文章编号：1000-5773(2013)05-0719-06

H_2-O_2/Air 直接起爆形成爆轰临界能量的预测模型*

张　博[1,2]，白春华[2]

（1.华东理工大学资源与环境工程学院，上海　200237；
2.北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室，北京　100081）

摘要：基于活塞做功模型，利用 H_2-O_2/Air 混合物爆轰临界管径和胞格尺寸，对直接起爆的临界能量进行预测，得出的预测结果和实验值吻合较好，可有效地预测 H_2-O_2/Air 混合物的临界起爆能量。基于预测模型得出在相同状态下，H_2-Air 混合物的临界起爆能量显著大于 H_2-O_2 混合物。进一步开展了 ZND 诱导区长度的研究，计算结果清晰地表明：在相同条件下，H_2-Air 混合物的诱导区长度明显大于 H_2-O_2 混合物，由于临界起爆能量与诱导区的长度通常为三次方的关系，因此导致前者的临界起爆能量大于后者。此结论与活塞做功模型得出的两者临界起爆能量的规律相符。

关键词：爆轰；直接起爆；临界能量；预测模型
中图分类号：O381　　**文献标识码**：A

1　引　言

工业生产的不断发展导致对燃料的需求日益增加，由于矿物燃料的不可再生性和对环境的污染性，因此，国内外开展了大量清洁能源的研究。H_2 由于具有燃料特性优良、燃烧清洁等优点而被广泛应用，并将成为工业生产中一种主要的能源[1]。氢技术应用的成功与否主要取决于氢使用的安全性，因而需要对氢燃料的爆轰特性进行研究[2]。

爆轰是一种激波和化学反应耦合、能够自持传播并具有强间断性质的物理现象，也是一个伴有大量能量释放的化学反应传输过程。如果起爆源在瞬间释放出的能量足够大，则可形成强爆炸波并作用于混合气体而直接形成爆轰，其危害远大于燃烧转爆轰（DDT）[3-4]。虽然已有学者通过实验测定了 H_2-O_2/Air混合物在一些初始条件下的临界起爆能量，但与爆轰胞格尺寸的数据相比，则明显偏少；另一方面，到目前为止，对于导致 H_2-O_2 和 H_2-Air 混合物直接起爆临界能量较大差异的化学动力学机理还没有得到解决。

本研究利用 H_2-O_2/Air 混合物爆轰胞格和临界管径，基于活塞做功模型，预测直接起爆的临界能量，并与实验值进行比较，对模型的合理性进行验证。在此基础上研究 H_2-O_2 和 H_2-Air 混合物临界起爆能量的规律，从化学动力学机理分析导致两者临界起爆能量差异的原因。从而为有效地控制危险、避免或减小 H_2 混合物的爆轰危害提供依据。

2　临界起爆能量预测模型

图 1 是活塞做功模型示意图。假设在管道中，平面爆轰波以定常速度（U_{CJ}）运动，并最终传播至无

* **收稿日期**：2011-09-05；**修回日期**：2013-01-07
基金项目：中国博士后科学基金(2012M520852)；中央高校基本科研业务费资助项目(222201314030)
作者简介：张　博(1983—)，男，博士，讲师，主要从事燃烧与爆轰的研究. E-mail：bzhang@ecust.edu.cn

约束空间，平面爆轰最终发展为球形爆轰。假定在无约束空间中球形爆轰得以维持所需的能量等于爆轰波在管道中运动（可视为活塞运动）一段时间（t^*）所做的功，则所需的能量为

$$E_c = \int_0^{t^*} p_{CJ} S(t) u_{CJ} \mathrm{d}t \tag{1}$$

式中：p_{CJ}、u_{CJ} 分别表示爆轰 CJ 状态的压力和爆轰产物的 CJ 速度；t^* 表示稀疏波到达管轴的时间，即 $t^* = D_c/2c_{CJ}$，c_{CJ} 是爆轰产物的声速，D_c 是管道直径；$S(t)$ 为爆轰波衰减至 CJ 状态时的管道断面面积

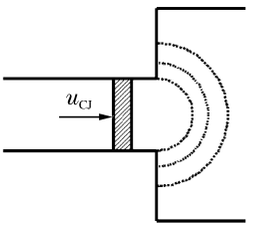


图 1 活塞做功模型示意图

Fig. 1 Piston model sketch

$$S(t) = \pi(D_c/2)^2 \tag{2}$$

将(2)式代入(1)式，通过积分可得出爆轰波由管道传播至自由场过程中，成功形成球面爆轰所需要的临界能量为

$$E_c = p_{CJ} u_{CJ} \pi D_c^3 / 8 c_{CJ} \tag{3}$$

(3)式与 Desbordes[5] 和 Sochet 等[6] 得出的推导公式一致。由(3)式可知，通过以上模型得出的临界起爆能量依赖于临界管径。临界管径的数据一方面来自 CALTECH 爆轰数据库[7]，另一方面，根据研究[8-9]表明，临界管径与胞格尺寸存在定量的线性关系，因此，可由其爆轰胞格尺寸间接得出临界管径，从而计算出临界起爆能量。

3 实验装置

为了验证以上临界起爆能量的预测模型是否正确和合理，需与实验值进行对比。H_2-O_2/Air 混合物直接起爆的临界起爆能量部分来自于 CALTECH 的爆轰数据库[5]，对于数据库中缺失的数据（如理论配比的 H_2-O_2 在不同压力时的临界能量）则通过本实验测量得到。

直接起爆实验在直径为 203.2 mm、壁厚为 50.8 mm 的高压球形容器中进行，其实验装置可参考文献[10]。在容器壁上安装 PCB 压力传感器，用于测定爆炸波到达壁面的时间和压力，通过时间的长短和爆炸压力的大小来判断是否成功形成爆轰，并通过容器底部的冲击波探针得到爆炸波到达容器底部的时间，若该时间与传感器得到时间一致，则判定为形成球面爆轰。点火系统主要包括高压电源、电容、间隙开关、触发开关（TM-11A）、电流转化系统和电火花点火装置。电路中的电流信号通过电流转换器转化为示波器中的电压信号，通过对信号的分析得出电火花的放电能量。在电极的末端是间隙为 3.5 mm的火花塞，电路触发以后通过火花塞产生放电能量，放电能量的大小通过控制放电电压的高低和改变电容的大小来实现。直接起爆的临界起爆能量的测量可参考文献[10]。

4 实验结果与讨论

4.1 爆轰临界管径与胞格尺寸

由于临界起爆能量的预测模型依赖于爆轰临界管径，而临界管径与胞格尺寸存在定量的线性关系，因此，首先通过 H_2-O_2/Air 混合气体的临界管径与胞格尺寸的数据，确定两者之间的参量关系，再将临界管径作为中间参数，建立临界起爆能量与胞格的关系。

对于 H_2-O_2/Air 混合气体，爆轰临界管径与胞格尺寸之间的关系分别如图 2 和图 3 所示。其中，图 2是在常压下，H_2-Air 混合物在不同化学当量比时的爆轰胞格尺寸（λ）和临界管径（D_c）的对比。其中胞格尺寸的数据取自于 Guirao 等[11] 和 Tieszen 等[12] 的实验测量结果，临界管径取自于 Guirao[9] 等的数据。通过对比发现，H_2-Air 混合物爆轰临界管径的实验数据与曲线 $D_c \approx 13\lambda$ 基本吻合。

图 3 是理论配比的 H_2-O_2 混合物在不同初始压力下的爆轰胞格尺寸，其中的胞格尺寸取自于 Denisov等[13] 和 Manzhalei 等[14] 的数据，并与 Lee 等[15] 的爆轰临界管径拟合曲线进行对比。通过两者的对比表明，$D_c \approx 13\lambda$ 曲线与 Lee 等得出的拟合曲线基本吻合。

由以上分析可知，H_2-O_2/Air 混合气体的爆轰临界管径与胞格尺寸之间的关系为 $D_c \approx 13\lambda$。因此，如已知该物质的胞格尺寸，基于活塞做功模型可间接计算出临界起爆能量。

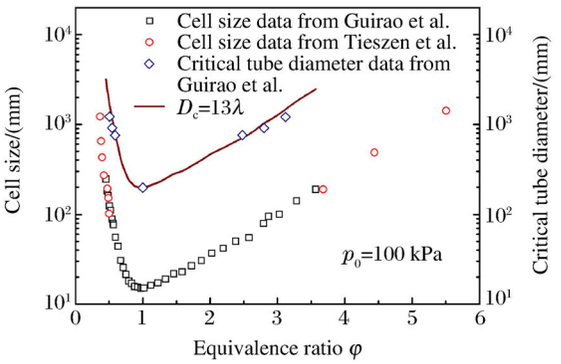


图 2 H_2-Air 不同当量比时的胞格尺寸和临界管径

Fig. 2 Equivalence ratio as a function of cell size and critical tube diameter in H_2-Air mixture

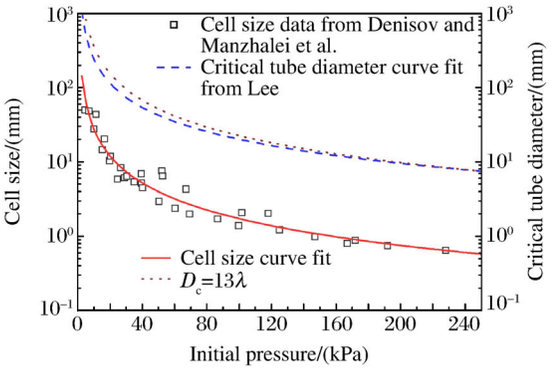


图 3 理论配比的 H_2-O_2 不同初始压力下的胞格尺寸和临界管径

Fig. 3 Initial pressure as a function of cell size and critical tube diameter in stoichiometric H_2-O_2 mixture

4.2 临界起爆能量的预测值与实验值

通过计算得出的 H_2-O_2/Air 两种混合气体在不同条件下的爆轰参数以及得到的直接起爆的临界能量见表 1。

表 1 计算 H_2-O_2/Air 两种混合气体临界起爆能量的参数值(p_0=100 kPa)

Table 1 Parameters of calculating the critical energy for H_2-O_2/Air mixtures(p_0=100 kPa)

φ	Mixtures	u_{CJ}/(km/s)	c_{CJ}/(km/s)	p_{CJ}/(kPa)	D_c/(mm)	E_c/(kJ)
0.6	H_2-O_2	2.137 9	1.155 3	2 780	28.0	0.020 4
	H_2-Air	1.709 5	0.973 0	1 300	720.2	144.316 3
1.0	H_2-O_2	2.376 3	1.283 5	3 380	22.5	0.012 8
	H_2-Air	1.971 4	1.092 2	1 580	196.3	3.777 1
1.6	H_2-O_2	2.604 1	1.410 0	3 980	37.0	0.067 0
	H_2-Air	2.101 8	1.179 8	1 530	297.7	12.385 2
2.0	H_2-O_2	2.681 5	1.459 2	4 170	48.0	0.151 7
	H_2-Air	2.146 5	1.215 3	1 450	450.0	39.748 2

由表 1 可知，H_2-O_2 和 H_2-Air 两种混合气体在相同状态(相同初始压力和当量比)下，H_2-O_2 混合气体的爆轰速度、压力及爆轰产物的声速均大于 H_2-Air 混合物，表明 H_2-O_2 混合气体的爆轰敏感性大于 H_2-Air 混合物，因而导致爆轰临界管径和临界起爆能量远小于后者。基于预测模型，计算得出了 H_2-Air/O_2 混合物的临界起爆能量，并与实验值进行对比，结果如图 4～图 6 所示。

图 4 是在常压下，H_2-Air 混合物在不同化学当量比时的临界起爆能量的实验值和预测曲线的对比。图 4 表明，基于预测模型得出的 H_2-Air 混合物的临界起爆能量曲线与实验值相符。

图 5 和图 6 分别是 H_2-O_2 混合物在各初始状态下，直接起爆临界能量的预测曲线与实验值的对

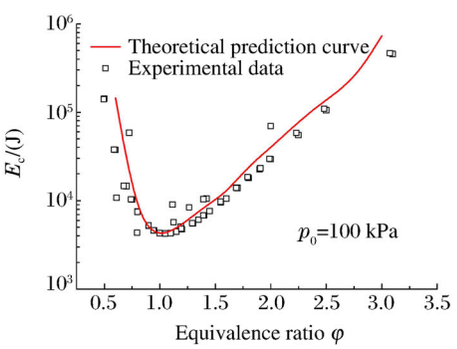


图 4 H_2-Air 不同当量比时的临界起爆能量实验值和预测曲线

Fig. 4 Theoretical predicted critical energy curve and experimentally measured data for H_2-Air mixture at different equivalence ratio

比。其中，图 5 是理论配比 H_2-O_2 混合物在不同初始压力时，临界起爆能量理论值与实验值的对比。实验中，通过改变电容大小或者电压的高低来调节电火花的初始放电能量，逐渐改变放电能量的大小，确定物质在每个特定的初始条件下能引起直接起爆的临界起爆能，并且在临界点附近对于成功起爆和不成功起爆都重复测量 3 次，故临界起爆能量介于引起爆轰的起爆能量最小值与引起爆燃的起爆能量最大值之间。由图 5 可知，本研究所测得的临界起爆能量与 Zitoun 等[16]的数据的趋势是一致的，说明两者的吻合性较好。通过图 6 中 H_2-O_2 混合物在不同化学当量比时，临界起爆能量计算数据与实验值的比较表明，理论预测曲线与实验值基本符合。

由图 4～图 6 中的对比表明：通过本研究建立的活塞做功模型，得出的 H_2-O_2/Air 混合气体直接起爆临界能量的理论值与实验值基本吻合，验证了预测模型的正确性和合理性。

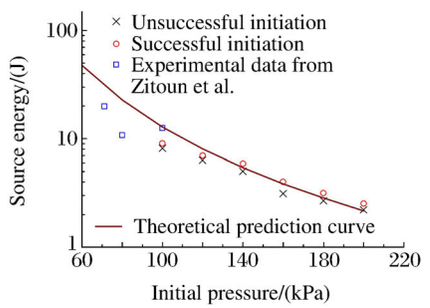


图 5 理论配比 H_2-O_2 不同初始压力时临界起爆能量的实验值和预测曲线

Fig. 5 Theoretical predicted critical energy curve and experimentally measured data for stoichiometric H_2-O_2 mixture under different initial pressure

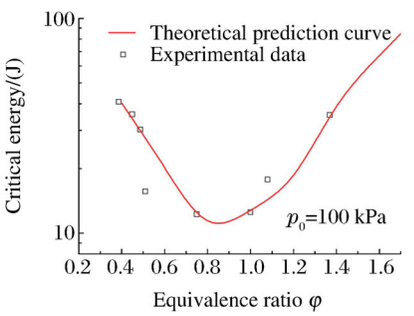


图 6 H_2-O_2 不同当量比时临界起爆能量的实验值和预测曲线

Fig. 6 Theoretical predicted critical energy curve and experimentally measured data for H_2-O_2 mixture at different equivalence ratio

4.3 H_2-O_2 和 H_2-Air 混合物临界起爆能量分析

由于活塞做功模型对 H_2-O_2/Air 混合物临界起爆能量较准确的预测，因此基于预测模型可对两种混合物在相同初始压力和当量比时的临界起爆能量进行对比，结果如图 7 和图 8 所示。

由图 7 和图 8 可知，在相同的初始条件下，H_2-Air 混合物的临界起爆能量显著大于 H_2-O_2 混合物。Zel'dovich[17]通过对爆轰波的研究曾经提出，理想的爆轰波具有稳定的一维 ZND 结构，爆轰波能自持传播的必要条件为：当爆炸波衰减到 CJ 状态时，爆炸波的半径至少约为诱导区的长度；并提出临界起爆能与 ZND 诱导区长度的三次方成正比关系。因此，H_2-O_2 和 H_2-Air 混合物临界起爆能量的差异可从其诱导区长度进行分析。利用 Chemkin 程序[18]和 Li 等[19]化学动力反应机制可得出 ZND 诱导区长度。其中 Li 等的化学动力反应机制已在 Zhang 等[20]爆轰敏感度的研究中得到了验证。

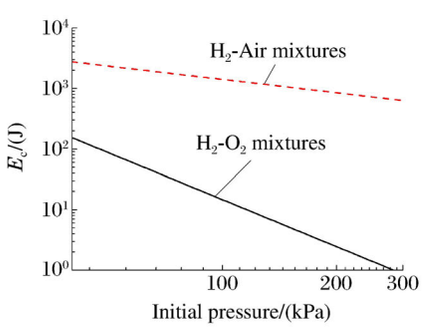


图 7 理论配比 H_2-O_2/Air 混合物在不同初始压力下临界起爆能量的预测曲线

Fig. 7 Theoretical prediction curves of critical energy for stoichiometric H_2-O_2/Air mixtures at different initial pressure

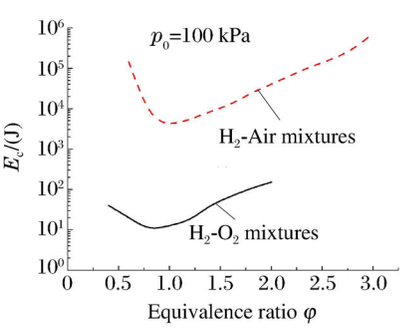


图 8 H_2-O_2/Air 混合物在不同化学当量比时临界起爆能量的预测曲线

Fig. 8 Theoretical prediction curves of critical energy for H_2-O_2/Air mixtures at different equivalence ratio

通过计算得到的 H_2-O_2 和 H_2-Air 混合物在各初始压力和化学当量比时的 ZND 诱导区长度如图 9 和图 10 所示。通过对两种混合物诱导区长度的对比表明，在相同状态下，H_2-Air 混合物的诱导区长度明显大于 H_2-O_2 混合物。由于临界起爆能量与诱导区的长度通常为三次方的关系，因此，通过预混气体诱导区长度的判断，可得出两者临界起爆能量差异的原因。此结论与通过模型得出的两种混合气体临界能量差异的规律性相符，验证了模型的正确性。

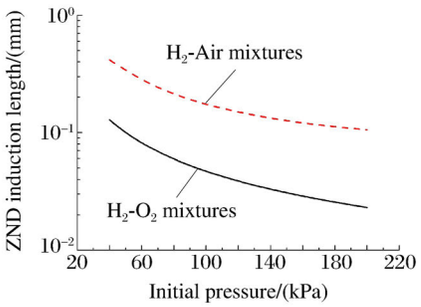


图 9　理论配比的 H_2-O_2 和 H_2-Air 混合物在不同初始压力下的诱导区长度

Fig. 9　Initial pressure as a function of ZND induction zone length in stoichiometric H_2-O_2 and H_2-Air mixtures

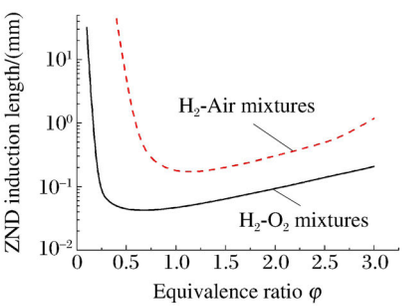


图 10　H_2-O_2 和 H_2-Air 混合物在不同化学当量比时的诱导区长度

Fig. 10　Equivalence ratio as a function of ZND induction zone length in H_2-O_2 and H_2-Air mixtures

5　结　论

基于活塞做功模型，利用爆轰临界管径与爆轰胞格，对 H_2-O_2 和 H_2-Air 混合物直接起爆的临界起爆能量进行了预测，并与实验值进行对比。进一步研究了 H_2-O_2 和 H_2-Air 混合物临界起爆能量的规律，分析导致两者临界起爆能量差异的原因，得出如下结论。

（1）模型的预测值与实验值基本吻合，验证了本研究所建立的模型有效预测 H_2-O_2/Air 混合物的临界起爆能量的正确性。

（2）在相同状态下，H_2-Air 混合物的诱导区长度明显大于 H_2-O_2 混合物，由于临界起爆能量与诱导区的长度通常为三次方关系，因此导致前者的临界起爆能量大于后者，此结论与活塞做功模型得出的临界起爆能量相符。

References:

[1] Sun B G, Zhao J H, Liu F S. Numerical simulation for laminar burning velocity of premixed hydrogen-air mixture [J]. Journal of Combustion Science and Technology, 2010, 16(5): 430-435. (in Chinese)
孙柏刚，赵建辉，刘福水. 预混氢气层流燃烧速度的数值模拟 [J]. 燃烧科学与技术，2010，16(5)：430-435.

[2] Matsui H. Characteristics of hydrogen explosions [J]. China Occupational Safety and Health Management System Certification, 2005, 1(6): 3-9. (in Chinese)
Matsui H. 氢气爆炸特性研究 [J]. 中国安全生产科学技术，2005，1(6)：3-9.

[3] Lee J H S. Dynamic parameters of gaseous detonations [J]. Annual Rev Fluid Mech, 1984, 16: 311-336.

[4] Lee J H S. Initiation of gaseous detonation [J]. Annual Rev Phys Chem, 1977, 28: 75-104.

[5] Desbordes D. Transmission of overdriven plane detonations: Critical diameter as a function of cell regularity and size [J]. Prog Astron Aeron, 1988, 114: 170-185.

[6] Sochet I, Lamy T, Brossard J, et al. Critical tube diameter for detonation transmission and critical initiation energy of spherical detonation [J]. Shock Waves, 1999, 9: 113-123.

[7] Kaneshige M, Shepherd J E. Detonation database, FM97-8 [R]. Pasadena, CA: California Institute of Technology, 1997.

[8] Mitrofanov V V, Soloukhin R I. The diffraction of multifront detonation waves [J]. Soviet Phys-Dokl, 1965, 9(12): 1055-1058.

[9] Edwards D H, Hooper G, Morgan J M. An experimental investigation of the direct initiation of spherical detonations [J]. Acta Astron, 1976, 3(1/2): 117-130.

[10] Zhang B, Lee J H S, Bai C H. Critical energy for direct initiation of C_2H_4-O_2 mixture [J]. Explosion and Shock Waves, 2012, 32(2): 113-120. (in Chinese)
张 博, Lee J H S, 白春华. CH_4-O_2 混合气体直接起爆的临界能量 [J]. 爆炸与冲击, 2012, 32(2): 113-120.
[11] Guirao C M, Knystautas R, Lee J H S, et al. Hydrogen-air detonations [C]//19th Symposium (International) on Combustion. Pittsburgh: The Combustion Institute, 1982: 583-590.
[12] Tieszen S R, Sherman M P, Benedick W B, et al. Detonation cell size measurements in hydrogen-air-steam mixtures [J]. Prog Astron Aeron, 1986, 106: 205-219.
[13] Denisov Y N, Troshin Y K. Structure of gaseous detonation in tubes [J]. Soviet Phys-Tech Phys, 1960, 5(4): 419-431.
[14] Manzhalei V I, Mitrofanov V V, Subbotin VA. Measurement of inhomogeneities of a detonation front in gas mixtures at elevated pressures [J]. Combust, Explo Shock Waves, 1974, 10(1): 89-95.
[15] Matsui H, Lee J H. On the measure of the relative detonation hazards of gaseous fuel-oxygen and air mixtures [J]. Symposium (International) on Combustion, 1979, 17(1): 1269-1280.
[16] Zitoun R, Desbordes D, Guerraud C, et al. Direct initiation of detonation in cryogenic gaseous H_2-O_2 mixtures [J]. Shock Waves, 1995, 4(6): 331-337.
[17] Zel'dovich Y B, Kogarko S M, Simonov N N. An experimental investigation of spherical detonation in gases [J]. Sov Phys-Tech Phys, 1957, 1: 1689-1713.
[18] Kee R J, Rupley F M, Miller J A. Chemkin-II: A Fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical kinetics, SAND89-8009 [R]. Livermore, CA, USA: Sandia National Labs, 1989.
[19] Li J, Zhao Z W, Kazakov A, et al. An updated comprehensive kinetic model of hydrogen combustion [J]. Int J Chem Kinet, 2004, 36: 566-575.
[20] Zhang B, Ng H D, Mevel R, et al. Critical energy for direct initiation of spherical detonations in $H_2/N_2O/Ar$ mixtures [J]. Int J Hydrogen Energ, 2011, 36(9): 5707-5716.

Theoretical Prediction Model of Critical Energy for Direct Detonation Initiation in H_2-O_2/Air Mixtures

ZHANG Bo[1,2], BAI Chun-Hua[2]

(1. *East China University of Science and Technology, School of Resources and Environmental Engineering, Shanghai* 200237, *China*;
2. *State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing* 100081, *China*)

Abstract: Based on the critical tube diameter and detonation cell size data in H_2-O_2/Air mixtures, the piston work done model was used to predict their critical energies of direct initiation. The good agreement is found by comparing the theoretical predicted critical energies with those measured in the experiment. Thus, the theoretical model is proved to be able to predict the critical energy of H_2-O_2/Air mixtures within satisfactory. From the theoretical prediction model, it is obviously shown that the critical energy for H_2-Air is significantly bigger than H_2-O_2 mixture when at the same initial conditions. The ZND induction zone length was further investigated to study the large critical energy discrepancy behavior between those mixtures, the results clearly indicated that the induction zone length for H_2-Air is much longer than that of H_2-O_2 mixture at the same initial condition, and it is cube relationship between critical energy and induction zone length, which results in the bigger critical energy of the H_2-Air mixture. This result is in agreement with the critical energy predicted from theoretical model.

Key words: detonation; direct initiation; critical energy; prediction model