

# CH<sub>4</sub>-O<sub>2</sub>混合气中爆燃爆震转捩的数值模拟<sup>\*</sup>

高泰荫 黄军涛 李元明 高越 信一兵

(东北大学 沈阳 110006)

**摘要** 运用化学流体力学基本理论和两步燃烧反应模型原理,建立了一维封闭体系可燃气体爆燃爆震转变现象的数学模型,利用拉格朗日质量坐标变换下的 Lax-Wendroff 和 Mecom ic 气动差分与 Adams 化学差分格式,求解基本方程,成功地完成了过程的数值模拟,清楚地说明了可燃气体中 DDT 现象由压缩波到激波达到稳态爆震的发生机制和火焰带引生爆震波的过程行为。

**关键词** 可燃气体爆炸 爆燃爆震转捩 (DDT) 数值模拟

**中图法分类号** O 381 O 613 3

## 1 引言

建立可燃混合物爆炸发生的临界条件是工业爆炸灾害预报与防护的基础。以往,这一工作主要通过物理实验进行,并曾试图建立获得爆炸临界参数的实验标准<sup>[1,2]</sup>。但是,迄今为止的推荐实验方法都是以等容绝热为条件,这与工程实际中常常面临复杂多变的流动传热状况相差甚远<sup>[3]</sup>。后来,开始有人在限定条件下实现可燃混合物中的爆震,实验研究其发生因素和发展过程,丰富了人们对爆震波形成机理和传播结构的基本认识,但是对于有工程实际那样复杂的边界条件和初始条件的实验相似尚难以实现<sup>[4-7]</sup>。

可燃混合物中燃烧波爆燃爆震转捩与过渡 (DDT) 特性受系统初始条件和边界条件的显著影响。正因为这一点,物理实验有许多困难。随着数值方法和计算技术的进步,近年来,DDT 问题的数值分析与模拟研究日渐活跃,涉及的对象有均相混合气,也有气-固混合物,研究的问题有 DDT 发生条件,也有爆震波结构<sup>[8-10]</sup>。已有的研究预示着数值模拟研究 DDT 问题的前景,同时也期待在现象本质描述和过程解析计算上有更多的尝试<sup>[11]</sup>。

我们针对 CH<sub>4</sub>-O<sub>2</sub>混合气燃烧波在一维封闭空间传播的 DDT 问题,运用化学反应流动传热基本理论和两步反应模型原理,建立现象的数学表达,利用拉格朗日质量坐标变换方法,完成过程的数值解析,为深入研究 DDT 过程发生的化学反应流动传热本质特征提供基础。

## 2 物理模型及其数学表达

### 2.1 物理模型

讨论 CH<sub>4</sub>-O<sub>2</sub>混合气在一维封闭空间点火形成燃烧波后,由爆燃转成爆震的发生过程,在如图 1 简化条件下,考察其化学反应流动参数的基本特征,其假定条件是:

\* 国家自然科学基金资助项目 (59476032)

高泰荫:男,1943年4月生,教授。

1997-09-01日收到原稿,1997-12-25收到修改稿。

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  $\text{CH}_4\text{-O}_2$  气体混合物的温度、浓度和压力沿径向均匀分布。

3 初始温度场由两部分组成,即  $T = T(x)$ : 当  $0 \leq x \leq x_h$  时,为恒定的高温区域,即点火源,  $T = T_h = \text{const}$ ; 当  $x_h < x \leq x_m$  ( $x_m = L$ ) 时,为一恒定的低温区域,  $T = T_0 = \text{const}$

4 初始浓度场由两部分组成,即  $Y = Y(x)$ : 当  $0 \leq x \leq x_h$  时,为按一定比例(与  $x_h < x \leq x_m$  段相同)均匀混合后的  $\text{CH}_4$  与纯  $\text{O}_2$  燃烧气体产物; 当  $x_h < x \leq x_m$  时,为按一定比率均匀混合的  $\text{CH}_4$  与纯  $\text{O}_2$  气体混合物。

5 初始混合气密度均匀,  $d(x) = d_0 = \text{const} (0 \leq x \leq L)$

6 不考虑辐射传热。

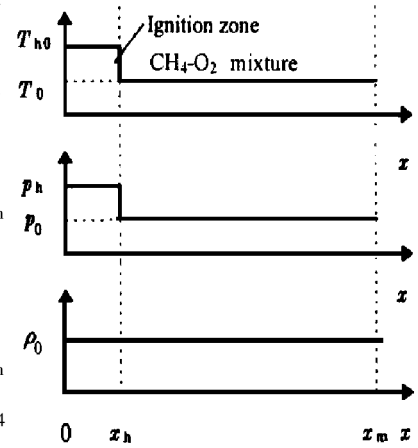


图 1 初始温度压力分布图

Fig. 1 Initial temperature and pressure-distance profile

### 2.2 基本方程

我们采用两步反应模型,即将反应分成两个阶段。第一阶段为感应期阶段,此阶段的基本特征是不发生化学反应,不伴随有放热现象;第二阶段为放热阶段,此阶段的基本特征是发生化学反应,且伴随有放热现象<sup>[12]</sup>。根据化学反应流体力学理论,二步反应模型及以上各种假定,对于一维非定常、粘性、气体导热的化学反应流动问题,可以建立以下的数学模型:

质量守恒方程

$$\frac{\partial d}{\partial t} + \frac{\partial (du)}{\partial x} = 0 \tag{1}$$

感应期方程

$$\frac{\partial (dW)}{\partial t} + \frac{\partial (duW)}{\partial x} = - \frac{\partial (\Phi \frac{\partial W}{\partial x})}{\partial x} - w w \tag{2}$$

此式描述二步反应模型的第一阶段:感应阶段。W为感应期的表征参数,W从 1~ 0 变化。反应率  $w = A' d \exp[-E_w/(R_u T)]$ ,  $E_w$  为活化能,  $A'$  为定常数。

组分方程

$$\frac{\partial (dY_i)}{\partial t} + \frac{\partial (duY_i)}{\partial x} = \frac{\partial (\Phi \frac{\partial Y_i}{\partial x})}{\partial x} - w_i \tag{3}$$

此式描述二步反应模型的第二阶段:放热阶段。其中:  $Y_i$  为第  $i$  种组分的质量百分比浓度,且

$$\sum_{i=1}^N Y_i = 1 (N = 4), w_i \text{ 为 } i \text{ 组分的反应率,对于第一种组分 } \text{CH}_4$$

$$w_1 = A \exp(-\frac{E}{R_u T}) (\text{CH}_4)^T (\text{O}_2)^U x (W)$$

式中:  $A = 4.0 \times 10^{10}$ ,  $E = 1.2305 \times 10^5 \text{ J/mol}$ ,  $T = 0.2 \leq T \leq 1.3 \times 10^3 \text{ K}$   $(W) = \begin{cases} 1 & \text{当 } x < x_h \text{ 时} \\ 0 & \text{当 } x \geq x_h \text{ 时} \end{cases}$

动量方程

$$\frac{\partial (du)}{\partial t} + \frac{\partial (du^2)}{\partial x} = - \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} (\frac{4}{3} \frac{\partial u}{\partial x}) \tag{4}$$

能量方程

$$\frac{\partial (dh - p)}{\partial t} + \frac{\partial (d_u h)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{4}{3} u \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \frac{\partial T}{\partial x} + dTD \sum_{i=1}^N C_{p_i} \frac{\partial Y_i}{\partial x} \right) + \sum_{i=1}^N w \Delta h_{f,i}^0 \quad (5)$$

式中:  $h$  为单位质量的总焓,  $\Delta h_{f,i}^0$  为单位质量的生成热。

完全气体状态方程

$$P = R_u T \sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{m_i} \quad (6)$$

式中:  $R_u$  为通用气体常数,  $m_i$  为第  $i$  种组分的分子量。

如是, 得到 9 个独立的方程 (1)~ (6), 含有变量  $d, u, p, W, E, Y_i (i=1, \dots, 4)$  共 9 个, 方程组封闭。给定合适的初始条件和边界条件, 方程组可以求解。在本文中, 时间是从突然点火时刻算起, 在左右边界处可认为流体速度为零, 其他各变量则偏导数为零。

### 3 基本方程的变换及格式化

#### 3.1 拉格朗日质量坐标系变换及参数无量纲化

对于可压缩流体流动产生激波的问题, 采用拉格朗日坐标系, 可解决密度梯度较大的数值计算问题, 使高压区域集中较多的网格结点, 有利于计算的稳定; 另外, 可以消去对流项, 简化了方程。通过对各个质点的跟踪计算, 可得出各主要物理变量沿管长和时间变化的情况。

拉格朗日坐标转换公式为  $q(x, t) = \int_0^x d(x, t) dx$ , 由坐标  $(x, t)$  转换成坐标  $(q, f)$ , 其中  $f = t$  通用变量可写成:  $a(x, t) = a[q(x, t), f(x, t)]$ , 于是

$$\frac{\partial a}{\partial t} = - d_u \frac{\partial a}{\partial q} + \frac{\partial a}{\partial f} \quad (7)$$

$$\frac{\partial a}{\partial x} = d \frac{\partial a}{\partial q} \quad (8)$$

同时, 为了减少计算过程的舍入误差, 对坐标变换以后的方程进行了无量纲处理, 无量纲参数见下 ( $a_0$  为音速,  $m_0$  为混合气体平均分子量):  $R_{e0} = L a_0 / \nu \alpha$ ,  $P_{r0} = \lambda_0 / C_{p0} \alpha$ ,  $S_{c0} = v_0 D \alpha$ ,  $\bar{c}_0 = C_{p0} T_0 / a_0^2 = C_{v0} m_0 / R_u$ ;  $D_a = \bar{c}_0 / \bar{c}_\alpha$ ;  $D_{a_i} = \bar{c}_0 / \bar{c}_i$ ;  $\bar{c}_u = L / a_0 \alpha$ ,  $\bar{c}_0 = d_0 / A$  ( $A = 4.0 \times 10^0$ );  $\bar{c}_i = 1 / A$ ;  $(D_{a_i} \bar{c}_0 = 10^0)$ ;  $S = R_u T_0 / (m_0 a_0^2) = 1 / N_\alpha$ ;  $\bar{c}_d = d / d_0$ ;  $\bar{u} = u / a_0$ ;

$$a_0 = (V_0 R_u T_0 / m_0)^{1/2}; \quad V_0 = C_{p0} / C_{v0}; \quad \bar{D} = D / D_\alpha; \quad \bar{Y}_i = Y_i (i=1, 2, 3, 4); \quad \bar{p} = p / (d_0 a_0^2);$$

$$\Delta \bar{H} = \Delta H / (C_p T_0); \quad \bar{c}_- = \bar{c}_- / \bar{c}_\alpha; \quad \bar{T} = T / T_\alpha; \quad \bar{q} = \frac{q}{M} \left[ M = \int_1^L d(x, t) dx = d_0 L = \text{const} \right];$$

$$\bar{c}_f = f / \bar{c}_i; \quad \bar{h} = h / a_0^2; \quad \bar{C}_{p_i} = C_{p_i} / C_{p0}; \quad \bar{\lambda} = \lambda / \lambda_0 = \bar{C}_p / (Pr Pr_0) = \bar{C}_p / \bar{c}_-$$

对于 CH<sub>4</sub> 和 O<sub>2</sub> 气体混合物,  $m_0 = [y_{m1} m_1 + y_{m2} m_2]$ , 其中  $y_{m1}$  和  $y_{m2}$  分别为 CH<sub>4</sub> 和 O<sub>2</sub> 的体积百分比浓度, 满足  $y_{m1} + y_{m2} = 1$ ,  $m_1$  和  $m_2$  分别为 CH<sub>4</sub> 和 O<sub>2</sub> 的分子量。上式中, “0” 表示初始混合物参数,  $x_0 \leq x \leq L$  或  $q_0 \leq q \leq M$ 。

因此, 方程 (1)~ (6) 其中 (3) 式中只列出 CH<sub>4</sub> 组分可表示成以下的通式

$$\frac{\partial U}{\partial f} + \frac{\partial G(U)}{\partial q} = J(U) \quad (9)$$

$$\begin{aligned}
 \text{式中: } \mathbf{G}(\mathbf{U}) &= \mathbf{F}(\mathbf{U}) + \mathbf{v}(\mathbf{U}) \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{U})}{\partial \bar{q}}; \quad \mathbf{U} = \begin{bmatrix} 1/\bar{d} \\ \bar{Y}_1 \\ \bar{u} \\ \bar{h} - \bar{p} / \bar{d} \\ \bar{W} \end{bmatrix}; \quad \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \begin{bmatrix} -\bar{u} \\ 0 \\ \bar{p} \\ \bar{p} \bar{u} \\ 0 \end{bmatrix}; \\
 \mathbf{f}(\mathbf{U}) &= \begin{bmatrix} 0 \\ \bar{Y}_1 \\ \bar{u} \\ \bar{T} \\ \bar{W} \end{bmatrix}; \quad \mathbf{J}(\mathbf{U}) = \begin{bmatrix} 0 & & & & \\ & -\frac{1}{\bar{d}} D_a [\bar{Y}_1]^T [\bar{Y}_2]^U \exp\left[-\frac{E}{R_u T}\right] x(\bar{W}) & & & \\ & 0 & & & \\ a_0 \Delta \bar{H} - \frac{1}{\bar{d}} D_a [\bar{Y}_1]^T [\bar{Y}_2]^U \exp\left[-\frac{E}{R_u T}\right] x(\bar{W}) - D_{a_i} \exp\left[-\frac{E}{R_u T}\right] & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{S_{c0}} \bar{d}^2 \bar{D} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{4}{3} \bar{d}^- & 0 & 0 \\ 0 & \frac{a_0}{S_{c0}} \bar{d}^2 \bar{D} \bar{T} \left[ \bar{C}_{p_1} + 2 \frac{m_2}{m_1} \bar{C}_{p_2} - \frac{m_3}{m_1} \bar{C}_{p_3} - 2 \frac{m_4}{m_1} \bar{C}_{p_4} \right] & \frac{4}{3} \bar{d}^- \bar{u} & \frac{a_0}{P r_0} \bar{d} \bar{\lambda} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{S_{c0}} \bar{d}^2 \bar{D} \end{bmatrix}; \\
 \mathbf{v}(\mathbf{U}) &= \begin{bmatrix} -\frac{1}{R_{e0}} \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

体系的  $Pr$  数和  $Sc$  数可以近似考虑成与其所处状态无关, 取  $Pr = Pr_0 = Sc = Sc_0 = 0.72 = \text{const}$  则  $\bar{d} \bar{D} = (S_{c0} / Sc) \bar{d}^-$ ,  $\bar{\lambda} = \bar{C}_p^- / (Pr / Pr_0) = \bar{C}_p^-$ 。而完全气体状态方程可转化成

$$\frac{\bar{p}}{\bar{d}} = S \bar{T} \sum_{i=1}^4 \frac{\bar{Y}_i}{m_i} \tag{10}$$

### 3.2 方程的离散化

为产生隐式人工阻尼, 减少激波震荡, 对于方程 (9), 我们采用流体力学和化学分别离散的方法。气体动力差分方法是建立在显式  $S^V_U$  方法的基础上, 包括 Lax-Wendroff 方法和 McCormic 方法。化学差分使用二级精度的 Adams 方法。具体离散步骤如下:

(1) 气体动力学差分

$$\mathbf{G}_j^k = \mathbf{F}_j^k + \frac{\nu \left[ \sum_{i=1}^4 a_i \mathbf{U}_{j+1}^k \right]}{\Delta \bar{q}} \left[ (\mathbf{f}_j^k - \mathbf{f}_{j-1}^k) + \nu (\mathbf{f}_{j+1}^k - 2\mathbf{f}_j^k + \mathbf{f}_{j-1}^k) \right] \quad (j = 2, N - 1) \tag{11}$$

式中:  $\sum_{i=1}^4 a_i = 1$ ,  $\widehat{\mathbf{U}}_{j+1}^{k+T} = \mathbf{U}_{j+1}^k - \frac{\Delta \bar{t}}{\Delta \bar{q}} [\mathbf{G}_{j+1}^k - \mathbf{G}_j^k]$  ( $j = 1, N - 1$ )

(2) 化学差分

$$\mathbf{U}_{j+1}^{k+T} = \widehat{\mathbf{U}}_{j+1}^{k+T} + \Delta \bar{t} \mathbf{J}(\widehat{\mathbf{U}}_{j+1}^{k+T}) \quad (j = 1, N - 1) \tag{12}$$

(3) 气体动力学差分

$$\widehat{\mathbf{U}}_j^{k+1} = \mathbf{U}_j^k - \Delta \bar{t} \left[ \frac{\mathbf{F}_{j+1}^k - \mathbf{F}_{j-1}^k}{2\Delta \bar{q}} - \frac{\Delta \bar{t}}{2\Gamma} \left[ \frac{\mathbf{F}_{j+1}^{k+T} - \mathbf{F}_j^{k+T}}{\Delta \bar{q}} - \frac{\mathbf{F}_{j+1}^k - \mathbf{F}_j^k}{\Delta \bar{q}} \right] \right]$$

$$-\frac{\Delta \tau}{\Delta \bar{q}^2} \left| v \left[ \frac{U_{j+1}^k - U_j^k}{2} \right] (f_{j+1}^k - f_j^k) - v \left[ \frac{U_j^k - U_{j-1}^k}{2} \right] (f_j^k - f_{j-1}^k) \right| \quad (j = 2N - 1) \quad (13)$$

(4)化学差分

$$U_j^{k+1} = \widehat{U}_j^{k+1} + \Delta \tau J[\widehat{U}_j^{k+1}] \quad (j = 2N - 1) \quad (14)$$

上列各式中:  $F_j^k = F(U_j^k)$ ,  $G_j^k = G(U_j^k)$ ,  $f_j^k = f(U_j^k)$ 。

取合适值  $\bar{E} = 0.01$ ,  $\bar{V} = 0.5$  且取加权数  $\alpha$  的参考值  $\alpha = 1/3$  ( $\alpha = -1, 0, 1$ )。

计算的稳定性用 CFL 数来限制, 对式 (9) 离散的收敛条件为

$$(|\bar{u}| + 1) \Delta \tau \Delta \bar{q} \leq 1 \quad (15)$$

考虑到化学反应的速度很大,  $\Delta \tau$  取  $10^{-4} \sim 10^{-8}$  不等。

## 4 计算结果及分析

根据爆燃与爆震的经典理论, 波前马赫数是区分爆燃与爆震的主要依据。我们通过对 10cm 长管子内燃烧波传播过程的数值模拟, 给出了有预压缩波引导的火焰波 DDT 的详细过程。

由计算结果分析爆燃向爆震转变的过程及机理, 可建立一个典型的爆燃向爆震转变过程的概貌。取初始条件  $T_{h_0} = 2500\text{K}$ ,  $T_{o_0} = 700\text{K}$ ,  $p_{o_0} = 101325\text{Pa}$  且在当量浓度下, 所得计算结果如图 2~ 7 从中可以看到转变过程中的压力、温度、 $Ma$  数、气体绝对速度、密度和质量浓度的分布情况。

由图 2 可以看出, 2 时刻和 3 时刻之间的某一时刻, 波前  $Ma$  数等于 1, 爆燃向爆震发生了转变, 转变时间  $t_{cr}$  处于 0.044ms 与 0.053ms 之间, 无量纲转变距离 (以 10cm 作为比数)  $\bar{x}_{cr}$  处于 0.1728 与 0.2832 之间。在  $t_{cr}$  之前的过程为爆燃, 在  $t_{cr}$  之后的过程为爆震。在爆燃过程中, 压力峰值较小, 压力分布相对比较平坦, 其中 2 时刻的波前  $Ma$  数等于 0.8871, 已接近爆震, 因此压力峰值较大一些, 最大压力达到 0.7279MPa。前导压缩波的传播速度为  $v_p = 505.55\text{m/s}$  而火焰波的传播速度为  $v_f = 999.6\text{m/s}$ 。由此可以看出, 火焰波逐渐向前导压缩波靠拢。3 时刻的波前  $Ma$  数为 1.457, 已经是爆震波, 但波后  $Ma$  数为 0.7, 因此是强爆震。4 时刻的波前  $Ma$  数为 1.691, 波后  $Ma$  数为 0.78 还是强爆震, 其中最大压力达到 2.212MPa。激波强度  $[(p_{max} - p_0)/p_0]$  很大。以后时刻的激波强度有所降低, 在 6 时刻时, 波后  $Ma$  达到 0.98 已接近  $Ma$  为 1, 可以断定为 C-J 爆震波。在图 2 中还可以看到, 在 6 时刻以后的过程中, 波前的  $Ma$  数基本上在 1.6 保持不变, 波后的  $Ma$  数则基本上保持在 0.98 不变, 另外,  $v_p = v_f = 1806.775\text{m/s}$  即: 火焰波与前导压缩波已相重合, 此时, 燃烧产生而能量刚好能维持管内气体的流动状态及爆震波的正常传播, 这些都是 C-J 爆震的明显特征。

由图 3 及图 4 可以看出, 在 1~ 6 时刻的变化过程中, 高密度区逐渐由左向右转移, 特别是在 1~ 3 时刻的变化过程中, 密度梯度越来越大, 峰值越来越高, 在整个 1~ 6 时刻的变化过程中, 可以看到压缩波的逐渐聚合, 渐渐转变成激波 (与火焰波相重合), 经历强爆震波后, 最后形成稳态的爆震, 即 C-J 状态的爆震。可以断言: 由于前导压缩波及燃烧反应的放热作用, 造成流场的不均匀性, 使得每一时刻流场中质点的速度、密度分布不一样, 以至产生局部压缩波, 各种压缩波的聚合则形成激波。同时可以得到结论, 爆燃向爆震的转变的机制: 压缩波——激波——稳态爆震。

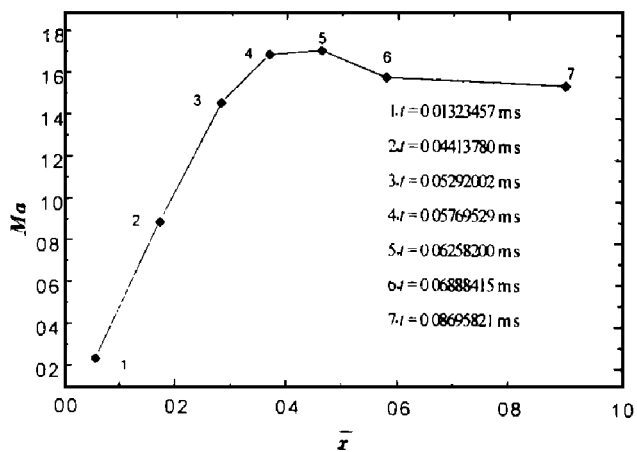


图 2 波前  $Ma$  数的分布

Fig. 2 Mach numbers-distance profile in flame wave front

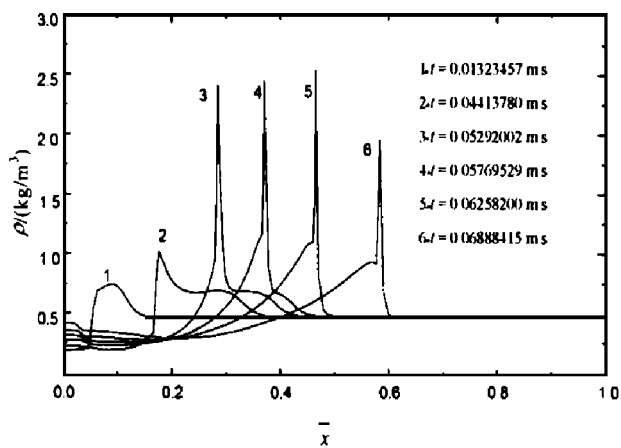


图 3 密度分布图

Fig. 3 Density-distance profile

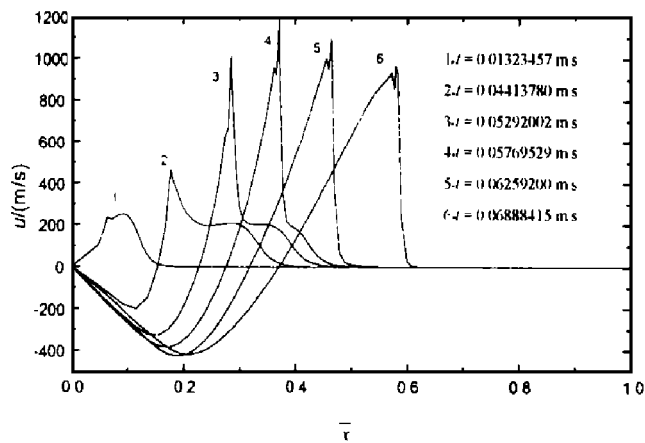


图 4 速度分布图

Fig. 4 Velocity-distance profile

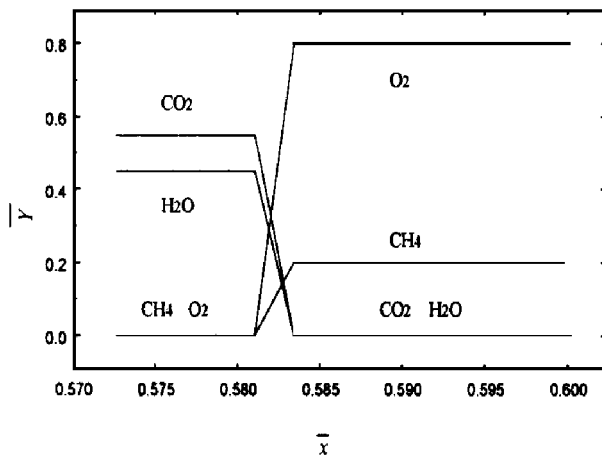


图 5 浓度分布图 ( $t = 68.884150\text{ns}$ )

Fig. 5 Composition-distance profile

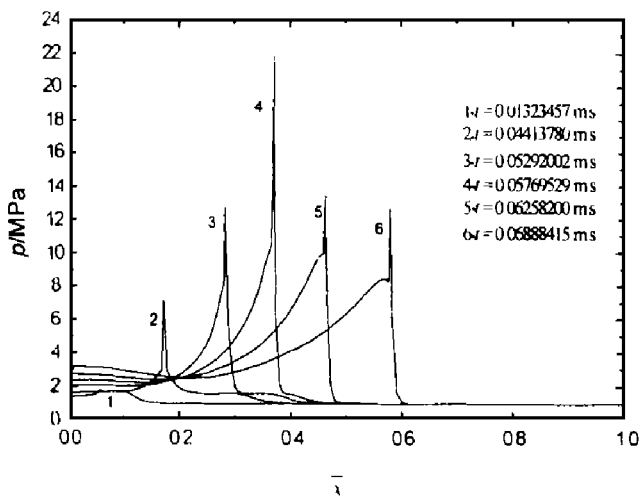


图 6 压力分布图

Fig. 6 Pressure-distance profile

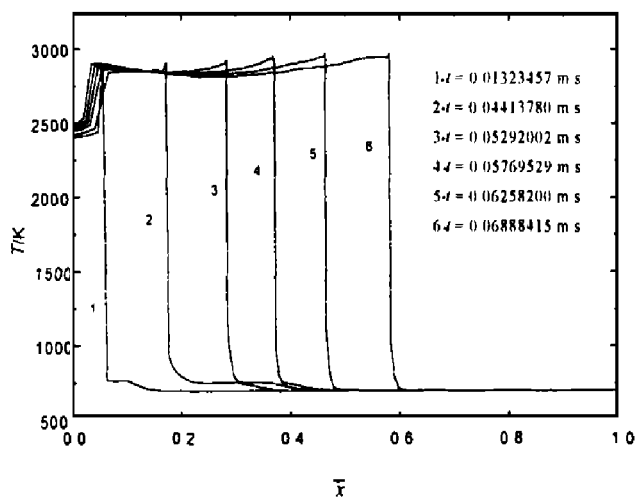


图 7 温度分布图

Fig. 7 Temperature-distance profile

图5为  $t = 68\ 88415\text{ns}$ 时刻气体各组分质量百分比浓度的分布图,结合图6的6时刻的压力分布和图7的6时刻的温度分布可以看出爆震波的结构。由图可以看出,随着未燃气体混合物的燃尽,气体的温度逐渐升高,压力也逐渐升高,在燃烧带末尾,温度达到最大,同时,压力也达到最大,然后,温度基本维持不变,而压力则逐渐变小。燃烧带很短,燃烧过程只在很短的时间内迅速完成,这是由于点火温度和未燃混合气初始温度较高,燃烧反应的速度常数很大,同时,前导压缩波的通过,使得感应期缩短。另外,经计算,1~3时刻的过程中,压力峰值位置始终处于燃烧带末尾位置,与温度的峰值位置相重合,具体为:在时间为  $13\ 23457\text{ns}$ 时,  $\bar{x}$ 为  $0\ 05731348$ 在时间为  $44\ 1378\text{ns}$ 时,  $\bar{x}$ 为  $0\ 1728233$ 在时间为  $52\ 92002\text{ns}$ 时,  $\bar{x}$ 为  $0\ 2831483$ 而在此过程中,爆燃向爆震发生了转变,这说明爆燃向爆震转变的方式为:爆震波的引发来自火焰带。

## 5 结 论

对  $\text{CH}_4\text{-O}_2$ 混合气在一维封闭空间中发生爆震波的化学反应流动规律建立数学描述,采用能产生稳式人工阻尼减少激波震荡的数值离散方法,成功地实现过程数值模拟,计算结果与实验现象相一致<sup>[13]</sup>。清楚地说明了可燃气中爆燃爆震转变由压缩波到激波再到稳态爆震的过程机制和由火焰带引发爆震波的过程行为。通过充分考虑稳定性的计算格式和编程模块化处理,使编制的计算程序能适应初始条件的广泛变化,收敛性好,通用性强,为DDT问题的深入研究打下基础。

## 参 考 文 献

- 1 前泽正礼. 化学安全工学概论. 东京: 共立出版株式会社, 1988 10~ 80
- 2 梁宁元, 邓煦帆. 粉尘爆炸理论研究现状. 见: 第一届粉尘爆炸与防护学术讨论会论文. 沈阳: 东北工学院, 1986
- 3 Eckhoff R K. A ssuming Ignitability and Explosibility of Dust Clouds in Industry by Laboratory Tests In Shenyang International Symposium on Dust Explosions Shenyang Northeast University of Technology, 1987 216~ 270
- 4 Hasson A, Arinor M, Burcat A. Transition from Deflagration to Detonation, Spark Ignition and Detonation Characteristics of  $\text{C}_2\text{H}_4\text{-O}_2$  Mixtures in a Tube Comb & Flame, 1983 49(1-3): 13~ 26
- 5 Smirnov N N, Tyurnikov M V. Experimental Investigation of Deflagration to Detonation transition in Hydrocarbon-Air Gaseous Mixtures Comb & Flame, 1995 100(4): 661~ 668
- 6 漳田谦一, 新冈 嵩.  $\text{CH}_4/\text{H}_2$ および  $\text{CH}_4/\text{C}_4\text{H}_{10}$ 混合燃料のデトネーション. 第30回燃烧シンポジウム前刷集. 名古屋: 日本燃烧学会, 1992 244~ 246
- 7 渡边真次, 铃木 茂, 大八木重治, 等. 粉尘层にちるデトネーション波の开始过程. 第32回燃烧シンポジウム讲演论文集. 仙台: 日本燃烧学会, 1994 403~ 405
- 8 Weber H J, Mack A, Roth P. Combustion and Pressure Wave Interaction in Enclosed Mixtures Initiated by Temperature Nonuniformities Comb & Flame 1994 97(2): 281~ 295
- 9 木村一雄, 藤原俊隆. 素反应モデルによる2次元デトネーションの数値解析. 第32回燃烧シンポジウム讲演论文集. 仙台: 日本燃烧学会, 1994 409~ 411
- 10 冬头孝之, 林 光一, 藤原俊隆. 固一气二相デトネーションの数値解析. 第32回燃烧シンポジウム讲演论文集. 仙台: 日本燃烧学会, 1994 406~ 408

- 11 刘育魁. 可燃气体的燃烧与爆震. 力学进展, 1985 15(3): 347~ 354
- 12 Smirnov N N, Panfilov I I Deflagration to Detonation Transition in Combustible Gas Mixtures Comb & Flame 1995 101(1~ 2): 91~ 100
- 13 胡 栋, 龙属川, 吴传谦, 等. 可燃性气体爆炸极限和爆燃转变成爆轰的研究. 爆炸与冲击, 1989 9(3): 266 ~ 275

## NUMERICAL SIMULATION OF DEFLAGRATION TO DETONATION TRANSITION (DDT) OF CH<sub>4</sub>-O<sub>2</sub> GAS MIXTURE

Gao Taiyin, Huang Juntao, Li Yuanming, Gao Yue, Xin Yibing

(Northeastern University, Shenyang, 110006)

**ABSTRACT** Numerical simulation of deflagration to detonation transition (DDT) of CH<sub>4</sub>-O<sub>2</sub> gas mixture is successfully accomplished, the generation mechanism of gas DDT phenomenon from compression wave to shock wave to stable detonation and detonation behavior caused by flame zone are clearly interpreted by modeling DDT phenomenon of combustible gas mixture in one dimensional system of equations with two-step reaction and in Lax-Wendroff and McCormic gas dynamic differential schemes as well as Adams chemical differential schemes in Lagrangian coordinates

**KEY WORDS** gas explosion, deflagration to detonation transition (DDT), numerical simulation