1月

2012 年

文章编号:0253-9993(2012)01-0127-05

# 密闭长管内甲烷-空气爆炸火焰传播数值模拟

# 毕明树 蓮呈杰 周一卉

(大连理工大学 化工机械学院 辽宁 大连 116024)

摘 要:采用 LES 湍流模型与预混燃烧模型对直径 *D*=104 mm,长度 *L*=2 400 mm 的圆柱形容器内 甲烷-空气预混爆炸进行了数值模拟,模拟最大爆炸压力与实验结果吻合。结果表明,混合气体被 引燃后,火焰速度快速增加,接下来火焰速度突然下降;火焰传播过程中出现郁金香火焰,它的形成 与中心区域逆流和容器壁的相互作用有关;在郁金香型火焰面后出现涡团,该涡团对层流燃烧转变 为湍流燃烧起到重要作用。研究内容揭示了密闭长管内气体爆炸火焰传播规律。

关键词:大 L/D 密闭容器;甲烷-空气爆炸;计算流体力学

中图分类号: TD752.1 文献标志码: A

# Numerical simulation of methane-air explosion flame in a long closed vessel

BI Ming-shu ,DONG Cheng-jie ZHOU Yi-hui

(School of Chemical Machinery Dalian University of Technology Dalian 116024 ,China)

**Abstract**: A numerical model was built and a series of numerical simulations of methane-air explosions were carried out in a long closed pipe which was 104 mm in inner diameter and 2 400 mm in length. The model was based on the large eddy simulation for turbulence modeling and the premixed combustion for calculating chemical reaction. The simulated pressures and total explosion time were in good agreement with experimental results. It is found that after ignition flame darts forward firstly then the flame speed decreases sharply. Tulip flame appears during explosion and its formation is related to the interaction of vortices in the middle section and near walls. The vortices near walls moves backward after tulip flame which is an important factor to the transform from laminar to turbulence combustion. The numerical results reveal the characteristics of flame propagation and flow field during gas explosion in such pipe. **Key words**: large L/D closed vessel; methane-air explosion; CFD( computation fluid dynamics)

工业上由气体爆炸引起的事故屡见不鲜 往往造 成重大的经济损失和严重的人员伤亡。气体爆炸常 发生在密闭空间或者起始阶段发生在密闭空间 因为 泄露的可燃气体在封闭场所容易形成可燃气云。密 闭空间的长度与直径比(*L/D*)较大时 ,火焰传播与压 力变化过程更加复杂<sup>[1-2]</sup>。因此研究和分析 *L/D* 较 大的容器内气体爆炸具有非常重要的实际意义。

目前,采用数值方法对气体爆炸问题的研究分为 集中参数(LMP)方法和计算流体动力学(CFD)方 法。LMP方法采用半经验模型,其计算过程仅考虑 空间的一维变化,对计算资源要求较低,但不能反映 变量在空间的分布 不适应几何形状复杂的情况。随 着计算机硬件的发展 ,CFD 方法得到了广泛的应用。 Ibrahim 等<sup>[3]</sup>、林柏泉等<sup>[4]</sup> 采用数值方法研究了火焰 在一端开口管道内火焰的传播特征; Benedetto 等<sup>[5]</sup>、 王志荣等<sup>[6]</sup> 模拟了连通容器内气体爆炸 ,结果表明 第 2 个容器内产生预压缩 ,湍流导致爆炸压力增加; Sarli 等<sup>[7]</sup>、范宝春等<sup>[8]</sup>、徐景德等<sup>[9]</sup> 对障碍物导致火 焰加速的现象进行了数值研究; Makarov 等<sup>[10]</sup> 模拟了 球形密闭容器内氢气爆炸; Xiao Huahua 等<sup>[11]</sup> 对 0.55 m长密闭方管内的氢气爆炸进行了数值研究。 然而针对大 L/D 的密闭容器内气体爆炸的数值模拟

收稿日期: 2011-03-23 责任编辑: 毕永华

基金项目:国家自然科学基金资助项目(500076006);教育部基金资助项目(106054)

作者简介:毕明树(1962一),男,内蒙古赤峰人 教授。Tel:0411-84708711 E-mail: bimsh@ dlut. edu. cn

还鲜见报道。

本文对内径 104 mm,长 2 400 mm(*L/D*=23)的 容器内甲烷-空气爆炸过程进行了数值模拟。数值 模型采用大涡模拟方法计算湍流,采用基于梯度方法 对燃烧过程建立模型。模型中考虑了甲烷浓度、湍 流、温度和压力等因素对燃烧速率的影响。模拟计算 得到的爆炸最大压力与爆炸时间与实验结果吻合,验 证了数值结果的有效性。数值结果揭示了爆炸过程 中火焰的传播规律、流场特性以及浓度对最大火焰速 速的影响。

1 数值模型与数值方法

#### 1.1 数值模型

LES 对大尺度变量进行直接计算,而对亚格子应 力采用湍流模型进行模拟。在采用适当的亚格子模 型的情况下,大涡模拟结果的准确性高。计算资源介 于雷诺平均与直接模拟之间。针对密闭容器内气体 爆炸,LES 对非稳态可压缩流体质量、动量和能量守 恒方程采用过滤处理得到流体控制方程<sup>[10-12]</sup>。亚格 子应力采用动态 Smagorinsky Lilly 模型。

LES 方法对变量处理包括大涡空间过滤和密度 加权过滤,即 Favre 过滤过程。分别表示为

$$\overline{\varphi}(x) = \int_{D} \varphi(x') G(x x') dx' \qquad (1)$$

$$\widetilde{\varphi} = \frac{\overline{\rho \varphi}}{2}$$

式中 *D* 为流体区域; φ 为任意需要过滤处理的变量; ρ 为密度; *G*(*x*, *x*) 为过滤函数 ,定义为

$$G(x,x') = \begin{cases} 1/V & (x' \in V) \\ 0 & (x' \in \mathbf{H}\mathbf{0}) \end{cases}$$
(3)

其中, // 为所计算网格体积, 过滤函数表示, 物理量 φ 属于所计算的网格时, 就取体积平均值, 超出计算网 格则为 0; 变量上方的横线表示大涡过滤量, 波浪线 表示 Favre 过滤量。

甲烷-空气燃烧采用基于梯度方法的预混燃烧 模型 模型中求解过程变量方程:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\ \tilde{c}\) + \frac{\partial}{\partial x_{j}}(\bar{\rho}\ \tilde{u}_{j}\ \tilde{c}\) = \frac{\partial}{\partial x_{j}}\left(\frac{\mu_{1}}{Sc_{1}}\frac{\partial\ \tilde{c}}{\partial x_{j}}\right) + \bar{S}_{c}(4)$$

式中  $\mu_j$ (*j*=1 2 3)为 *x*, *y*和 *z*方向的速度; *S*<sub>e</sub>为过程 变量源项;  $\mu_i$ 为亚格子黏性,采用动态 Smagorinsky Lilly 模型计算; *Sc*<sub>i</sub>为湍流施密特数,取 *Sc*<sub>i</sub> = 0.75; *c* 为反应过程变量,

$$c = \sum_{i=1}^{n} Y_{i} / \sum_{i=1}^{n} Y_{i eq}$$
 (5)

其中 n 为燃烧产物数;  $Y_i$ 为产物组分 i 的质量分数;

 $Y_{i,eq}$ 为平衡时产物组分 *i* 的质量分数。根据式(5) 的 定义 c=0 表示反应物 c=1 表示燃烧产物;  $S_c$ 为过程 变量方程源项,

$$\overline{S}_{c} = \rho_{u} U_{t} | \nabla \widetilde{c} |$$
(6)

式中  $\rho_u$ 表示未燃混合气体的密度;  $U_t$ 表示湍流火焰 速度; 湍流燃烧速度采用 Zimont<sup>[13]</sup>提出的经验表达 式:

$$U_{t} = A(u')^{3/4} U_{1}^{1/2} \alpha^{-1/4} l_{t}^{1/4}$$
(7)

式中 模型常数 A=0.52; u<sup>2</sup>为亚格子湍流脉动速度; α 为反应物分子热传输系数; l<sub>1</sub>为湍流特征尺度; U<sub>1</sub>为 层流燃烧速度 ,与甲烷浓度、温度和压力有关 ,其中温 度和压力的影响采用以下关系式来修正<sup>[14]</sup>,即

$$U_1 = U_{10} (T_u/T_0)^2 (P/P_0)^{-1/2}$$
(8)

式中, $T_a$ 和 P分别为未燃气体温度和容器内压力;  $T_0 = 300$  K,  $P_0 = 0.1$  MPa;  $U_0$ 为 300 K, 0.1 MPa 时的 层流燃烧速度,其随甲烷浓度的变化采用文献[15] 中的数据,见表1。

表 1 层流燃烧速率随甲烷浓度的变化<sup>[15]</sup> Table 1 Laminar burning rate vs. methane concentration

	/		
CH <sub>4</sub> 浓度/%	空气/%	化学当 量比	层流燃烧速率/ (m • s <sup>−1</sup> )
6	94	0.61	0.154
8	92	0.83	0.317
10	90	1.06	0.437
12	88	1.26	0.330

将式(6)~(8)代入式(4)中就可获得由反应物 转化为产物的速率。由化学反应引起能量方程的源 项表示为

$$S_{\rm E} = S_{\rm c} H_{\rm comb} Y_{\rm fuel} \tag{9}$$

式中 *H*<sub>comb</sub>为按照甲烷-氧气单步不可逆反应的反应 热; *Y*<sub>fuel</sub>混合气体中甲烷的质量分数。

反应系统的热量损失一部分导致壁面材料温度 的升高,另一部分表现为向环境放热。

$$E_{\rm loss} = \int c_p dT + k \frac{\Delta T}{\Delta x}$$
(10)

式中  $E_{loss}$ 为损失的热量;  $c_p$ 为壁面材料的比热; k 为 固体壁面的热传导系数;  $\Delta T$  和  $\Delta x$  分别为壁面的温 度梯度和厚度。

1.2 数值方法与初始、边界条件

几何模型为内径 104 mm、长 2 400 mm(*L/D* 约 为 23)、两端封闭的管道。点火源设置在左端法兰中 心。采用结构化六面体单元对整个区域进行网格划 分,在容器壁面附近划分边界层,网格数量约为 80 000 °

甲烷-空气被引燃前处于常温、常压下的静止状态。即 $T(t_0) = 300 \text{ K} p(t_0) = 0.1 \text{ MPa};$ 甲烷-空气未参与反应 $c(t_0) = 0$ 。甲烷浓度根据模拟的情况而变化。点火瞬间假设在点火源位置一个网格单元90%的混合物生成燃烧产物,即c=0.9。容器壁面采用非滑移、常温和组分零通量边界条件,即 $T=300 \text{ K}, \partial c/\partial t=0$ ;热量损失以热传导方式从系统中向环境释放,壁面材料比热为450 J/(kg•K),热传导系数为48 W/(m•K),壁面厚度5 mm。

本文采用三维非稳态数值计算气体爆炸过程 在 整个计算区域采用有限容积法离散微分方程,对流项 采用 QUICK 格式,扩散项采用中心差分格式,压力速 度耦合采用 SIMPLEC 算法,时间步长为 10<sup>-4</sup> s。

2 结果与分析

#### 2.1 数值模型的有效性验证

采用上述数学模型与数值算法对甲烷-空气爆 炸进行模拟,数值结果与实验数据相比较,结果如图 1所示。可见,爆炸最大压力、达到最大压力的时间 计算值与实验值变化趋势一致。说明了数值模型与 数值方法的有效性,计算结果能够反映甲烷-空气的 爆炸过程。



图 1 数值结果与实验数据的对比



## 2.2 火焰传播规律的模拟结果

火焰形状在传播过程中的变化如图 2 所示,由图 2 可知,甲烷-空气被点燃后,火焰呈半球形,从点火 点向四周传播; *t* = 30 ms 时火焰面在轴向被拉伸,沿 周向还没有接触到壁面; *t* = 70 ms 时,与容器侧壁面 接触到的火焰面熄灭,火焰面近似呈平面形状; *t* = 80 ms火焰面发展为倒圆锥形状,火焰在管道中心形 成指向已燃气体的尖端,称为郁金香状火焰,接下来 火焰基本维持郁金香火焰继续传播,*t*=180 ms 时,火 焰面逐渐变得不规则;*t*=370 ms 时,火焰发展为明显 的湍流,火焰面厚度增加。



#### 图2 不同时刻火焰形状



图 3 为甲烷体积分数 10% 时,火焰面位置、火焰 速度随爆炸时间的变化趋势。火焰速度以火焰面传 播距离与对应的时间间隔(10 ms)相除计算。甲烷--空气被点燃后火焰速度仅为 2 m/s,接下来火焰速度 快速增加,在 t = 50 ms 时火焰速度达到最大值 17.75 m/s;当火焰面在侧壁面与容器接触,火焰面熄 灭,火焰面积减小,热量损失增加,火焰速度急剧下 降,在 t = 80 ms 时,火焰速度达到最小; t = 100 ms 时 火焰速度又增加到最大值的 1/3,同时出现剧烈波 动;接近燃烧结束时,火焰速度稍微增加,并依然保持 较大波动。





#### 2.3 模拟流场分析

图 4 为不同时刻( 与图 2 火焰传播过程对应时 刻) 的火焰面局部流线图,可以看出,甲烷-空气刚被 点燃后,燃烧膨胀受壁面影响较小,火焰面前方未燃 气体被推动向各个方向流动; *t* = 30 ms 时,由于容器 壁面的限制,气流或者穿过已燃区域向未燃区域流 动,或者沿火焰面与侧壁的间隙未燃区域流动,气流 呈喷射状,前者使火焰面在轴向拉伸,火焰传播速度 增加; *t* = 70 ms 时,火焰面在轴向和侧壁完全接触,气 流在火焰中心区域开始出现与火焰传播相反方向的 流动,使得火焰速度在中心位置减小,而在侧壁附近, 气流继续向未燃气体;随着中心区域逆向流动的加 强,中心线位置火焰速度急剧下降,在t=80 ms时,郁 金香火焰基本形成,中心逆向气流在已燃区域侧壁附 近形成涡团;随着火焰继续传播 #=180 ms 涡流出现 在火焰阵面 增加了火焰面厚度。接近燃烧结束时, 在火焰面附近出现不同尺度的涡流,火焰厚度增加, 湍流火焰推动前方未燃气体向右流动。



图 4 不同时刻火焰附近流场(t=10 30 70 80 180 and 370 ms)

Fig. 4 Flame shapes and streamline at the time instants t = 10, 30, 70, 80, 180 and 370 ms

综合火焰传播与流场表明: 点火后,由于侧壁面 的限制,火焰面被拉伸,火焰面面积增加导致火焰速 度快速增加; 当火焰面在侧壁熄灭,热量损失增加又 造成火焰速度下降; 伴随郁金香火焰的形成,在火焰 面后方形成涡团,涡团向右推移诱导燃烧向湍流发 展。

### 2.4 浓度对最大火焰速度的影响

图 5 为最大火焰速度随甲烷浓度的变化关系,在 甲烷浓度为 10% 时,最大火焰速度达到 17.75 m/s, 与文献 [1]中在 *L/D* = 20 的圆柱形容器中测得 10% 甲烷-空气的最大火焰速度 20 m/s 接近。即使是在 接近甲烷的爆炸下限浓度,最大火焰速度也接近 3.6 m/s。可见与球形容器或 *L/D* 较小的容器相比, 火焰速度大大增加。这意味着对于大 *L/D* 容器内爆 炸的火焰更难以控制。

3 结 论

(1) 在 L/D 较大的密闭容器预混气体爆炸,最大 火焰速度在爆炸初期形成,这意味着对于 L/D 较大 的容器内爆炸的火焰更难以控制。

(2)火焰在传播过程中出现郁金香状火焰,火焰 面的形成与中心区域逆流与壁面相互作用有关。

(3)伴随郁金香火焰的形成,在已燃区域侧壁附近出现涡团,该涡团向火焰面推移引起火焰厚度增



#### 图 5 浓度对最大火焰速度的影响



#### 加,最后发展为湍流燃烧。

#### 参考文献:

- Phylaktou H ,Andrews G E. Gas explosions in long closed vessels
   [J]. Combustion Science and Technology 1991 77(1):27-39.
- [2] Bjerketvedt D ,Bakke J R ,Wingerden K V. Gas explosion handbook
   [J]. Journal of Hazardous Materials ,1997 52: 1–150.
- [3] Ibrahim S S ,Gubba S R ,Masri A R ,et al. Calculations of explosion deflagrating flames using a dynamic flame surface density model [J]. Journal of Loss Prevention in the Process Industries ,2009 ,22 (3): 258-264.
- [4] 林柏泉,桂晓宏. 瓦斯爆炸过程中火焰传播规律的模拟研究
   [J].中国矿业大学学报 2002 31(1):6-9.
   Lin Baiquan, Gui Xiaohong, Numerical simulation reasearch on flame

transmission in gas explosion[J]. Journal of China Unversity of Mining and Technology 2002 31(1):6–9.

131

- [5] A Di Benedetto ,Salzano E. CFD simulation of pressure piling [J]. Journal of Loss Prevention in the Process Industries 2010 23(4): 498-506.
- [6] 王志荣 蔣军成,郑杨艳. 连通容器气体爆炸的 CFD 模拟[J]. 化 工学报 2007 58(4):854-861.
   Wang Zhirong Jiang Juncheng ,Zheng Yangyan. CFD simulation on gas explosion field in linked vessels[J]. Journal of Chemical Indus-
- [7] V Di Sarli , A Di Benedetto ,Russo G. Using large eddy simulation for understanding vented gas explosions in the presence of obstacles [J]. Journal of Hazardous Materials 2009 ,169(1-3):435-442.

try and Engineering 2007 58(4):854-861.

- [8] 范宝春,姜孝海,谢 波. 障碍物导致甲烷-氧气爆炸的三维数 值模拟[J]. 煤炭学报 2002 27(4):371-373.
  Fan Baochun ,Jiang Xiaohai ,Xie Bo. Three dimensional numerical simulation of explosion induced by obstacle in CH<sub>4</sub>-O<sub>2</sub> mixture[J]. Journal of China Coal Society 2002 27(4):371-373.
- [9] 徐景德 杨庚宇. 置障条件下的矿井瓦斯爆炸传播过程数值模 拟研究[J]. 煤炭学报 2004 29(1):54-57.
   Xu Jingde , Yang Gengyu. Numetical simulation of the barricade en-

couraging effect in the process of gas explosion propagation [J]. Jour-

nal of China Coal Society 2004 29(1):54-57.

- [10] Makarov D V ,Molkov V V. Modeling and large eddy simulation of deflagration dynamics in a closed vessel [J]. Combustion ,Explosion and Shock Waves 2004 40(2):136-144.
- [11] Xiao H ,Wang Q ,He X ,et al. Experimental and numerical study on premixed hydrogen/air flame propagation in a horizontal rectangular closed duct [J]. International Journal of Hydrogen Energy 2010 35 (3):1367-1376.
- [12] Molkov V V , Makarov D V , Grigorash A. Cellular structure of explosion flames: modeling and large-eddy simulation [J]. Combustion Science and Technology 2004 ,176(5):851-865.
- [13] Zimont V L. Gas premixed combustion at high turbulence. Turbulent flame closure combustion model [J]. Experimental Thermal and Fluid Science 2000 21(1-3):179–186.
- [14] Catlin C A ,Fairweather M ,Ibraiim S S. Predictions of turbulent , premixed flame propagation in explosion tubes [J]. Combustion and Flame ,1995 ,102(1-2):115-128.
- [15] Bielert U ,Sichel M. Numerical simulation of premixed combustion processes in closed tubes [J]. Combustion and Flame ,1998 ,114 (3-4):397-419.

# 重要启事

目前 科技期刊中基金项目著录存在很多问题,出现了编造、剽窃基金项目等学术不端行为。同时,由于科 技论文中可列出的基金项目数量没有相关规定,有些作者为了项目结题,在论文中尽可能多地标注与论文无关 的基金项目,这是一种极其不负责任的行为。为了弘扬健康、向上的学术风气,还科技期刊一片净土,《煤炭学 报》编辑部针对本刊论文中的基金项目著录进行如下规定:

- 1. 禁止编造、剽窃基金项目。
- 2. 禁止出现与论文研究内容不相关的基金项目。
- 3. 我刊不排斥、不歧视无基金项目资助的论文,所有稿件一视同仁。
- 4. 原则上每篇论文只允许标注1~2个与本文研究内容直接相关的基金项目 最多不超过3个。
- 5. 对于获得多个基金项目资助的论文,只标注省部级及以上级别的基金项目。
- 6. 论文中出现的所有基金项目,请作者务必提供带编号的基金批文复印件或扫描件。

对于基金项目著录过程中出现学术道德问题甚至违反相关法律法规的 视情节轻重 ,我刊保留将作者列入 黑名单并公开发表声明、通报作者所在单位和通报相关基金委员会的权利。本规定从 2011 年 2 月份 ,即 2011 年《煤炭学报》第 2 期开始执行 ,敬请广大读者、作者监督。

#### 本刊编辑部