

doi:10.3969/j.issn.1001-8352.2022.02.006

# 外部空间与初始温度对氢气与空气混合气体爆炸过程的影响\*

赵懿明 杨振欣 张欣 张传彪 许张归 周庄红 张云 赵亮亮 曹卫国  
中北大学环境与安全工程学院(山西太原,030051)

**[摘要]** 为了研究容器形状和初始温度对氢气与空气预混气体爆炸过程的影响,分别采用20 L球形容器和20 L圆柱形容器对氢气与空气混合气体的爆炸过程进行了研究。首先,通过壁面压力传感器获取了两种容器内的最大爆炸压力,并采用高速摄影装置拍摄了球形容器内部爆炸火球的发展变化过程。其次,利用计算流体力学方法对氢气爆炸过程进行了数值模拟,获取了三维爆炸压力场、火焰温度场等爆炸参数,对比分析了容器内不同位置处的压力曲线,并探讨了初始温度对氢气爆炸压力的影响。实验结果表明:在常温下,最大爆炸压力出现在氢气体积分数为30.0%的条件下,略高于理论当量浓度。数值模拟结果表明:两种容器内,火焰传播初期均呈球面往外发展;容器内上壁面的压力均低于右壁面的压力;由于壁面不规则的反射作用,圆柱形容器第1个压力峰值后的压力振荡周期不同步;在体系初始压力不变的情况下,初始温度提高20%,容器内部总的物质的量减少,最大爆炸压力下降15%。

**[关键词]** 容器形状;爆炸压力;火焰温度;计算流体力学

**[分类号]** X932

## Effects of External Space and Initial Temperature on Explosion Process of Hydrogen/Air Mixture

ZHAO Yiming, YANG Zhenxin, ZHANG Xin, ZHANG Chuanbiao, XU Zhanggui, ZHOU Zhuanghong,  
ZHANG Yun, ZHAO Liangliang, CAO Weiguo  
School of Environment and Safety Engineering, North University of China (Shanxi Taiyuan, 030051)

**[ABSTRACT]** To study the effect of container shape and initial temperature on explosion process of premixed hydrogen/air, explosion process of premixed hydrogen/air was studied using a 20 L spherical container and a 20 L cylindrical container, respectively. Firstly, the maximum explosion pressures in the two containers were obtained through the wall pressure sensor, and evolution of the explosion fireball inside the spherical container was captured with a high-speed camera. Secondly, the explosion process was conducted by computational fluid dynamics simulation. Parameters such as 3D explosion pressure field and temperature field were obtained. Pressure at different locations in the container was compared and analyzed, and influence of initial temperature on explosion pressure was discussed. Test results reflect that, at room temperature, the maximum explosion pressure appears when the volume fraction of hydrogen is 30.0%, which was slightly higher than the theoretical equivalent concentration. Simulation results of show that the flame develop outward as a sphere at the initial stage of propagation in both containers, and pressure on the upper wall is lower than that on the right wall in the container. The pressure oscillation period in cylindrical container after the first pressure peak is not synchronous because of the irregular wall reflection. When the initial pressure of the system remains unchanged, the initial temperature increases by 20%, the total amount of substances in the container decreases, and the maximum explosion pressure decreases by 15%.

**[KEYWORDS]** container shape; explosion pressure; flame temperature; computational fluid dynamics

\* 收稿日期:2021-09-23

基金项目:国家自然科学基金(12172336)

第一作者:赵懿明(1997-),男,硕士研究生,主要从事可燃气体、粉尘爆炸动力学研究。E-mail:563890771@qq.com

通信作者:曹卫国(1984-),男,博士,副教授,主要从事粉尘、气体多相燃烧与爆炸研究。E-mail: caoweiguom@nuc.edu.cn

## 引言

氢气因能量密度大、燃烧产物无污染等优点而得到应用和推广<sup>[1]</sup>。但从化学本质上讲,氢气属于第 2 类危险化学品,在储存、运输和使用中易发生爆炸事故<sup>[2-3]</sup>。因此,安全使用氢能也是在氢气推广使用中亟需解决的问题。

为了更好地认识氢气的危险性,大量研究人员对氢气爆炸的压力、火焰等燃爆特性及影响因素开展了相关研究。Kim 等<sup>[4]</sup>对圆形管道内氢气的自燃机理进行流动可视化研究,发现自燃首先发生在氢气与空气混合区前锋面后管壁处的高度混合点处。Shen 等<sup>[5-7]</sup>探究了方形管道中氢气与空气预混火焰传播形态的变化,发现郁金香变形总是伴随着火焰尖端速度的脉动。Wang 等<sup>[8]</sup>在具有单个孔板的圆柱形容器中进行氢气与空气混合气体的爆炸特性实验,发现孔板阻塞对最大爆炸压力上升速率的影响显著。进一步增大孔板阻塞率发现,随着阻塞率的增加,火焰传播速度和爆炸压力有升高趋势<sup>[9-10]</sup>。

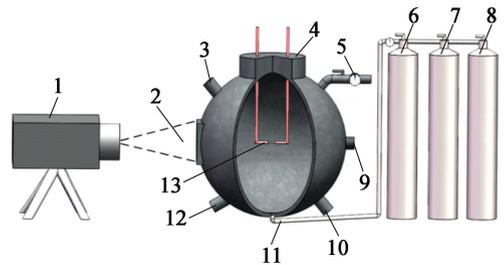
虽然从事相关研究的专业人员对氢气爆炸的风险具有较为丰富的认识,但是由于对氢气爆炸发生机制还未完全了解,导致开展氢气爆炸实验存在一定的安全风险。而随着计算机技术的发展,数值模拟可以对现阶段实验无法捕捉到的爆炸参数进行仿真再现,辅助研究人员对爆炸过程中微观动力学过程及爆炸机理进行认识,因此被广泛地应用在气体爆炸的研究中。周宁等<sup>[11]</sup>采用大涡模拟 (LES) 模型研究了大长径比空间对氢气与空气爆炸过程的影响,发现火焰阵面结构发展受管道截面尺寸影响较大。任家帆等<sup>[12]</sup>基于 Navier-Stokes 方程组以及  $k-\epsilon$  湍流模型,在球形爆炸容器内对不同比例的氢气与空气混合气体的燃爆压力及压力上升速率进行数值模拟研究,并通过实验验证了该模型的准确性。Ugarte 等<sup>[13]</sup>对氢气与空气混合气体的泄爆场景建立数值计算模型,并改变容器大小、形状和点火位置进行实验,发现容器内压力传播规律受容器大小和形状影响,而泄爆口火焰形状、大小受点火位置影响较大。通过对以上研究结果进行分析可以看出:氢气爆炸的燃爆特性受外部环境因素,尤其是受限制空间影响;同时,初始温度作为重要的环境因素,对氢气的燃爆特性也有重要影响。

鉴于此,结合实验和数值模拟,使用 20 L 球形爆炸实验装置和 20 L 圆柱形爆炸实验装置对不同氢气浓度时氢气与空气混合气体的燃爆压力特性进

行了研究。之后,对理论当量浓度氢气在两种容器内的燃爆过程进行数值模拟仿真,并通过实验数据验证仿真结果的正确性。在此基础上,对比分析了容器形状和初始温度对氢气与空气混合气体爆炸压力及火焰传播特性的影响,为氢气的安全使用提供基础数据。

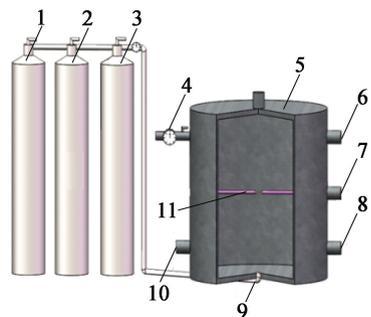
## 1 实验仪器

球形爆炸容器和圆柱形爆炸容器如图 1 所示。球形容器的主体是一个内径为 0.34 m 的球体;圆柱形容器是一个高为 0.30 m、内径为 0.29 m 的圆柱体。两者都为不锈钢材质,体积均为 20 L。容器内设有抽真空、排气、进气、清洗等接口,抽真空接口附近安装真空表。容器都包括配气系统、点火系统、加热系统、同步控制系统等。在实验开始之前,容器内部抽真空,氢气和空气通过气体质量流量计控制进行预混合,然后将预混气瓶中的气体注入到爆炸容器中,在爆炸容器中静止 10 min,以消除气体湍流的影响。同时,为了保证点火成功,采用 100 mJ 的电火



1 - 高速摄影装置;2 - 观察窗;3 - 出气口;4 - 开启盖;5 - 抽真空;6 - 预混气瓶;7 - 氢气瓶;8 - 空气瓶;9 - 压力传感器;10 - 出气口;11 - 进气口;12 - 出气口;13 - 点火电极。

(a) 20 L 球形爆炸容器



1 - 空气瓶;2 - 氢气瓶;3 - 预混气瓶;4 - 抽真空;5 - 开启盖;6 - 出气口;7 - 压力传感器;8 - 出气口;9 - 进气口;10 - 出气口;11 - 点火电极。

(b) 20 L 圆柱形爆炸容器

图 1 不同形状的气体爆炸实验装置示意图

Fig. 1 Schematic diagram of experimental apparatus of gas explosion with different shapes

花点火。球形容器和圆柱形容器的压力传感器均设置在容器侧壁中心处。球形爆炸容器在进行压力测试的同时,采用高速摄影拍摄球体内部的火焰传播过程。

## 2 数值模拟

### 2.1 计算模型

建立了符合实验情况的三维几何模型,两种不同形状的容器中都包括点火电极。为反映两种不同规格容器内的动态反应压力,对爆炸容器中不同位置处的压力进行了采集,计算模型及具体压力采集位置见图2。图2中,A点代表点火中心位置;B点代表容器的右侧壁面中心位置;C点代表上壁面中心位置。

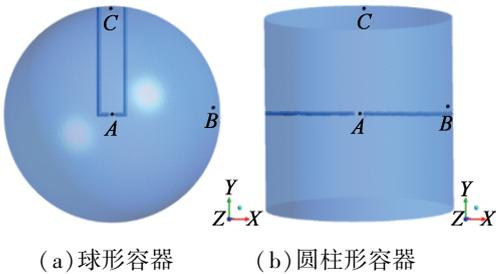


图2 三维几何模型及压力采集位置

Fig.2 3D geometric model and pressure acquisition location

使用ICEM软件对几何模型进行网格划分。整个流场采用四面体网格,为了保证网格的独立性和计算结果的收敛性,在计算前对网格的无关性进行了验证。计算最终采用的网格数量:球形密闭容器中为366 888个,圆柱形密闭容器中为448 282个。网格分布如图3所示。

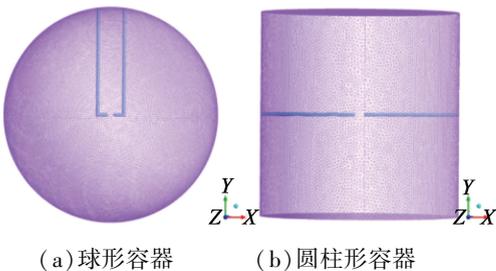


图3 三维几何模型的网格分布

Fig.3 Grid distribution of 3D geometric model

在模拟计算中,每一个时间步都进行20步迭代,且能量残差、动量残差和质量残差都小于 $10^{-6}$ ,从而保证了计算结果的收敛性。在容器中心区域点火,以直径15 mm的高温区域模拟点火源,点火源初始温度1 200 K,其他参数与未反应区域相同,近

似模拟电火花引发的气体强迫点火。

### 2.2 数值计算方法

利用计算流体力学软件ANSYS Fluent求解基本控制方程。主要包括质量方程、动量方程和能量方程<sup>[14]</sup>。因本文中气体爆炸模拟是一个化学反应过程,因此还需考虑组分输运模型<sup>[15]</sup>。

模拟时采用压力基瞬态求解器;压力-速度耦合方程采用半隐式Simple算法求解;梯度差分采用Green-Gauss节点基格式;压力、密度、动量、湍流变量以及燃烧组分等均采用二阶迎风格式。组分输运模型在湍流流动中包括了详细的化学反应机理,选用氢气燃烧的19步详细化学反应机理进行数值计算<sup>[16]</sup>,假定化学反应都发生在小涡当中,反应时间由小涡的生存时间和化学反应本身所需要的时间共同控制。

## 3 结果与讨论

### 3.1 不同氢气浓度爆炸时容器内典型的压力特性

不同容器中,气体爆炸的火焰传播速度及其响应压力等参数并不完全一致。对氢气体积分数为10.0%、20.0%、28.6%、30.0%、40.0%、50.0%、60.0%和70.0%的混合气体在20 L球形容器内的爆炸火焰形貌传播特征及其压力变化规律进行了研究。其中,体积分数28.6%为氢气的理论当量浓度。利用高速摄影装置和压力传感器分别对密闭容器内火焰发展状况及爆炸压力变化情况进行了测试,分析火焰传播发展过程中的爆炸压力响应规律。氢气体积分数为10.0%、30.0%、50.0%时,典型的爆炸压力和火焰形貌组合图如图4所示。

通过图4可知,在点火初期,火焰从点燃位置向球体四周自由扩散。由于点火初期容器内未燃气体温度较低,因此火焰面缓慢发展,火焰前锋阵面近似球形。随着爆炸的发展,未燃气体逐渐被加热。当氢气体积分数为30.0%时,火焰面发展最快。点火后3 ms,火焰面迅速靠近观察视窗并于5 ms后充满整个球体;在7 ms时,通过视窗拍摄到的火焰尺度及亮度均达到最大,在此范围内,容器壁面压力迅速增加到最大;氢气爆炸反应结束后,因球体壁面向外部散热,容器内温度和压力不断减小,火焰亮度减弱并逐渐熄灭。

不同氢气浓度时容器内的最大爆炸压力 $p$ 见表1。从表1可以看出,在测试浓度范围内,两种容器测试得出的最大爆炸压力的变化规律一致。这是因为影响最大爆炸压力的主要因素是氢气的浓度。氢

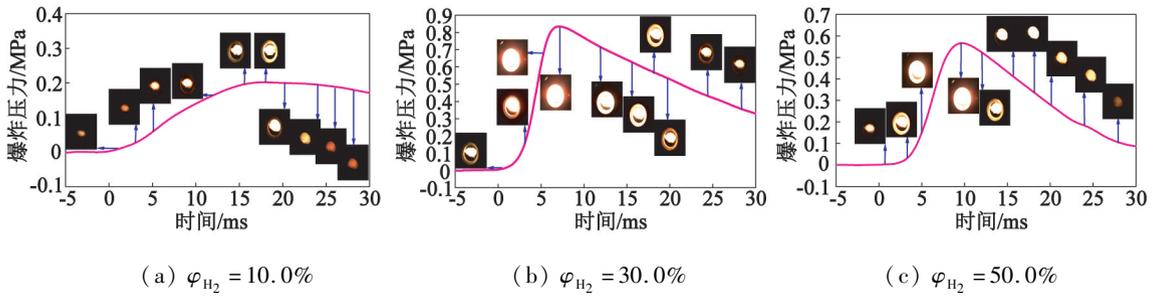


图 4 球形容器中不同时间的爆炸压力和火焰形貌

Fig. 4 Explosion pressure and flame morphology in spherical container at different times

表 1 不同氢气浓度时容器内的最大爆炸压力  
 Tab.1 Maximum explosion pressure in containers at different hydrogen concentrations

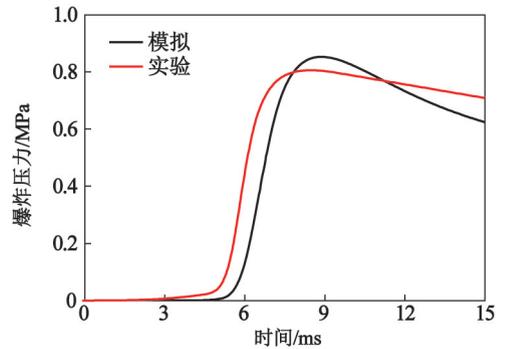
容器形状	$\varphi_{H_2}/\%$	$p/MPa$
球形	10.0	0.21
	20.0	0.34
	28.6	0.82
	30.0	0.85
	40.0	0.64
	50.0	0.58
	60.0	0.54
圆柱形	20.0	0.29
	28.6	0.78
	30.0	0.79

气浓度过低时,氧气供应充分。从传热方面分析,氢气浓度越高,分子数目越多,参与化学燃烧的分子数增多,释放的总热量越大,整个燃烧程度加强,爆炸压力随之增加并达到最大。此外,实验测得的氢气的最佳爆炸浓度(体积分数 30.0%)略高于当量比浓度(体积分数 28.6%),造成这一现象的主要原因是实验过程中气体混合不均匀以及测试的不确定性等。进一步增加氢气浓度,单位体积内的氢气分子数增多,有限密闭空间内氧气供应不足,氢气不能完全燃烧,参与反应的有效氢分子数减少,最终导致爆炸压力随氢气浓度的增加而减小。

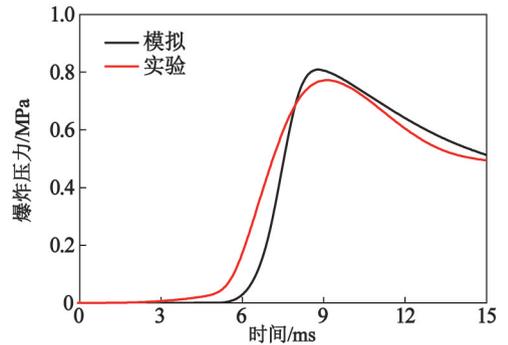
造成两种不同形状容器爆炸压力差异的原因将通过数值模拟进行探讨。

### 3.2 计算模型的验证

图 5 为 293 K 模拟条件下两种容器中理论当量浓度(体积分数 28.6%)时右壁面爆炸压力随时间的变化规律,并与相同条件下的实验值进行了对比。从图 5 中可以看出:20L 球形容器中,爆炸压力的实验结果在 8 ms 左右达到最大值 0.82 MPa,模拟结果在 9 ms 左右达到最大值 0.86 MPa; 20 L 圆柱



(a) 球形容器



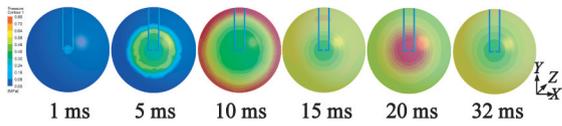
(b) 圆柱形容器

图 5 两种容器内右壁面爆炸压力的模拟与实验对比  
 Fig.5 Comparison of explosion pressure on the right wall of two kinds of containers between simulation and experiment

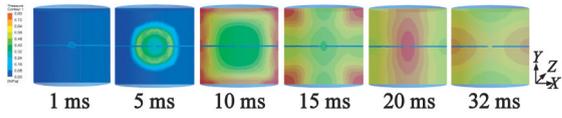
形容器中,爆炸压力的实验结果在 9 ms 附近达到最大值 0.78 MPa,模拟结果也在 9 ms 左右达到最大值 0.82 MPa。模拟结果与实验结果具有较高的重复性。

### 3.3 容器形状对氢气爆炸过程的影响

为了直观重现不同形状的密闭容器中氢气多维瞬态的爆炸过程,深入分析动态爆炸过程中容器内爆炸压力、火焰温度等的变化规律,通过 ANSYS Fluent 软件对理论当量浓度下氢气在 20 L 球形容器和 20 L 圆柱形容器的爆炸过程进行 3D 模拟。图 6 ~ 图 7 为模拟得出的理论当量浓度时氢气在不同容器中的动态爆炸过程。



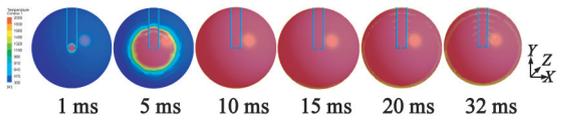
(a) 球形容器



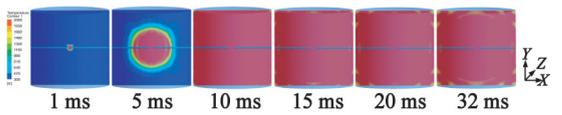
(b) 圆柱形容器

图6 不同容器中爆炸压力的空间分布

Fig. 6 Space distribution of explosion pressure in different containers



(a) 球形容器



(b) 圆柱形容器

图7 不同容器中爆炸温度的空间分布

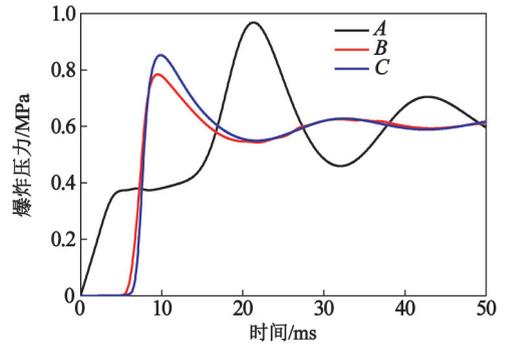
Fig. 7 Space distribution of explosion temperature in different containers

从图6爆炸压力云图中可以看出:在点火瞬间,球形容器和圆柱形容器中点火电极处的压力都达到0.1 MPa;随后,压力波向壁面处传播,使壁面处的压力在10 ms时达到0.8 MPa左右。从图6中还可以看出,两种容器内随后的压力传播规律并不一致。由于壁面的反射作用,球形容器中的压力波在球体中心处叠加,使得球体中心处的压力在20 ms时达到最大;随后,压力再均匀地向壁面处传播,直至球体中各处压力达到平衡。而圆柱形容器的压力传播较球形容器不规则,使得四周反射的压力波在圆柱体中心叠加的时间和强度并不一致;圆柱中心压力也在20 ms达到最大,但是强度较球形容器中的小;随后,压力向上、下壁面和左、右壁面传播的强度也不一致。

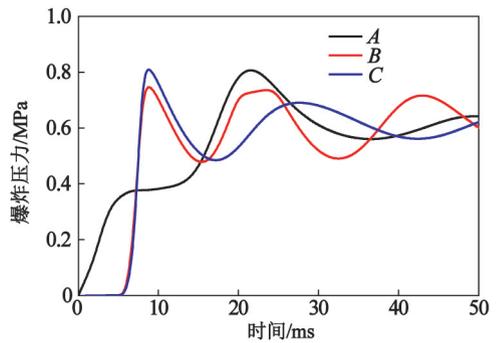
从图7爆炸温度云图中可以看出,球形容器和圆柱形容器中温度的传播规律较为一致。点火瞬间,温度达到2 000 K,火焰以球形向四周传播;5 ms时,火焰传递到容器的一半;10 ms时,火焰已充满整个容器,此时容器内温度达到最高;32 ms时,由于反应后壁面的冷却作用,壁面处的温度开始下降。

### 3.4 容器内不同位置处的压力特性

在实验测试过程中,压力传感器一般设置在容器壁面。数值模拟能得到任一时刻、任何位置的爆炸压力分布。以氢气体积分数28.6%时的爆炸压力为例,A、B、C 3个压力采集点分别监测的压力变化情况如图8所示。



(a) 球形容器



(b) 圆柱形容器

图8 不同位置处的爆炸压力特性

Fig. 8 Explosion pressure characteristics at different locations

通过图8可以看出:两种容器中,点火电极处的压力都在5 ms时达到最大值0.4 MPa;15 ms前,两种形状的密闭容器中,电极中心处的压力传播规律基本一致,结合图6~图7可知,此时的爆炸火焰已传播到壁面,还未反射到球体中心处;20 ms时,由于压力波均匀的反射和叠加作用,球形容器中的点火电极处的压力达到极大值0.96 MPa,而由于不均匀的反射和叠加,圆柱形容器中点火电极处的压力达到极大值0.81 MPa;随后,圆柱形容器中电极处压力下降的幅度不如球形容器中明显。

两种容器中,上、右壁面处的压力都是在9 ms时就达到最大。球形容器上、右壁面处的压力分别为0.79 MPa和0.86 MPa。造成球形容器内部压力不一致的原因主要是由于点火电极存在一定的阻碍和冷却效应,造成爆炸传播过程存在差异。圆柱形容器中,上、右壁面处的压力为0.75 MPa和0.82 MPa,主要是由于圆柱形容器侧壁面距离中心的距

离小于上壁面,压力在侧壁面首先形成集聚效应。球形容器中,上、右壁面压力的传播趋势基本一致,振荡幅度也基本一致;而圆柱形容器中,上、右壁面压力在第 1 个峰值前的传播规律基本一致,到达壁面后,由于向容器内四周不均匀地传播,使得第 1 个峰值后的压力振荡传播规律并不完全同步。随着时间的推移,压力振荡周期逐渐一致,容器内最大压力稳定在 0.5 MPa 左右,这也是造成两种容器测试得出的最大爆炸压力不一致的原因。

从图 8 中还可以看出,部分点(例如 A 点)最大爆炸压力大于最大壁面压力,说明此时间段为整个体系的爆炸猛烈程度最大的时刻。整个反应体系爆炸压力最猛烈的位置并不在壁面处,从侧面说明了仅通过壁面压力传感器来测试最大爆炸压力存在一定的局限性,壁面压力传感器并不能完全反映出整个爆炸体系的猛烈程度。

### 3.5 不同初始温度下氢气爆炸压力特性

为进一步研究氢气爆炸压力特性的影响因素,以 20 L 球形容器为例,对不同初始温度(293、313、333、353 K)条件下、氢气体积分数 28.6% 时的爆炸压力进行了模拟,得到了最大爆炸压力与时间的变化关系,如图 9 所示。

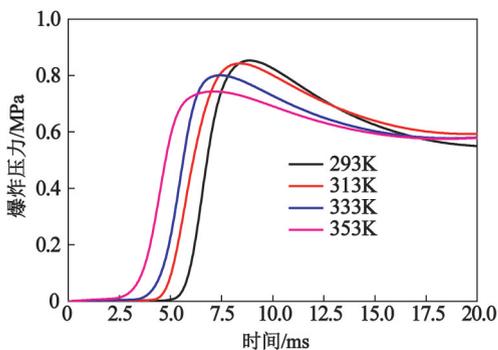


图 9 不同初始温度条件下的爆炸压力特性

Fig. 9 Explosion pressure characteristics at different initial temperatures

从图 9 可以看出:初始温度从 293 K 上升到 353 K 时,达到最大爆炸压力的时间由 9 ms 提前至 7 ms;在体系初始压力不变的前提下,密闭容器内最大爆炸压力由 0.86 MPa 降低到 0.73 MPa。当初始温度提高 20%,最大爆炸压力降低 15% 左右。

温度的升高使分子运动速度加快,单位面积内的有效碰撞次数增加,因而反应速率加快。而到达最大爆炸压力的时间与反应速率直接相关。因此,温度升高,到达最大爆炸压力的时间就越快。根据标准气体状态方程可知,当初始温度升高时,在体系压力不变的前提下,单位体积的物质的量减小,参与

反应的分子数降低。因此,密闭容器内的最大爆炸压力也随之减小。

## 4 结论

利用 20 L 球形容器和 20 L 圆柱形容器对氢气与空气混合气体爆炸过程进行了实验和模拟研究,得到主要结论如下:

1) 两种容器得出的不同氢气浓度下的爆炸压力随氢气浓度的变化规律基本一致,最大爆炸压力出现在氢气体积分数为 30.0% 的条件下;模拟结果与实验结果基本一致。

2) 两种容器中,气体爆炸后的火焰均呈球面往外发展。容器中,上壁面的压力均低于右壁面的压力。由于壁面的反射作用,导致两种容器中压力振荡趋势并不一致,最终使得球形容器的最大爆炸压力高于圆柱形容器。

3) 温度的升高使分子运动速度加快,单位面积内的有效碰撞次数增加,因而反应速率加快。初始温度从 293 K 上升到 353 K 时,球形容器内达到最大爆炸压力的时间由 9 ms 提前至 7 ms。当初始温度升高时,在体系压力不变的前提下,单位体积的物质的量减小,参与反应的分子总数降低,最大爆炸压力由 0.86 MPa 降低到 0.73 MPa。

## 参 考 文 献

- [1] 周蕊, 李晓鹏. 连续旋转爆轰发动机冷流场的混合特性研究[J]. 航空学报, 2016, 37(12):3668-3674.  
ZHOU R, LI X P. Numerical investigation of mixing characteristic of cold continuously rotating detonation engine[J]. Acta Aeronautica et Astronautica Sinica, 2016, 37(12):3668-3674.
- [2] CROWL D A, JO Y D. The hazards and risks of hydrogen[J]. Journal of Loss Prevention in the Process Industries, 2007, 20(2):158-164.
- [3] ZHANG Y, CHEN R K, ZHAO M K, et al. Hazard evaluation of explosion venting behaviours for premixed hydrogen-air fuels with different bursting pressures[J]. Fuel, 2020, 268:117313.
- [4] KIM Y R, LEE H J, KIM S, et al. A flow visualization study on self-ignition of high pressure hydrogen gas released into a tube[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2013, 34(2):2057-2064.
- [5] SHEN X B, XIU G L, WU S Z. Experimental study on the explosion characteristics of methane/air mixtures with

