

文章编号: 1001-1455(2012)02-0113-08

C₂H₄-O₂ 混合气体直接起爆的临界能量*

张 博^{1,2}, Lee J H S², 白春华¹

(1. 北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室, 北京 100081;

2. Department of Mechanical Engineering, McGill University, Montreal H3A 2K6, Canada)

摘要: 主要基于化学动力学和 Ng 模型, 对 C₂H₄-O₂ 混合气体的爆轰胞格尺寸进行预测; 结合 Lee 表面积能量模型, 预测物质在不同初始压力和化学当量比的条件下, 直接起爆引起球面爆轰的临界起爆能量。直接起爆实验主要采用高压电点火提供起爆能量, 起爆能量通过放电过程中电流的输出信号确定。结果表明, 理论预测与实验值较吻合。首先, 通过化学动力学计算得出 ZND 模型的爆轰参数, 利用 Ng 模型得出爆轰胞格尺寸与 ZND 诱导区长度之间的比例因数 A 在不同初始压力与当量比的条件下分别为: $A = 43.815(1 + p_1/p_0)^{-0.12371}$ 和 $A = 8.531\exp(\varphi/3.135) + 28.644$, 在此基础上对爆轰胞格尺寸进行定量预测。胞格尺寸的理论预测与实验结果吻合。其次, 把爆轰胞格尺寸作为中间特征参数并结合 Lee 的表面积能量模型, 提出可以预测临界起爆能量的定量模型, 并得出 C₂H₄-O₂ 混合气体直接起爆的临界起爆能量与初始压力和化学当量比的参量拟合关系分别为 $E_c = 0.332(p_1/p_0)^{-2.017}$ 和 $E_c = \exp[3.951(\varphi - 1.401)^2 - 1.9]$ 。

关键词: 爆炸力学; 临界起爆能; 直接起爆; C₂H₄-O₂ 混合气体; 胞格尺寸; 化学动力学; 电火花点火

中图分类号: O381

国标学科代码: 1303510

文献标志码: A

乙烯(C₂H₄)是高分子碳氢化合物(如 JP-10、脂肪烃和芳香烃)燃烧的中间产物,也是用于研究火焰结构和传播的重要燃料^[1]。由于乙烯-氧气(C₂H₄-O₂)混合物在所有的碳氢燃料中点火时间最短,所以该混合物也是研究爆轰脉冲发动机的重要原料^[2-3]。因此,研究 C₂H₄-O₂ 混合物的爆轰特性可以为工业安全生产提供重要依据,有效地控制危险源。

爆轰可由 2 种方式形成,一种是在适当的边界扰动下通过火焰加速而最终发展为爆轰波,即通常所谓的燃烧转爆轰;另一种即直接起爆。直接起爆指的是,在极短的时间内爆炸源产生的强爆炸波能量作用于混合气体而形成爆轰。由于直接起爆依赖于初始爆炸波的能量,故也被称为直接爆炸起爆^[4-5],能引起直接起爆的最小点火能量被称为临界起爆能量。

目前,基本都是通过间接参数(如爆轰胞格尺寸或临界管径)的测定来得到临界起爆能量,因此临界起爆能量很大程度上依赖于经验公式。由于选取模型的差异和实验方法的不同,很难形成可以预测直接起爆临界起爆能量的系统又合理的模型。到目前为止还没有基于热力学第一定律(即爆炸性混合物最基本的热化学反应和动态反应速率等)预测临界起爆能量的定量理论^[6]。

本文中主要基于化学动力学理论预测 C₂H₄-O₂ 混合气体在不同初始条件下(即不同初始压力和当量比)的爆轰胞格尺寸,把胞格尺寸作为中间特征参数并结合 Lee 的表面积能量模型,建立能够预测直接起爆临界起爆能量的模型;通过实验测定 C₂H₄-O₂ 混合气体在不同初始条件下的起爆能量,并与理论模型的预测值进行比较,验证本文中所建模型的正确性。

1 实 验

1.1 实验原理

直接起爆实验主要是在直径为 203.2 mm、壁厚为 50.8 mm 的高压球形容器中进行,如图 1 所示。

* 收稿日期: 2010-12-24; 修回日期: 2011-05-16

基金项目: 爆炸科学与技术国家重点实验室(北京理工大学)重点课题项目(ZDKT08-2)

作者简介: 张 博(1983—),男,博士研究生。

每次实验前,容器内的压力抽至低于 80 Pa,并通过电子压力表控制进入容器的气体量。PCB 压力传感器位于容器壁面中心,与火花塞的距离为 145 mm,可以测定爆炸波到达壁面的时间和压力,借此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来进一步验证是否形成爆轰。

图 2 为点火系统示意图,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,并通过对信号分析得出电火花放电能量。电极的末端是间隙为 3.5 mm 的火花塞,电路触发后可以通过火花塞产生放电能量,放电能量的大小可以通过控制放电电压的高低和改变电容的大小来实现,点火系统可以简化如图 2(b)所示的 RLC 电路。

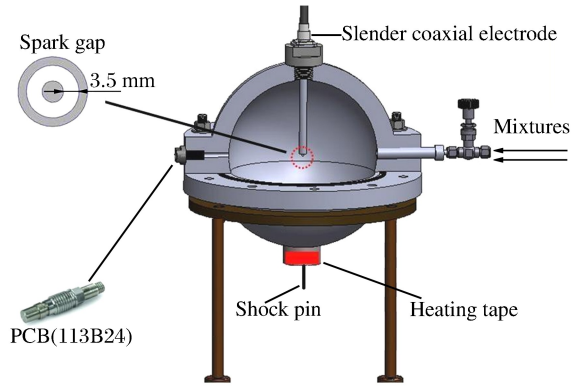
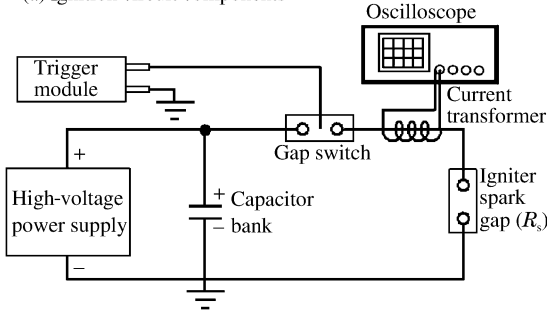


图 1 实验装置

Fig. 1 Sketch of experimental setup

(a) Ignition circuit components



(b) Equivalent RLC circuit diagram to ignition system

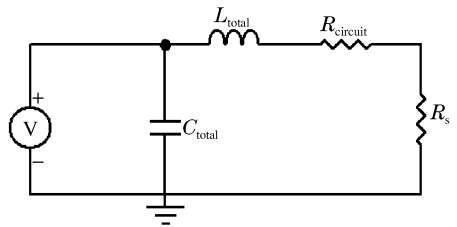


图 2 点火系统示意图

Fig. 2 Sketch of ignition system

通常情况下,电容中储存的总电能 $E_{total} = CU_0^2/2$ 被视为作用于混合气体的点火能量。然而在放电过程中由于存在能量损失和欧姆扩散等因素,所以 $E_{total} = CU_0^2/2$ 仅可以作为点火能量在数量级上的参考,而不能代表真实起爆能量。真正作用于混合物的起爆能量应该是 $\int_0^\infty i^2 R_{spark} dt$, 也即电流的平方 $i^2(t)$ 与电火花电阻 R_{spark} 的积分^[7]。而对于衰减的震荡放电电流 $i(t) = Be^{-\alpha t} \sin(\omega t)$, 衰减系数 $\alpha = R_{total}/(2L_{total})$, 放电频率

$$\omega = \sqrt{1/(LC)_{total} - [R/(2L)]^2_{total}} = \omega_n \sqrt{1 - \zeta^2}$$

式中: ω_n 是非衰减放电电流的自然频率, ζ 是阻尼系数。电路总电阻 R_{total} 是电路元件的电阻 $R_{circuit}$ 与电火花电阻 R_{spark} 之和。为了计算作用于混合气体的真实起爆能量 E_s , V. Kamenskihs 等^[8] 对示波器中得到的信号进行分析, 具体步骤为:

- (1) 利用 Matlab 将示波器中的电压信号还原为电流信号, 并用 ω 和 ζ 计算出电流固有频率 ω_n ;
- (2) 电路中电感 $L_{total} = 1/(\omega_n^2 C_{total})$;
- (3) 电路的总电阻 $R_{total} = 2L_{total}\alpha$;
- (4) 由于 $R_{total} = R_{circuit} + R_{spark}$, 因此当短路时 $R_{spark} \approx 0$, 也即 $R_{total} = R_{circuit}$, 开路时 $R_{total} = R_{circuit} +$

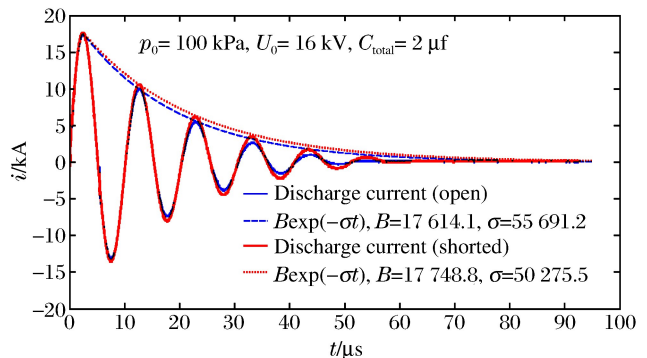


图 3 火花塞短路和开路时放电电流信号

Fig. 3 Discharge current through shorted and open spark gap

R_{spark} , 就可以确定电火花电阻 R_{spark} , 短路和开路时的放电电流信号如图 3 所示;

(5) 利用公式 $E_s = \int_0^\infty i^2 R_{spark} dt$ 的积分可以计算得出电火花放电能量。

R. Knystautas 等^[7]的研究同时证明, 由于起爆过程的时间很短, 只有放电时间的 1/4 个周期 T , 因此, 在放电过程中, 仅有最初的 1/4 周期的放电能量才能真正作用于起爆过程。这是由于在该时间以后起爆已经完成, 故之后的放电能量对于起爆过程没有影响。简言之, 只有起爆能量的 1/4 周期才真正并完全用于直接起爆, 因此直接起爆的能量为 $E_{T/4} = \int_0^{T/4} i^2 R_{spark} dt$ 。V. Kamenskihs 等^[8]和 B. Zhang 等^[9]最近的研究证实了该理论并通过以上方法可以准确地计算直接起爆中的起爆能量。

1.2 实验结果

实验中, 通过改变电容大小或者电压的高低来调节电火花初始放电能量, 逐渐改变放电能量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起爆都重复 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, 表 1 是实验结果, r_{CJ} 表示实验中测量得到的爆炸波速度 D 与 CJ 爆轰速度 D_{CJ} 的比值。

表 1 100 kPa 的初压下, 理论配比的 C₂H₄-O₂ 混合气体中成功直接起爆和不成起爆实验结果

Table 1 Results for successful direct initiation and unsuccessful initiation in stoichiometric C₂H₄-O₂ at 100 kPa

E_T/J	U_0/kV	$C_{circuit}/\mu f$	$R_{circuit}/\Omega$	R_{spark}/Ω	$E_{T/4}/J$	E_s/J	$v/(m/s)$	$r_{CJ}/\%$	直接起爆
28.8	12	0.4	0.163	0.028 2	0.39	4.72	2 265.6	95.4	成功
24.2	11	0.4	0.172	0.027 7	0.35	4.56	146.2	6.2	失败

根据以上实验原理和方法得出 C₂H₄-O₂ 混合气体在不同初始压力及化学当量比条件下的起爆能量如图 4 和图 5 所示。由图 4 可知, 初始压力越低, C₂H₄-O₂ 混合气体直接起爆的临界起爆能量越高, 临界起爆能量与初始压力呈指数衰减关系; 而由图 5 可知, 在初始压力 100 kPa 条件下, C₂H₄-O₂ 混合气体临界起爆能量与化学当量比呈“U”型关系, 临界起爆能量的最低值偏于富燃料侧。

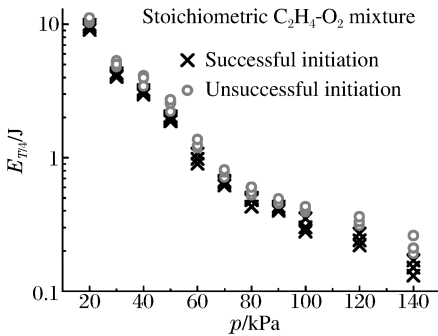


图 4 不同初始压力下的起爆能量

Fig. 4 Initiation energy at different initial pressures

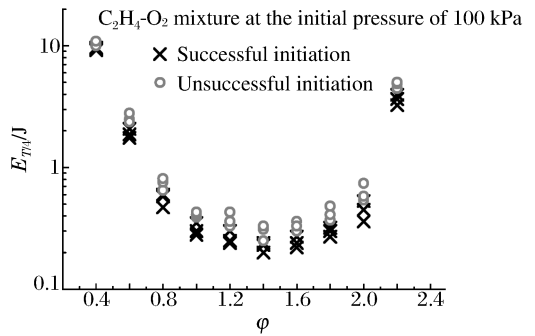


图 5 不同化学当量比条件下的起爆能量

Fig. 5 Initiation energy at different equivalence ratios

2 讨论与分析

2.1 基于化学动力学预测爆轰胞格尺寸

直接起爆的临界起爆能量依赖于爆轰胞格尺寸, 而基于化学动力学机理可以计算反应过程中的爆轰参数, 进而对爆轰胞格尺寸进行定量描述, 为临界起爆能量的预测提供依据。

爆轰波可以视为由前导冲击波和紧随其后的化学反应区组成的强间断, 其中的化学反应区包括诱导区和反应区, 如图 6 所示。其中 T 、 p 、 ρ 分别代表

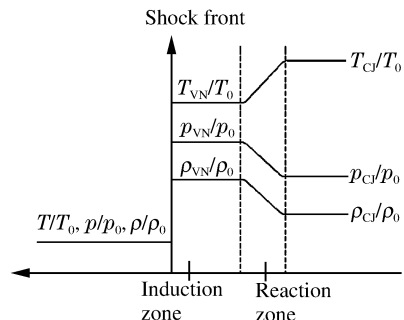


图 6 一维稳定 ZND 爆轰结构模型

Fig. 6 One-dimensional stable ZND detonation model

温度、压力和密度,下标 0 表示初始状态,VN 代表 Von Neumann 状态。

ZND 诱导区长度 Δ_1 是爆轰胞格尺寸 λ 的重要参数,J. E. Shepherd^[10] 研究发现,诱导区长度与胞格尺寸之间的关系为 $\lambda = A\Delta_1$,其中 A 是量纲一参数并且随着不同初始条件而变化。ZND 爆轰参数可以通过 Chemkin 程序和 Sandiego 的化学反应机理^[11] 和热力学参数^[12] 计算得到。H. D. Ng^[13] 基于化学动力学理论提出了可以预测爆轰胞格尺寸的模型,并且与气相碳氢燃料爆轰胞格尺寸的实验值进行对比,发现二者基本吻合^[14-15],爆轰胞格尺寸与诱导区长度的关系为

$$\lambda = A(\chi)\Delta_1 = \left[A_0 + \left(\frac{a_n}{\chi^n} + \dots + \frac{a_1}{\chi} + b_1\chi + \dots + b_n\chi^n \right) \right] \Delta_1 \quad (1)$$

式中: χ 是量纲一参数,代表爆轰稳定程度,数值越大表示爆轰越不稳定,并定义为

$$\chi = \epsilon_1 \frac{\Delta_1}{\Delta_R} = \epsilon_1 \Delta_1 \frac{\dot{\sigma}_{\max}}{u'_{CJ}} \quad (2)$$

式中: ϵ_1 、 Δ_R 、 $\dot{\sigma}_{\max}$ 和 u'_{CJ} 分别表示在诱导区中的活化能、化学反应区长度、最大放热速率以及质点的 CJ 速度。 A_0 、 a_1 、 \dots 、 a_n 与 b_1 、 \dots 、 b_n 可参考文献^[14-15]。

反应放热速率 $\dot{\sigma}$ 和活化能 ϵ_1 分别为

$$\dot{\sigma} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{W}{W_i} - \frac{h_i}{c_p T} \right) \frac{dY_i}{dt}, \quad \epsilon_1 = \frac{\ln(t_1 - t_2)}{[T(D_1) - T(D_2)]T_{VN}} \quad (3)$$

式中: W 为混合物平均摩尔质量, c_p 是比定压热容, h_i 是物质 i 的比焓, Y_i 为组分; $D_1 = 0.99D_{CJ}$, $D_2 = 1.01D_{CJ}$, t_1 和 t_2 分别为当爆轰速度为 D_1 和 D_2 时定容爆炸点火延迟时间, $T(D_1)$ 和 $T(D_2)$ 分别为当爆轰速度为 D_1 和 D_2 时波后初始温度。

经以上步骤计算得到的 $C_2H_4-O_2$ 混合气体在不同初始条件下的各爆轰参数如表 2 所示, $\dot{\sigma}_{\max}$ 为最大放热速率。

表 2 $C_2H_4-O_2$ 混合气体在不同初始条件下的爆轰参数

Table 2 Detonation parameters at different initial conditions of $C_2H_4-O_2$ mixture

p / kPa	φ	D_{CJ} / (m/s)	u'_{CJ} / (m/s)	T_{VN} / K	Δ_1 / μm	$\dot{\sigma}_{\max}$ / (10^7 s^{-1})	ϵ_1	χ	λ / mm
100	1.0	2 373.9	1 282.1	2 036.5	16.143	9.240	6.236	7.26	0.65
30	1.0	2 316.0	1 247.9	1 964.3	49.557	2.568	5.514	5.62	2.10
100	0.4	1 973.4	1 069.9	1 770.6	52.233	2.441	7.751	9.24	2.01

理论配比的 $C_2H_4-O_2$ 混合气体在不同初始压力条件下,初始压力与 ZND 诱导区长度及最大放热速率之间的关系如图 7 所示,压力与诱导区长度之间呈指数衰减关系,也即压力越大对应的诱导区越小,而诱导区越小对应的最大放热速率越大,由图 8 可得到同样的趋势关系。

$C_2H_4-O_2$ 混合气体在初始压力为 100 kPa 时不同化学当量比条件下的 ZND 诱导区长度如图 8 所示。由图 8 可知,诱导区长度随当量比的变化趋势呈“U”型,当量比为 1.8 时诱导区最小, $\Delta_{1,\min} = 11.584 \mu\text{m}$ 。当量比远离 1.8 时,诱导区长度随着当量比的改变而缓慢增大,但当量比大于 1.8 侧诱导区增大坡度明显大于当量比小于 1.8 侧。

爆轰胞格尺寸与诱导区的长度之间的关系为, $\lambda = A\Delta_1$,通过化学动力学计算可以得出量纲一参数 A 与初始压力的关系如图 9 所示,参量拟合关系为

$$A = 43.815 (1 + p_1/p_0)^{-0.12371} \quad (4)$$

式中: p_1 为 $C_2H_4-O_2$ 混合气体初始压力, p_0 为标准压力,即 $p_0 = 100 \text{ kPa}$ 。

初始压力为 100 kPa 时,量纲一参数 A 与当量比 φ 之间的关系如图 10 所示,其参量拟合关系为

$$A = 8.531 \exp(\varphi/3.135) + 28.644 \quad (5)$$

基于式(4)~(5)定量计算 $C_2H_4-O_2$ 在不同初始条件下的爆轰胞格尺寸,并和实验数据^[16-18] 对比,如图 11 所示,实验值与理论预测曲线基本吻合,爆轰胞格尺寸随着初始压力的增加而减小,这与图 7 中压力和诱导区长度的变化趋势类似,可推断爆轰胞格尺寸依赖于诱导区长度。

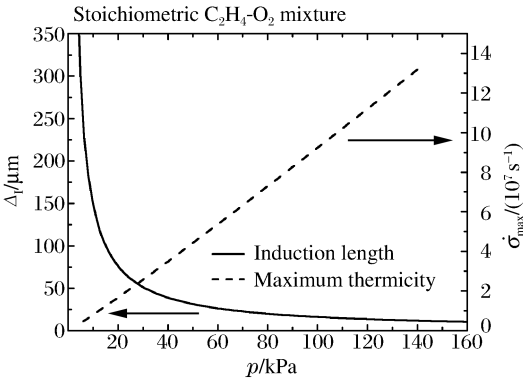


图 7 初始压力与 ZND 诱导区和最大放热速率之间函数关系

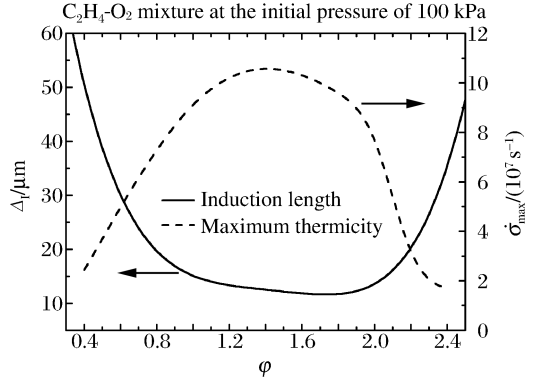


图 8 当量比与 ZND 诱导区和最大放热速率之间函数关系

Fig. 7 Relation among initial pressure and ZND induction length as well as maximum thermicity

Fig. 8 Relation among equivalence ratio and ZND induction length as well as maximum thermicity

图 12 是 C₂H₄-O₂ 混合气体在初始压力为 100 kPa 时不同当量比条件下的爆轰胞格尺寸实验^[19-20]和理论对比。对于不稳定爆轰物质,通常情况下爆轰直径 d_c 约为爆轰胞格尺寸 λ 的 13 倍,即 $d_c \approx 13\lambda$ ^[21],因此通过爆轰直径的测量即可推测爆轰尺寸的大小。图 12 表明,爆轰胞格尺寸最小值位于 $\phi = 1.8$,这与图 8 中当量比与诱导区长度的关系吻合。

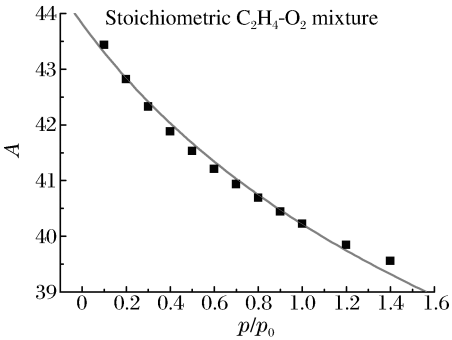


图 9 初始压力与参数 A 的关系

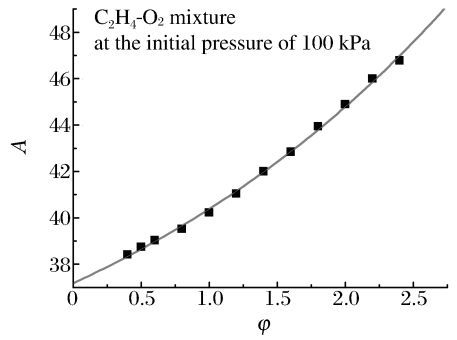


图 10 当量比与参数 A 的关系

Fig. 9 Initial pressure as a function of parameter A

Fig. 10 Equivalence ratio as a function of parameter A

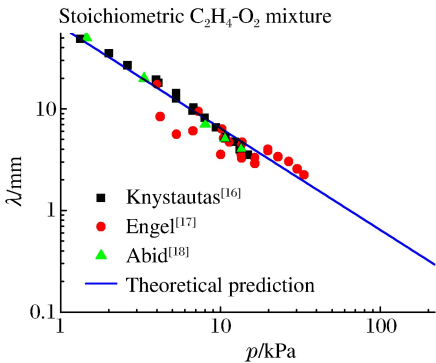


图 11 不同初始压力下的胞格尺寸

Fig. 11 Cell size data at different initial pressures

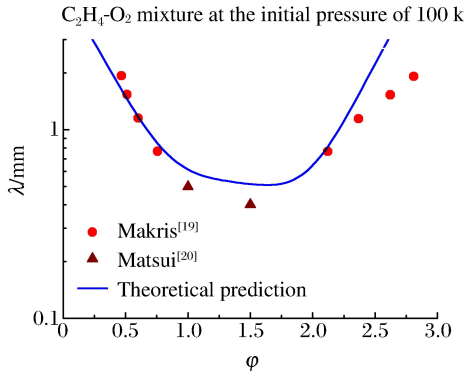


图 12 不同当量比时的胞格尺寸

Fig. 12 Cell size data at different equivalence ratios

以上通过 C₂H₄-O₂ 混合气体中爆轰胞格尺寸的实验值与理论的对比表明二者的耦合性较好,因此利用化学动力学理论和 Ng 模型可以较精确地预测 C₂H₄-O₂ 在不同初始条件下的爆轰胞格尺寸。

2.2 直接起爆临界起爆能量预测

爆轰胞格尺寸可以作为判断可燃气体爆轰敏感度的参数,并可以作为中间参数用于计算直接起爆的临界起爆能量,因此结合 Lee 的表面积能量模型^[22-23],可以得出临界起爆能量的模型。

Lee 的表面积能量模型^[22-23]的本质为:点爆炸引起的爆轰波从过驱爆轰衰减到 CJ 状态时,球面爆轰波表面所含的能量等于平面爆轰在临界直径中的能量,因此

$$4\pi R^{*2} = d_c^2 \pi / 4 \quad (6)$$

由此可以得到爆轰核心半径为 $R^* = d_c/4$,由强爆炸波理论可知,爆炸波能量为

$$E_b = 4\pi I \gamma p M_s^2 R_s'^3 \quad (7)$$

依据 Zel'dovich 准则,当爆炸波衰减到 $M_s = M_{CJ}$ 时,可以得到 $R_s' = R^*$ 。

在 $C_2H_4-O_2$ 混合气体中, $d_c = 13\lambda$ ^[21],因此临界起爆能量即为

$$E_c = 4\pi \gamma p M_{CJ}^2 I \left(\frac{13\lambda}{4} \right)^3 = \frac{2197}{16} \pi \rho_0 v_{CJ} I \lambda^3 \quad (8)$$

式中: ρ_0 为混合气体初始密度, v_{CJ} 是 CJ 爆轰速度, I 是定常数(当 $\gamma = 1.4$ 时, $I = 0.423$),爆轰胞格尺寸 λ 可通过上节中的化学动力学理论和 Ng 模型计算得出。

结合化学动力学计算得出的爆轰胞格尺寸和 Lee 表面积能量模型^[22-23]可得出 $C_2H_4-O_2$ 混合气体直接起爆临界起爆能量的理论值,与实验值的对比结果如图 13 和图 14 所示。

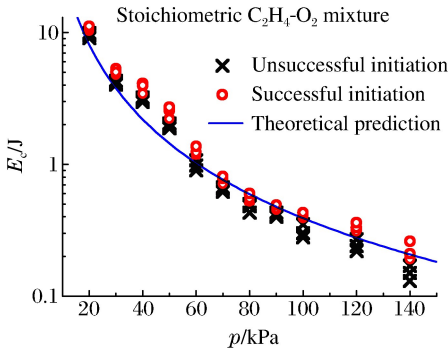


图 13 不同初始压力下的临界起爆能量

Fig. 13 Critical initiation energy at different initial pressures

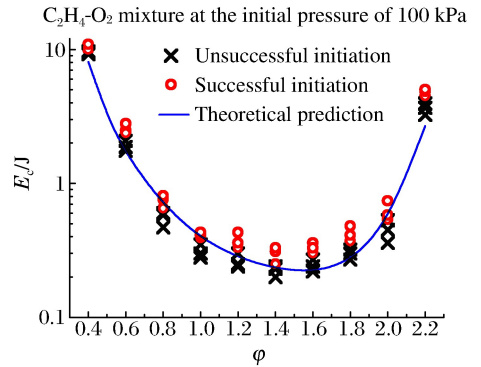


图 14 不同当量比时的临界起爆能量

Fig. 14 Critical initiation energy at different equivalence ratios

由图 13 可以得出理论配比的 $C_2H_4-O_2$ 混合气体直接起爆的临界起爆能量与初始压力之间拟合参量关系为

$$E_c = 0.332(p_1/p_0)^{-2.017} \quad (9)$$

由图 13 可知,理论配比的 $C_2H_4-O_2$ 混合气体直接起爆的临界起爆能量与初始压力呈指数衰减关系,即初始压力越低,临界起爆能量越高;图 14 表明在初始压力为 100 kPa 时,临界起爆能量与当量比呈“U”型关系,临界起爆能量的最小值位于 $\phi = 1.6$ 附近。

由图 14 可以得出 100 kPa 初始压力下的 $C_2H_4-O_2$ 混合气体直接起爆的临界起爆能量与当量比之间拟合参量关系为

$$E_c = \exp [3.951 (\phi - 1.401)^2 - 1.9] \quad (10)$$

图 13~14 表明:临界起爆能量与初始条件的变化趋势,与诱导区长度及爆轰胞格尺寸的变化趋势基本相同,因此可推断临界起爆能量依赖于诱导区长度和爆轰胞格尺寸。结合用化学动力学理论计算得到的爆轰胞格尺寸和 Lee 表面积能量模型可以比较准确地预测 $C_2H_4-O_2$ 在不同初始条件下直接起爆的临界起爆能量。

3 结 论

(1)结合化学动力学理论计算和 Ng 模型,预测 $C_2H_4-O_2$ 混合气体在不同初始条件下的爆轰胞格尺寸,确定爆轰胞格尺寸与 ZND 诱导区长度之间的比例因数 A 在不同初始压力与化学当量比的条件下分别为: $A = 43.815(1 + p_1/p_0)^{-0.12371}$ 和 $A = 8.531 \exp(\phi/3.135) + 28.644$ 。根据该公式可以定量计算

爆轰胞格尺寸,且与实验结果基本吻合。

(1)C₂H₄-O₂混合气体直接起爆的临界起爆能量与初始条件关系的变化趋势,与诱导区长度和爆轰胞格尺寸的变化趋势基本相同,因此可推断临界起爆能量依赖于诱导区长度和爆轰胞格尺寸。

(3)把爆轰胞格尺寸作为中间特征参数并结合 Lee 的表面积能量模型,得出 C₂H₄-O₂混合气体直接起爆的临界起爆能量与初始压力和化学当量比的参量拟合关系分别为 $E_c = 0.332(p_1/p_0)^{-2.017}$ 和 $E_c = \exp[3.951(\varphi - 1.401)^2 - 1.9]$ 。实验数据与预测值的比较表明,本文中提出的模型能够较精确地预测 C₂H₄-O₂混合气体在不同初始条件下直接爆炸起爆的临界起爆能量。

参考文献:

- [1] Cooper M, Shepherd J E. The effect of transient nozzle flow on detonation tube impulse[C]//40th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit, Fort Lauderdale; American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2004,3914:1-22.
- [2] Liang Z X, Zhu Y J, Yang J M. Dependence of PDE performance on divergent nozzle and partial fuel filling[J]. Shock Waves, 2009, Part IV :221-226.
- [3] Li C, Kailasanath K, Patnaik G. A numerical study of flow field evolution in a pulse detonation engine[C]//Thirty-eighth AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, AIAA Paper 2000-0314, 2000.
- [4] Lee J H S. Initiation of gaseous detonation[J]. Annual Review of Physical Chemistry, 1977,28:75-104.
- [5] Lee J H S. Dynamic parameters of gaseous detonations[J]. Annual Review of Fluid Mechanics, 1984,16:311-336.
- [6] Lee J H S, Higgins A J. Comments on criteria for direct initiation of detonation[J]. Philosophical Transactions of the Royal Society: A, 1999,357(1764):3503-3521.
- [7] Knystautas R, Lee J H S. On the effective energy for direct initiation of gaseous detonations[J]. Combustion and Flame, 1976,27:221-228.
- [8] Kamenskihs V, Ng H D, Lee J H S. Measurement of critical energy for direct initiation of spherical detonations in high-pressure H₂-O₂ mixtures[J]. Combustion and Flame, 2010,157(9):1795-1799.
- [9] Zhang B, Kamenskihs V, Ng H D, et al. Direct blast initiation of spherical gaseous detonation in highly argon diluted mixtures[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2011,33(2):2265-2271.
- [10] Shepherd J E. Chemical kinetics of hydrogen-air-diluent detonations[J]. Progress in Astronautics and Aeronautics, 1986,106:263-293.
- [11] Varatharajan B, Williams F A. Chemical-kinetic descriptions of high-temperature ignition and detonation of acetylene-oxygen-diluent systems[J]. Combustion and Flame, 2001,124(4):625-645.
- [12] Kee R J, Rupley F M, Miller J A. Chemkin-II: A Fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical kinetics[R]. Sandia National Laboratories Report; SAND89-8009, 1989.
- [13] Ng H D. The effect of chemical reaction kinetics on the structure of gaseous detonations[D]. Montreal: McGill University, 2005.
- [14] Ng H D, Ju Y, Lee J H S. Assessment of detonation hazards in high pressure hydrogen storage from chemical sensitivity analysis[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2007,32(1):93-99.
- [15] Ng H D, Chao J, Yatsufusa T, et al. Measurement and chemical kinetic prediction of detonation sensitivity and cellular structure characteristics in dimethyl ether-oxygen mixtures[J]. Fuel, 2009,88(1):124-131.
- [16] Knystautas R, Lee J H, Guirao C M. The critical tube diameter for detonation failure in hydrocarbon-air mixtures [J]. Combustion and Flame, 1982,48(1):63-83.
- [17] Engel C D, Strehlow R A. Transverse waves in detonations (II): Structure and spacing in H₂-O₂, C₂H₂-O₂, C₂H₄-O₂ and CH₄-O₂ systems[J]. AIAA Journal, 1969,7(3):492-496.
- [18] Abid S, Dupre G, Paillard C. Oxidation of gaseous unsymmetrical dimethylhydrazine at high temperatures and detonation of UDMH/O₂ mixtures[J]. Progress in Astronautics and Aeronautics, 1991,153:162-181.
- [19] Makris A, Oh T J, Lee J H S, et al. Critical diameter for the transmission of a detonation wave into a porous medium[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 1994,25(1):65-71.

- [20] Matsui H L, Lee J H. On the measure of the relative detonation hazards of gaseous fuel-oxygen and air mixtures [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 1979, 17(1):1269-1280.
- [21] Edwards D H, Hooper G, Morgan J M. An experimental investigation of the direct initiation of spherical detonations[J]. *Acta Astronautica*, 1976, 3(1/2):117-130.
- [22] Lee J H S. Initiation of gaseous detonation[J]. *Annual Review of Physical Chemistry*, 1977, 28:75-104.
- [23] Lee J H S, Knystautas R, Guirao C M. The link between cell size, critical tube diameter, initiation energy and detonability limits[C]//*Fuel-air Explosions*. Waterloo: University of Waterloo Press, 1982:157-187.

Critical energy for direct initiation of $C_2H_4-O_2$ mixture*

ZHANG Bo^{1,2}, Lee J H S², BAI Chun-hua¹

(1. *State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China;*

2. *Department of Mechanical Engineering, McGill University, Montreal H3A 2K6, Canada*)

Abstract: The detonation cell size for the $C_2H_4-O_2$ mixture was predicted by chemical kinetics and Ng's model. And together with Lee's surface energy model, the critical energy was estimated for the direct initiation of spherical detonation in the $C_2H_4-O_2$ mixture under different initial pressures and at different equivalence ratios. The direct initiation was performed via a high voltage capacitor spark discharge and the critical energy was accurately determined from the current output analysis. Good agreement was found between the theoretical prediction and the experimental measurement. Through steady ZND analyses based on a comprehensive kinetic mechanism and by using the improved semi-empirical correlation by Ng, the factor in the relation between the cell size and its ZND induction zone length, i. e. , non-dimensional parameter A , was determined at different initial pressures and equivalence ratios as following: $A=43.815(1+p/p_0)-0.12371$ and $A=8.531 \exp(\varphi/3.135)+28.644$, respectively. The cell size can be calculated ultimately from these correlations, and the experimentally measured cell sizes agree well with the theoretical prediction data. The cell size is considered as an input intermediate characteristic parameter and used to estimate the critical energy for direct initiation based on Lee's surface energy model. The combination of chemical kinetics and theoretical models may form a quantitative theory to predict the critical energy for direct initiation. The theoretical curve fit of the parametric relationship between the critical initiation energy and the initial pressure as well as the equivalence ratio is $E_c=0.332(p/p_0)-2.017$ and $E_c=\exp[3.951(\varphi-1.401)2-1.9]$, respectively.

Key words: mechanics of explosion; critical initiation energy; direct initiation; $C_2H_4-O_2$ mixture gas; cell size; chemical kinetics; spark ignition

* Received 24 December 2010; Revised 16 May 2011

Corresponding author: ZHANG Bo, zhangb@live.cn