文章编号:1000-5773(2012)03-0301-05

甲烷-空气最小点火能量预测理论模型*

马秋菊[1],张 奇[1],庞 磊[2]

(1.北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室,北京 100081;
2.北京市劳动保护科学研究所,北京 100081)

摘要:最小点火能是可燃气体危险性辨识的重要参数之一。为从理论上得到混合气体的最小点火能,建立了可燃气体火花点火的物理模型,给出了通过数值模拟得到的可燃气体最小点火能量的预测方法,采用该方法得到了甲烷-空气混合气火花点火的临界温度及最小点火能量。结果表明:甲烷-空气混合气的最小点火能量与浓度呈 U 型关系,浓度为 8.5%的预混气的最小点火能量计算值为 0.39 mJ,与实验值 0.4 mJ 吻合较好。

关键词:气体爆炸;最小点火能;临界温度;点火;热点
中图分类号:O38;X928.7 **文献标识码**:A

1 引 言

最小点火能是设计安全标准和理解可燃气体点火过程的一个重要特性参数,确定可燃气体混合物的最小点火能,采取相应措施避免点火源,是最经济、合理的预防易燃易爆气体爆炸的方法。尽管对甲烷-空气混合气体中火焰的形成已经通过实验和数值方法进行了比较系统的研究,但是尚未给出对点火机制较为满意的解释,由于可燃气体混合物的最小点火能的测量受诸多因素的影响,因此,从理论上研究其点火机理,将理论计算与实验测量相结合,才能得到更准确、更合理的最小点火能的值。

点火过程是事故诱发原因分析的基础,点火和火焰加速过程是目前气体爆炸理论及数值计算多年来尚未解决的科学问题。电火花是气体爆炸事故的典型诱发源,也是可燃气体燃爆危险性测试点火的主要方法。点火过程在多大范围内对爆炸参数有影响、有怎样的影响等,这些都与可燃气体的点火过程有关。由于电火花点火过程的瞬时性和微小的空间尺度,电火花点火的局部特征实验测量是极其困难的,建立适当的模型,进行数值模拟,是解决该问题的有效途径。

很多学者对可燃气体的点火进行了研究,主要成果是最小点火能量的测定、电极参数对火花能量的影响、火花能量特性对爆炸参数的影响。

Eckhoff[1]组建了电火花发生器,测量得到的丙烷-空气混合气的最小点火能为 0.48 mJ;Sacks 等[2]证明了闪电可以引起矿井下瓦斯气体的点火;Man 等[3]通过实验方法研究了颗粒尺寸、氧含量等富氧条件下煤颗粒点火的影响因素;Han 等[4]通过数值方法得到当量比、电极间距和电极半径对甲烷-空气混合气体最小点火能、熄灭距离和点火延迟期的影响;Kelley 等[5]用实验方法得到了不同当量比和不同压力下,火花点火的球形火焰持续传播的最小点火半径。

有关点火理论分析的研究成果较少:Amyoeee 等[6]指出,粉尘云有 3 种点火机理;El-Sayeda[7]从理论上详细考查了化学反应程度对可燃气体点火的临界条件和影响,其研究对象不是局部高温热点的点

* **收稿日期**:2011-12-05;**修回日期**:2011-12-21
基金项目:国家自然科学基金(11072035);博士点科学基金(20101101110005)
作者简介:马秋菊(1987—),女,博士研究生,主要从事气体粉尘爆炸研究. E-mail:maqiuju@bit.edu.cn
通讯作者:张 奇(1956—),男,教授,主要从事爆炸安全理论与技术研究. E-mail:qzhang@bit.edu.cn

火过程;Petersen 等人[8]考虑多步基元反应,建立了甲烷-氧气混合物冲击起爆反应动力学模型。

可燃气体最小点火能量的精确测定需要较复杂的实验系统,可燃气体最小点火能量的实验研究难以揭示其物理本质,难以对其影响因素进行系统研究。因此探索可燃气体的点火过程的预测模型具有重要理论意义和应用背景。

本研究将"热点"抽象为局部高温区,在高温作用下,局部高温区内的可燃混合物将发生化学反应,并向周围扩散,热点边界能否发生快速反应是点火的临界条件。这种思想在凝聚态含能材料的点火理论中已有尝试,并取得相应成果。可燃气体燃爆特性的热力学参数与凝聚态具有较大差别,目前尚未进行过局部热点火的理论分析。本研究以热点机理分析为基础,以有限元方法为手段,建立点火模型,利用 MATLAB 数值计算软件对模型的控制方程进行求解,得到临界点火温度和不同浓度下的最小点火能,并与实验值进行了对比验证。

2 可燃气体点火理论模型

2.1 模型的建立

建立球形计算区域,内部为可燃混合气体,以可燃气体混合物内的球形点火源为研究对象,由于是球对称的,因此可以简化为二维问题进行计算。

2.2 基本假设

模型及控制方程的确定建立在一定的假设基础上的。由于点火机理十分复杂,且本研究只专门针对热传导和化学反应对点火过程的影响进行分析,因此必须对其它各因素和一些过程进行必要的假设:

(1) 在反应区域内,热是通过热传导机制进行的,含能物质不发生对流运动;

(2) 在反应过程中,可燃物质的物性参量不随温度的变化而改变,即为常数,如热传导系数、密度、活化能、指前因子等;

(3) 忽略反应区内气体的波动;

(4) 用体系的温度突越来表征体系发生点火爆炸;

(5) 不考虑冲击力、粘性力等力的作用,只考虑热传导。

2.3 控制方程

热平衡方程主要由热传导的热量和化学反应产生的热量两部分组成,对混合气体建立数学模型,以混合气体中心为原点建立球坐标系,微分方程为

$$\frac{\partial T}{\partial t}=\frac{K}{\rho c}\left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial T}{\partial r}\right)+\frac{QZ}{c}\exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \tag{1}$$

式中:$\frac{K}{\rho c}\left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial T}{\partial r}\right)$ 是热传导的热量,$\frac{QZ}{c}\exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$ 是化学反应产生的热量;c 是混合气体的定容比热容,单位 J/(kg·K);ρ 是混合气体的密度,单位 kg/m^3;T 是气体温度,单位 K;K 是气体导热率,单位 W/(m·K);Q 是反应分解热,单位 J/kg;E 是活化能,单位 J/mol;Z 为指前因子(常数),单位 s^{-1};R 为气体常数。

2.4 初始条件和边界条件

在模拟电火花点火过程时,假设给中心半径为 r_0(点火半径)的区域加一初始高温载荷 T_0。由于计算区域半径 b 远远大于点火半径 r_0,所以认为在气体外边界处温度始终不变,为室温

$$T=\begin{cases}T_0, & 0<r\leqslant r_0\\ & t=0\\ T_a, & r_0<r<b\end{cases} \tag{2}$$

$$\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}r}=0,\ r=0 \qquad \text{(点火中心处的温度梯度为零)} \tag{3}$$

$$c_1\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)\Big|_{x=r_0^-} = c_2\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)\Big|_{x=r_0^+} \qquad \text{(点火边界处热流相等)} \tag{4}$$

式中:T_0 是点火半径内的初始温度;T_a 是初始时刻气体的温度,即室温;c_1、c_2 为边界两侧气体的定容比热容。

3　甲烷-空气最小点火能量的数值计算

3.1　求解方程

方程(1)是一种复杂的热点火问题,包含有非线性的化学反应热分解部分,难以得到解析解,只有数值解,采用数值计算方法对偏微分方程进行求解是一种常用方法。

点火区域为:$D_1=\{(x,t)\mid 0\leqslant x\leqslant r_0, t\geqslant 0\}$,$r_0$ 为点火半径。

混合气体求解区域为:$D_2=\{(r,t)\mid r_0\leqslant r\leqslant d, t\geqslant 0\}$,$d$ 为混合气体半径。

3.2　结果与分析

甲烷气体指前因子为 2.119×10^{11} s^{-1}[9],活化能为 202.7 MJ/mol[9]。对混合气体中心半径为 r_0 的区域施加初始高温载荷,模拟电火花点火中放电瞬间的高温,然后用 MATLAB 软件编写程序对点火过程求解,得到计算区域内各点温度随时间的变化,通过温度是否出现急剧上升来判断是否点火。在温度-时间图中,若某一时刻的温度突然急剧上升,则认为点火成功,即发生了气体点火;若没有突跃,最后温度越来越低,直至趋于室温,则认为没有达到成功点火,如图 1 所示,虚线表示成功点火,实线表示没有成功点火。

由数值计算得到了点火中心处气体的温度-时间曲线(见图 2),图 2 是点火半径为 0.5 mm、初始温度分别为相应的临界温度时,不同浓度下点火中心位置处温度随时间的变化。

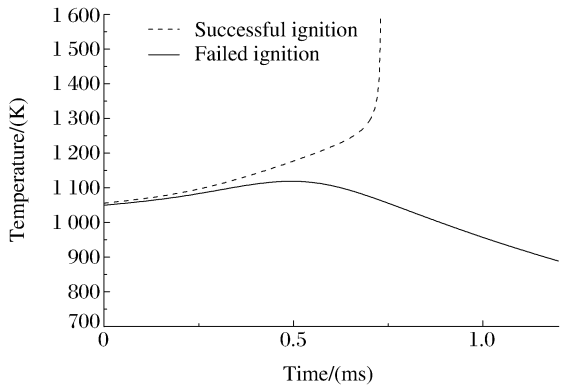


图 1　成功点火与失败点火曲线

Fig. 1　Successful ignition and failed ignition curves

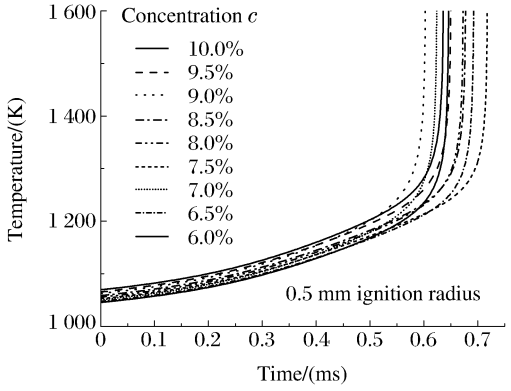


图 2　不同浓度下点火中心处温度-时间曲线

Fig. 2　Temperature-time curves at the centre

从图 2 中可看出,中心处的温度首先缓慢升高,达到一定的温度后突然急剧升高,此时即认为发生点火。

由公式(5)可计算得到最小点火能,结果列于表 1 中。

$$Q_{\min} = mc\Delta T_{\min} = \frac{4}{3}\pi R^3 \rho c \Delta T_{\min} \tag{5}$$

式中:m 为点火区域气体质量,单位 kg;c 是混合气体的定容比热容,单位 J/(kg·K);ρ 是混合气体的密度,单位 kg/m^3。

表 1 最小初始温度和最小点火能

Table 1 Minimum initial temperatures and minimum ignition energies

c_0/(%)	T_0/(K)	ΔT_{min}/(K)	Q_{min}/(mJ)	c_0/(%)	T_0/(K)	ΔT_{min}/(K)	Q_{min}/(mJ)
6.0	1070	774	0.3917	8.5	1053	757	0.3906
6.5	1066	770	0.3911	9.0	1051	755	0.3912
7.0	1063	766	0.3910	9.5	1048	752	0.3915
7.5	1059	763	0.3907	10.0	1046	750	0.3920
8.0	1056	760	0.3907				

由表 1 中的最小点火能数据拟合出的曲线如图 3 所示，图中黑点代表不同浓度下的最小点火能量值，拟合得到的曲线方程为

$$Q_{min}(c_0) = 0.40981 - 0.00501c_0 + 3.4329 \times 10^{-4}c_0^2 - 2.0202 \times 10^{-6}c_0^3 \quad (6)$$

由图 3 的拟合曲线可以看出：在所选取的浓度范围两端，预混气体的最小点火能量较高。甲烷浓度为 8.5% 的预混气体的最小点火能量最低，为 0.3906 mJ，与李伟等人[10]得到的实验值 0.4 mJ 是一致的。在化学当量比条件下，浓度为 9.5% 的预混气体的最小点火能量数值并非各浓度条件下的最低值，反而相对较高。

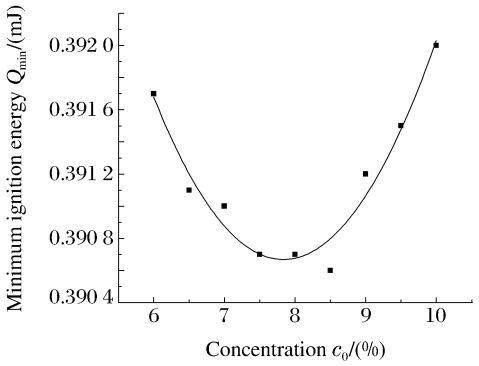


图 3 点火半径为 0.5 mm、不同浓度下甲烷气体最小点火能曲线

Fig. 3 Minimum ignition energy-time curve under 0.5 mm ignition radius

应该指出，可燃气体最小点火能量的实验测定值与实验系统、数据处理方法、甚至点火电极的材料和间隙等等因素有关。传统认为，甲烷-空气的最小点火能量为 0.28 mJ。取得这一数值的实验系统、数据处理方法、点火电极参数等因素难以从现有的文献中详细查找。为了验证本研究的理论模型和数值结果，利用可燃气体最小能量测试系统，在 20 L 爆炸罐体内进行了甲烷-空气最小点火能量精确测定，在环境温度 22.9 ℃、相对湿度 60%、甲烷浓度为 8.5%、点火半径为 0.5 mm 条件下，测得的最小点火能量为 0.4 mJ，本研究的理论预测值为 0.3906 mJ，两者吻合较好。

4 结 论

建立了物理模型，得到一种预测可燃气体混合物最小点火能的方法，用数值方法解决了可燃气体混合物的爆炸参数（如点火临界温度和最小点火能）长期依赖于实验的问题。

以甲烷为例，预测得到了甲烷与空气混合气的最小点火能，并用实验值进行验证。结果表明，理论值与实验结果吻合较好，表明此方法是合理可行的。

References:

[1] Eckhoff R K. On the minimum ignition energy (MIE) for propane/air [J]. J Hazard Mater, 2010, 175(1-3): 293-297.

[2] Sacks H K, Novak T. A method for estimating the probability of lightning causing a methane ignition in an underground mine [J]. IEEE T Ind Appl, 2008, 44(2): 418-423.

[3] Man C K, Gibbins J R. Factors affecting coal particle ignition under oxy fuel combustion atmospheres [J]. Fuel, 2011, 90(1): 294-304.

[4] Han J L, Yamashita H, Hayashi N. Numerical study on the spark ignition characteristics of a methane-air mixture using detailed chemical kinetics effect of equivalence ratio, electrode gap distance, and electrode radius on MIE, quenching distance, and ignition delay [J]. Combust Flame, 2010, 157(7): 1414-1421.

[5] Kelley A P, Jomaas G, Law C K. Critical radius for sustained propagation of spark-ignited spherical flame [J]. Combust Flame, 2009, 156(5): 1006-1013.

[6] Amyoeee P R, Chippett S, Pegg M J. Effects of turbulence on dust explosion [J]. Prog Energ Combust, 1988, 14(4): 293-310.

[7] El-Sayeda S A. Effect of degree of reaction on critical conditions and times to ignition of a gas mixture explosion [J]. Combust Sci Tech, 2006, 178(6): 1055-1086.

[8] Petersen E L, Davidson D F, Hanson R K. Kinetics modeling of shock-induced ignition in low-dilution CH_4/O_2 mixtures at high pressures and intermediate temperatures [J]. Combust Flame, 1999, 290(117): 272-290.

[9] Fluent Inc. Fluent 6.3 User's Guide [Z]. Lebanon, NH, 2006.

[10] LI Wei. Study on the process and characters of gas and dust's explosion [D]. Beijing: Beijing Institute of Technology, 2010: 43. (in Chinese)
李　伟. 气体粉尘爆炸过程及其参数研究 [D]. 北京:北京理工大学, 2010: 43.

Theoretical Model of Minimum Ignition Energy Prediction for Methane-Air Mixture

MA Qiu-Ju[1], ZHANG Qi[1], PANG Lei[2]

(1. *State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing* 100081, *China*;
2. *Beijing Municipal Institute of Labor Protection, Beijing* 100054, *China*)

Abstract: The minimum ignition energy is one of the important properties to estimate the fatalness of combustible gases. To get a theoretical value of minimum ignition, a physical model of spark ignition of the combustible gases was established, and a minimum ignition energy prediction method of combustible mixtures through a numerical analysis was given. The critical temperature and minimum ignition energy of methane-air mixture during spark ignition process were obtained. The results shows that MIE of methane-air has a U-shaped relationship to concentrations, and the MIE of premixed gas under concentration of 8.5% is 0.39 mJ, which agrees well with the experimental value.

Key words: gas explosion; minimum ignition energy; critical temperature; ignition; hot spot