文章编号：1000-5773(2009)05-0367-10

CH_4-O_2-N_2 预混气体爆炸二维数值模拟*

李成兵，吴国栋，经福谦

（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
国防科技重点实验室，四川绵阳 621900）

摘要：利用 CFD 软件，基于 ISAT 算法和简化的甲烷氧化基元反应模型，建立了 CH_4-O_2-N_2 预混气体的二维湍流爆炸模型。数值计算结果表明，该模型较好地模拟了 CH_4-O_2-N_2 预混气体在高温气团作用下的点火、燃烧和爆炸过程。计算中，考察了高温点火气团的初始温度和混合气体初始组分对 CH_4-O_2-N_2 预混气体燃烧和爆炸过程的影响。结果表明：高温气团的初始温度对 CH_4-O_2-N_2 预混气体的点火延迟时间和燃烧初始阶段有重要影响，但对 CJ 爆燃没有影响；惰性气体 N_2 的加入，降低了混合气体的反应活性，导致点火延迟时间增大，燃烧反应速度、爆炸超压和重要自由基浓度都随之减小。相同条件下爆炸超压峰值的计算结果与实验测量结果符合较好。

关键词：ISAT 算法；基元反应；化学动力学；湍流；CJ 爆燃；数值模拟
中图分类号：O382.1 **文献标识码**：A

1 引 言

煤矿瓦斯爆炸是威胁煤矿安全生产的重要隐患。一直以来它都是国内外研究的重要课题[1-3]。事故分析结果表明，绝大多数瓦斯爆炸都属于瓦斯燃烧（爆燃）事故，发生瓦斯爆轰的情况极少。研究发现，瓦斯爆炸本质上是一种带压力波的高湍流度、高反应速率的燃烧（爆燃）过程。瓦斯气体被点燃后，燃烧产物因膨胀压缩周围气体而产生流动，坑道壁面或障碍物会把这种流动诱发为湍流。在瓦斯燃烧和爆炸过程中，燃烧化学反应、流动和湍流间有着强烈的相互作用，从而大大提高燃烧速率和火焰传播速度[4-5]。对于甲烷气体（煤矿瓦斯和天然气的主要成分）的燃烧和爆炸，已有的数值模拟研究大多针对一维层流预混火焰问题[6-7]，即不考虑湍流对燃烧火焰的加速作用；同时，燃烧化学反应一般也都采用单步反应或两步反应的简单化学反应机理[8]。在数值模拟中，考虑真实化学反应机理和湍流作用，对于研究甲烷等可燃性气体爆炸的瞬态过程十分重要，不仅有助于准确预测其点火和放热，还能提供燃烧和爆炸过程中各种组分的生成、浓度的分布和变化情况等信息。

针对封闭管内 CH_4-O_2-N_2 预混气体爆炸问题，本研究利用 Fluent 软件和 ISAT 算法，基于重新简化的 CH_4 氧化基元反应模型计算了燃烧化学反应，并考虑燃烧过程中湍流与化学反应的相互作用，建立了考虑真实化学反应机理的二维湍流爆炸模型。在不同计算初始条件下，对其燃烧和爆炸过程进行数值计算，检验了该二维湍流爆炸模型的计算能力和计算结果的可靠性。

* **收稿日期**：2008-12-08；**修回日期**：2009-02-08
作者简介：李成兵（1977－），男，博士，主要从事燃烧、爆炸安全及相关方向研究. E-mail：lichbing@mail.ustc.edu.cn
通讯作者：吴国栋（1943－），男，研究员，博士生导师，主要从事凝聚态物理和爆炸力学研究.

2 理论模型

2.1 计算物理模型和基本假设

天然气、沼气、煤矿瓦斯等可燃性气体燃烧和爆炸事故中，绝大多数都发生在细长管道或狭长巷道内。因此，在实验室中模拟研究可燃性气体燃烧和爆炸问题时，一般都是在两端封闭(或一端封闭，另一端开口)的细长管道中进行。数值计算建模时，通常将细长管道或狭长巷道简化为二维管道。本研究采用的物理模型就是两端封闭的二维管道模型，如图 1 所示。

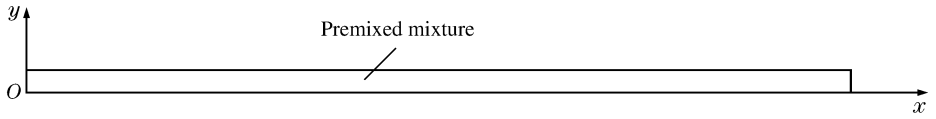


图 1 计算模型

Fig. 1 The computational model

为了便于计算，本研究做了以下基本假设：

(1) 计算中所涉及的气体全部为理想气体，且完全稳定；

(2) 在计算区域内预混可燃性气体均匀分布，并处于静止状态；

(3) 忽略壁面厚度，且壁面温度为恒温 300 K；

(4) 壁面处的速度为零；

(5) 计算过程中，气体的比热容随温度变化。

2.2 控制方程与计算方法

在直角坐标系下，二维守恒型 Navier-Stokes 方程可写成下列向量形式[9-10]

$$\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial t}+\frac{\partial(\boldsymbol{F}-\boldsymbol{F}_v)}{\partial x}-\frac{\partial(\boldsymbol{G}-\boldsymbol{G}_v)}{\partial y}=\boldsymbol{S} \tag{1}$$

其中

$$\boldsymbol{U}=(\rho Y_1,\rho Y_2,\cdots,\rho Y_k,\rho u,\rho v,\rho E)^{\mathrm{T}} \tag{2}$$

$$\boldsymbol{F}=(\rho u Y_1,\rho u Y_2,\cdots,\rho u Y_k,\rho u^2+p,\rho u v,u(\rho E+p))^{\mathrm{T}} \tag{3}$$

$$\boldsymbol{G}=(\rho v Y_1,\rho v Y_2,\cdots,\rho v Y_k,\rho u v,\rho v^2+p,v(\rho E+p))^{\mathrm{T}} \tag{4}$$

$$\boldsymbol{S}=(\dot{\omega}_1,\dot{\omega}_2,\cdots,\dot{\omega}_k,0,0,0)^{\mathrm{T}} \tag{5}$$

$$\boldsymbol{F}_v=(0,0,\cdots,0,\tau_{xx},\tau_{xy},u\tau_{xx}+v\tau_{yx}+q_x)^{\mathrm{T}} \tag{6}$$

$$\boldsymbol{G}_v=(0,0,\cdots,0,\tau_{yx},\tau_{yy},u\tau_{yx}+v\tau_{yy}+q_y)^{\mathrm{T}} \tag{7}$$

粘性应力项

$$\tau_{xx}=\frac{2}{3}\mu_{\mathrm{t}}\left(2\frac{\partial u}{\partial x}-\frac{\partial v}{\partial y}\right) \tag{8}$$

$$\tau_{yy}=\frac{2}{3}\mu_{\mathrm{t}}\left(2\frac{\partial v}{\partial y}-\frac{\partial u}{\partial x}\right) \tag{9}$$

$$\tau_{xy}=\tau_{yx}=\mu_{\mathrm{t}}\left(\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{\partial v}{\partial x}\right) \tag{10}$$

热流项

$$q_x=\kappa\frac{\partial T}{\partial x}+\sum_{i=1}^{k}\rho D_k h_k\frac{\partial Y_k}{\partial x} \tag{11}$$

$$q_y=\kappa\frac{\partial T}{\partial y}+\sum_{i=1}^{k}\rho D_k h_k\frac{\partial Y_k}{\partial y} \tag{12}$$

单位体积总能（包含热能、化学能和动能）

$$\rho E=\sum_{i=1}^{k}\rho_k h_k-p+\frac{1}{2}(u^2+v^2) \tag{13}$$

式中：ρ 为预混气体密度，Y_k 为组分 k 的质量分数，u 和 v 分别为 x 方向和 y 方向的速度分量，κ 为热传导系数，μ_t 为湍流粘性系数，D_k 为 k 组分的扩散系数，p 为压力，T 为温度，h_k 为 k 组分单位质量净焓。h_k 的表达式为

$$h_k=\int_{T_{\mathrm{ref}}}^{T}c_{p,k}\,\mathrm{d}T+h_{\mathrm{f}k}^{0} \tag{14}$$

式中：$c_{p,k}$ 为 k 组分的定压比热容，$h_{\mathrm{f}k}^{0}$ 为 k 组分的单位质量标准生成焓。$c_{p,k}$ 和 $h_{\mathrm{f}k}^{0}$ 均采用依赖于温度的多项式形式计算。

在化学反应的计算中，组分 k 的净生成速率 $\dot{\omega}_k$ 为

$$\dot{\omega}_k=\sum_{i=1}^{I}(\gamma''_{ki}-\gamma'_{ki})\left(k_{\mathrm{f}i}\prod_{k=1}^{K}x_k^{\gamma'_{ki}}-k_{\mathrm{b}i}\prod_{k=1}^{K}x_k^{\gamma''_{ki}}\right) \tag{15}$$

式中：γ''_{ki} 和 γ'_{ki} 分别为第 i 个基元反应中第 k 种物质的正、逆反应计量系数，x_k 为第 k 种物质的摩尔分数，$k_{\mathrm{f}i}$ 和 $k_{\mathrm{b}i}$ 分别为第 i 个基元反应的正、逆反应速率常数。$k_{\mathrm{f}i}$ 和 $k_{\mathrm{b}i}$ 遵循 Arrhenius 函数

$$k_{\mathrm{f}i}=A_{\mathrm{f}i}T^{\beta_{\mathrm{f}i}}\exp\left(-\frac{E_{\mathrm{f}i}}{RT}\right) \tag{16}$$

式中：$A_{\mathrm{f}i}$ 为第 i 个正反应的指前因子，$\beta_{\mathrm{f}i}$ 为第 i 个正反应的温度指数，$E_{\mathrm{f}i}$ 为第 i 个正反应的活化能，R 为气体常数。

计算中采用标准 k-ε 湍流燃烧模型模拟爆炸过程中的湍流流动，湍流与化学反应的耦合采用 EDC (Eddy Dissipation Concept)模型，压力与速度的耦合采用 SIMPLCE 算法，激波的捕捉采用二阶迎风格式，近壁面处理采用标准壁面函数，密度、黏度和各组分项的迭代采用亚松弛处理，对流项的处理也采用二阶迎风格式，控制方程的离散采用有限体积法。

由于化学反应过程中不同反应物质的特征反应时间相差很大，这给数值计算带来了“反应刚性”问题。因此，计算中采用基于 Gear 算法的 LSODE 程序求解化学反应过程。为了实现化学反应与多维流动的相互耦合，在计算中采用了 ISAT(In Situ Adaptive Tabulation)算法[11]。数值模拟计算在Fluent 程序中进行。

3　化学反应动力学机理

甲烷氧化反应的详细机理十分复杂。美国学者提出的 GRIMech 3.0 甲烷氧化详细机理就涉及 53 种组分 325 个基元反应[12-13]。如果将这样复杂的化学反应机理与燃烧流动过程结合起来用于数值计算，既不经济也不现实。

对于 CH_4-O_2-N_2 反应系统，CH_4 的氧化反应过程要能反映如下的链式反应途径

$$CH_4\longrightarrow CH_3\longrightarrow CH_2O\longrightarrow HCO\longrightarrow CO+H_2\longrightarrow CO_2+H_2O$$

其中：CH_3、CH_2O 和 HCO 为中间产物，CO 和 H_2 为不完全氧化产物，CO_2 和 H_2O 为完全氧化产物。此外，H、O、OH 等高活性自由基是链式反应的传递者，用来维持上述链式反应的传播过程。

本研究采用敏感性分析法和“准稳态”假设法对 GRIMech 3.0 甲烷氧化详细机理进行简化，构造出包含 17 种组分 47 个基元反应的简化甲烷氧化机理。将简化后的甲烷氧化反应模型耦合到燃烧流场计算中，既在一定程度上缓解了数值计算中的“刚性问题”，又能有效提高数值计算效率。简化后的甲烷氧化反应机理见表 1。表中所有参数均取自 GRIMech 3.0[12-13]。

表 1 CH_4-O_2-N_2 的 47 步基元反应机理

Table 1 47-steps element reaction mechanism for CH_4-O_2-N_2 (kJ-mole-s unit systems)

Element reaction	A_{fi}	β_{fi}	E_{fi}	Element reaction	A_{fi}	β_{fi}	E_{fi}
$2O+M\rightleftharpoons O_2+M$[1]	1.20×10^{17}	−1.00	0.00	$OH+CH_2O\rightleftharpoons HCO+H_2O$	3.43×10^{9}	1.18	−1.87
$O+HO_2\rightleftharpoons OH+O_2$	2.00×10^{13}	0.00	0.00	$OH+C_2H_4\rightleftharpoons C_2H_3+H_2O$	3.60×10^{6}	2.00	10.45
$O+CH_3\rightleftharpoons H+CH_2O$	8.43×10^{13}	0.00	0.00	$OH+C_2H_6\rightleftharpoons C_2H_5+H_2O$	3.54×10^{6}	2.12	3.64
$O+CH_4\rightleftharpoons OH+CH_3$	1.02×10^{9}	1.50	35.90	$HO_2+CH_3\rightleftharpoons O_2+CH_4$	1.00×10^{12}	0.00	0.00
$O+CH_2O\rightleftharpoons OH+HCO$	3.90×10^{13}	0.00	14.80	$HO_2+CH_3\rightleftharpoons OH+CH_3O$	2.00×10^{13}	0.00	0.00
$O+C_2H_6\rightleftharpoons OH+C_2H_5$	8.98×10^{7}	1.92	23.80	$CH_2+O_2\rightleftharpoons OH+HCO$	1.32×10^{13}	0.00	6.27
$O_2+CH_2O\rightleftharpoons HO_2+HCO$	1.00×10^{14}	0.00	167.20	$CH_2+CH_3\rightleftharpoons H+C_2H_4$	4.00×10^{13}	0.00	0.00
$H+O_2\rightleftharpoons O+OH$	8.30×10^{13}	0.00	60.20	$CH_2+CH_4\rightleftharpoons 2CH_3$	2.46×10^{6}	2.00	34.57
$2H+M\rightleftharpoons H_2+M$[2]	1.00×10^{18}	−1.00	0.00	$CH_2(S)+O_2\rightleftharpoons H+OH+CO$	2.80×10^{13}	0.00	0.00
$H+OH+M\rightleftharpoons H_2O+M$[3]	2.20×10^{22}	−2.00	0.00	$CH_2(S)+O_2\rightleftharpoons CO+H_2O$	1.20×10^{13}	0.00	0.00
$H+HO_2\rightleftharpoons O_2+H_2$	2.80×10^{13}	0.00	4.46	$CH_3+O_2\rightleftharpoons O+CH_3O$	2.67×10^{13}	0.00	120.38
$H+HO_2\rightleftharpoons 2OH$	1.34×10^{14}	0.00	2.65	$CH_3+O_2\rightleftharpoons OH+CH_2O$	3.60×10^{10}	0.00	37.37
$H+CH_3(+M)\rightleftharpoons CH_4(+M)$[4]	1.27×10^{16}	−0.63	1.60	$CH_3+H_2O_2\rightleftharpoons HO_2+CH_4$	2.45×10^{4}	2.47	21.65
$H+CH_4\rightleftharpoons CH_3+H_2$	6.60×10^{8}	1.62	45.30	$2CH_3(+M)\rightleftharpoons C_2H_6(+M)$[6]	2.12×10^{16}	−0.97	2.59
$H+HCO\rightleftharpoons H_2+CO$	7.34×10^{13}	0.00	0.00	$2CH_3\rightleftharpoons H+C_2H_5$	4.99×10^{12}	0.10	44.31
$H+CH_2O(+M)\rightleftharpoons CH_3O(+M)$[5]	5.40×10^{11}	0.45	10.87	$CH_3+HCO\rightleftharpoons CH_4+CO$	2.64×10^{13}	0.00	0.00
$H+CH_2O\rightleftharpoons HCO+H_2$	2.30×10^{10}	1.05	13.69	$CH_3+CH_2O\rightleftharpoons HCO+CH_4$	3.32×10^{3}	2.81	24.49
$H+C_2H_6\rightleftharpoons C_2H_5+H_2$	1.15×10^{8}	1.90	31.47	$CH_3+C_2H_4\rightleftharpoons C_2H_3+CH_4$	2.27×10^{5}	2.00	38.46
$OH+H_2\rightleftharpoons H+H_2O$	2.16×10^{8}	1.51	14.34	$CH_3+C_2H_6\rightleftharpoons C_2H_5+CH_4$	6.14×10^{6}	1.74	43.68
$OH+HO_2\rightleftharpoons O_2+H_2O$	2.90×10^{13}	0.00	−2.09	$HCO+H_2O\rightleftharpoons H+CO+H_2O$	2.24×10^{18}	−1.00	71.06
$OH+CH_3\rightleftharpoons CH_2+H_2O$	5.60×10^{7}	1.60	22.65	$HCO+M\rightleftharpoons H+CO+M$[7]	1.87×10^{17}	−1.00	71.06
$OH+CH_3\rightleftharpoons CH_2(S)+H_2O$	2.50×10^{13}	0.00	0.00	$HCO+O_2\rightleftharpoons HO_2+CO$	7.60×10^{12}	0.00	1.67
$OH+CH_4\rightleftharpoons CH_3+H_2O$	1.00×10^{8}	1.60	13.04	$CH_3O+O_2\rightleftharpoons HO_2+CH_2O$	4.28×10^{-13}	7.60	−14.75
$OH+CO\rightleftharpoons H+CO_2$	4.76×10^{7}	1.22	0.29				

Note: [1] H_2/2.40/H_2O/15.40/CH_4/2.00/CO/1.75/CO_2/3.60/C_2H_6/3.00/Ar/0.83

[2] H_2/0.00/H_2O/0.00/CH_4/2.00/CO_2/0.00/C_2H_6/3.00/Ar/0.63

[3] H_2/0.73/H_2O/3.65/CH_4/2.00/C_2H_6/3.00/Ar/0.38

[4] LOW/2.477×10^{33},−4.760,2440.00/,TROE/0.7830,74.00,2941.00,6964.00/H_2/2.00/H_2O/6.00/CH_4/2.00/CO/1.50/CO_2/2.00/C_2H_6/3.00/Ar/0.70

[5] LOW/2.200×10^{30},−4.800,5560.00/,TROE/0.7580,94.00,1555.00,4200.00/H_2/2.00/H_2O/6.00/CH_4/2.00/CO/1.50/CO_2/2.00/C_2H_6/3.00

[6] LOW/1.770×10^{50},−9.670,6220.00/,TROE/0.5325,151.00,1038.00,4970.00/H_2/2.00/H_2O/6.00/CH_4/2.00/CO/1.50/CO_2/2.00/C_2H_6/3.00/Ar/0.70

[7] H_2/2.00/H_2O/0.00/CH_4/2.00/CO/1.50/CO_2/2.00/C_2H_6/3.00

4 计算结果与讨论

4.1 计算初始条件

计算物理模型如前所述,管道两端封闭,几何尺寸为:长度 $L=4.0$ m,直径 $D=0.1$ mm。数值计算中,点火位置为 $x=0.24$ m、$y=0.10$ m,点火源即是以点火位置为圆心、半径 $R=0.04$ m 的半圆形高温气团。高温气团初始温度 $T'_0=1\,200$ K,高温气团初始压力 $p'_0=30\,397.5$ Pa。管内其他区域气体的初始温度 $T_0=300$ K,全管初始压力 $p_0=30\,397.5$ Pa。管内混合气体的初始湍动能设为 1.0 m^2/s^2。不同工况下的初始计算条件列于表 2。

4.2 CH_4-O_2-N_2 混合气体在管内的燃烧和爆炸过程

CH_4-O_2-N_2(Case 2)混合气体在高温气团作用下,其点火、燃烧和爆炸过程如图 2 所示。需要说明的是:图 2 是以温度变化情况(温度等值线图)来表征混合气体点火、燃烧和爆炸过程。从图中可以看出,经过一定延迟时间的准备,初始高温气团内部首先引发链式反应并放热,使高温气团的温度不断上升。同时,链式反应放出的热量传递给最靠近高温气团的那一薄层可燃性气体。该层可燃性气体被加热后,也开始发生链式反应并放热。随着可燃性气体温度的升高,链式反应速率不断加快,最终达到点火燃烧状态。该工况(Case 2)下,CH_4-O_2-N_2 混合气体的点火延迟时间大约为 8.1 ms。点火完成后,

燃烧火焰阵面逐渐向外扩展，上一层链式反应放出的热量依次传递给下一层可燃性气体，并引发其发生链式反应。如此延续下去，使得 CH_4-O_2-N_2 混合气体发生连续燃烧和爆炸。随着燃烧的进行，火焰阵面不断向未燃区域移动（向右），燃烧速率也逐渐增大。

表 2　初始计算参数

Table 2　The initial computation parameters

Case	Initial mole fraction of premixed gas	Equivalence ratio Φ	Initial temperature of core/(K)	Initial mole pressure of premixed gas/(Pa)
1	$n_{N_2}:n_{CH_4}:n_{O_2}=0.0:1:2$	1	1 200	30 397.5
2	$n_{N_2}:n_{CH_4}:n_{O_2}=0.5:1:2$	1	1 200	30 397.5
3	$n_{N_2}:n_{CH_4}:n_{O_2}=1.0:1:2$	1	1 200	30 397.5
4	$n_{N_2}:n_{CH_4}:n_{O_2}=0.5:1:2$	1	1 400	30 397.5
5	$n_{N_2}:n_{CH_4}:n_{O_2}=0.5:1:2$	1	1 600	30 397.5
6	$n_{N_2}:n_{CH_4}:n_{O_2}=0.5:1:2$	1	1 800	30 397.5
7	$n_{N_2}:n_{CH_4}:n_{O_2}=0.5:1:2$	1	2 000	30 397.5

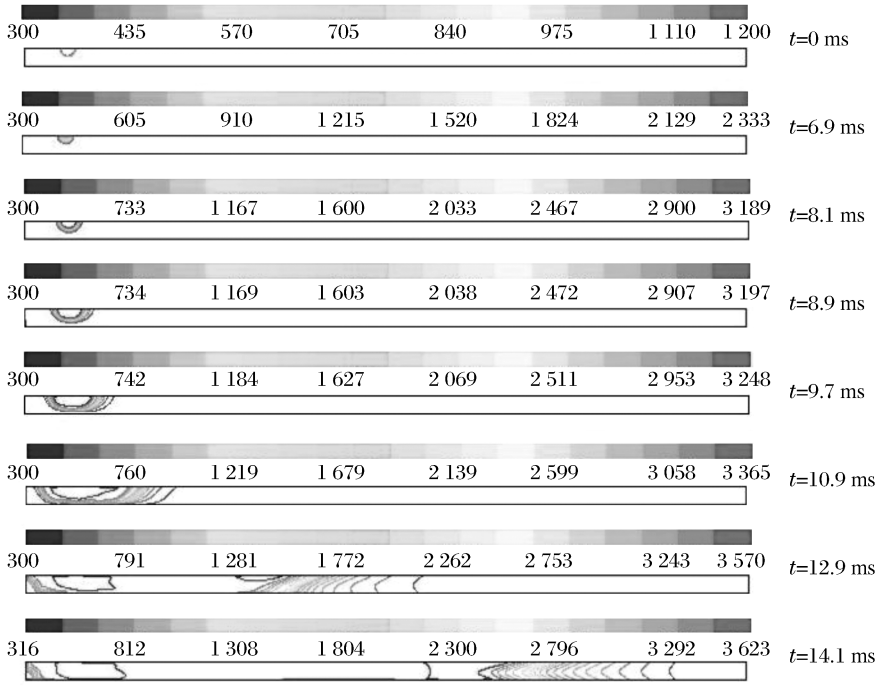


图 2　CH_4-O_2-N_2 在管内燃烧和爆炸过程

Fig. 2　The combustion and explosion process

当 $t=13.7$ ms 时，在 $y=0.05$ m 处的压力和温度曲线如图 3 所示。从图中可以看出，前驱压力波曲线明显超前于温度曲线，即前驱冲击波阵面与燃烧火焰阵面是分离的。由于气体爆燃的传播机制并不是依靠先导冲击波的压缩加热，而是主要依靠热传导、热辐射及活化中心向未燃气体中扩散等输运过程[14]。这就必然导致燃烧波阵面滞后于前驱压力波阵面，从而形成典型的“两波三区”（两波是指前驱压力波和燃烧波）的气体燃烧、爆炸流场结构[15]，此流场结构完全不同于爆轰波流场结构。

4.3　湍流对燃烧火焰的加速作用

图 4 给出了 CH_4-O_2-N_2（Case 2）混合气体燃烧、爆炸过程中管内最大湍动能的变化情况。从图中可以看出：在气体燃烧初期，壁面附近湍动能较小，如在 $t=8.9$ ms 时，最大湍动能为 118 m^2/s^2，此时气体燃烧速率也很小；随着燃烧和爆炸的进行，流场的湍流强度不断增大，如在 $t=12.9$ ms 时，壁面附近

的最大湍动能已经增大到 1 770 m^2/s^2，燃烧波速也增大到 1 000 m/s 以上。计算结果表明，流场中最大湍动能的分布位置都是在靠近壁面的区域，说明该计算条件下的湍流主要是由管道壁面诱发产生的。

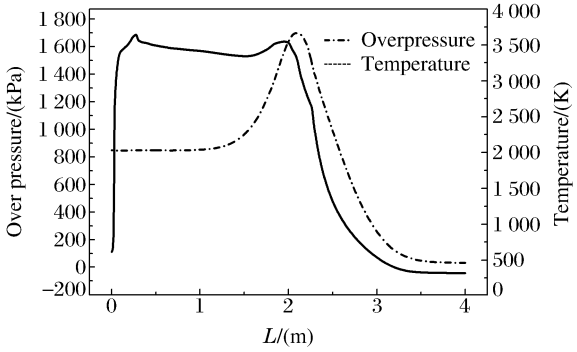


图 3 压力和温度曲线(t=13.7 ms)

Fig. 3 Pressure and temperature curves (t=13.7 ms)

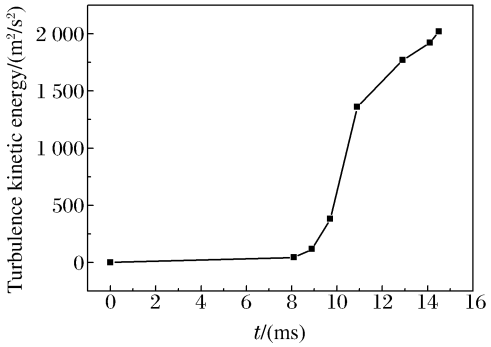


图 4 湍动能-时间曲线

Fig. 4 The turbulence kinetic energy versus time

在湍流燃烧中，燃烧化学反应过程与湍流流动有着强烈的相互作用。湍流通过强化混合来加速燃烧反应速率，从而使燃烧火焰传播加速；同时，燃烧化学反应的放热过程又强烈影响着湍流[4-5]。可见，湍流在可燃性气体的燃烧和爆炸过程中起着重要作用。在煤矿巷道或天然气输气管道中，应尽可能减少巷道或管道中的障碍物，保持壁面光滑，从而有效降低由障碍物或壁面诱导产生的湍流强度。若发生可燃性气体爆炸，由于湍流强度小，对燃烧火焰的加速作用也小，从而有效降低爆炸强度。

4.4 高温气团对燃烧和爆炸的影响

不同温度的高温气团(Case 2，Case 4～Case 7)对 CH_4-O_2-N_2 混合气体点火延迟时间的影响如图 5 所示。经过一定时间的延迟，CH_4-O_2-N_2 混合气体被高温气团点燃。高温气团作为能量源，其温度高低决定其能量大小。高温气团的温度越高，能量就越大，链式反应的准备时间越短，可燃性气体被点燃所需时间就越短；反之，温度越低，能量就越小，可燃性气体被点火所需要的时间就越长。计算结果表明，当高温气团的初始温度达到 1 800 K 时，高温气团的初始温度对 CH_4-O_2-N_2 混合气体点火延迟的影响就不明显了。

不同温度的高温气团对 CH_4-O_2-N_2 混合气体燃烧波轨迹的影响如图 6 所示。从图中可以看出，当 CH_4-O_2-N_2 混合气体被高温气团点燃后，在开始阶段各爆燃波曲线呈发散状，但经过一定时间和距离后所有爆燃波轨迹线都逐渐趋于平行(即斜率相同)，说明所有爆燃波的传播速度逐渐趋于相同。可

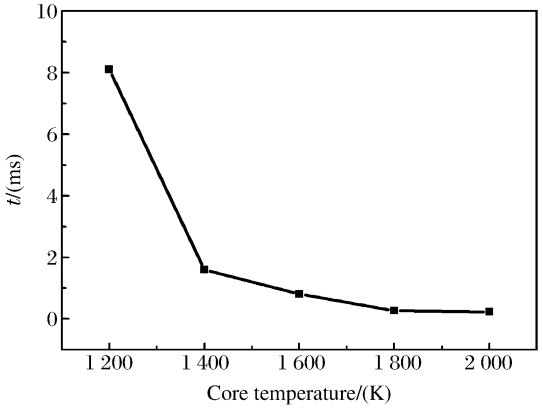


图 5 点火延迟时间随高温气团温度的变化

Fig. 5 The variation of ignition delay time with the core temperature

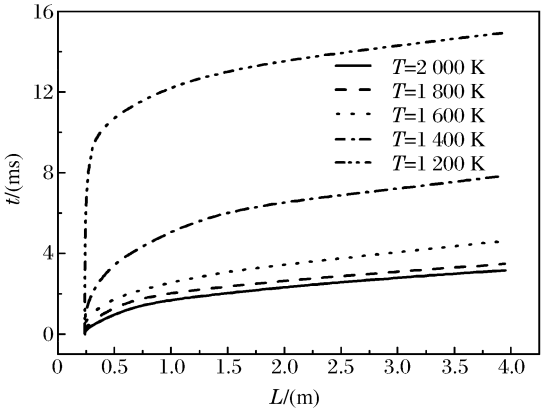


图 6 初始高温气团温度对爆燃波轨迹线的影响

Fig. 6 The influence of the initial core temperature on the deflagration tracking lines

以将 CH_4-O_2-N_2 混合气体的燃烧历程分为两个阶段：弱爆燃阶段和 CJ 爆燃阶段。在燃烧的初期，热传导、热辐射及活化中心向未燃气体的扩散等输运过程较慢，使得燃烧传播速度很小，该阶段即属弱爆燃阶段。由于诱发点火的能量源的能量不同，致使该阶段的燃烧速率也不同。随着燃烧产物因膨胀压缩周围气体而产生湍流流动，燃烧速率和火焰传播速度大大提高，并最终进入 CJ 爆燃阶段。点火气团的初始温度越高，点火延迟时间就越短，气体燃烧加速越快，到达 CJ 爆燃的时间和距离也越短。一旦气体燃烧由低速弱爆燃发展成 CJ 爆燃，其燃烧和爆炸特性就不再受初始点火气团初始温度的影响，而是受相同的化学动力学机制控制。当然，CJ 爆燃只是气体燃烧和爆炸过程中的一种状态。由于湍流对燃烧火焰的加速作用，使得气体燃烧可能由 CJ 爆燃快速转变到高速爆轰阶段，整个转变过程即 DDT (Deflagration to Detonation Transition)过程。

4.5　初始组分对燃烧和爆炸的影响

为了研究初始混合气体活性对燃烧和爆炸的影响，对 3 种工况(Case 1～Case 3)进行了数值计算。

不同初始组分对混合气体点火延迟时间和爆燃波轨迹的影响如图 7 所示。从图中可以看出，随着惰性气体 N_2 加入量的增加，混合气体的化学反应活性逐渐降低，导致点火延迟时间增大，燃烧速率降低。对不同时刻前驱压力波的峰值压力及位置等数据进行处理后，得到初始组分对混合气体爆炸超压峰值的影响，如图 8 所示。计算结果表明，燃烧产生的爆炸超压峰值随 N_2 量的增加而减小，前驱压力波传播速度也明显降低。图 9 和图 10 给出了 Case 2 和 Case 3 在相同时刻(t=14.0 ms)、y=0.05 m处的反应物、产物及重要自由基(如 H、O、OH)的摩尔分数变化情况。可以看出，与 N_2 含量较高的 Case 3 相比，在 N_2 含量较低的 Case 2 中，爆燃波阵面上 H、O 和 OH 3 种重要自由基的浓度相对较高。根据链式反应理论，H、O 和 OH 是链式反应的链传递者，其浓度大小直接决定链式反应速率和强度。因此，在 Case 2 中燃烧阵面上的链式化学反应进行得更加剧烈，放出的热量更多，燃烧温度也更高。

数值计算结果表明，在 CH_4-O_2-N_2 预混气体中加入 N_2 可以有效降低反应活性，使得点火延迟时间增大，燃烧阵面处的链式反应速率减缓，反应放热减少，最终使得靠化学反应放热维持的爆炸波的传播速度和爆炸强度都降低。当 N_2 加入量达到临界值时，CH_4-O_2-N_2 预混气体将不能被点燃，即点火延迟时间趋于无限长，其燃烧和爆炸将被彻底阻止。除了 N_2 外，其它惰性气体如 CO_2、H_2O、Ar 等都可以有效抑制可燃性气体的燃烧和爆炸。目前，惰性气体抑燃、抑爆技术已经被应用于煤炭开采、石油和天然气的存储和输运等工业生产中，有效地预防和阻止了煤矿瓦斯、石油气、天然气等可燃性气体燃烧和爆炸事故的发生。

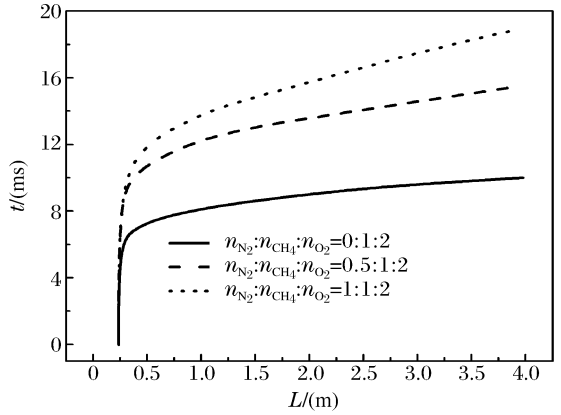


图 7　不同初始组分对爆燃波轨迹线的影响

Fig. 7　The influence of the initial component of mixture on the deflagration tracking lines

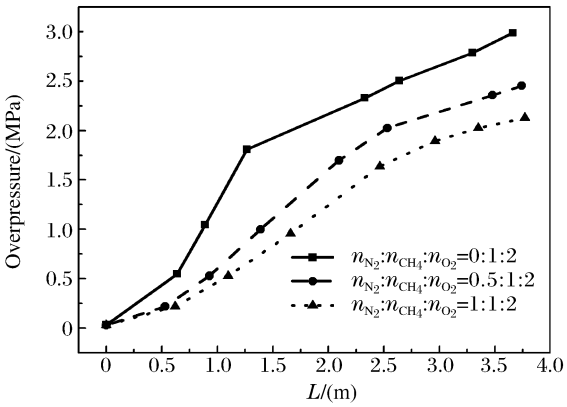
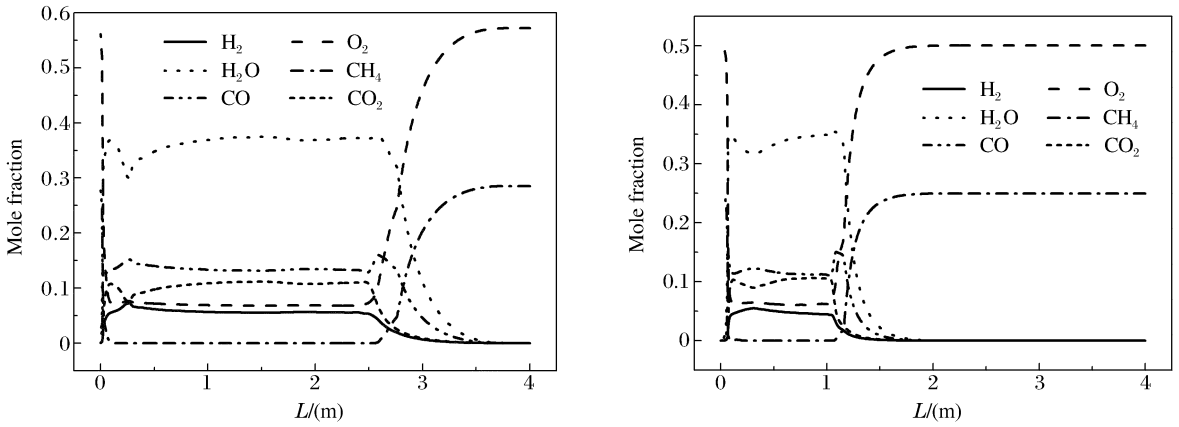


图 8　不同初始组分对爆炸超压的影响

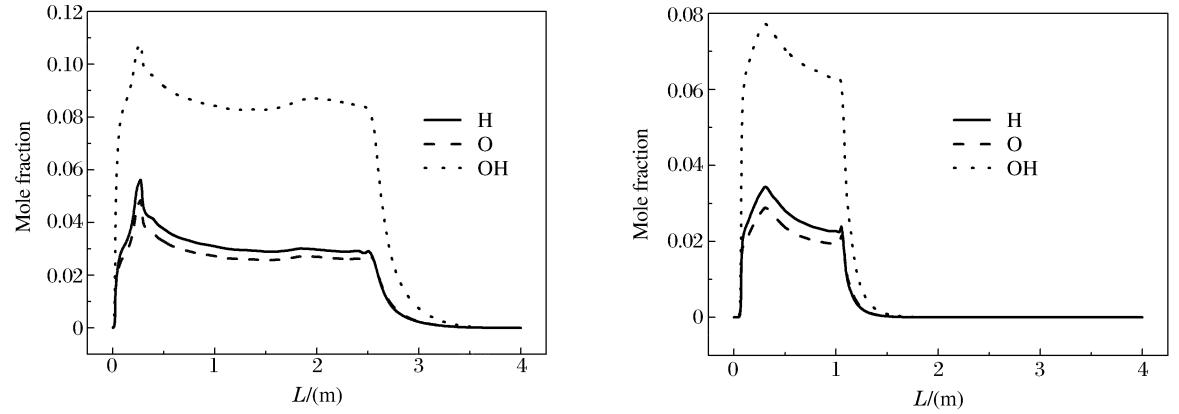
Fig. 8　The influence of the initial component of mixture on the explosion overpressure



(a) Case 2 (b) Case 3

图 9 $y=0.05$ m 处反应物和产物的摩尔分数变化($t=14.0$ ms)

Fig. 9 The variations of the mole fraction of the reactions and products at $y=0.05$ m ($t=14.0$ ms)



(a) Case 2 (b) Case 3

图 10 $y=0.05$ m 处重要自由基的摩尔分数变化($t=14.0$ ms)

Fig. 10 The variations of the mole fraction of the important radicals at $y=0.05$ m ($t=14.0$ ms)

4.6 数值计算结果与实验测量结果的比较

为了考察我们建立的湍流爆炸模型在预测 CH_4-O_2-N_2 预混气体爆炸时的有效性,将 Case 1～Case 3的计算结果与实验测量结果进行比较。实验在爆炸激波管中进行,管两端封闭,几何尺寸为:长度 $L=4.0$ m、直径 $D=0.1$ mm。在激波管上壁面附近分别布置 1#($x=2.24$ m、$y=0.1$ m 处)、2#($x=3.24$ m、$y=0.1$ m 处)和 3#($x=3.74$ m、$y=0.1$ m 处)3 个压力传感器,用于测量混合气体爆炸产生的超压。点火位置与数值计算时基本相同,即在 $x=0.24$ m、$y=0.1$ m 处。采用电火花点火,点火能量大于 0.28 mJ。管内预混气体的初始温度为 300 K 左右,管内气体初始压力为 30 397.5 Pa。实验时,在激波管中依次充入所需量的 CH_4、O_2 和 N_2,等待 30 min 后将其点火。

在 $x=2.24$ m、$x=3.24$ m 和 $x=3.74$ m 这 3 个位置上,实验测量的爆炸超压峰值和计算得到的爆炸超压峰值(计算时,取 $y=0.1$ m)的比较见图 11。从中可以看出,数值计算结果与实验测量结果总体上符合较好,并且爆炸超压峰值的变化规律也是一致的。但是,数值计算结果与实验测量结果还是存在一定差异,这是因为数值计算条件与实验测量条件并不完全相同。例如:数值计算中,气体都作为理想气体处理,点火前各种气体是理想的均匀混合,采用高温气团点火;而实验测量中,气体是真实气体,气体混合不完全,采用电火花点火。这些不同因素必然导致数值计算结果与实验测量结果之间出现差异。

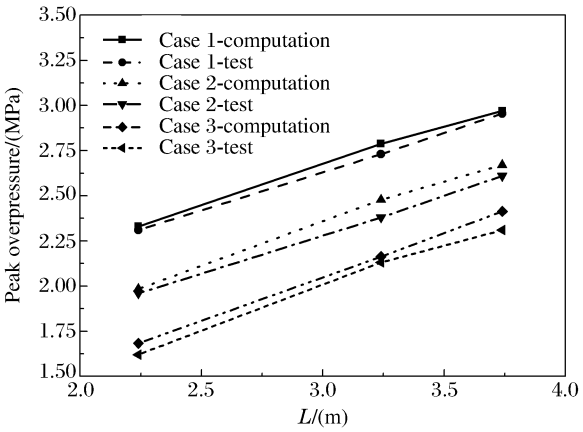


图 11　爆炸超压计算值与试验值的比较

Fig. 11　Comparison between computational results and experimental results

5　结　论

利用 CFD 软件——Fluent，采用 ISAT 算法对 CH_4-O_2-N_2 预混气体在管道中的湍流燃烧和爆炸过程进行了二维数值计算，化学反应过程的计算采用包含 17 种物质 47 个基元反应的简化 CH_4 氧化反应模型。数值计算结果表明，二维湍流爆炸模型较好地模拟了 CH_4-O_2-N_2 预混气体在高温气团作用下的点火、燃烧和爆炸过程。在数值计算中，考察了高温点火气团的初始温度和混合气体的初始组分对 CH_4-O_2-N_2 预混气体燃烧和爆炸过程的影响。结果表明：高温点火气团的初始温度对其点火延迟时间和初始弱爆燃阶段具有重要影响，但对 CJ 爆燃阶段没有影响；惰性气体 N_2 的加入，降低了混合气体的反应活性，导致点火延迟时间增大，燃烧反应速度、爆炸超压和重要自由基浓度都随之减小。爆炸超压峰值的数值计算结果与实验测量结果符合较好。

简化的 CH_4 氧化机理和二维湍流爆炸模型可以被应用于涉及甲烷气体燃烧和爆炸的相关问题研究，例如：矿井瓦斯爆炸点火条件、爆炸波传播规律、惰性气体对瓦斯的抑燃抑爆作用效果等。

References:

[1]　Lindstedt R P, Sakthitharan V. Time Resolved Velocity and Turbulence Measurements in Turbulent Gaseous Explosions [J]. Combustion and Flame, 1998, 114(3-4): 469-483.

[2]　Fairweather M, Hargraveg K, Ibrahims S, et al. Studies of Premixed Flame Propagation in Explosion Tubes [J]. Combustion and Flame, 1999, 116(4): 504-518.

[3]　Patel S, Ibrahims S, Yehiama A, et al. Investigation of Premixed Turbulent Combustion in a Semi-Confined Explosion Chamber [J]. Experimental Thermal and Fluid Science, 2003, 27(4): 355-361.

[4]　Fan B C, Jiang X H, Li H Z. Numerical Simulation of Turbulent Accelerating Flame in Three Dimensional Flows [J]. Chinese Journal of Computational Mechanics, 2003, 20(4): 462-466. (in Chinese)
范宝春，姜孝海，李鸿志. 湍流加速火焰的三维数值模拟 [J]. 计算力学学报，2003，20(4)：462-466.

[5]　Ye J F, Fan B C, Ying Z F, et al. Experimental Investigation of CH_4-Air Premixed Flame-Obstacle Interaction [J]. Journal of Experiments in Fluid Mechanics, 2006, 20(4): 40-44. (in Chinese)
叶经方，范宝春，应展烽，等. 甲烷-空气预混火焰越过不同形状障碍物的实验研究 [J]. 实验流体力学，2006，20(4)：40-44.

[6]　Zhang B, Fu W B. Effect of Hydrogen and Vapor on Laminar Flame Speeds of Methane/Air Mixtures [J]. Journal of Combustion Science and Technology, 2004, 10(6): 559-562. (in Chinese)
张　波，傅维标. 氢气和水蒸气对甲烷/空气层流火焰传播速度的影响 [J]. 燃烧科学与技术，2004，10(6)：559-562.

[7] Dong G, Liu H W, Chen Y L. General, Nitrogen-Containing Semi-Detailed Chemical Kinetic Mechanism for Methane Laminar Premixed Flame [J]. Journal of Combustion Science and Technology, 2002, 8(1): 44-48. (in Chinese)
董 刚, 刘宏伟, 陈义良. 通用甲烷层流预混火焰半详细化学动力学机理 [J]. 燃烧科学与技术, 2002, 8(1): 44-48.

[8] Gao T Y, Huang J T, Li Y M, et al. Numerical Simulation of Deflagration to Detonation Transition (DDT) of CH_4-O_2 Gas Mixture [J]. Explosion and Shock Waves, 1998, 18(4): 321-330. (in Chinese)
高泰荫, 黄军涛, 李元明, 等. CH_4-O_2 混合气中爆燃转爆震转捩的数值模拟 [J]. 爆炸与冲击, 1998, 18(4): 321-330.

[9] Ren Y X, Chen H X. Computational Fluid Dynamics Foundation [M]. Beijing: Tsinghua University Press, 2006: 8-10. (in Chinese)
任玉新, 陈海昕. 计算流体力学基础 [M]. 北京: 清华大学出版社, 2006: 8-10.

[10] Yue P T. Investigation of Some Problems in Scramjet Combustor [D]. Hefei: University of Science and Technology of China, 2002. (in Chinese)
岳朋涛. 超燃冲压发动机燃烧室若干问题的研究 [D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2002.

[11] Fluent 6.2 User's Guide [Z]. Lebanon: Fluent Inc, 2005.

[12] Hughes K J, Turanyi T, Pilling M J. The Leeds Methane Oxidation Mechanism [EB/OL]. (2001-03-31) http://garfield.chem.elte.hu/combustion/methane.htm.

[13] Smith G P, Golden D M, Frenklsch M, et al. GRI-Mceh [EB/OL]. (1999-07-30) http://www.me.berkeley.edu/gri_mech.

[14] Sun C W, Wei Y Z, Zhou Z K. Applied Detonation Physics [M]. Beijing: National Defense Industry Press, 2000: 10-11. (in Chinese)
孙承纬, 卫玉章, 周之奎. 应用爆轰物理 [M]. 北京: 国防工业出版社, 2000: 10-11.

[15] Zhao H Y. Principle of Gas and Dust Explosion [M]. Beijing: Beijing Institute of Technology Press, 1996: 72-83. (in Chinese)
赵衡阳. 气体和粉尘爆炸原理 [M]. 北京: 北京理工大学出版社, 1996: 72-83.

Two-Dimensional Numerical Simulation of Explosion for Premixed CH_4-O_2-N_2 Mixture

LI Cheng-Bing, WU Guo-Dong, JING Fu-Qian

(*National Key Laboratory of Shock Wave and Detonation Physics, Institute of Fluid Physics, CAEP, Mianyang* 621900, *China*)

Abstract: Based on the reduced methane oxidized element reaction model, CFD software and ISAT algorithm were used to establish a two-dimensional turbulent explosion model for premixed CH_4-O_2-N_2 mixture. Computational results show that the process of ignition, combustion and explosion of the premixed CH_4-O_2-N_2 mixture can be simulated well by the model. The influence of the initial temperature of the high temperature core and the component of mixture on combustion and explosion were considered in the numerical computations. Simulation results indicate that the initial temperature of the high temperature core has an important effect on the ignition delay time and the early combustion phase of the premixed CH_4-O_2-N_2 mixture, but it hardly affects the CJ deflagration phase. The reaction activity of the premixed mixture is reduced by adding N_2, which results in the increase of ignition delay time and the decrease of deflagration reaction speed, explosion overpressure and free radical concentration. The computational results of explosion overpressure are in good agreement with experimental results on the same conditions.

Key words: ISAT algorithm; element reaction; chemical kinetics; turbulence; CJ deflagration; numerical simulation