
氢氧燃烧微观过程的 DSMC 模拟研究

杨超, 孙泉华

中国科学院力学研究所高温气体动力学国家重点实验室, 北京海淀区 100190

燃烧问题一直都是流体力学和计算化学的研究热点, 已有的研究大多着眼于宏观尺度, 本文采用 DSMC 方法从微观上研究了氢氧混合物的自燃过程。研究发现, 燃烧的微观行为与空间尺度密切相关, 空间内分子数的多少直接影响化学反应发生的概率, 统计上也对点火延时有显著影响。通过控制 DSMC 微观模拟的统计误差, 初步模拟了不同初始压力、温度、稀释度下的氢氧点火过程, 解释了氢原子产生和消耗机理对点火延迟时间的影响。计算结果显示, 在较低温度下氢原子的消耗机制严重制约着燃烧的反应速度, 特别是点火延时依赖于分子的微观局部行为, 揭示了采用各向同性假设的 CFD 模拟的不足。