

王连聪,罗海珠,梁运涛. 激波管中水对瓦斯爆炸反应动力学特性的影响[J]. 煤炭学报, 2014, 39(10):2037-2041. doi:10.13225/j.cnki.jccs.2013.1383

Wang Liancong, Luo Haizhu, Liang Yuntao. Effects of water on reaction kinetic for gas explosion in shock tube [J]. Journal of China Coal Society, 2014, 39(10):2037-2041. doi:10.13225/j.cnki.jccs.2013.1383

激波管中水对瓦斯爆炸反应动力学特性的影响

王连聪,罗海珠,梁运涛

(煤科集团沈阳研究院有限公司 煤矿安全技术国家重点实验室 辽宁 沈阳 110016)

摘 要:为揭示水对激波诱导瓦斯爆炸反应动力学特性的影响规律,运用化学反应动力学数值分析方法,建立了描述激波诱导瓦斯爆炸反应动力学特性的数学模型,就激波诱导瓦斯爆炸过程中水对爆炸温度、冲击波速度、反应物摩尔分数、自由基摩尔分数及主要致灾性气体摩尔分数变化趋势的影响进行了数值模拟研究与对比分析。研究表明:在一定范围内,随着初始混合气体中水含量的升高,激波诱导瓦斯爆炸后,爆炸温度、冲击波速度,以及 O 自由基、H 自由基、CO、NO 和 NO₂ 等的摩尔分数均依次降低,而 CO₂ 的摩尔分数则依次升高。这说明在一定范围内混合气体中含水量的增加,会降低瓦斯爆炸强度,促进 CO₂ 的生成,抑制 CO、NO 及 NO₂ 等有毒有害气体的生成,尤其对 H 自由基和 O 自由基的抑制作用最为显著。

关键词:瓦斯爆炸;反应动力学特性;激波管;爆炸力学

中图分类号:TD712 文献标志码:A 文章编号:0253-9993(2014)10-2037-05

Effects of water on reaction kinetic for gas explosion in shock tube

WANG Lian-cong, LUO Hai-zhu, LIANG Yun-tao

(State Key Laboratory of Coal Mine Safety Technology, CCTEG Shenyang Research Institute, Shenyang 110016, China)

Abstract: In order to study the effects of water on reaction kinetic for gas explosion in shock tube, by using numerical analysis method of reaction kinetics, a mathematical model was built for the shock wave-induced gas explosion. And the model was used to have numerical simulations and contrastive analyses to the effects of H₂O on the variation tendencies of explosion temperature, shock wave velocity, mole fractions of reactants, radicals and main catastrophic gases. The results show that: in certain scope, along with initial gaseous mixture in H₂O elevation, explosion temperature, shock wave velocity, and the mole fractions of O radical/H radical/CO/NO/NO₂ decrease successively; on the contrary, the mole fractions of CO₂ increase in turn. That is to say, within a certain range, with the H₂O increasing, the gas explosion intensity decreasing, the resultant of CO₂ being promoted, the resultants of CO/NO/NO₂ being inhibited, and the inhibiting effects to the H radical and O radical are more obvious especially.

Key words: gas explosion; reaction kinetics characteristic; shock tube; explosion mechanics

瓦斯爆炸是煤矿矿井灾害中最为常见的灾害之一,严重威胁着井下工作人员的生命安全,制约着矿井生产的发展,给煤矿的安全生产带来了极大的威胁。瓦斯爆炸事故不仅造成了大量的人员伤亡和巨

大的经济损失^[1],而且也带来了严重的环境破坏和不良的社会影响^[2]。

瓦斯爆炸经历燃烧、爆燃到爆轰的全过程,主要形式是有焰燃烧和爆炸冲击波。瓦斯爆炸在瓦斯浓

收稿日期:2013-09-22 责任编辑:张晓宁

基金项目:国家自然科学基金资助项目(51404138);中国煤炭科工集团科技创新基金资助项目(2013QN003);国家重大科学仪器开发专项资助项目(2012YQ240127)

作者简介:王连聪(1984—),男,河北南宮人,助理研究员,硕士。E-mail:ccong001@126.com

度分布、引爆方式和强度极限、空间几何特性及尺寸效应等条件确定后,会从爆燃过程转变为爆轰过程^[3]。爆轰波一旦形成,由于爆轰波后面压力非常高,可使未燃混合气体着火。经过一段时间以后,正常火焰传播与爆轰波引起的燃烧合二为一。于是,爆轰波传播到哪里,哪里的混合气体就着火,火焰传播速度与爆轰波速度相同。爆轰波后的已燃气体又连续向前传递一系列的压缩波,并不断提供能量以阻止爆轰波强度的衰减,从而得到稳定的爆轰波。由于爆轰过程中出现的爆轰波的爆轰温度、爆轰压力和爆轰波传播速度的量级较爆燃更高,因此瓦斯爆轰对于煤矿矿井的破坏效应要比爆燃大得多^[4]。虽然学者们对瓦斯爆炸的预防及控制进行了不少研究,并起到了一定的作用,但瓦斯爆炸事故还是时有发生。这说明还有许多本质的东西还没有被认识^[5],对瓦斯爆炸过程中存在的许多科学问题还有待进一步研究并加以解决^[6]。鉴于此,笔者根据初始混合气体中水含量的不同,就激波诱导瓦斯爆炸过程中水对混合气温度、冲击波传播速度、反应物摩尔分数、活化中心摩尔分数、主要致灾性气体摩尔分数等变化趋势的影响进行了数值模拟和研究分析,以期从反应机理角度为预防与抑制瓦斯爆炸提供理论支撑和科学依据。

1 物理模型

激波管是一种用于分析可反应气体化学反应动力学特性的实验装置。在激波管中,通过一层薄膜将整个管道划分为高压区域(诱导气体)和低压区域(可反应气体)。高压区域气体发生爆炸时形成的冲击波将薄膜冲破,向可反应气体方向传播,提高其压力和温度,诱发其发生化学反应,从而使可反应气体发生爆炸^[7]。激波管的物理模型如图 1 所示。

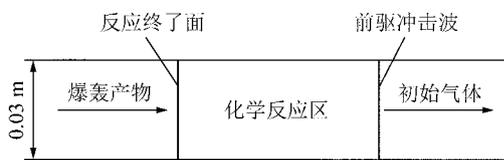


图 1 激波管示意

Fig. 1 The schematic diagram of shock tube

2 数学模型

为描述激波诱导瓦斯爆炸的反应动力学特性,做如下假设:① 激波管内的混合气体为稳态、稳定流动;② 在轴向没有混合,这表示在流动方向上分子扩散和湍流质量扩散都可以忽略;③ 垂直于流动方向的参数都相同,即一维流动,这意味着在任何一个横

截面上,单个参数的速度、温度、组分等可以完全描述这一流动;④ 理想无黏流动,这个假设可以允许用简单的欧拉方程来关联压力与速度;⑤ 理想气体特性,这个假设可以允许用简单的状态方程来关联温度 T 、压力 p 、密度 ρ 、组分 i 的质量分数 Y_i 、焓 h 。

由以上假设可以推导出一组一阶常微分方程组,其解准确地描述了激波管内组分的流动特性沿轴向距离 z 的变化函数关系。

(1) 连续性方程。

$$\frac{d\rho}{dz} = \left(1 - \frac{R_u}{c_p M_{\text{mix}}}\right) \rho^2 v_z^2 \left(\frac{1}{A} \frac{dA}{dz}\right) + \frac{\rho R_u}{v_z c_p M_{\text{mix}}} \times \sum_{i=1}^N \dot{\omega}_i M_i \left(h_i - \frac{M_{\text{mix}}}{M_i} c_p T\right) / [p(1 + v_z^2/c_p T) - \rho v_z^2] \quad (1)$$

(2) 组分质量分数变化率方程。

$$\frac{dY_i}{dz} = \frac{\dot{\omega}_i M_i}{\rho v_z} \quad (2)$$

(3) 能量守恒方程。

$$\frac{dT}{dz} = -\frac{v_z^2}{\rho c_p} \frac{d\rho}{dz} - \frac{v_z^2}{c_p} \left(\frac{1}{A} \frac{dA}{dz}\right) + \frac{1}{v_z \rho c_p} \sum_{i=1}^N h_i \dot{\omega}_i M_i \quad (3)$$

(4) 动量守恒方程。

$$\frac{dv_z}{dz} = -\frac{v_z}{\rho} \frac{d\rho}{dz} - \frac{v_z}{A} \left(\frac{dA}{dz}\right) \quad (4)$$

式中 ρ 为组分密度, kg/m^3 ; z 为轴向距离, m ; v_z 为轴向速度(即 z 向速度), m/s ; c_p 为比定压热容, $\text{J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$; A 为反应器的横截面积,是轴向距离 z 的函数, m^2 ; p 为系统压力, Pa ; h 为焓, J/kg ; Y_i 为组分 i 的质量分数; $\dot{\omega}_i$ 为组分 i 的净生成率, $\text{kmol}/(\text{s} \cdot \text{m}^3)$; M_i 为组分 i 的摩尔质量, kg/kmol ; T 为系统的温度, K ; R_u 为通用气体常数, $\text{J}/(\text{kmol} \cdot \text{K})$ 。

方程组只有加上对应的初始条件和边界条件才能构成一个定解问题^[8]。因此,为得到以上方程组的解,需给出对应的初始条件和边界条件。初始条件在第 4 节中的计算工况中给出。边界条件^[9]为

$$\frac{1}{A} \frac{dA}{dz} = \frac{(z/l_m)^{-\frac{1}{2}}}{2l_m [1 - (z/l_m)^{\frac{1}{2}}]} \quad (5)$$

式中 l_m 为激波与接触面之间的距离, m 。

通过 $\frac{d}{dt} = v_z \frac{d}{dz}$, 可以将混合气体密度、组分质量分数、反应温度以及激波速度与轴向距离 z 的函数关系转换为与反应时间 t 的函数关系。

3 反应机理

计算采用美国 Lawrence Livermore 国家实验室的甲烷燃烧反应动力学详细机理,包括 53 种组分、325 个基元反应^[10]。该反应机理针对当量比 0.1 ~ 5.0、温度 1 000 ~ 2 500 K、初始压力 100 Pa ~ 1.01 MPa 等范围内的甲烷燃烧做了专门的优化^[11-12],是国际公认的、可靠的甲烷燃烧机理^[13]。

4 计算结果及分析

瓦斯爆炸的发生需满足:① 甲烷与空气的混合气体中,甲烷的体积分数应在 4% ~ 16%;② 氧气的体积分数须大于 12%;③ 点火源,即高温热源(温度高于 650 °C)存在的时间大于瓦斯的引火感应期^[14]。在计算中,利用激波提供的能量代替点火源^[15-16]。激波管的初始计算条件见表 1。

表 1 激波管初始计算条件

Table 1 Initial computational conditions in shock tube

工况	初始温度/K	初始压力/Pa	甲烷摩尔分数/%	氧气摩尔分数/%	氮气摩尔分数/%	水摩尔分数/%	激波管直径/m	激波初始速度/(m·s ⁻¹)
1	300	607.95	9.500	19.00	71.500	5	0.03	2 800
2			9.025	18.05	67.925			
3			8.550	17.10	64.350			
4			7.600	15.20	57.200			

4.1 水对爆炸温度及冲击波传播速度的影响

从图 2 可以看出,随着初始混合气体中含水量的增加,瓦斯爆炸点火延迟时间略微延长,但幅度不大,爆炸过程中及爆炸后的爆炸温度和冲击波传播速度有一定幅度的下降。工况 1(初始混合气体中不含水)时,瓦斯爆炸过程中爆燃温度和冲击波传播速度的最大值分别为 3 412.0 K 和 473 m/s;工况 2~4(初始混合气体中含水 5%、10%、20%)时,爆燃温度和冲击波传播速度的最大值分别为 3 289.7 K 和 460 m/s、3 179.9 K 和 448 m/s、2 985.7 K 和 428 m/s。与不含水时相比,含水量为 20% 时,爆燃温度和冲击波传播速度分别下降了 426.3 K 和 45 m/s,降幅分别为 12.5% 和 9.5%。

4.2 水对反应物摩尔分数的影响

由图 3 可以看出,随着初始混合气体中含水量的增加,甲烷和氧气等反应物的消耗速率有一定幅度的下降,反应时间有所延长,但幅度不大。工况 1(初始混合气体中不含水)时,甲烷反应完全所需时间约为 5.5 μs;工况 2~4(初始混合气体中含水 5%、10%、20%)时,甲烷完全反应所需时间分别约为 5.8 μs、6.7 μs、8.7 μs。与不含水时相比,含水量为 20% 时甲烷完全反应所需的时间延长了 3.2 μs,增幅为 37%。

4.3 水对自由基摩尔分数的影响

由图 4 可以看出,随着初始混合气体中含水量的增加,瓦斯爆炸前后 H 自由基和 O 自由基的摩尔分数均有一定幅度的下降。工况 1(初始混合气体中不含水)时,瓦斯爆炸后 H 自由基和 O 自由基的摩尔分数分别为 3.88% 和 2.99%;工况 2~4(初始混合气

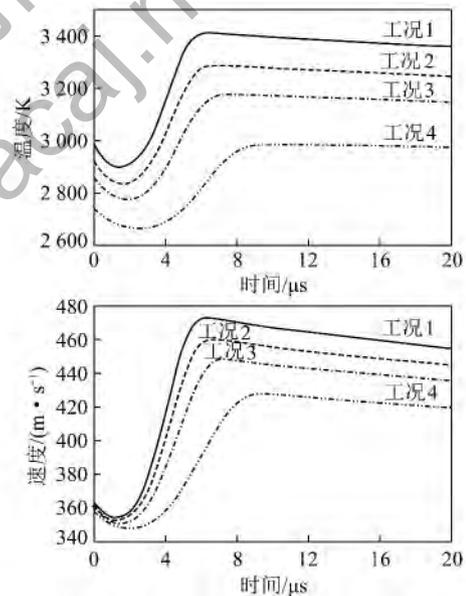


图 2 水对温度及冲击波传播速度的影响

Fig. 2 Effects of H₂O on variation tendencies of temperature and shock-wave velocity

体中含水 5%、10%、20%)时,瓦斯爆炸后 H 自由基和 O 自由基的摩尔分数分别为 3.68% 和 2.60%、3.45% 和 2.27%、2.91% 和 1.71%。与不含水时相比,含水量为 20% 时, H 自由基和 O 自由基的摩尔分数分别下降了 0.97% 和 1.28%,降幅分别为 25% 和 42.8%。

4.4 水对碳氧化物摩尔分数的影响

由图 5 可以看出,随着初始混合气体中含水量的增加,瓦斯爆炸后 CO 摩尔分数依次下降,CO₂ 摩尔分数则有一定幅度的升高。工况 1(初始混合气体中

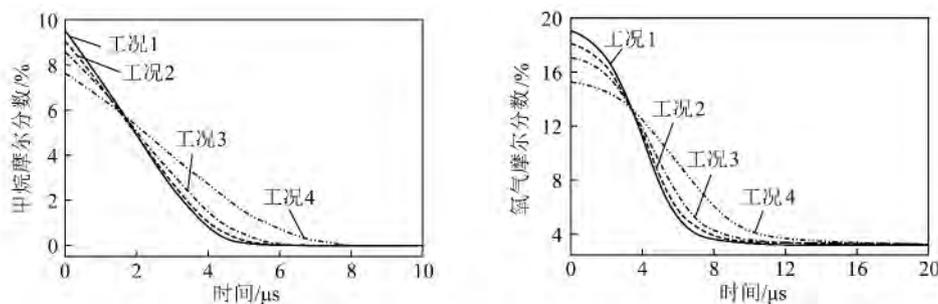


图3 水对反应物摩尔分数的影响

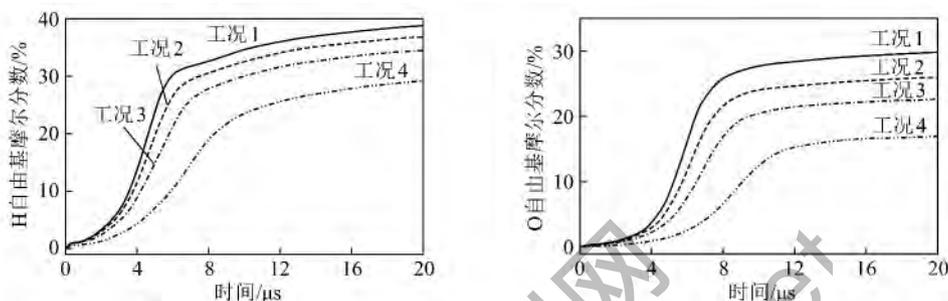
Fig. 3 Effects of H_2O on variation tendencies of reactants mole fractions

图4 水对 H, O 自由基摩尔分数的影响

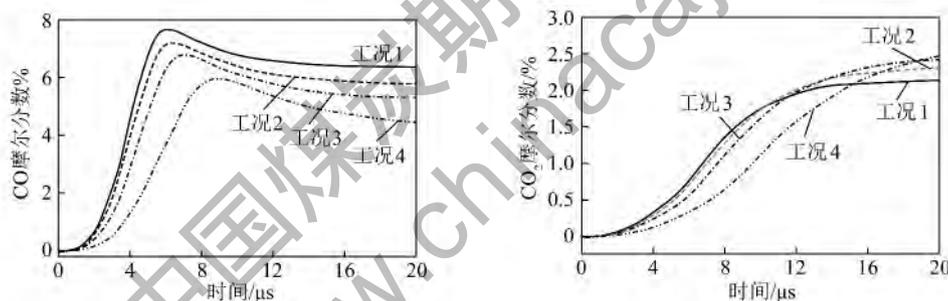
Fig. 4 Effects of H_2O on variation tendencies of H, O radicals mole fractions

图5 水对碳氧化物摩尔分数的影响

Fig. 5 Effects of H_2O on variation tendencies of carbon oxides mole fractions

不含水)时,瓦斯爆炸后 CO 和 CO_2 的摩尔分数分别为 6.36% 和 2.15%; 工况 2~4 (初始混合气体中含水 5%、10%、20%) 时,瓦斯爆炸后 CO 和 CO_2 的摩尔分数分别为 5.80% 和 2.32%、5.28% 和 2.44%、4.45% 和 2.48%。与不含水时相比,含水量为 20% 时,CO 的摩尔分数下降了 1.91%,降幅为 30%;而 CO_2 的摩尔分数上升了 0.33%,增幅为 13.3%,这主要是因为基元反应 R12: $\text{O} + \text{CO} (+\text{M}) \rightleftharpoons \text{CO}_2 (+\text{M})$ 为压力控制反应,反应体系中压力越低,正反应发生的强度就越大。因此,随着反应体系中含水量的增加,体系中的爆炸压力依次降低,基元反应 R12 的正反应发生强度依次增加, CO_2 的生成量依次增加。这也是与工况 1 相比,在瓦斯爆炸后,工况 2~4 中 CO_2 生成量依次增加的主要原因。

4.5 水对氮氧化物摩尔分数的影响

图 6 为水对氮氧化合物的影响。

由图 6 可以看出,随着初始混合气体中含水量的增加,NO 和 NO_2 等致灾性气体的摩尔分数依次下降。工况 1 (初始混合气体中不含水) 时,瓦斯爆炸后 NO 和 NO_2 的摩尔分数分别为 0.16% 和 0.43×10^{-6} ; 工况 2~4 (初始混合气体中含水 5%、10%、20%) 时,瓦斯爆炸后 NO 和 NO_2 的摩尔分数分别为 0.10% 和 0.25×10^{-6} 、0.06% 和 0.15×10^{-6} 、0.02% 和 0.05×10^{-6} 。与不含水时相比,含水量为 20% 时,NO 和 NO_2 的摩尔分数分别下降了 0.14% 和 0.38×10^{-6} ,降幅分别为 87.5% 和 88.4%。

5 结 论

(1) 在激波诱导瓦斯爆炸过程中,初始混合气中的含水量对瓦斯爆炸反应动力学特性影响显著。在一定范围内,随着初始混合气体中水含量的升高,激

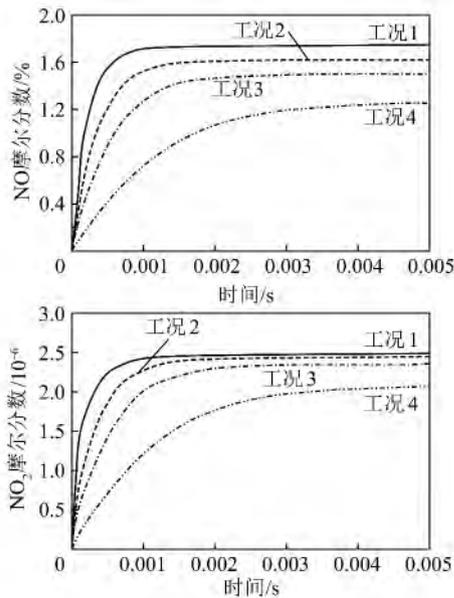


图 6 水对氮氧化物摩尔分数的影响

Fig. 6 Effects of H_2O on variation tendencies of nitrogen oxides mole fractions

波诱导瓦斯爆炸后,甲烷完全反应时间有所延长;爆炸温度、冲击波速度,以及 O 自由基、H 自由基、CO、NO 和 NO_2 等的摩尔分数均依次降低; CO_2 的摩尔分数则依次升高。

(2) 与初始混合气体中不含水时相比,含水量为 20% 时,爆炸温度和冲击波传播速度分别下降了 426.3 K 和 45 m/s,降幅分别为 12.5% 和 9.5%;甲烷完全反应所需的时间延长了 3.2 μs ,增幅 37%;H 自由基和 O 自由基的摩尔分数分别下降了 0.97% 和 1.28%,降幅分别为 25% 和 42.8%;CO 摩尔分数下降了 1.91%,降幅为 30%;而 CO_2 摩尔分数上升了 0.33%,增幅 13.3%;NO 和 NO_2 摩尔分数分别下降了 0.49% 和 0.41×10^{-6} ,降幅分别为 16% 和 16.5%。

(3) 在一定范围内,混合气体中含水量的增加会降低瓦斯爆炸强度、促进 CO_2 的生成、抑制 CO、NO 及 NO_2 等有毒有害气体的生成,尤其对 H 自由基和 O 自由基的抑制作用最为显著。

参考文献:

- [1] 景国勋,乔奎红,王振江,等.瓦斯爆炸中的火球伤害效应[J].工业安全与环保,2009,35(3):37-38.
Jing Guoxun, Qiao Kuihong, Wang Zhenjiang, et al. The fireball effect of injury in gas explosion [J]. Industrial Safety and Environmental Protection, 2009, 35(3): 37-38.
- [2] 张延松.煤矿生产与环境保护[J].四川环境,1997,16(2):60-62.
Zhang Yansong. Production and environmental protection in coal

mines [J]. Sichuan Environment, 1997, 16(2): 60-62.

- [3] 丁广骥.煤矿巷道瓦斯爆炸理论分析和参数计算[J].中国矿业大学学报,2000,29(1):37-40.
Ding Guangxiang. Theoretical analysis and calculation of methane gas explosion in coal gangway [J]. Journal of China University of Mining and Technology, 2000, 29(1): 37-40.
- [4] Rodat S, Abanades S, Coulié J, et al. Kinetic modelling of methane decomposition in a tubular solar reactor [J]. Chemical Engineering Journal, 2009, 146(1): 120-127.
- [5] 贾智伟,李小军,杨书召.煤矿瓦斯爆炸传播规律的研究进展[J].矿业安全与环保,2008,35(6):73-75.
Jia Zhiwei, Li Xiaojun, Yang Shuzhao. Research and development of coal mine gas explosion propagation regularity [J]. Mining Safety and Environmental Protection, 2008, 35(6): 73-75.
- [6] Lu F K, Ortiz A A, Li J M, et al. Detection of shock and detonation wave propagation by cross correlation [J]. Mechanical Systems and Signal Processing, 2009, 23(4): 1098-1111.
- [7] 刘向军,陈昊.初始压力对矿井瓦斯爆炸过程影响的理论研究[J].矿冶,2006,15(1):5-9.
Liu Xiangjun, Chen Hao. Theoretical study on the effects of initial pressure on methane explosion in coal mine [J]. Mining and Metallurgy, 2006, 15(1): 5-9.
- [8] Essen V M, Sepman A V, Mokhov A V, et al. Pressure dependence of NO formation in laminar fuel-rich premixed CH_4 /air flames [J]. Combustion and Flame, 2008, 153(3): 434-441.
- [9] Mitchell R E, Kee R J. Shock: A general purpose computer code for predicting chemical kinetic behavior behind incident and reflected shocks [R]. Sandia National Laboratory, SAND 82-8205, 1998.
- [10] Gregory P, Smith D G. Gri-mech 3.0 [EB/OL]. http://www.me.berkeley.edu/gri_mesh/version30/text30.html. 2005/2007.
- [11] Westbrook C K, Mizobuchi Y, Poinot T J, et al. Computational combustion [J]. Proceeding of the Combustion Institute, 2005, 30(1): 125-157.
- [12] 王高峰.基于激波管实验平台的甲烷燃烧化学动力学机理研究[D].合肥:中国科学技术大学,2008.
- [13] 朱传杰,林柏泉.基于化学反应动力学的瓦斯爆炸对冲火焰叠加特征的研究[J].煤炭学报,2011,36(S1):118-122.
Zhu Chuanjie, Lin Baiquan. Superposition characteristics of gas explosion opposed-flow flame based on chemical kinetics [J]. Journal of China Coal Society, 2011, 36(S1): 118-122.
- [14] 贾宝山,温海燕,梁运涛.煤矿巷道内 N_2 及 CO_2 抑制瓦斯爆炸的机理特性[J].煤炭学报,2013,38(3):11-16.
Jia Baoshan, Wen Haiyan, Liang Yuntao. Mechanism characteristics of CO_2 and N_2 inhibiting methane explosions in coal mine roadways [J]. Journal of China Coal Society, 2013, 38(3): 11-16.
- [15] Liang Yuntao, Zeng Wen. Kinetic simulation of gas explosion and inhibition mechanism in enclosed space [J]. CIESC Journal, 2009, 60(7): 1700-1706.
- [16] 梁运涛,曾文.空气含水量抑制瓦斯爆炸过程的数值模拟[J].深圳大学学报(理工版),2013,30(1):52-57.
Liang Yuntao, Zeng Wen. Simulation of the inhibition mechanism of humidity ratio of air in gas explosion process [J]. Journal of Shenzhen University (Science and Engineering), 2013, 30(1): 52-57.