

文章编号: 1001-2486 (2001) 02-0033-05

## 激波诱导可燃气体爆燃的数值模拟\*

张艳, 任兵, 常熹钰, 熊国清

(国防科技大学航天与材料工程学院, 湖南长沙 410073)

摘要: 运用化学流体力学基本理论, 建立了一维激波诱导可燃气体爆燃的九化学反应模型, 完成了 CO 气体爆燃过程的数值模拟, 由 CO 气体密度的变化以及流场中压力和温度的相应变化, 清楚地说明了激波诱导可燃气体爆燃的发生机制以及对灭火的重要影响。

关键词: 可燃气体爆燃; 激波; 数值模拟

中图分类号: O643.2<sup>+</sup>1 文献标识码: ANumerical Simulation about the Process that a Shock Wave Induces  
the Combustible Gas Deflagrating

ZHANG Yan, REN Bing, CHANG Xi-yu, XIONG Guo-qing

(College of Aerospace and Material Engineering, National Univ. of Defense Technology, Changsha 410073, China)

**Abstract:** Based on the theory of reaction fluid dynamic, numerical simulate about the process that shock waves induce the combustible gas deflagrating in one-dimensional system with the chemical model of nine equation is successfully accomplished. The generation mechanism of the induced process and an important effect of shock waves extinguishing the forest fire are clearly interpreted by the density variety of CO and the variety of pressure and temperature in the field.

**Key words:** combustible gas deflagrating; shock wave; numerical simulate

绝大多数固体可燃物在着火燃烧之前因受热而产生了热解气化现象, 使着火时首先形成的是气相火焰。因此固体可燃物的着火过程从化学的角度出发划分为如下三个阶段: 预热阶段、热分解阶段、有焰燃烧和无焰燃烧阶段。在热分解阶段这一过程中可燃物迅速地分解成可燃性气体(如一氧化碳、氢、甲烷等)和焦油液滴(较大分子碎片), 形成可燃性挥发物, 逸向可燃物上方的空间。热分解反应逸出的可燃性挥发物在可燃物上方空间中, 与空气形成可燃性混合物, 当挥发物的浓度达到燃烧极限范围, 可燃性混合物温度达到燃点时, 在固体可燃物上方可形成明亮火焰, 放出大量热量。在 1995 年俄罗斯托姆斯克大学 A. M. Grishin 发表了激波与林冠和林冠火锋面相互作用的研究报告<sup>[1]</sup>中提出激波诱导可燃气体爆燃可能是激波灭火的动因之一。由于这一说法还很难从实验上得到确切的论证, 因此本文运用数值模拟的方法探讨其机理。由于热解过程十分复杂, 与树种、加热速度、最终温度、环境压力、加热时间多种参数有关, 而且随着热解、气化反应的发生还应考虑逆反应的作用, 而热解、气化反应过程的机理研究也相当困难。因此, 本文的数值模拟不考虑这一过程。仅仅考虑已经热解后的情况(即预混气情况), 本文就一维激波诱导关于水蒸气与 CO 的可燃气体爆燃建立的九化学反应模型问题, 对其爆燃过程进行数值模拟, 从可燃气体爆燃发生机制及可燃气体区域激波后增温现象, 探讨激波灭火的机理。

## 1 物理模型及其数学表达

## 1.1 物理模型

为了能反映本问题的化学反应流动过程的基本特征, 假设<sup>[2]</sup>:

\* 收稿日期: 2000-09-25  
基金项目: 国家自然科学基金资助项目(39770623)  
作者简介: 张艳(1975-), 女, 硕士生。

(1) 反应装置是一根两端封闭、边界绝热且光滑的圆柱形钢管，管子的抗压强度足够大，且长度  $L$  远远大于直径  $D$ ；

(2) 初始气体混合物的温度、浓度和压力沿径向均匀分布；

(3) 初始温度场如图 1 所示给出；

(4) 初始浓度场由三部分组成，即当  $0 \leq x \leq x_0$ ， $x_0 \leq x \leq x_1$ ， $x_1 \leq x \leq x_2$  为空气（按一定比例混合的  $N_2$ 、 $O_2$  和  $H_2O$ ），当  $x_1 \leq x \leq x_2$ ，为按一定比例混合的  $O_2$ 、 $CO$ 、 $N_2$  和  $H_2O$ ；

(5) 初始混合气体密度均匀；

(6) 不考虑辐射传热。

### 1.2 基本方程

对于一维非定常、无粘、气体导热的化学反应流动问题，可以建立以下的数学模型<sup>[3]</sup>：

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial X} = S \tag{1}$$

其中：

$$U = [\rho, \rho u, E_t, \rho_1, \dots, \rho_N]^T$$

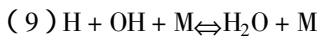
$$F = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ (E_t + p)u \\ \rho_1 u \\ \dots \\ \rho_N u \end{bmatrix}, \quad S = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \sigma_1 \\ \dots \\ \sigma_N \end{bmatrix}$$

$$E_t = \sum \rho_i (e_i(T) + h_i^0(T)) + \rho \cdot u^2/2$$

式中  $e_i(T)$ 、 $h_i^0(T)$ 、 $h_i(T)$ 、 $\sigma_i$ 、 $Y_i$  分别为第  $i$  组元的内能、生成焓、焓、生成率和质量浓度，且有  $\sum \rho_i = \rho$ ， $\sum \sigma_i = 0$ 。

## 2 化学反应模型

假定化学反应是以有限速率进行的，不考虑固体可燃物的热解，可燃性气体各组分之间的化学反应模型如下<sup>[4]</sup>：



其中反应速率均采用修正的 Arrhenius 公式

$$k_i = A_i T^{\delta_i} \exp(-E_i/RT) \tag{2}$$

其中： $A_i$ 、 $\delta_i$ 、 $E_i$  值见表 1。

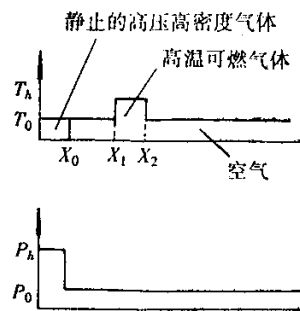


图 1 初始温度压力分布

Fig.1 Initial temperature and pressure-distance profile

表 1 反应速率常数表

Tab.1 Rate parameters of reaction of combustion

反应序号	正向反应			逆向反应		
	$A_i$	$\delta_i$	$E_i$	$A_i$	$\delta_i$	$E_i$
(1)	$5.600 \times 10^{11}$	0.00	1080	$1.455 \times 10^{18}$	-1.19	27047
(2)	$2.190 \times 10^{13}$	0.00	5150	$4.858 \times 10^{14}$	0.20	20727
(3)	$2.240 \times 10^{14}$	0.00	16800	$6.647 \times 10^{11}$	0.39	-469
(4)	$1.740 \times 10^{13}$	0.00	9450	$7.737 \times 10^{12}$	0.00	7467
(5)	$5.750 \times 10^{13}$	0.00	18000	$1.169 \times 10^{12}$	0.20	444
(6)	$5.000 \times 10^{18}$	-1.15	0	$1.662 \times 10^{19}$	-1.14	103988
(7)	$4.700 \times 10^{15}$	-0.28	0	$2.375 \times 10^{18}$	-1.00	119279
(8)	$5.300 \times 10^{15}$	0.00	-2780	$8.477 \times 10^{18}$	0.00	99246
(9)	$1.170 \times 10^{17}$	0.00	0	$8.629 \times 10^{18}$	-0.19	119565

### 3 离散算法处理

首先把能量方程中的生成焓分裂出来归入源项，然后把得到的控制方程分解为三个方程，其中运动控制方程与组分方程用完全气体计算时使用的方法处理，在时间方向用大步长推进。这样，在公式推导时非常简便，且能够充分利用现有程序和计算经验。分解得到的第一个方程称之为化学生成源项方程，进行半隐式处理后用二阶梯形公式离散，并用与运动方程同量级的步长推进。

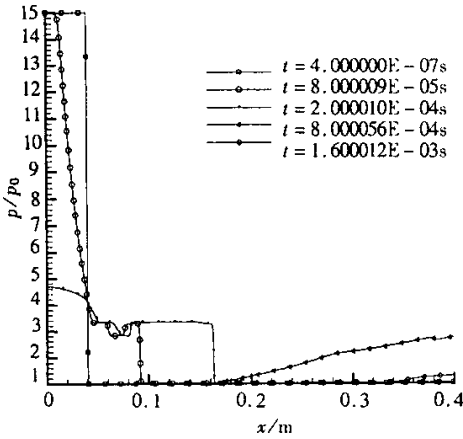


图 2 压力分布

Fig.2 Pressure-distance profile

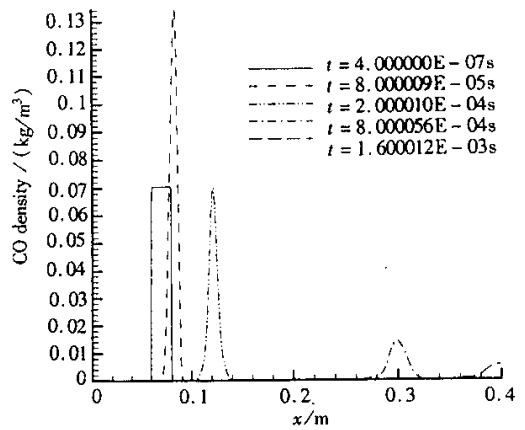


图 3 CO 密度分布

Fig.3 CO composition-distance profile

本文借用平衡气体计算中提出的等效比热比概念，设

$$\begin{aligned}
 E_t &= \sum \rho_i (e_i(T) + h_i(T)) + \rho \cdot u^2/2 \\
 &= \rho u^2/2 + \frac{p}{\gamma - 1} + \sum \rho_i h_i(T) = e + \sum \rho_i h_i(T)
 \end{aligned} \quad (3)$$

然后，利用时间分裂法，将控制方程中源项分裂出来：

$$\frac{\partial U_1}{\partial t} = S_1 \quad (4)$$

这里：

$$U_1 = [e, \rho_1, \dots, \rho_N]^T,$$

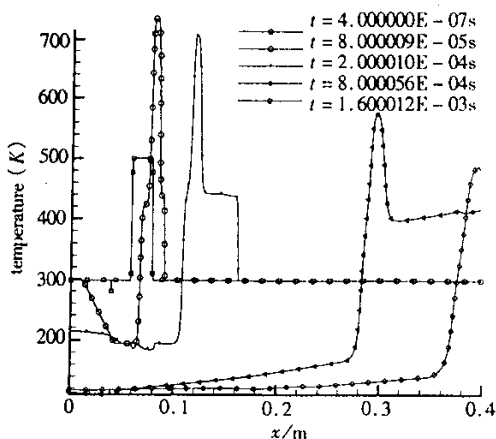


图4 温度分布

Fig.4 Temperature-distance profile

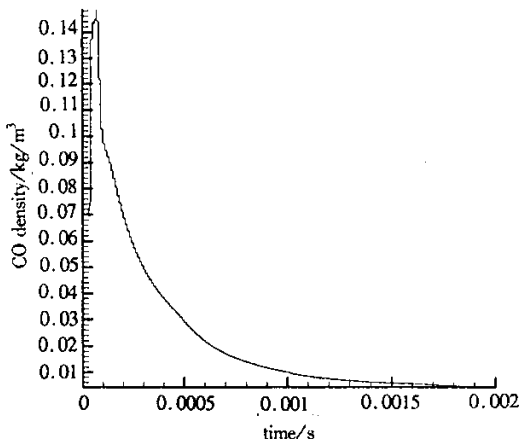


图5 CO最大密度随时间的变化曲线

Fig.5 CO maximum composition-time profile

$$S_1 = [- \sum h_i \sigma_i \sigma_1 \dots \sigma_N]^T$$

对于其余的齐次部分, 可以看着两独立的方程:

$$\frac{\partial U_2}{\partial t} + \frac{\partial F_2}{\partial X} = 0 \quad (5)$$

这里:

$$U_2 = [\rho, \rho u, e]^T, \quad F_2 = [\rho u, \rho u^2 + p, (p + e)u]^T$$

剩余项构成组分方程

$$\frac{\partial U_3}{\partial t} + \frac{\partial F_3}{\partial X} = 0 \quad (6)$$

这里:

$$U_3 = [\rho_1, \dots, \rho_N]^T, \quad F_3 = [\rho_1 u, \dots, \rho_N u]^T$$

至此, 从控制方程(1)出发, 经过变换得到源项方程(4)、运动控制方程(5)和组分连续方程(6), 对对流项运用 mnd-4 格式进行分解<sup>[5]</sup>, 对粘性

项使用中心差分, 对化学生成源项方程进行半隐式处理后用二阶梯形公式离散。详细的处理过程请参考文献[3]

#### 4 算例与结果分析

高压区:  $p = 15p_0, u = 0.0, T = T_0, Y_{O_2} = 0.21, Y_{N_2} = 0.785, Y_{H_2O} = 0.005$ ;

低压区:  $p_0 = 1.01e5, u_0 = 0.0, T_0 = 298K, Y_{O_2} = 0.21, Y_{N_2} = 0.785, Y_{H_2O} = 0.005$ ;

高温可燃气体:  $p_1 = p_0, u_1 = 0.0, T_1 = 500K, Y_{O_2} = 0.15, Y_{CO} = 0.1, Y_{H_2O} = 0.01, Y_{N_2} = 0.74$ 。

由计算结果分析 CO 气体密度的变化, 可以清楚地说明激波诱导可燃气体发生爆燃的过程。图 2 至图 4 为不同时刻压力分布曲线、CO 气体密度分布曲线以及流场温度分布曲线。由图 2 的压力分布可知, 经过高温可燃气体时, 由于可燃气体区密度较小, 压力减小。由图 3 中不同时刻 CO 密度分布曲线可知, 随着激波的运动, 波后气体密度增加, CO 气体密度也随之增加, 而且整个可燃气体区也随着激波发生运动; 而后由于高温高压的影响, 使得一氧化碳发生剧烈的化学反应。图 5 是 CO 气体最大密度随时间的变化曲线。由图可知, CO 气体的燃烧带很短, 燃烧过程只在很短的时间内完成。这是由于激波过后温度很高以及可燃气体初始温度较高, 燃烧反应速率常数很大的原因。但是 CO 气体密度降到不能燃烧却是在激波过后, 由图 5 与图 6 (相对应点的压力随时间变化曲线) 比较可以看

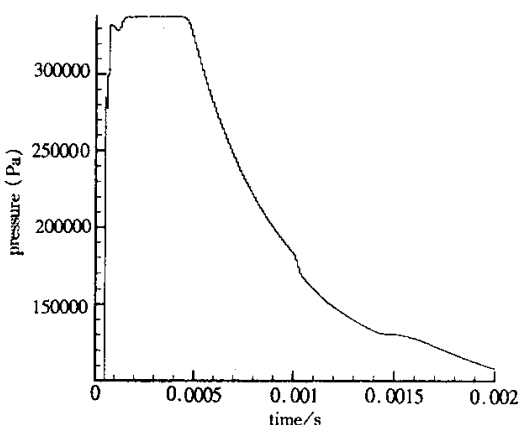


图6 压力随时间的变化曲线

Fig.6 Pressure-time profile

出, CO 气体的最大密度降到  $0.01 \text{ kg/m}^3$  以下的时间大约为  $1 \text{ ms}$ , 而激波在  $0.5 \text{ ms}$  时就通过可燃气体区, 出现这种现象的原因: 一种可能是化学反应具有一定的延迟性; 另一可能是由于波后负压作用密度降低所致。

## 5 结论

由上述分析可知, 可燃气体确实发生爆燃, 具体过程为: 激波扫过高温可燃气体, 首先将其压缩至一较窄区域, 再经过高温加速其化学反应速率, 从而使其在很短的时间内发生剧烈的化学反应(爆燃), 最终降低 CO 气体的浓度使其不能继续维持燃烧反应。激波诱导的可燃气体的爆燃, 将耗尽固体可燃物着火过程中的气相火焰的反应物, 因此破坏了燃烧过程中的一个链节, 具有明显的灭火作用。

## 参考文献:

- [1] A.M. Grish. Interaction of Shock Wave with Tree Crown and the Front of Crown Forest Fire [A]. Shock Wave(Editors: R. Brum) Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1995, 3: 411~416.
- [2] 高泰荫等.  $\text{CH}_4\text{-O}_2$  混合气中爆燃爆震转捩的数值模拟 [J]. 爆炸与冲击. 1998, 18(4).
- [3] 刘君. 超音速完全气体和  $\text{H}_2/\text{O}_2$  燃烧非平衡气体的复杂喷流流场数值模拟 [D]. 绵阳: 中国空气动力学研究与发展中心研究生部. 1993.
- [4] 徐丰等. 球形封闭容器内一个简单的煤粉燃烧爆炸模型 [J]. 爆炸与冲击. 1998, 18(2).
- [5] 叶友达. 航天飞机简化外形无粘流场的数值模拟 [D]. 绵阳: 中国空气动力学研究与发展中心研究生部. 1991.

