

文章编号: 1001-1455(2010)04-0370-07

激波诱导瓦斯爆炸的动力学特性及影响因素^{*}

梁运涛¹, 曾文²

(1. 煤炭科学研究总院沈阳研究院煤矿安全技术国家重点实验室, 辽宁 沈阳 110016;

2. 天津大学内燃机燃烧学国家重点实验室, 天津 300072)

摘要: 通过修改化学动力学计算软件 CHEMKIN III 中的 SHOCK 程序包, 建立了激波管中激波诱导瓦斯爆炸过程的计算模型, 化学反应采用了详细反应机理(包括 53 种组分、325 个反应)。对激波诱导瓦斯爆炸过程中混合气温度、冲击波传播速度、反应物(甲烷、氧气)摩尔分数、活化中心(O、H)摩尔分数、部分致灾性气体(CO、CO₂、NO、NO₂)摩尔分数的变化趋势进行了详细分析。同时, 分析了瓦斯爆炸前混合气初始压力及初始混合气组成对激波诱导瓦斯爆炸动力学特性的影响。结果表明: 瓦斯爆炸后 CO 的摩尔分数达到 0.07 左右, CO₂ 的摩尔分数为 0.02 左右, NO 的摩尔分数为 0.001 左右, NO₂ 的摩尔分数则在 10⁻⁶ 左右; 随着瓦斯爆炸前混合气初始压力的提高以及混合气中甲烷体积分数的降低, 瓦斯引爆时间将缩短, 爆炸后温度将降低, 但压力将升高, 同时, 爆炸后 CO 的摩尔分数将降低, NO 的摩尔分数将提高。

关键词: 爆炸力学; 影响因素; 化学动力学模型; 瓦斯爆炸; 冲击波

中图分类号: O381

国标学科代码: 130·3510

文献标志码: A

1 引言

矿井瓦斯爆炸是煤矿灾害中的一类重大恶性事故。在我国随着煤炭产量逐年提高, 国民经济对于煤炭能源的需求越来越大, 近年来煤矿瓦斯爆炸事故呈上升趋势, 每年都有死亡近百人的恶性事故发生^[1-2]。瓦斯爆炸在瓦斯浓度分布、引爆方式和强度极限、空间几何特性及尺寸效应等条件具备后, 由爆燃过程转变为爆轰过程^[3]。瓦斯爆轰对煤矿矿井的破坏效应要比爆燃大得多, 原因在于爆轰会出现冲击波, 爆温、爆压和爆速的量级较高。气相爆轰波的传播是由于前驱激波压缩和加热未燃气体, 发生迅速的化学反应; 而化学反应释放的能量又用来供给激波的传播。同时, 爆轰过程中化学反应是有限速率的, 在诱导阵面和能量释放区之间存在诱导区^[4]。对激波诱导爆炸性燃料点燃过程的深入研究, 从安全角度来看有着十分重要的意义^[5-6]。实验研究一直是爆炸事故过程的规律和机理研究的基本手段。与实验相比, 数值模拟则具有快速、经济的优点, 而且随着计算机技术和计算流体力学理论不断发展, 数值仿真的精度和经济性还在不断提高, 已经成为对爆炸过程进行重现和研究的重要手段^[7-8]。

本文中, 对激波诱导瓦斯爆炸过程中温度、压力的变化历程、气相爆轰波的传播速度、反应物摩尔分数、促使瓦斯爆炸的自由基摩尔分数及瓦斯爆炸后部分有毒气体摩尔分数的变化进行详细分析; 同时, 对影响激波管中瓦斯爆炸的动力学特性及部分有毒气体摩尔分数变化的因素进行分析, 为矿井安全设计、防控瓦斯爆炸提供参考。

2 物理模型

主要对激波管中激波诱导瓦斯爆炸过程的动力学特性进行分析。激波管是一种广泛应用于分析可反应气体的化学动力学行为特性的实验器材^[9]。在激波管中, 通过 1 层薄膜把整个管道分为高压区域

* 收稿日期: 2009-04-28; 修回日期: 2009-06-01

基金项目: 国家自然科学基金项目(50674055); 国家重点基础研究发展计划(973 计划)项目(2005CB221506);

中国博士后科学基金项目(20080430733); 辽宁省教育厅项目(2008545)

作者简介: 梁运涛(1974—), 男, 博士, 高级工程师。

(诱导气体)与低压区域(可反应气体)。当高压气体发生爆炸时将形成冲击波(激波),冲击波冲破薄膜,向可反应气体方向传播,提高温度和压力,诱发化学反应,从而发生爆炸。激波管的物理模型如图 1,图中 u_s 为冲击波速度,激波管右侧为未反应混合气,激波管左侧为激波过后已反应或爆炸气体。

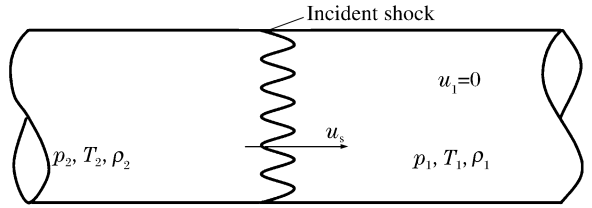


图 1 激波管示意图

Fig. 1 Schematic diagram of the shock tube

3 数学模型

假设激波管中的气体流动为绝热,同时,忽略横向截面上与质量扩散、热传导及粘度影响相关的输运现象。一维流动的连续性方程、组分方程、动量方程和能量方程分别为^[10]

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{1}{\rho + \rho v^2/c_p T - \rho v^2} \left[\frac{R_u \rho}{W_c} \sum_{k=1}^{k_g} \dot{\omega}_k W_k h_k - \frac{\bar{W}_c \rho T}{W_k} \right] + \frac{\rho^2 v^3}{A} - \frac{R_u}{W_c} \left| \frac{dA}{dz} \right| \quad (1)$$

$$\frac{dY_k}{dt} = \frac{\dot{\omega}_k W_k}{\rho} \quad k = 1, 2, \dots, k_g \quad (2)$$

$$\frac{dv}{dt} = -\frac{v}{\rho} \frac{d\rho}{dt} - \frac{v^2}{A} \left| \frac{dA}{dz} \right| \quad (3)$$

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{v^2}{\rho c_p} \frac{d\rho}{dt} - \frac{1}{\rho c_p} \sum_{k=1}^{k_g} \dot{\omega}_k W_k h_k + \frac{v^3}{Ac_p} \left| \frac{dA}{dz} \right| \quad (4)$$

其中

$$\dot{\omega}_k = \sum_{i=1}^{N_g} \nu_{ik} k_{fi} \prod_{j=1}^{k_g} X_j^{\nu_{jk}} \quad k = 1, 2, \dots, k_g \quad (5)$$

$$k_{fi} = A_i T^{b_i} \exp\left(-\frac{E_{ai}}{RT}\right) \quad i = 1, 2, \dots, N_g \quad (6)$$

边界条件采用层流边界条件

$$\frac{1}{A} \frac{dA}{dz} = \frac{(z/l_m)^{-1/2}}{2l_m(1 - (z/l_m)^{1/2})} \quad (7)$$

式中: $\nu_{ik} = \nu''_{ik} - \nu'_{ik}$, ν'_{ik} 、 ν''_{ik} 分别为第 i 个反应式中第 k 种组分的正向与逆向化学计量系数; t 、 z 分别为反应时间、轴向距离; ρ 、 A 分别为混合气密度、激波管横截面面积; Y_k 、 W_k 、 $\dot{\omega}_k$ 分别为第 k 种组分的质量分数、分子量、化学反应速率; v 、 R 、 c_p 分别为激波速度、气体常数、定压比热容; p 、 T 分别为混合气的压力、温度; k_g 、 N_g 分别为组分总数、反应步总数; A_i 、 b_i 、 E_{ai} 分别为第 i 反应步中的指前因子、温度指数、反应活化能; X_j 为第 j 种组分的质量摩尔浓度; h_k 为第 k 种组分的焓。

为了得到密度、组分摩尔分数、激波速度及温度与反应时间的函数关系,通过 $\frac{d}{dt} = v \frac{d}{dz}$ 把上述各量随轴向距离 z 的函数关系转变成与反应时间 t 的函数关系。在文中各图中,横轴上标注的时间为激波过后的反应时间。

简要计算流程如下:先由 CHEMKIN III 程序包中的 CHEMKIN INTERPRETER 程序块读入化学反应详细机理和热力学数据,生成 CHEMKIN.ASC 输出文件,然后用 SHOCK 主程序调用该输出文件和另一个输入文件,该输入文件为计算模型的初始计算条件和计算迭代的设置,进行控制方程的求解,最后生成一输出文件。其中 SHOCK 中对刚性的常微分方程的求解主要调用了求解器 LSODE。

4 化学反应机理

计算采用的甲烷燃烧化学动力学详细机理见文献[11],包括 53 种组分、325 个反应。这个机理得到了大量的验证,基本与实验结果相吻合。表 1 列出了部分关键反应基元步。

表1 瓦斯爆炸化学反应详细机理(部分反应基元步)

Table 1 The detailed reaction mechanisms of gas explosion

<i>i</i>	反应式	A_i
32	$O_2 + CH_2O = HO_2 + HCO$	1.00×10^{14}
38	$H + O_2 = O + OH$	2.65×10^{16}
53	$H + CH_4 = CH_3 + H_2$	6.60×10^8
57	$H + CH_2O (+M) = CH_3O (+M)$	5.40×10^{11}
98	$OH + CH_4 = CH_3 + H_2O$	1.00×10^8
101	$OH + CH_2O = HCO + H_2O$	3.43×10^9
116	$2HO_2 = O_2 + H_2O_2$	4.20×10^{14}
119	$HO_2 + CH_3 = OH + CH_3O$	3.78×10^{13}
155	$CH_3 + O_2 = O + CH_3O$	3.56×10^{13}
156	$CH_3 + O_2 = OH + CH_2O$	2.31×10^{12}
158	$2CH_3 (+M) = C_2H_6 (+M)$	6.77×10^{16}
161	$CH_3 + CH_2O = HCO + CH_4$	3.32×10^3
170	$CH_3O + O_2 = HO_2 + CH_2O$	4.28×10^{-13}

左右,从而引发初始混合气的化学反应。当反应时间为 $2 \mu s$ 左右时,由于支链反应所生成的活化中心摩尔分数越来越高(见图3),从而引发瓦斯爆炸,温度急剧上升。当激波管中的甲烷消耗完全后(见图3),即反应时间在 $5 \mu s$ 左右时,温度达到峰值,为 $3400 K$ 左右。随着反应时间的继续延长,温度基本维持稳定。当冲击波到达初始混合气时,激波尾部将以音速反向进入高压混合气(图1中的反应产物区),从而降低激波在管中的传播速度,如图2(b)所示。当初始混合气被引爆的瞬间,激波的传播速度骤然增加,在极短的时间内达到峰值,然后虽略有下降,但下降幅度较小。

图3显示了激波诱导瓦斯爆炸过程中反应物摩尔分数及促进瓦斯爆炸的活化中心摩尔分数的变化历程。从图3(a)可以看出,冲击波到达初始混合气后,提高了温度与压力(见图2),诱发了化学反应,从而引发爆炸。在此过程中甲烷与氧气摩尔分数迅速降低,甲烷在 $5 \mu s$ 时已由初始的 0.01 降低到接近为零,氧气在 $10 \mu s$ 时已由初始的 0.18 低为 0.02 左右,然后维持稳定。冲击

波到达初始混合气后,甲烷将发生支链反应,生成 HO_2 、 H 、 O 等自由基,而 H 自由基与 O 自由基进一步生成 OH 自由基。这些自由基活性很大,在反应链中形成活化中心,而活化中心摩尔分数是引发瓦斯爆炸的关键环节。从图3(b)可以看出,在瓦斯爆炸前的瞬间, H 自由基与 O 自由基摩尔分数急剧上升,从而形成摩尔分数极高的活化中心,引发瓦斯爆炸。

5 计算结果与分析

瓦斯爆炸发生的3个条件为^[12]:(1)甲烷与空气混合气体中,甲烷的体积分数为 $0.04 \sim 0.16$; (2)氧气体积分数大于 0.12 ; (3)高温热源(温度高于 $650 \text{ }^\circ\text{C}$)存在的时间大于瓦斯的引火感应期。在本文计算中,利用激波提供能量来替代高温热源。激波管中混合气初始条件分别为: $T_0 = 300 K$, $p_0 = 0.6 \text{ kPa}$, $\varphi_{CH_4} = 0.10$, $\varphi_{O_2} = 0.18$, $\varphi_{N_2} = 0.72$, $u_s = 2.8 \text{ km/s}$,激波管直径 $d = 3.0 \text{ cm}$ 。

5.1 激波诱导瓦斯爆炸的动力学特性分析

图2显示了激波诱导瓦斯爆炸过程中温度、冲击波传播速度的变化历程。从图2(a)可以看出,冲击波到达初始混合气瞬间释放出巨大能量,使初始混合气温度从初始的 $300 K$ 骤然上升为 $2950 K$

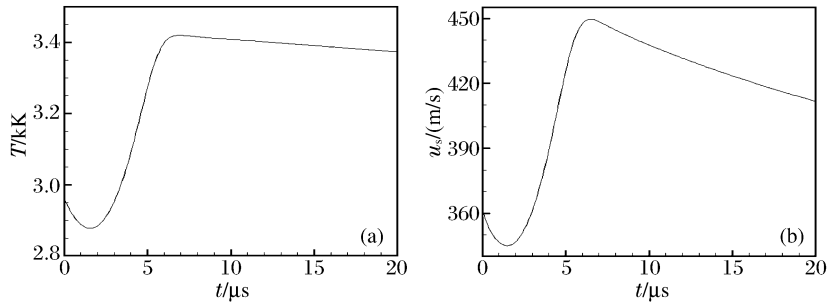


图2 温度、冲击波传播速度的变化历程

Fig. 2 The variational currents of temperature and the velocity of shock wave

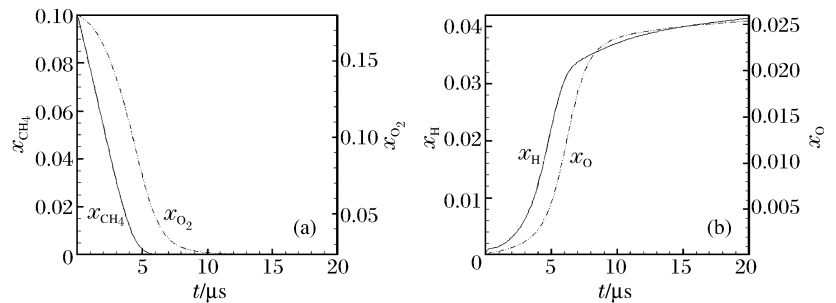


图3 反应物、活化中心摩尔分数的变化历程

Fig. 3 The variational currents of mole fractions of reactants and active centers

图 4 显示了激波诱导瓦斯爆炸过程中部分致灾性气体的生成与演变历程。

CO₂ 属于单纯性窒息气体，CO 中毒程度取决于摩尔分数的大小与接触时间，当摩尔分数达到 0.005 时，人吸一两口就会立即中毒死亡^[13]。从图 4(a)可以看出，在瓦斯爆炸瞬间，CO 的摩尔分数达到最高，然后有小幅下降，最后维持稳定；瓦斯爆炸后 CO₂ 的摩尔分数一直在增长，直到反应时间为 15 μs 时才逐渐维持稳定。瓦斯爆炸后 CO₂ 的摩尔分数为 0.02 左右，而 CO 的摩尔分数则在 0.07 左右，因此致灾性非常强。

NO 是一种极不稳定的气体，在常温下能很快与空气中的氧化合成 NO₂。当 NO₂ 与 CO 共存时，毒性更强。NO₂ 对人体的毒害与摩尔分数和作用时间有关。NO₂ 的摩尔分数达到 6 × 10⁻⁵ 时，咳嗽、胸部作痛；达到 10⁻⁴ 时，恶心、呕吐；达到 2.5 × 10⁻⁴ 时，短时间内死亡。从图 4(b)可以看出，瓦斯爆炸后 NO 的摩尔分数达到了 10⁻³ 左右，NO₂ 的摩尔分数则在 10⁻⁶ 左右。

5.2 初始压力对激波诱导瓦斯爆炸的动力学特性的影响

瓦斯爆炸前混合气初始压力是一个重要影响参数。在实际过程中，通常突然发生大面积的瓦斯冒出，瓦斯的压力较大，并且巷道比较狭窄，通风条件不好，那么意味着巷道中瓦斯空气混合气体的压力和体积分数升高，初始压力发生了变化，通常大于 0.1 MPa，有时局部达 0.5 MPa 左右。因此，忽略初始压力研究瓦斯爆炸过程必然会带来误差，初始压力对瓦斯爆炸的发生和传播是不可忽略的因素。

图 5 显示了初始压力对激波诱导瓦斯爆炸过程中温度、压力变化历程的影响。从图 5(a)可以看出，随着瓦斯爆炸前初始压力的提高，瓦斯引爆时间将缩短，爆炸后温度将降低。当初始压力为 0.4 kPa 时，瓦斯引爆时间为 3 μs 左右，而当初始压力提高到 0.8 kPa 时，瓦斯引爆时间缩短为 1 μs 左右。初始压力提高 0.4 kPa，瓦斯引爆时间将缩短 2 μs 左右。同时，如图 5(b)所示，随着初始压力的提高，爆炸后压力将急剧升高。当初始压力为 0.4 kPa 时，爆炸后压力为 30 kPa 左右，当初始压力为 0.8 kPa 时，爆炸后压力上升为 60 kPa 左右。

图 6 显示了初始压力对激波诱导瓦斯爆炸过程中反应物及部

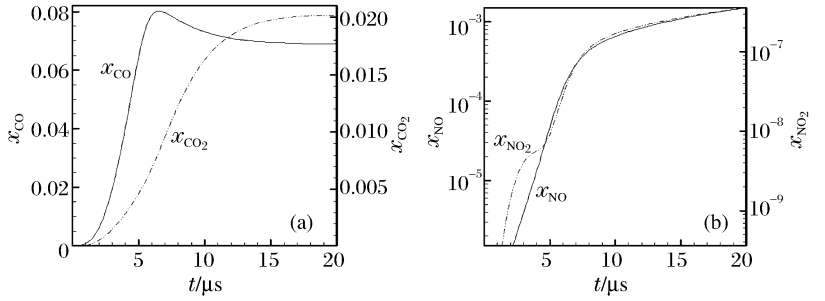


图 4 部分致灾性气体摩尔分数的变化历程
Fig. 4 The variational currents of mole fractions of catastrophic gases

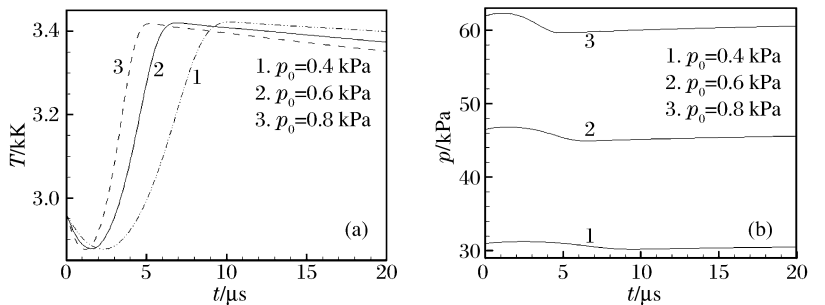


图 5 初始压力温度、压力变化历程的影响
Fig. 5 The effects of initial pressure on the variational currents of temperature and pressure of shock wave

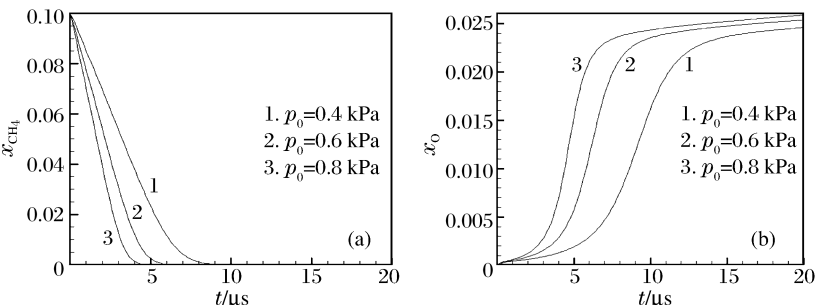


图 6 初始压力对反应物、活化中心摩尔分数变化历程的影响
Fig. 6 The effects of initial pressure on the variational currents of mole fractions of reactants and active centers

分活化中心摩尔分数变化趋势的影响。从图 6(a)可以看出,随着初始压力的提高,甲烷完全消耗所需的反应时间将缩短。当初始压力为 0.4 kPa 时,甲烷完全消耗的反应时间为 9 μs 左右,而当初始压力提高到 0.8 kPa 时,甲烷完全消耗的反应时间为 4 μs 左右。如图 6(b)所示,随着初始压力的提高,活化中心摩尔分数急剧升高的反应时间得到提前,同时,当活化中心摩尔分数达到稳定时,初始压力越高,活化中心摩尔分数也越高,瓦斯爆炸也更加快速与剧烈。

图 7 显示了初始压力对激波诱导瓦斯爆炸过程中部分致灾性气体摩尔分数变化趋势的影响。从图可以看出,随着初始压力的提高,CO、NO 摩尔分数急剧升高的反应时间将缩短,爆炸后 CO 摩尔分数将有所降低,但 NO 摩尔分数将有所提高。

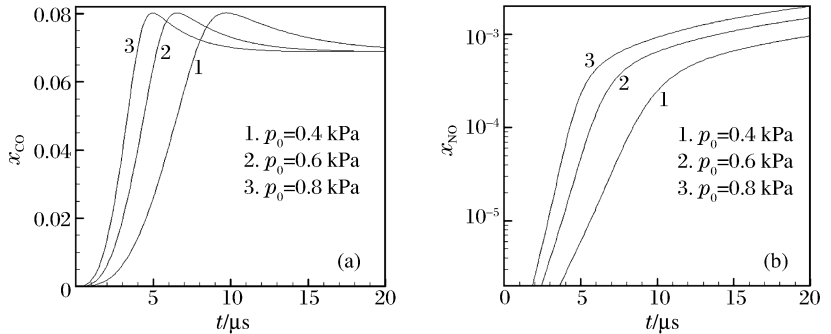


图 7 初始压力对部分致灾性气体摩尔分数变化历程的影响

Fig. 7 The effects of initial pressure on the variational currents of mole fractions of catastrophic gases

5.3 初始混合气组成对激波诱导瓦斯爆炸的动力学特性的影响

图 8 显示了初始混合气组成对激波诱导瓦斯爆炸过程中温度、压力变化历程的影响。从图可以看出,随着混合气中甲烷体积分数的降低,瓦斯引爆时间将缩短,爆炸后温度将下降,但是,压力将有所升高。当甲烷的体积分数为 0.12 时,引爆时间为 3 μs 左右;当甲烷的体积分数为 0.08 时,引爆时间为 1 μs 左右。

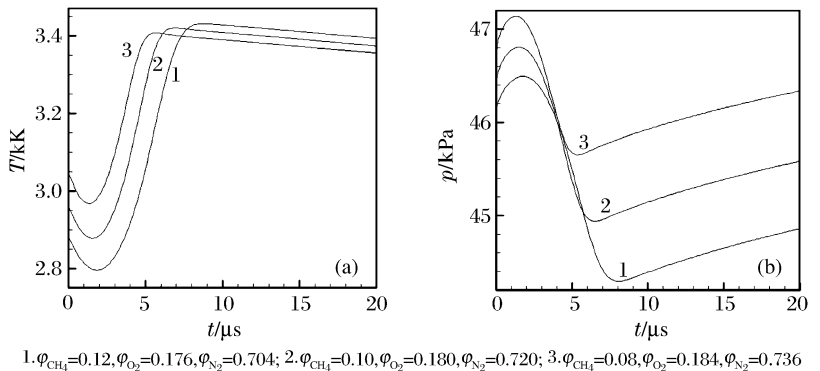


图 8 初始混合气组成对温度、压力变化历程的影响

Fig. 8 The effects of initial composition of mixed-gas on the variational currents of temperature and pressure of shock wave

图 9 显示了初始混合气组成对激波诱导瓦斯爆炸过程中反应物、活化中心摩尔分数变化历程的影响。从图 9(a)可以看出,随着混合气中甲烷体积分数的降低,甲烷完全消耗所需的反应时间将缩短。当甲烷的体积分数为 0.12 时,甲烷完全消耗的反应时间为 7 μs 左右;当甲烷的体积分数为 0.08 时,甲烷完全消耗的反应时间为 5 μs 左右,缩短了 2 μs 左右。如图 9(b)所示,随着混合气中甲烷体积分数的降低,O 自由基摩尔分数急剧上升的反应时间将缩短,同时,摩尔分数也将得到大幅提高。

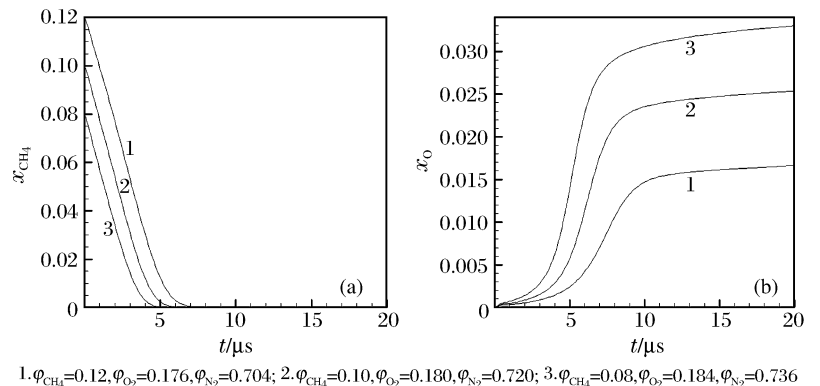


图 9 初始混合气组成对反应物、活化中心摩尔分数变化历程的影响

Fig. 9 The effects of initial composition of mixed-gas on the variational currents of mole fractions of reactants and active centers

图 10 显示了初始混合气组成对激波诱导瓦斯爆炸过程中部分致灾性气体摩尔分数变化历程的影响。从图 10(a)可以看出,随着混合气中甲烷体积分数的降低,瓦斯爆炸后 CO 的摩尔分数将大幅降低。当甲烷的体积分数为 0.12 时,爆炸后 CO 的摩尔分数为 0.09 左右;当甲烷的体积分数为 0.08 时,爆炸后 CO 的摩尔分数为 0.05 左右,降低了 0.04。如图 10(b)所示,随着混合气中甲烷体积分数的降低,爆炸后 NO 摩尔分数将升高。

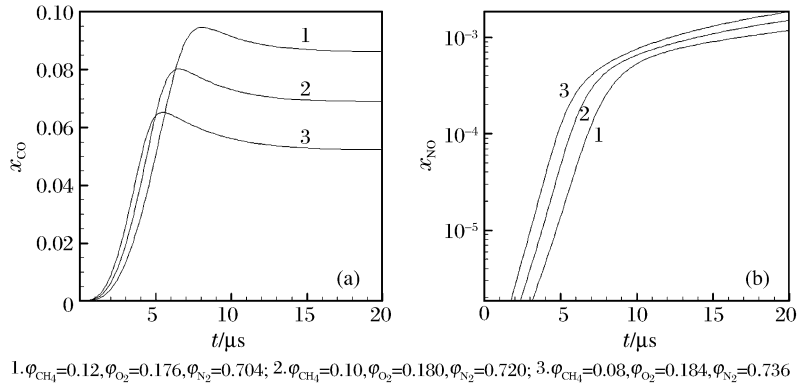


图 10 初始混合气组成对部分致灾性气体摩尔分数变化历程的影响

Fig. 10 The effects of initial composition of mixed-gas on the variational currents of mole fractions of catastrophic gases

6 结论

(1) 冲击波到达初始混合气

后,诱发瓦斯发生爆炸的时间为 $2 \mu s$ 左右;当反应时间为 $20 \mu s$ 时,CO 的摩尔分数为 0.07 左右,CO₂ 的摩尔分数为 0.02 左右,NO 的摩尔分数为 10^{-3} 左右,而 NO₂ 的摩尔分数则在 10^{-6} 左右。

(2) 在瓦斯爆炸前的瞬间,H 自由基与 O 自由基摩尔分数急剧上升,从而形成摩尔分数极高的活化中心,引发瓦斯爆炸。

(3) 随着瓦斯爆炸前混合气初始压力的提高,瓦斯引爆时间缩短。初始压力提高 0.4 kPa,瓦斯引爆时间缩短 $2 \mu s$ 左右。但是爆炸后温度降低,压力升高。同时,反应结束时 CO 的摩尔分数度降低,NO 的摩尔分数则提高。

(4) 随着爆炸前初始混合气中甲烷体积分数的降低,瓦斯引爆时间缩短,爆炸后温度下降,但是,压力有所升高。混合气中甲烷体积分数降低 0.04,引爆时间将缩短 $2 \mu s$ 。同时,反应结束时 CO 的摩尔分数降低,NO 的摩尔分数则提高。

参考文献:

- [1] Troiani G. Effect of velocity inflow conditions on the stability of a CH₄/air jet-flame[J]. Combustion and Flame, 2009,156(2):539-542.
- [2] 李敬民. 煤矿井下爆破气体的危害及其预防[J]. 华北科技学院学报,2005,2:34-36.
LI Jing-min. Mine harmful gas that after bursting and preventive measures[J]. Journal of North China Institute of Science and Technology, 2005,2:34-36.
- [3] 丁广骧. 煤矿巷道瓦斯爆轰理论分析和参数计算[J]. 中国矿业大学学报,2000,29(1):37-40.
DING Guang-xiang. Theoretical analysis and calculation of methane gas explosion in coal gangway[J]. Journal of China University of Mining & Technology, 2000,29(1):37-40.
- [4] 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.
- [5] Essen V M, Sepman A V, Mokhov A V, et al. Pressure dependence of NO formation in laminar fuel-rich premixed CH₄/air flames[J]. Combustion and Flame, 2008,3:434-441.
- [6] 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.
- [7] Oh K H, Kim H, Kim J B, et al. A study on the obstacle-induced variation of the gas explosion characteristics[J]. Loss Prevention in Process Industries, 2001,14:597-602.

- [8] 范宝春, 雷勇, 姜孝海. 激波与堆积粉尘相互作用的数值模拟[J]. 爆炸与冲击, 2002, 22(3): 216-220.
FAN Bao-chun, LEI Yong, JIANG Xiao-hai. Numerical simulation of interactions of shock waves with air/ granular material interface[J]. Explosion and Shock Waves, 2002, 22(3): 216-220.
- [9] 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 Xiang-jun, CHEN Hao. Theoretical study on the effects of initial pressure on methane explosion in coal mine [J]. Mining & Metallurgy, 2006, 15(1): 5-9.
- [10] Mitchell R E, Kee R J. Shock: A general purpose computer code for predicting chemical kinetic behavior behind incident and reflected shocks[R]. SAND82-8205. Sandia National Laboratory, 1998.
- [11] Gregory P, Smith D G. Gri-Mech 3.0[EB/OL]. http://www.me.berkeley.edu/gri_mesh/version30/text30.html, 2005/2007.
- [12] 陈桢. 矿井火区可燃气体爆炸分析[J]. 煤矿现代化, 2005, 5: 17-18.
CHEN Zhen. Analysis on explosion of combustible gases in underground fire zone[J]. Coal Mine Modernization, 2005, 5: 17-18.
- [13] Pintgen F, Shepherd J E. Detonation diffraction in gases[J]. Combustion and Flame, 2009, 156(3): 665-677.

Kinetic characteristics and influencing factors of gas explosion induced by shock wave^{*}

LIANG Yun-tao¹, ZENG Wen²

(1. State Key Laboratory of Coal Mine Safety Technology, Shenyang Branch of
China Coal Research Institute, Shenyang 110016, Liaoning, China;

2. State Key Laboratory of Engines, Tianjin University, Tianjin 300072, China)

Abstract: By amending the SHOCK code in the Fortran chemical kinetics package, CHEMKIN III, a computational model was built for the shock wave-induced gas explosion in a shock tube. And, the detailed reaction mechanisms involving 53 species and 325 reactions were adopted in the model above. The built computational model was used to analyze the evolvments of the following parameters: mixed gas temperature, shock wave velocity, the mole fractions of reactants (CH_4 and O_2), the mole fractions of active centers (O, H), and the mole fractions of catastrophic gases (CO , CO_2 , NO and NO_2) in the process of gas explosion induced by shock wave. Furthermore, the effects of the initial pressure and the mixed gas composition before gas explosion on the kinetic characteristics of gas explosion induced by shock wave were discussed. The results show that the mole fractions of CO , CO_2 , NO and NO_2 are about 0.07, 0.02, 0.001 and 10^{-6} , respectively, after gas explosion. With the increase of the initial pressure and the decrease of the CH_4 fraction in the mixed gas, the detonation time of gas explosion shortens, the temperature decreases, but the pressure increases after gas explosion. Meanwhile, the mole fraction of CO decreases, the mole fraction of NO increases.

Key words: mechanics of explosion; influencing factor; chemical reaction kinetics model; gas explosion; shock wave

* Received 28 April 2009; Revised 1 June 2009

Supported by the National Natural Science Foundation of China (50674055);

the National Basic Research Program of China (973 Program) (2005CB221506)

Corresponding author: ZENG Wen, zengwen928@sohu.com