1　主要反应物变化

图 8 是 1 号位置的主要反应物质量变化曲线。从图 8 可知，$t\in[0,0.36]$ s时，主要反应物相差不大，它们的质量分数从 0.01 还降到了 0.009 6，这主要是受热壁加热影响，密度下降的原因。$t\in[0.36,0.415]$ s时，主要反应物呈现了明显的阶段性特征。第 1 阶段，从 0.36 s 到 0.39 s，主要反应物发生了缓慢氧化反应，浓度呈现下降趋势，特别正庚烷发生了热裂解，质量分数几乎变为了零。第 2 阶段，从0.39 s到 0.40 s，主要反应物质量分数有所增大。主要原因是密度回升，流场影响相对减弱，大分子热裂解成低碳烷烃的因素增加，造成了 $C_1\sim C_4$ 的质量分数增大。第 3 阶段，从 0.40 s 到 0.41 s，主要反应物发生反应被消耗，浓度降低。0.41 s 后，热着火发生，反应速度增大，流场变化加剧，主要反应物质量分数呈现波动。

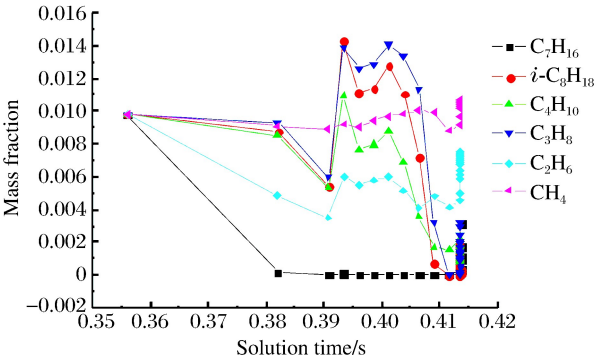


图 8　1 号位置反应物的质量分数变化曲线

Fig. 8　Mass faction curve at the first spatial point

3.3.2　不同位置的组分质量分数

图 9～13 为不同位置主要组分的质量分数变化曲线。从以上反应物在不同阶段的质量分数变化曲线可知：(1)$t\in[0,0.15]$ s 阶段，主要生成物 CO、H_2O 基本没有变化，但随后到 0.39 s，这些生成物有较小量级增加，说明随着温度的增加，主要反应物发生了非常缓慢的氧化反应，特别是 1 号位置表现明显。(2)$t\in[0.39,0.41]$ s 阶段，发生缓慢氧化阶段，生成物不断增加，组分的质量分数与反应强度，流场变化特征、空间位置关系紧密，CO、H_2O 等组分的质量分数总体增加，O_2、轻质烷烃等组分质量分数总体减小，但波动较明显。(3)热着火发生后，主要受燃烧反应强度的影响，反应物减少，生成物增加。从 OH 基团的变化可以发现不同位置反应强度不同。

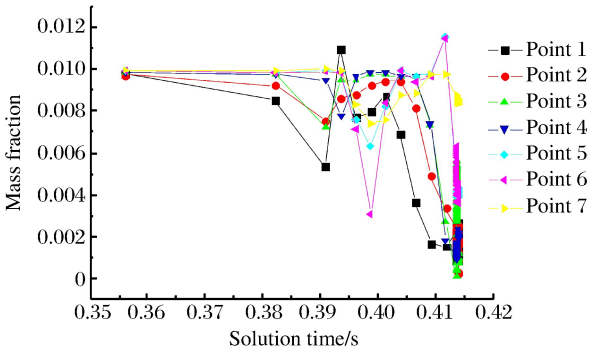


图 9　不同位置 C_4H_{10} 的质量分数变化曲线

Fig. 9　Mass faction curves of C_4H_{10} at different positions

综上，受限空间油气热着火发生过程中，无论是缓慢氧化阶段，还是热着火发生过程中，整个受限空间内气体都受到了化学反应和流动的耦合作用，气体间化学反应不断加剧，流动不断增强。但从所起的主导作用来看，加热初期，辐射换热为主导作用；在加热中期，辐射换热和缓慢氧化反应为主导作用；在热着火发生阶段，化学反应和流动强烈耦合，同时占主导作用。

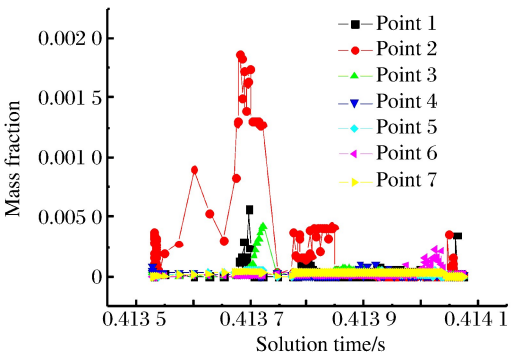


图 10　不同位置 OH 的质量分数变化曲线

Fig. 10　Mass faction curves of OH at different positions

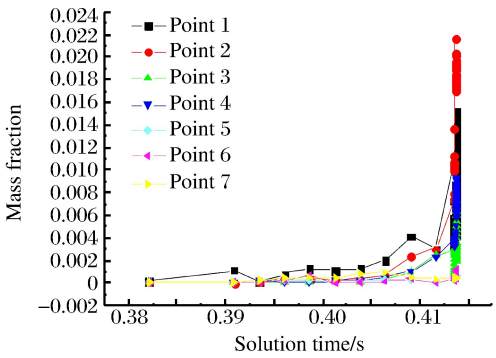


图 11　不同位置 CO 的质量分数变化曲线

Fig. 11　Mass faction curves of CO at different positions

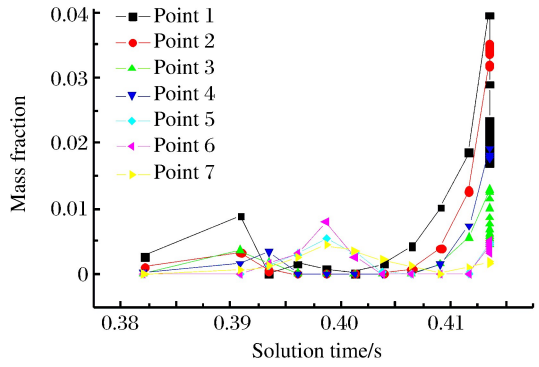


图 12 不同位置 H_2O 的质量分数变化曲线

Fig. 12 Mass faction curves of H_2O at different positions

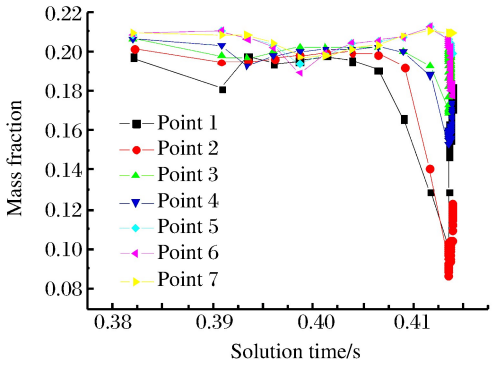


图 13 不同位置 O_2 的质量分数变化曲线

Fig. 13 Mass faction curves of O_2 at different positions

3.4 火焰速度

3.4.1 层流火焰速度

图 14～17 为不同位置流场速度变化曲线。由横轴方向层流速度来看：热着火发生前，速度很小，仅有每秒几个厘米，左右流动也基本对称；受受限空间影响，气体流动发生了回流，两侧气体呈现向中间流动的现象。在 0.405 s 后，热着火发生，形成弱冲击波，气体向两侧流动。速度超过了 100 cm/s。从第 1 和第 2 点的流动方向来看，热着火发生前，火焰基本呈振动状态，方向不断摆动，热着火发生后火焰偏向右侧，说明有湍流影响流动方向。由纵轴方向的层流速度来看：与横向速度比较，开始加热阶段，最大速度略大，而后受上壁面影响，速度相对减小。起燃阶段，速度方向总体向上，呈现震荡特征。

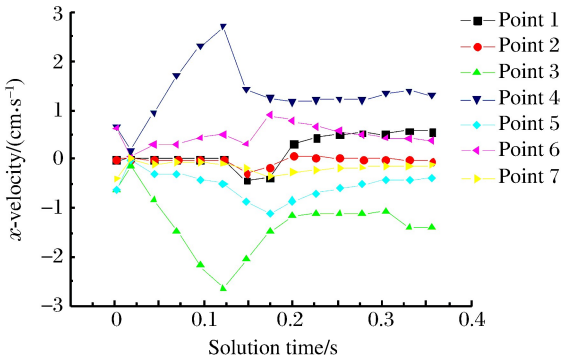


图 14 初始阶段横轴方向火焰速度变化曲线

Fig. 14 Velocity of the flame in x direction at initial stage

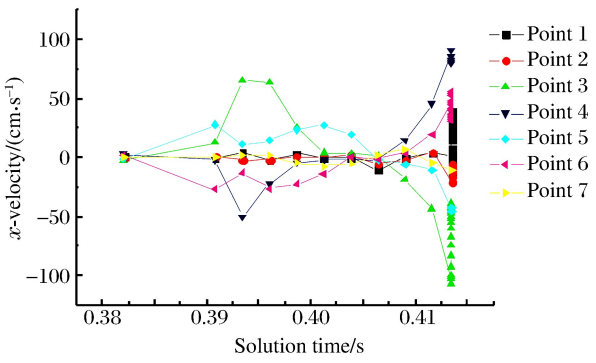


图 15 发生阶段横轴方向火焰速度变化曲线

Fig. 15 Velocity of the flame in x direction at occurrence stage

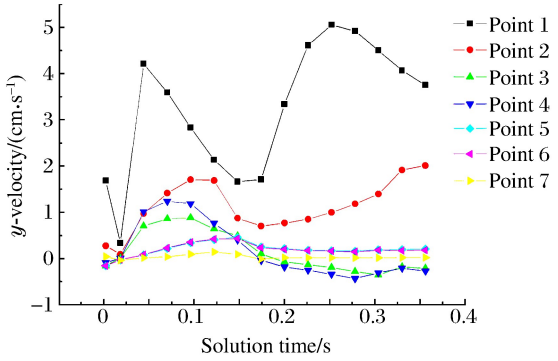


图 16 初始阶段纵轴方向火焰速度变化曲线

Fig. 16 Velocity of the flame in y direction at initial stage

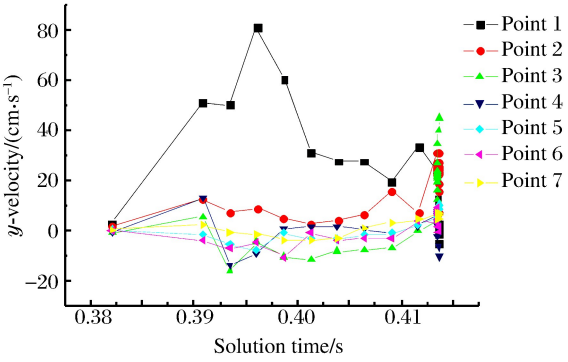


图 17 发生阶段纵轴方向火焰速度变化曲线

Fig. 17 Velocity of the flame in y direction at occurrence stage

3.4.2　湍流火焰速度

图 18 为不同位置湍流变化曲线。湍流也出现了 2 个阶段的特征：在加热开始阶段，湍流突然增大，而后略有降低；当热着火发生时，湍流急剧增大。

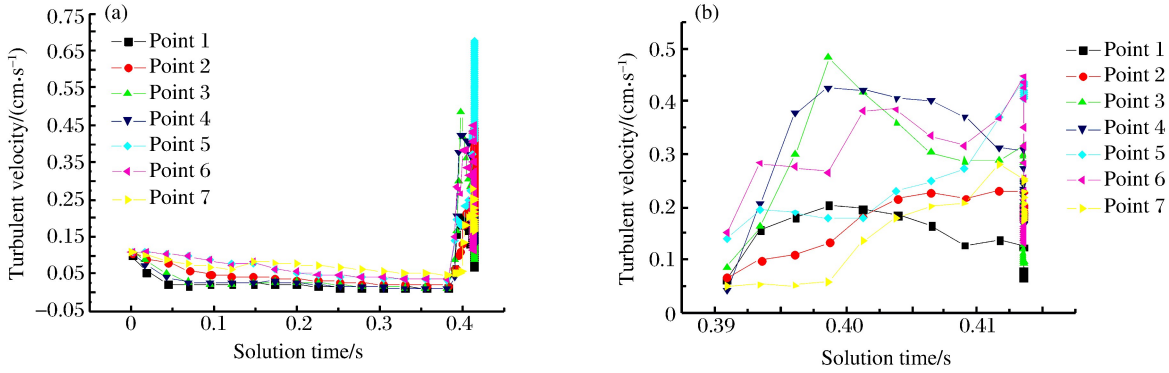


图 18　发生阶段火焰湍流速度曲线

Fig. 18　Turbulent velocity of the flame at occurrence stage

4　结　论

油气在热壁下的热着火发生过程主要受辐射放热、化学反应和流动的耦合作用，呈现出阶段性。在高温热壁加热初始阶段，加热使得气体膨胀，同时气体温度升高。流动改变了流场流动特征，造成受限空间中组分浓度、流速等参数的变化，辐射放热和流动成为主导作用；在热着火发生前，随着辐射放热进行，热壁上方温度升高，油气缓慢氧化反应放热逐渐成为影响流场特征的主导作用。在热着火发生后，剧烈化学反应和高强度湍流相互耦合，弱冲击波瞬间形成，化学反应和流动同时占主导作用，气体的温度、压力、质量分数、湍流强度等参数均呈现出一定的震荡和非线性特性。

参考文献：

[1]　MEHL M, PITZ W J, WESTBROOK C K, et al. Kinetic modeling of gasoline surrogate components and mixtures under engine conditions[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2011,33(1):193-200.

[2]　BATTIN-LECLERC F. Detailed chemical kinetic models for the low-temperature combustion of hydrocarbons with application to gasoline and diesel fuel surrogates[J]. Progress in Energy and Combustion Science, 2008,34(4):440-498.

[3]　CANCINO L R, FIKRI M, OLIVEIRA A A M, et al. Ignition delay times of ethanol-containing multi-component gasoline surrogates: Shock-tube experiments and detailed modeling[J]. Fuel, 2011,90(3):1238-1244.

[4]　DU Yang, ZHANG Peili, OU Yihong. Effects of humidity, temperature and slow oxidation reactions on the occurrence of gasoline-air explosions[J]. Journal of Fire Protection Engineering, 2013,23(3) :226-238.

[5]　欧益宏，杜扬，蒋新生，等. 地下坑道瓦斯热着火实验研究[J]. 煤矿安全，2011,42(2)4-7.
OU Yihong, DU Yang, JIANG Xinsheng, et al. Experiment research on thermal ignition of gas in underground tunnel[J]. Safety in Coal Mines, 2011,42(2):4-7.

[6]　杜扬，欧益宏，吴英，等. 热壁条件下油气的热着火现象[J]. 爆炸与冲击，2009,29(3):268-274.
DU Yang, OU Yihong, WU Ying, et al. Thermal ignition phenomena of gasoline-air mixture induced by hot wall [J]. Explosion and Shock Waves, 2009,29(3):268-274.

[7]　OU Yihong, DU Yang, JIANG Xinsheng, et al. Study on the thermal ignition of gasoline-air mixture in underground oil depots based on experiment and numerical simulation[J]. Journal of Thermal Science, 2010,19(2): 173-181.

[8]　BI Mingshu, DONG Chengjie, ZHOU Yihui. Numerical simulation of premixed methane air deflagration in large L/D closed pipes[J]. Applied Thermal Engineering, 2012,40:337-342.

[9]　WANG Cheng, HAN Wenhu, NING Jianguo, et al. High resolution numerical simulation of methane explosion in

bend ducts[J]. Safety Science, 2012,50(4):709-717.

[10] SKJOLD T, ARNTZEN B J, HANSEN O R, et al. Simulation of dust explosions in complex geometries with experimental input from standardized tests[J]. Journal of Loss Prevention in the Process Industries, 2006,19(2/3):210-217.

[11] SARLI V, BENEDETTO A, RUSSO G. Using Large Eddy Simulation for understanding vented gas explosions in the presence of obstacles[J]. Journal of Hazardous Materials, 2009,169(1/2/3):435-442.

[12] 吴松林,杜扬,李国庆,等.受限空间油气热着火的简化机理与分析[J].燃烧科学与技术,2015,21(1):20-27.
WU Songlin, DU Yang, LI Guoqing, et al. Reduced mechanism and analysis for thermal ignition of gasoline-air mixture in confined space[J]. Journal of Combustion Science and Technology, 2015,21(1):20-27.

[13] WU Songlin. Research on catastrophe phenomenon in the occurrence and the development of gasoline-air explosion on the local heat resource in confined space[D]. Chongqing, China: Logistical Engineering University, 2015:13-40.

Numerical simulation of gasoline-air thermal ignition induced by continuous hot wall

WU Songlin[1], DU Yang[2], OU Yihong[2], ZHANG Peili[2], LIANG Jianjun[2]

(1. *Department of Fundamental Studies, Army Logistical University, Chongqing* 401311, *China*;
2. *Department of Petroleum Supply Engineering, Army Logistical University, Chongqing* 401311, *China*)

Abstract: In order to simulate the thermal ignition process of gasoline-air in continuous hot wall, the chemical kinetic model, hydrodynamic model and radiation heat transfer model were coupled to establish a unified model of gasoline-airthermal ignition. According to the working condition of the experiment, the occurrence process of gasoline-air thermal ignition was simulated under the conditions of high temperature induced by continuous hot wall in confined space. Flow field evolution characteristics of the temperature and the pressure were analyzed. The variation curves of temperature, pressure, flow velocity, turbulent velocity and group concentration were obtained at different positions. By simulation, it is found that there are three stages in the process of gasoline-air thermal ignition, namely, the initial heating stage, the heating intermediate stage and the thermal ignition stage. The main reason for the existence of different stages is that the leading roles of chemical reaction and flow are different.

Keywords: gasoline-air; unified model; thermal ignition; continuous hot wall; chemical kinetic; hydrodynamic; radiation heat transfer

(责任编辑 张凌云)