

文章编号:1006-9941(2020)08-0779-07

# 甲烷爆炸初期关键自由基化学发光与爆炸压力的耦合关系分析

李孝斌<sup>1</sup>,崔沂巍<sup>2</sup>,张瑞杰<sup>2,3</sup>,黄宇翔<sup>2</sup>

(1. 中国人民警察大学消防工程系, 河北 廊坊 065000; 2. 中国人民警察大学研究生部, 河北 廊坊 065000; 3. 山西省安康市消防支队, 陕西 安康 725000)

**摘要:** 为建立甲烷爆炸初期微观化学反应机理与宏观爆炸压力之间的联系,利用20L标准球型爆炸测试装置和光栅光谱仪采集了甲烷爆炸初期爆炸压力数据,采用光谱分析和数据同步分析方法研究了CO<sub>2</sub>、C<sub>2</sub>、CHO·、OH·、C<sub>3</sub>等关键激发态自由基及分子的光谱强度和爆炸压力的耦合变化关系。研究表明,CO<sub>2</sub>在爆炸升压阶段大量生成;C<sub>2</sub>、CHO·在爆炸感应期内大量产生,在爆炸升压阶段大量消耗;OH·含量在整个甲烷爆炸的过程中处于较高水平。微观角度CO<sub>2</sub>大量生成在宏观上部分表现为爆炸压力的迅速上升,其含量变化趋势与升压过程呈正相关关系;C<sub>2</sub>、CHO·迅速消耗在宏观上部分表现为爆炸压力的迅速上升,其含量变化趋势与升压过程呈负相关关系。在爆炸感应期减少C<sub>2</sub>、CHO·的生成,降低其含量;在整个甲烷爆炸的过程中抑制OH·产生,降低其含量;减少或抑制CO<sub>2</sub>的生成,可以减缓或抑制爆炸进程,有效减小甲烷爆炸的压力。

**关键词:** 甲烷爆炸;爆炸压力;自由基;光谱分析

中图分类号: TJ55; X932

文献标志码: A

DOI:10.11943/CJEM2019296

## 1 引言

甲烷氧化机理的研究是实现甲烷抑爆的基础。目前,对于甲烷爆炸的相关研究,宏观层面多采用实验、数值模拟或计算机模拟等方法,分析爆炸压力、升压速率、火焰传播速度等宏观参数<sup>[1-3]</sup>;微观层面多采用计算机模拟<sup>[4-5]</sup>或实验等方法<sup>[6]</sup>,分析甲烷爆炸过程中相关自由基的变化过程。

甲烷氧化机理的研究可分为详细机理研究和简化机理研究。详细机理几乎涵盖了甲烷氧化过程中所有组分及其基元反应,可适用于所有情况,目前,最受广大研究人员认可的是美国Lawrence Livermore国家实验室通过实验和理论分析给出的包括53种组分、325个反应的甲烷燃烧化学动力学的详细机理<sup>[7]</sup>。但详细机理对于分析某种特定工况或产物显得过于复杂,为了更好地理解甲烷氧化的过程,降低计算的难

度,一些简化机理<sup>[8-11]</sup>被陆续提出,例如Peter等<sup>[9]</sup>提出的包含14种组分、18个反应的简化机理。基于这些简化机理,研究人员对甲烷爆炸的多个方面进行了模拟研究<sup>[12-16]</sup>。如Lacaze等<sup>[12]</sup>模拟了湍流甲烷喷射的电火花点火过程;Bidi等<sup>[13]</sup>对管道中湍流甲烷火焰的燃烧进行了数值模拟分析;Wang等<sup>[14]</sup>对甲烷的再燃烧过程进行了模拟研究。近年来,甲烷氧化机理也被运用到抑爆剂抑爆效果的数值分析上<sup>[17-18]</sup>,如Fan等<sup>[18]</sup>综合运用实验和数值模拟方法对NaHCO<sub>3</sub>粉体抑制甲烷燃烧的机理进行了研究,发现火焰中H和OH自由基的质量分数下降至一个稳定值,层流火焰燃烧速率将显著降低。

氧化机理的研究使关键自由基在反应过程中发挥的作用受到关注。20世纪70年代,Gaydon<sup>[19]</sup>给出了各种不同自由基/分子的发射光谱的特征波长及谱带,使得利用火焰光谱辨识不同粒子成为可能,为使用光学方法研究自由基变化提供了理论基础。Higgins等<sup>[20]</sup>研究了层流预混火焰中CH·自由基的特征光谱强度的变化规律,分析了火焰拉伸、环境压力和NO<sub>x</sub>的产生量与CH·、OH·自由基的光谱强度之间的关系。李艳红等<sup>[21]</sup>提出了在反应的最初阶段,影响H·、

收稿日期:2019-11-22;修回日期:2020-02-24

网络出版日期:2020-06-03

基金项目:国家自然科学基金项目(51774296)

作者简介:李孝斌(1980-),男,博士,教授,主要从事气体爆炸及控制理论与技术的研究。e-mail:wjxy\_lxb@163.com

引用本文:李孝斌,崔沂巍,张瑞杰,等. 甲烷爆炸初期关键自由基化学发光与爆炸压力的耦合关系分析[J]. 含能材料,2020,28(8):779-785.

LI Xiao-bin, CUI Li-wei, ZHANG Rui-jie, et al. Analysis of Coupling Relationship Between Critical Free Radical and Explosion Pressure in the Initial Stage of Methane Explosion[J]. Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao), 2020, 28(8):779-785.

O·和OH·自由基浓度的关键反应步。He<sup>[22]</sup>通过分子模拟发现甲烷氧化过程中HCHO是最关键的中间产物,OH·是最重要的自由基。

综上所述,现有研究成果中,详细机理研究较为成熟,适用范围较广,简化机理对于具体情况的适用度好,计算简便。但是对于爆炸过程中自由基的变化与爆炸压力等宏观参数变化的联系尚不明确,缺乏相关实验验证。为此,本研究采用光谱分析和数据同步分析方法,分析通过甲烷爆炸实验采集到的甲烷爆炸过程中火焰发射光谱和爆炸压力,分析CO<sub>2</sub>、C<sub>2</sub>、CHO·、OH·、C<sub>3</sub>等关键自由基或分子与爆炸压力的变化,得出相关自由基含量与甲烷爆炸压力发展过程之间的耦合变化关系,为进一步研究微观抑爆机理与宏观抑爆效果之间的耦合作用关系打下基础,为有针对性地改进抑爆剂的抑爆效果提供参考。

## 2 试验系统

### 2.1 实验设备

实验系统示意图如图1所示,实验系统主要包括两大部分,第一部分用于甲烷爆炸压力的测试,主要由20 L球形爆炸装置、控制系统、配气系统、压力采集系统和点火系统。其中20 L球形装置根据国际标准ISO6184-1设计制造,材质为不锈钢,在甲烷爆炸过程中处于密闭状态,最高承受2.5 MPa。而对于不同气体配比下的爆炸压力数据由球内传感器采集,压力传感器为美国Dytran公司制造的压电式高灵敏传感器,灵敏度为22.2 mv/psi,动态响应频率为250 kHz,压力测试范围为0~1.7 MPa,采样频率为2000 Hz,可以实时将数据传输给计算机并记录。

第二部分用于光谱采集,光谱采集系统包括光栅

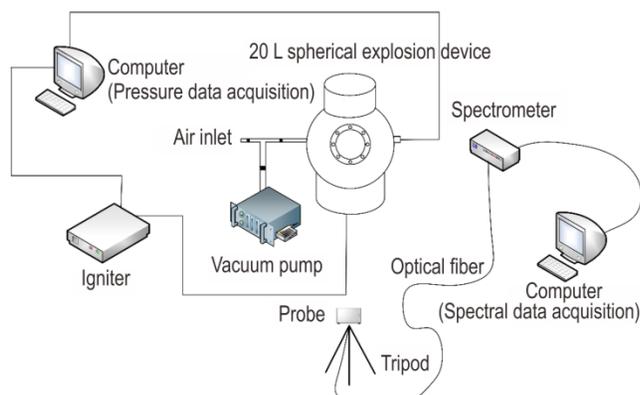


图1 实验设备示意图

Fig.1 Schematic diagram of the experimental set-up

光谱仪、光谱采集探头和配套的光谱数据采集软件,本实验使用光谱仪为英国产Newton Andor Shamrock 500i光栅光谱仪光栅,其光栅分辨率为0.3 nm,单次拍摄波长宽度为350 nm,可以实现对于同一种工况分别进行187~534 nm、520~874 nm、860~1210 nm三个波段拍摄,拍摄频率为1000 Hz。

### 2.2 试验方案

本实验采用分压法配气,在加入甲烷之前将装置内压力抽到-0.04 MPa,再将甲烷用气囊接在进气口放入爆炸装置内,使内部达到-0.03 MPa,由于爆炸装置为20 L,储气罐为6 L,将储气罐内1 MPa压力气体喷入腔室后爆炸腔内恰为常压状态。由于光谱仪单次拍摄波长范围有限,所以同一工况需分三个波段进行实验,每个波段均进行重复实验三次。共完成实验18组,其中10%的甲烷/空气预混气体爆炸实验9组,用于甲烷爆炸光谱和压力数据的采集;金属丝空放电点火9组,用于剔除点火丝火焰对光谱数据的影响。点火能均为1 J。

表1 实验方案

Table 1 Testing program

light source	wavelength /nm	volume fraction of methane/%
methane explosion	187-537	10
	537-887	
	887-1210	
wire ignition	187-537	0
	537-887	
	887-1210	

## 3 分析方法

### 3.1 光谱分析方法

采用光谱比较法<sup>[23]</sup>对光谱数据进行分析,对得到的原始光谱数据进行波峰筛选得到光谱峰值数据,然后扣除背景光和点火背景,通过光谱比较,将爆炸火焰发射光谱与谱图<sup>[24]</sup>中提供的各种不同自由基的特征发射光谱的波长进行对比,得到实验中爆炸火焰中存在的部分自由基或分子的发射光谱强度数据。自由基或分子特征光谱的光谱强度与自由基含量呈正相关关系,因此由光谱强度曲线即可以分析出自由基含量变化过程。

### 3.2 爆炸压力与光谱数据时间同步方法

图2为甲烷爆炸压力与光谱时间耦合关系,当甲

烷预混气体在遇到点火丝点火之后,并不是立即就发生爆炸,在爆炸之前会经历包括燃烧感应期和燃烧转为爆炸的响应时间<sup>[25]</sup>。本实验以甲烷燃烧感应期的开始时刻  $T_0$  为光谱与压力数据的同步时刻,对于光谱数据,当开始采集到光谱变化信号的时刻即为甲烷燃烧感应期的开始时刻  $T_0$ ,对于压力数据,压力曲线出现第一次上升的过程为储粉罐<sup>[26]</sup>空喷空气的过程,此套设备的储粉罐喷气动作时长为 40 ms,当喷气结束后,控制系统在接到压力信号后延迟 40 ms 后向点火系统发出点火指令,因此,甲烷燃烧感应期的开始时刻  $T_0$  应该是在压力曲线发生第一次上升后延迟 40 ms 的时刻。选取  $T_0$  时刻作为时间的零点,将压力曲线与不同自由基的光谱强度变化曲线放在同一坐标中,通过分析甲烷爆炸早期爆炸压力和不同自由基光谱强度在同一时间段的变化规律,就可以得到各个自由基与甲烷爆炸压力变化的关系,建立宏观爆炸压力与微观自由基变化之间的关系。

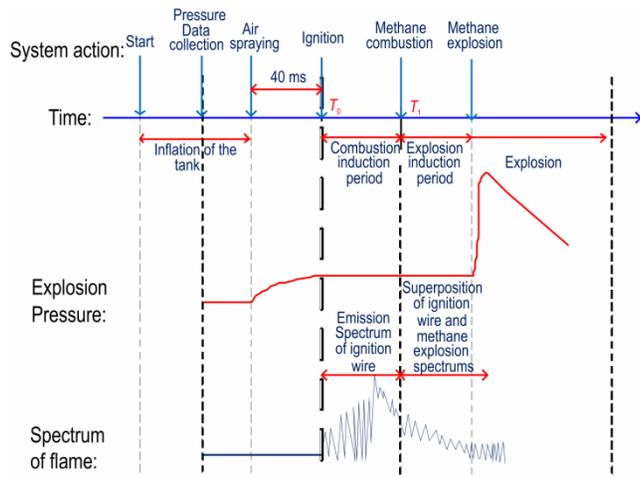


图2 甲烷爆炸压力与光谱时间分析耦合图

Fig.2 Coupling analysis diagram of methane explosion pressure and spectral time

### 3 自由基与爆炸压力的耦合关系分析

对于某一种粒子而言,受甲烷爆炸的不稳定性影响,并非其所有特征波长或特征谱带处均能探测到稳定的光谱信号。故选取每种粒子光谱信号较为稳定的特征波长处的光谱强度与爆炸压力变化进行耦合分析。通过多个特征波长的变化反映其含量的总体变化趋势。

#### 3.1 CO<sub>2</sub>光谱强度分析

图3为甲烷爆炸初期 CO<sub>2</sub>在 403.5 nm 和 452.7 nm

处的光谱强度与甲烷爆炸压力变化耦合关系。由图3可以看出,在甲烷爆炸感应期内,基本上探测不到 CO<sub>2</sub> 特征光谱信号;在爆炸感应期结束以后压力快速升高时,其特征光谱强度开始出现,并迅速升高;其持续时间与甲烷爆炸压力增大过程所用时间基本都为 10 ms;由此说明,CO<sub>2</sub>在爆炸升压阶段大量生成;CO<sub>2</sub>含量变化趋势与甲烷升压过程呈正相关关系。众所周知,CO<sub>2</sub>的生成是甲烷爆炸链式反应的作用结果。因此,甲烷爆炸压力增大阶段是 CO<sub>2</sub>大量生成的宏观表征。实验结果与基本理论一致,证明本研究方法和路线的正确性。同时可以得出,减少和抑制 CO<sub>2</sub>的生成,可以有效降低甲烷爆炸压力。

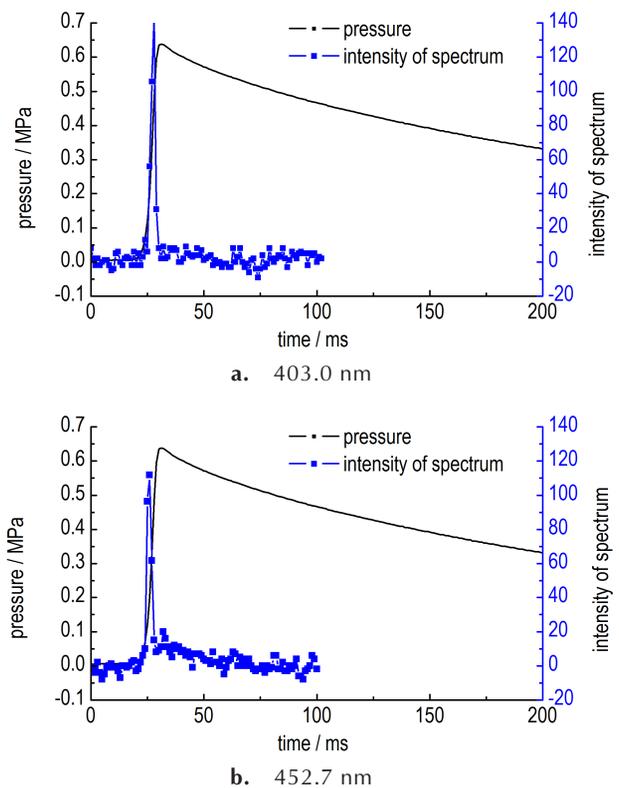


图3 CO<sub>2</sub>特征光谱强度与爆炸压力变化耦合关系图

Fig.3 Coupling relationship between spectral intensity of CO<sub>2</sub> and explosion pressure

#### 3.2 C<sub>2</sub>光谱强度分析

图4为甲烷爆炸初期, C<sub>2</sub>在 544.77, 554.07, 605.97, 667.59 nm 波长处的光谱强度与爆炸压力变化耦合关系。由图3可以看出,在爆炸感应期初期, C<sub>2</sub>含量即达到峰值;在甲烷爆炸的快速升压阶段, C<sub>2</sub>含量呈现出明显的达到峰值后即下降的趋势。由此说明, C<sub>2</sub>在爆炸感应期内大量产生,在爆炸升压阶段大量消耗;微观角度 C<sub>2</sub>迅速消耗,在宏观上部分表现为

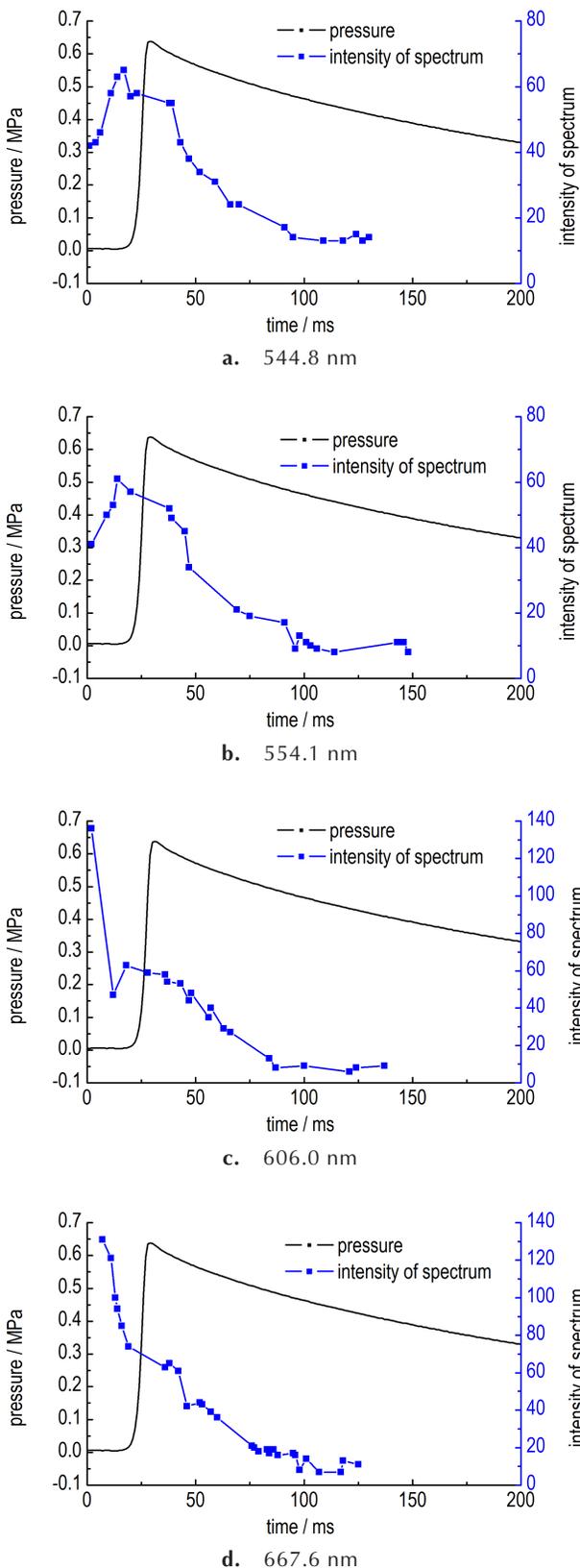


图4  $C_2$ 特征光谱强度与爆炸压力变化耦合关系

Fig.4 Coupling relationship between spectral intensity of  $C_2$  and explosion pressure

爆炸压力的迅速上升,其含量变化趋势与升压过程呈负相关关系。因此推测,在爆炸感应期减少 $C_2$ 的生成,降低其含量,可以减缓或抑制爆炸进程,有效减小甲烷爆炸的压力。

### 3.3 CHO光谱强度分析

图5为CHO·在329.8 nm和408.82 nm波长处的光谱强度与爆炸压力变化耦合关系。由图5可以看出,在爆炸反应过程中,反应初期的CHO·含量先是在较低水平波动,在20 ms时刻发生迅速上升,整个上升的时间持续约5 ms;这段时间内压力也快速上升到峰值。在甲烷爆炸的升压阶段,CHO·含量迅速降低。由此说明,CHO·在爆炸感应期内大量生成,在爆炸升压阶段大量消耗;微观角度CHO·迅速消耗在宏观上部分表现为爆炸压力的迅速上升,其含量变化趋势与升压过程呈负相关关系。因此推测,在爆炸感应期减少CHO·的生成,降低其含量,可以减缓或抑制爆炸进程,有效减小甲烷爆炸的压力。

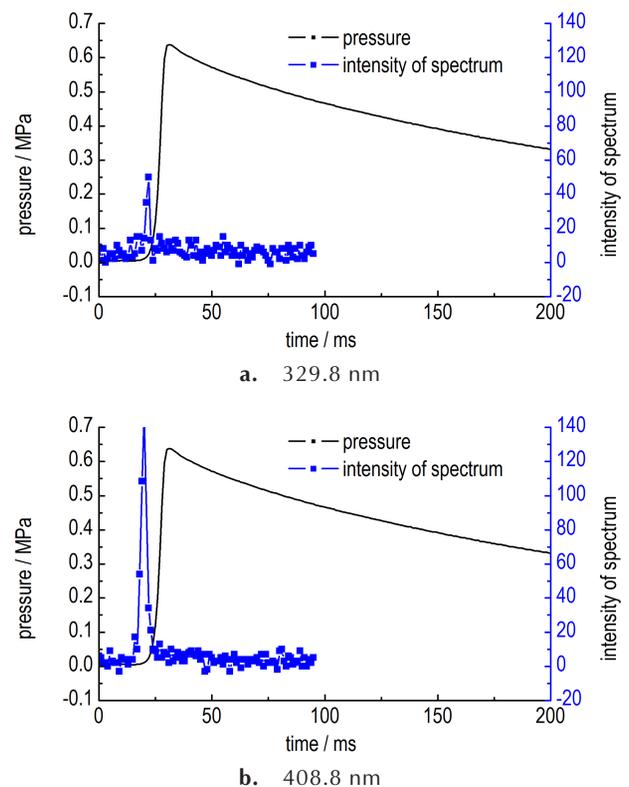


图5 CHO·特征光谱强度与爆炸压力变化耦合关系

Fig.5 Coupling relationship between spectral intensity of CHO and explosion pressure

### 3.4 OH光谱强度分析

图6为OH·在260.85, 282.90, 306.36, 827.83, 1014.3 nm和1027.3 nm波长处的光谱强度与爆炸压

力变化耦合关系。由图6可以看出,OH·含量在整个甲烷爆炸初期都处于一个相对稳定的水平上波动,没有明显的上升或下降趋势。由此说明,微观角度OH·含量的变化无法在宏观上通过甲烷爆炸压力变化趋势反映出来。

由于光谱仪得出的光谱强度是一个相对光谱强度,特征光谱强度相对稳定,只能得出自由基含量保持在一定水平,但无法得出自由基含量是在较高水平还

是在较低水平。结合前人的研究结果<sup>[21-22,27]</sup>,OH·作为关键自由基在整个甲烷爆炸的过程中发挥着重要的作用,因此推测,OH·含量处于较高水平;在整个甲烷爆炸的过程中抑制OH·产生,降低其含量,可以减缓或抑制爆炸进程,有效减小甲烷爆炸的压力;相同实验条件下,在加入有效抑爆剂后,在相同坐标系下,OH·含量在整个爆炸过程中仍处于相对稳定水平,但含量将低于本文中OH·含量。

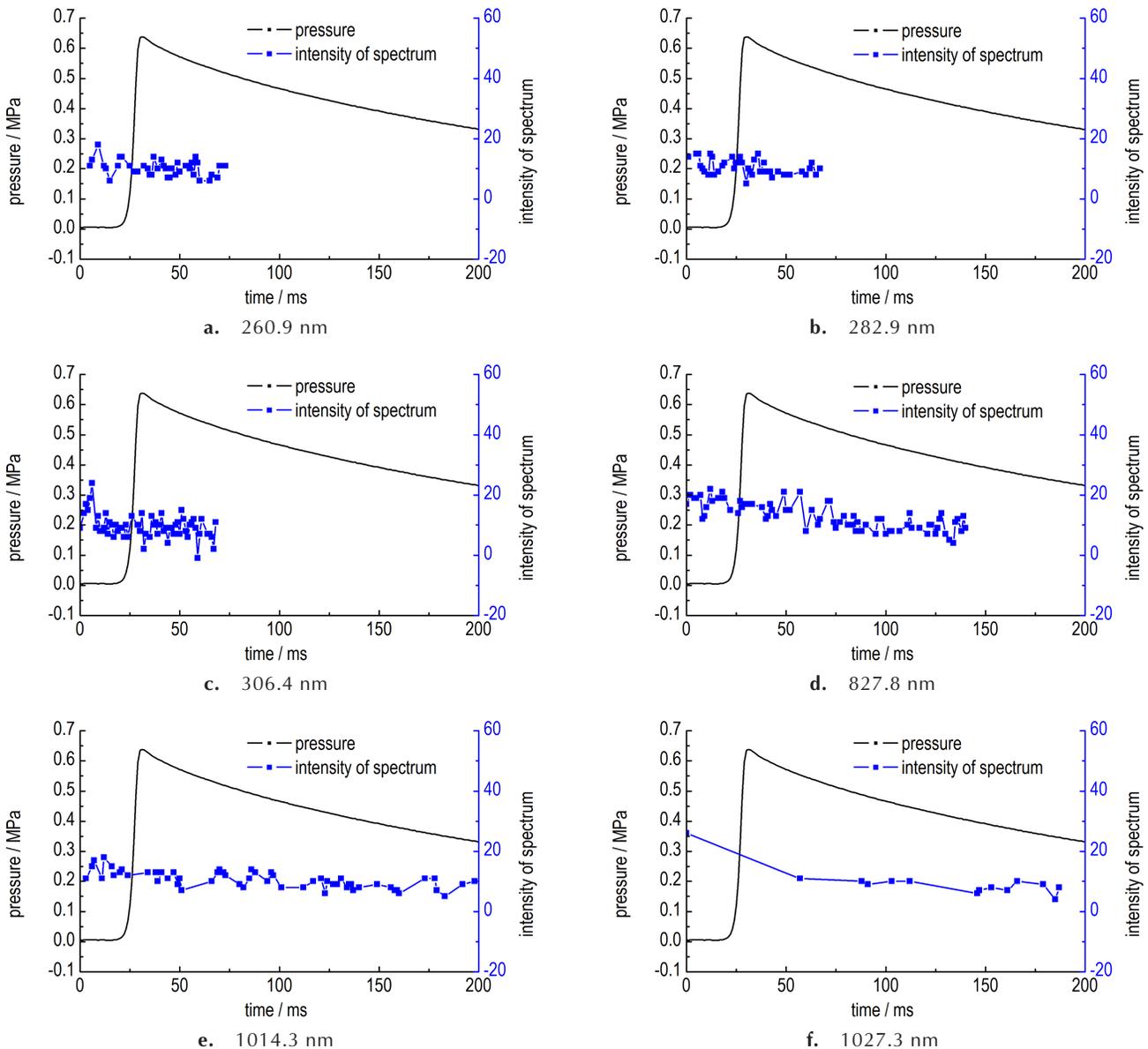


图6 OH·自由基特征光谱强度与甲烷爆炸压力耦合关系

Fig.6 Coupling relationship between spectral intensity of OH· radical and methane explosion pressure

### 3.5 C<sub>3</sub>光谱强度分析

图7为C<sub>3</sub>在396.69,402.27,404.98,407.24 nm波长处的光谱强度与爆炸压力变化耦合关系。

由图7可以看出,C<sub>3</sub>含量的变化趋势在整个甲烷爆

炸初期都大致处于一个相对稳定的水平上波动,没有明显的上升或下降趋势。由此说明,微观角度C<sub>3</sub>含量的变化无法在宏观上通过甲烷爆炸压力变化趋势反映出来。同时,无法得出C<sub>3</sub>含量是在较高水平还是在较低水平。

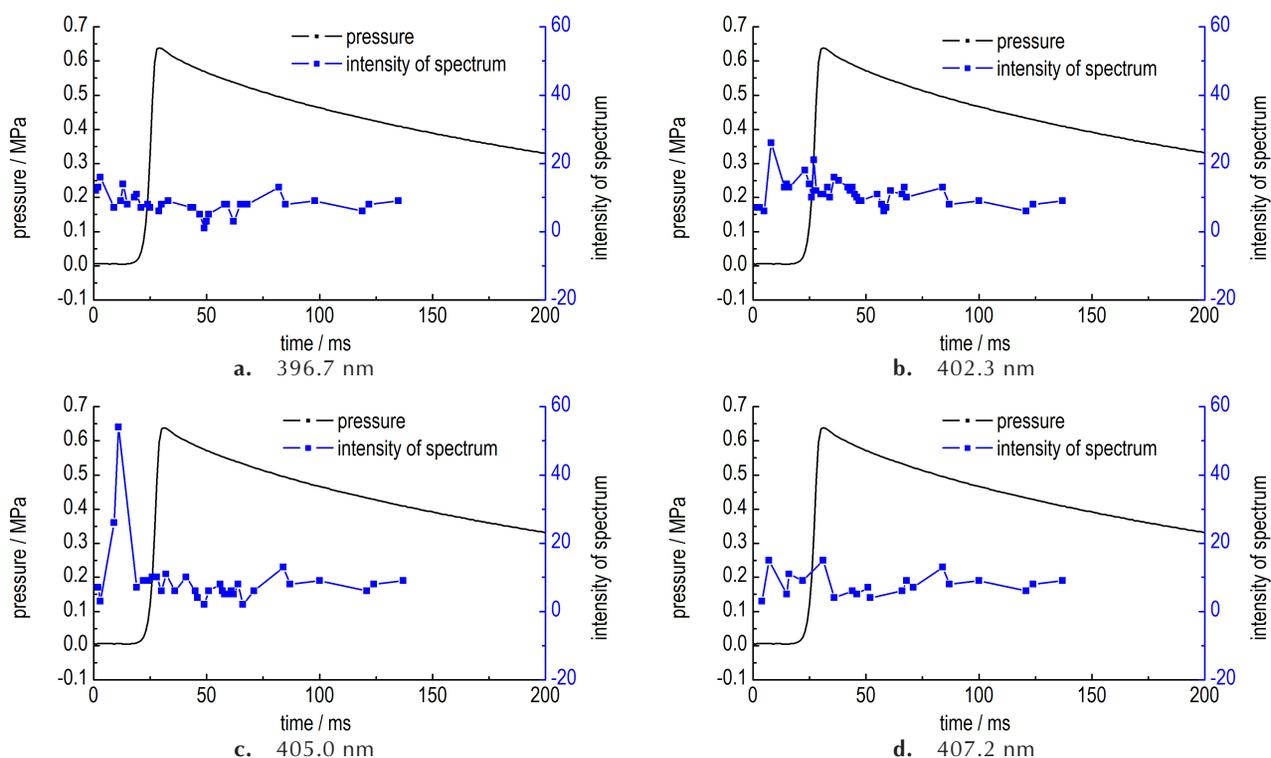


图7  $C_3$ 自由基特征光谱强度与爆炸压力变化耦合关系

Fig.7 Coupling relationship between spectral intensity of  $C_3$  radical and explosion pressure

## 4 结论

(1)  $CO_2$ 在爆炸升压阶段大量生成; $C_2$ 、 $CHO\cdot$ 在爆炸感应期内大量产生,在爆炸升压阶段大量消耗; $OH\cdot$ 含量在整个甲烷爆炸的过程中处于较高水平。

(2) 微观角度  $CO_2$ 大量生成在宏观上部分表现为爆炸压力的迅速上升,其含量变化趋势与升压过程呈正相关关系; $C_2$ 、 $CHO\cdot$ 迅速消耗在宏观上部分表现为爆炸压力的迅速上升,其含量变化趋势与升压过程呈负相关关系; $OH\cdot$ 、 $C_3$ 含量的变化无法在宏观上通过甲烷爆炸压力变化趋势反映出来。

(3) 在爆炸感应期减少  $C_2$ 、 $CHO\cdot$ 的生成,降低其含量;在整个甲烷爆炸的过程中抑制  $OH\cdot$ 产生,降低其含量;减少或抑制  $CO_2$ 的生成,可以减缓或抑制爆炸进程,有效减小甲烷爆炸的压力。

(4)  $CO_2$ 含量变化趋势与甲烷升压过程呈正相关关系。甲烷爆炸压力的升压阶段是  $CO_2$ 大量生成的宏观表征。实验结果与基本理论一致,证明了本研究方法和路线的正确性。

### 参考文献:

[1] 聂百胜,杨龙龙,孟筠青,等.基于图像处理的管道瓦斯爆炸火焰传播速度特征[J].煤炭学报,2016,4(41):884-891.

NIE Bai-sheng, YANG Long-long, MENG Jun-qing, et al. Characteristics of flame propagation velocity of gas explosion in duct based on image processing[J]. *Journal of China Coal Society*, 2016, 41(4): 884-891.

[2] 高娜,张延松,胡毅亭.温度压力对瓦斯爆炸危险性影响的实验研究[J].爆炸与冲击,2016,36(2):218-223.  
GAO Na, ZHANG Yan-song, HU Yi-ting. Experimental study on gas explosion hazard under different temperatures and pressures[J]. *Explosion and Shock Waves*, 2016, 36(2): 218-223.

[3] Zhang Q, Ma Q. Dynamic pressure induced by a methane-air explosion in a coal mine[J]. *Process Safety and Environmental Protection*, 2015, 93: 233-239.

[4] 罗振敏,张群,王华,等.基于FLACS的受限空间瓦斯爆炸数值模拟[J].煤炭学报,2013,38(8):1381-1387.  
LUO Zhen-min, ZHANG Qun, WANG Hua, et al. Numerical simulation of gas explosion in confined space with FLACS[J]. *Journal of China Coal Society*, 2013, 38(8): 1381-1387.

[5] 梁运涛,王连聪,罗海珠,等.定容燃烧反应器中瓦斯爆炸反应动力学计算模型[J].煤炭学报,2015,40(8):1853-1858.  
LIANG Yun-tao, WNAG Lian-cong, LUO Hai-zhu, et al. Computational model of reaction kinetic for gas explosion in constant volume combustion reactor[J]. *Journal of China Coal Society*, 2015, 40(8): 1853-1858.

[6] 李孝斌,李会荣,何昆,等.甲烷爆炸感应期内CN/CH/CHO/CH<sub>2</sub>O/NCN特征光谱分析[J].煤炭学报,2014,39(10):2042-2046.  
LI Xiao-bin, LI Hui-rong, HE Kun, et al. Analysis of characteristic spectrum of CN/CH/CHO/CH<sub>2</sub>O/NCN in induction period of methane explosion[J]. *Journal of China Coal Society*, 2014, 39(10): 2042-2046.

[7] Smith GP, Golden DM, Frenklach M, et al. GRI-Mech 3.0. [http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/), 2019-3-2.

[8] Jazbec M, Fletcher D F, Haynes B S. Simulation of the ignition of lean methane mixtures using CFD modelling and a re-

- duced chemistry mechanism[J]. *Applied Mathematical Modelling*, 2000, 24(8-9):689-696.
- [9] Quiceno, Raúl, Chejne F, Hill A. Proposal of a methodology for determining the main chemical reactions involved in methane combustion[J]. *Energy Fuels*, 2002, 16(3):536-542.
- [10] Mendiara T, Alzueta M U, Millera A, et al. An augmented reduced mechanism for methane combustion[J]. *Energy & Fuels*, 2004, 18(3):619-627.
- [11] Peters N, Williams F A. The asymptotic structure of stoichiometric methane/air flames[J]. *Combustion & Flame*, 1987, 68(2):185-207.
- [12] Lacaze G, Richardson E, Poinso T. Large eddy simulation of spark ignition in a turbulent methane jet[J]. *Combustion and Flame*, 2009, 156(10):1993-2009.
- [13] Bidi M, Hosseini R, Nobari M R H. Numerical analysis of methane-air combustion considering radiation effect[J]. *Energy Conversion and Management*, 2008, 49(12):3634-3647.
- [14] Wang E, Xu X, Zhang M. Experimental study on the time evolutions of methane reburning and combustion process[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2011, 50(17):9834-9838.
- [15] Brahim D, Choi J H, Youn P S, et al. Simulation on operating conditions of chemical looping combustion of methane in a continuous bubbling fluidized-bed process[J]. *Energy & Fuels*, 2012, 26(2):1441-1448.
- [16] Almerinda, Di, Benedetto, et al. Anomalous behavior during explosions of CH<sub>4</sub> in oxygen-enriched air[J]. *Combustion and Flame*, 2011, 158(11):2214-2219.
- [17] Dounia O, Vermorel O, Poinso T. Theoretical analysis and simulation of methane/air flame inhibition by sodium bicarbonate particles[J]. *Combustion and Flame*, 2018,193(JUL.):313-326.
- [18] Fan R, Jiang Y, Li W, et al. Investigation of the physical and chemical effects of fire suppression powder NaHCO<sub>3</sub> addition on methane-air flames[J]. *Fuel*, 2019, 257(1): 1873-1885.
- [19] Padley P J. Flames: their structure, radiation and temperature [J]. *Physics Bulletin*, 1974, 22(3): 10-199.
- [20] Higgins B, Mcquay M Q, Lacas F, et al. An experimental study on the effect of pressure and strain rate on CH chemiluminescence of premixed fuel-lean methane/air flames[J]. *Fuel*, 2001, 80(11): 1583.
- [21] 李艳红, 贾宝山, 曾文, 等. 受限空间初始压力对瓦斯爆炸反应动力学特性的影响[J]. 辽宁工程技术大学学报(自然科学版), 2011(5):697-701.  
LI Yan-hong, JIA Bao-shan, ZENG Wen, et al. Effect of initial pressure on kinetic characteristics of gas explosion in enclosed space [J]. *Journal of Liaoning Technical University (Natural Science)*, 2011(5):697-701.
- [22] HE Z, LI X B, LI M L, et al. The intrinsic mechanism of methane oxidation under explosion condition: a combined ReaxFF and DFT study[J]. *Fuel*, 2014, 124: 85-90.
- [23] 毛桂洁, 于喆英. 原子光谱分析技术与应用[M]. 哈尔滨: 东北林业大学出版社, 2011: 23-35.
- [24] Gaydon A G. The Spectroscopy of Flames[M]. LONDON: Department of chemical engineering and chemical technology, 1974:338-368.
- [25] 李孝斌, 李树刚, 林海飞, 等. 矿井瓦斯爆炸感应期确定方法的实验研究. 中国矿业大学学报. 2009. 38(4):541-543  
LI Xiao-bin, LI Shu-gang, LIN Hai-fei, et al. Experiential research on the method of ascertaining the induction period of gas explosion in mine[J]. *Journal of China University of Mining and Technology*, 2009, 38(4): 540-543.
- [26] DIN EN 26184-1-1991, 防爆系统. 第1部分:空气中易燃粉尘爆炸指数的测定(ISO 6184-1:1985); EN 26184-1:1991[S].  
DIN EN 26184-1-1991, Explosion protection systems; Part 1 : Determination of explosion indices of combustible dusts in air; EN 26184-1:1991[S].
- [27] 罗振敏. 瓦斯爆炸抑制材料的特性及抑爆作用研究[D]. 西安: 西安科技大学, 2009.  
LUO Zhen-min. Study of Suppression Materials' Characteristics and Effects on Gas Explosion[D]. Xi'an: Xi'an University of Science and Technology, 2009.

## Analysis of Coupling Relationship Between Critical Free Radical and Explosion Pressure in the Initial Stage of Methane Explosion

LI Xiao-bin<sup>1</sup>, CUI Li-wei<sup>2</sup>, ZHANG Rui-jie<sup>2,3</sup>, HUANG Yu-xiang<sup>2</sup>

(1. Department of Fire Protection Engineering, China People's Police University, Langfang 065000, China; 2. Department of Graduate Division, China People's Police University, Langfang 065000, China; 3. Ankang City Fire Department of Shaanxi Province, Ankang 725700, China)

**Abstract:** To establish the relationship between the microscopic chemical reaction mechanism and the macroscopic explosion pressure in the initial stage of methane explosion, the coupling relationship between content changes of key free radicals or molecules (such as CO<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>, CHO•, OH•, C<sub>3</sub>) and explosion pressure was investigated experimentally. The flame emission spectrum explosion pressure were obtained by a 20-Litre standard spherical explosion container and a grating spectrometer. Studies show that large amounts of CO<sub>2</sub> are produced during the pressure rising period, while the formation of C<sub>2</sub> and CHO• are primarily in the explosion induction period and they are consumed rapidly when explosion pressure rises. The content of OH• is at a high level throughout the methane explosion. The rapid increase of CO<sub>2</sub> accompanies with pressure rising, which reveals a positive correlation. On the contrary, the consumption of C<sub>2</sub> and CHO• accelerates when explosion pressure rises, revealing that they are correlated negatively. Formation reduction of C<sub>2</sub> and CHO• and their corresponding contents during the explosion induction period, suppression on OH• production during the whole methane explosion and decrease or inhibition in CO<sub>2</sub> formation can slow down or inhibit the explosion process and effectively reduce the methane explosion pressure. The result shows that it is possible to inhibit explosion and reduce the pressure efficiently through the manipulation of decreasing the production of C<sub>2</sub> and CHO• in the induction period, reducing the content of OH• throughout methane explosion and suppressing the formation of CO<sub>2</sub>.

**Key words:** methane explosion; explosion pressure; free radicals; spectrum analysis

**CLC number:** TJ55; X932

**Document code:** A

**DOI:** 10.11943/CJEM2019296

(责编:王艳秀)