

# 初始温度、压力对丙烯-空气混合物爆炸极限的耦合影响

王振刚<sup>1,2</sup>, 姜杰<sup>1,2</sup>, 孟睿佳<sup>1,2</sup>, 盛楠<sup>1,2</sup>, 孙峰<sup>1,2</sup>, 文松<sup>1,2</sup>

(1. 化学品安全全国重点实验室, 山东 青岛 266000

2. 中石化安全工程研究院有限公司, 山东 青岛 266000)

**摘要:** 为有效预防丙烯在生产、储存及使用过程中的燃爆风险, 利用12L爆炸极限测试仪测定了丙烯-空气混合物在不同初始温度(20 °C~180 °C)和初始压力(0.1 MPa~0.9 MPa)条件下的爆炸极限。实验结果表明: 随初始温度、初始压力的升高丙烯爆炸上限显著上升, 爆炸下限轻微下降, 爆炸极限明显变宽。在初始温度为180 °C时, 随着压力的升高, 丙烯爆炸上限测试中碳粉生产量显著增加, 同时丙烯爆炸下限下降趋势由直线变为滑梯状曲线。通过CHETAH 11.0软件分析发现, 碳粉含量升高与高温高压条件下的热力学特性密切相关, 当压力从0.1 MPa升至0.9 MPa时, 爆炸产物中碳含量从3.82%急剧增加至25.88%, 这种显著增长主要源于两个方面: 一是高压条件促进了Boudouard反应向碳生成进行, 二是高压环境下反应物总量提升, 导致产物总量成倍增加。利用CHEMKIN软件揭示了丙烯爆炸下限条件下燃烧特性规律: 在贫燃料区, 丙烯通过自由基链式反应最终生成CO<sub>2</sub>, 使绝热火焰温度(CAFT)维持在1400 K以上。随着压力升高CAFT逐渐降低; 随着温度升高CAFT呈现压力依赖性转变: 低压(<0.5 MPa)时CAFT上升, 高压时则下降, 0.5 MPa为关键转变阈值。研究还发现初始温度、初始压力的耦合影响明显高于单因素的影响且对爆炸上限的影响明显高于爆炸下限, 耦合影响: 爆炸上限上升108%, 爆炸下限下降18.05%。初始温度单因素影响: 爆炸上限上升3.8%, 爆炸下限下降3.41%。初始压力单因素影响: 爆炸上限上升51.3%, 爆炸下限下降2.44%。研究最终建立了丙烯爆炸极限随温度、压力变化的曲线/曲面模型及拟合公式, 为工业安全设计提供数据支撑。

**关键词:** 丙烯; 爆炸极限; 初始温度; 初始压力;

中图分类号: X932

国标学科代码: 62030

文献标志码: A

## Experimental Study on the Coupling Effects of Initial Temperature and Pressure on the Explosion Limits of Propylene-Air Mixtures

WANG Zhen-gang<sup>1,2</sup>, JIANG Jie<sup>1,2</sup>, MENG Ri-ji<sup>1,2</sup>, SHENG Nan<sup>1,2</sup>, SUN Feng<sup>1,2</sup>, WEN Song<sup>1,2</sup>

(1. State Key Laboratory of Chemical Safety, Qingdao Shandong 266000, China

2. SINOPEC Research Institute of Safety Engineering Co., Ltd.)

**Abstract:** To effectively prevent explosion hazards during propylene production, storage, and utilization, the explosion limits of propylene in air under varying initial temperatures (20 °C–180 °C) and initial pressures (0.1 MPa–0.9 MPa) were measured using 12L explosion limit tester. The study revealed that as the initial temperature and pressure increase, the upper explosion limit (UEL) of propylene rises significantly, while the lower explosion limit (LEL) decreases slightly, resulting in a marked broadening of the explosion limit range. At an initial temperature of 180 °C, with the pressure increases, the carbon powder content in the explosive products significantly increases during the UEL test, and the LEL decline transitions from a linear to a sliding-curve pattern. Analysis using CHETAH 11.0 software revealed that the increase in carbon powder content is closely related to thermodynamic properties under high-temperature and high-pressure conditions. When the pressure rises from 0.1 MPa to 0.9 MPa, the carbon powder content in the explosion products surges from 3.82% to 25.88%. This significant growth primarily stems from two factors: first, high-pressure conditions promote the Boudouard reaction toward carbon formation; second, the increased total amount of reactants under high pressure leads to a multiplicative rise in product quantities. Using CHEMKIN software, the combustion characteristics of propylene under lower explosion limit conditions were investigated. In the fuel-lean region, propylene undergoes free radical chain reactions, ultimately generating CO<sub>2</sub>, which maintains the calculated adiabatic flame temperature (CAFT) above 1400 K. As pressure increases, CAFT gradually decreases. Meanwhile, with rising temperature, CAFT exhibits a pressure-dependent transition: at low pressures (<0.5 MPa), CAFT increases, whereas at high pressures, it decreases, with 0.5 MPa serving as the critical transition threshold. The coupling effects of initial temperature and pressure on explosion limits are far more pronounced than those of individual factors, with a stronger impact on the UEL than the LEL. The coupling effects caused a 108% increase in the UEL and an 18.05% decrease in the LEL. For individual factors, initial temperature alone led to a 3.8% UEL increase and a 3.41% LEL decrease, while initial pressure alone resulted in a 51.3% UEL increase and 2.44% LEL reduction. The research ultimately established curve/surface models and fitting equations describing propylene's explosion limits under varying temperature-pressure conditions, providing critical data support for industrial safety design.

**Key words:** propylene; explosion limits; initial temperature; initial pressure;

丙烯 (Propylene) 作为重要的基础有机化工原料, 在石油化工领域具有广泛的应用, 主要用于生产

聚丙烯、丙烯腈、环氧丙烷等高附加值化学品<sup>[1-3]</sup>。然而，丙烯在生产、储存和运输过程中存在较高的燃爆风险，历史上已发生多起严重事故。如 2005 年美国台塑集团烯烃联合装置因丙烯泄漏引发重大火灾事故，造成 16 人轻伤、1 人重伤<sup>[4]</sup>；2010 年南京某厂拆迁过程中管道内丙烯泄漏，引发爆炸事故，导致 22 人死亡，直接经济损失达 4784 万元<sup>[5]</sup>。特别值得关注的是，在丙烯氨氧化制丙烯腈、丙烯环氧化制环氧丙烷等典型生产工艺中<sup>[6-9]</sup>，由于需要引入空气或双氧水等氧化剂，导致工艺尾气中不可避免地残留氧气，在高温高压的工艺条件下，这种含氧环境极易引发燃爆事故。针对这一重大安全隐患，国内外学者在可燃气体爆炸极限测试及惰化技术方面开展了深入研究。罗振敏<sup>[10-11]</sup>等使用可燃气体和液体蒸气爆炸极限测试装置，系统研究了不同配比 N<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub> 混合气体对丙烯爆炸极限、危险度、临界氧体积分数和惰化效果的影响，通过构建爆炸三角图定量揭示了 CO<sub>2</sub> 相较于氮气具有更优异的抑爆性能，研究团队进一步结合反应动力学模拟和气体动理论分析，阐明了 CO<sub>2</sub> 优越抑爆性能的微观机理：一方面，CO<sub>2</sub> 较高的比热容可更有效地吸收燃烧热量；另一方面，CO<sub>2</sub> 分子与活性自由基（如·OH）的碰撞猝灭效率显著高于 N<sub>2</sub>。高娜<sup>[12]</sup>等研究了甲烷在不同初始温度、压力下的爆炸极限，结果表明初始压力/初始温度对爆炸下限的影响与初始温度/初始压力的相关性并不显著，初始温度和初始压力对爆炸极限的耦合影响比单一因素对其的影响大，且相较而言，其对爆炸上限的影响更为显著。刘可心<sup>[13]</sup>等测试了初始温度、初始压力、当量比对甲烷最大爆炸压力的双因素、多因素耦合影响规律，利用 1stOpt 构建了非线性回归预测模型，对比预测结果与实验结果，该模型在测试范围内具有较高的精度和适应性。王康<sup>[14]</sup>等测试了氧含量对丙烯爆炸极限、爆炸压力的影响。王振刚<sup>[15]</sup>等针对丙烯环氧化工况利用爆轰管测试得到了三种工况温度、压力下的爆炸三角图和极限氧含量。刘姝廷<sup>[16]</sup>等开发了基于 KPLS 算法的丙烯爆炸极限预测模型，并验证了该算法的有效性。针对爆炸产物，宋来臣<sup>[17]</sup>向低浓度甲烷中通入爆炸下限更低的可燃气体，多次爆炸实验后在爆炸容器内壁收集到固体产物，采用红外和扫描电镜对产物分析后可知：固体生成物种含有大量的芳香烃结构和-OH 官能团，芳香烃结构在炭黑形成过程中起重要作用。本研究在高温高压（180 °C）条件下进行丙烯爆炸极限测试时，观察到显著的炭黑生成现象。为深入探究这一现象的形成机制，研究团队采用 CHETAH 11.0 热力学分析软件，系统考察了不同压力条件（0.1-0.9 MPa）对爆炸产物的影响规律。通过建立热力学平衡模型，从反应机理层面揭示了压力升高导致碳粉含量增加的本质原因。分析结果表明，在高温高压条件下，Boudouard 反应（ $2\text{CO} \rightleftharpoons \text{C} + \text{CO}_2$ ）的平衡向右移动是促进碳粉生成的主要因素。

为有效预防丙烯燃爆事故，获取其在不同温度、压力条件下的精确爆炸极限数据至关重要，任常兴、闫侠等学者<sup>[18-19]</sup>系统分析了现行主流测试标准，指出针对高温高压工况的燃爆参数测试标准体系仍存在不足。当前国际通用的爆炸极限测试标准主要包括：ASTM E 618<sup>[20]</sup>（5L 球）、EN 1839<sup>[21]</sup>（5L 球或长径比 1:1 的管）、ASTM E 2079<sup>[22]</sup>（7.85L 爆炸球）、ASTM E 918<sup>[23]</sup>（1L 管）、GB/T 12474<sup>[24]</sup>（内径 60mm 的管）以及最新实施的 GB/T 42368<sup>[25]</sup>（5L\12L\20L 球）。值得注意的是，ASTM E 2079 标准明确指出，由于器壁效应的影响，采用该标准测试得到的极限氧含量（LOC）值要比内径 50mm 的管状容器测得值小 1.5vol%。基于此，本研究选用 12L 爆炸球，系统测试了丙烯在不同初始温度、初始压力条件下的爆炸极限，以期为丙烯工业安全生产及使用提供准确的基础数据。

## 1 实验

### 1.1 试验装置

12L 爆炸球，用于气体或蒸气物料燃爆参数的测试，仪器主要由 12L 球测试腔、恒温油浴、抽真空系统、动态压力采集系统及电脑控制软件组成。其主要技术参数为：温度范围室温~200 °C（控温精度±2

\*收稿日期：2025-02-19；修回日期：2025-08-11；

第一作者：王振刚（1983—），男，硕士，高工。E-mail: wangzg.qday@sinopec.com;

通信作者：姜杰（1980—），男，博士研究生，教授级高工。E-mail: jiangj.qday@sinopec.com。

°C)，压力范围常压~1 MPa。压力测量系统配置两种传感器：静态压力传感器（量程0-1 MPa，精度0.05%FS，分辨率0.01 kPa）和动态压力传感器（采样频率20 kHz）。点火参数：15 kV\30 mA\400 ms。针对传统爆炸极限测试存在的精度限制问题（常规配气步长0.1vol%），本研究采用爱迪赛恩自主研发的高精度压力传感器，将丙烯爆炸下限测试步长优化至0.02vol%，上限测试步长保持0.1vol%，显著提升了测试结果的分辨率。仪器装置示意图见1所示。

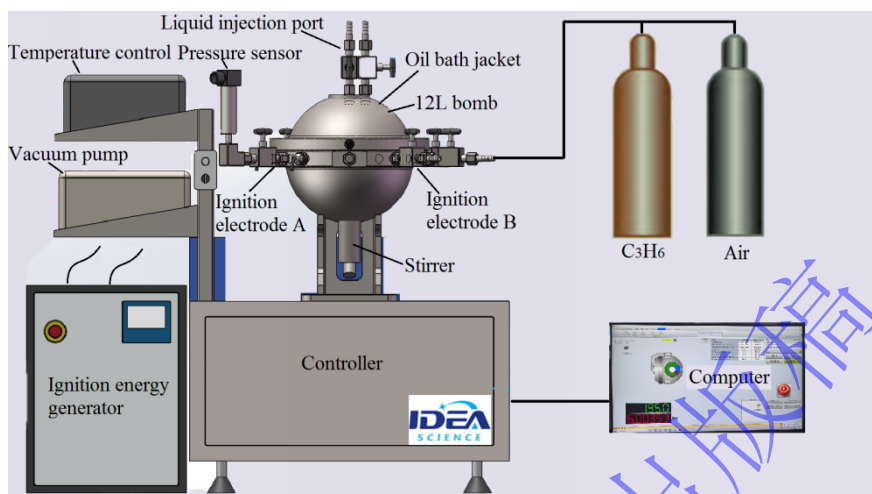


图1 12L爆炸球示意图  
Fig.1 Schematic diagram of 12L bomb

## 1.2 试验步骤

- 设置12L爆炸球油浴至目标温度；
- 待爆炸球内温度稳定至设定值 $\pm 2$  °C后，对球体和管路抽真空；
- 装置抽真空至绝压400 Pa，装置漏气速率小于60 Pa/min时判定合格；
- 按照分压配气法将丙烯、空气依次充入爆炸球；
- 充气完成后，开启搅拌5分钟，搅拌结束后等待3分钟，点火，记录爆炸压力；
- 排出废气，空气吹扫三次以上，多次实验或爆炸上限测试后开盖清理积碳，重新抽真空准备下次实验。

依据GB/T 42368-2023标准，以压力升高 $\geq 5\%$ 初始压力为爆炸判定依据，重复测试未爆炸的边界浓度三次，三次均未爆炸则认为该浓度不爆炸，取爆炸与非爆炸浓度的平均值为爆炸极限。

## 2 温度、压力单因素对爆炸极限的影响

图2为丙烯-空气混合在不同初始温度和初始压力下的爆炸极限。由图可知：在常压或常温条件下，随着初始温度、初始压力的升高，爆炸上限显著升高，爆炸下限轻微下降，爆炸极限区域变宽。这一现象可通过链式反应理论解释：温度升高增加了分子动能和自由基础撞频率，而压力增大缩短了分子间距，两者均促进了链式反应的持续传播，从而扩大了爆炸极限区域。

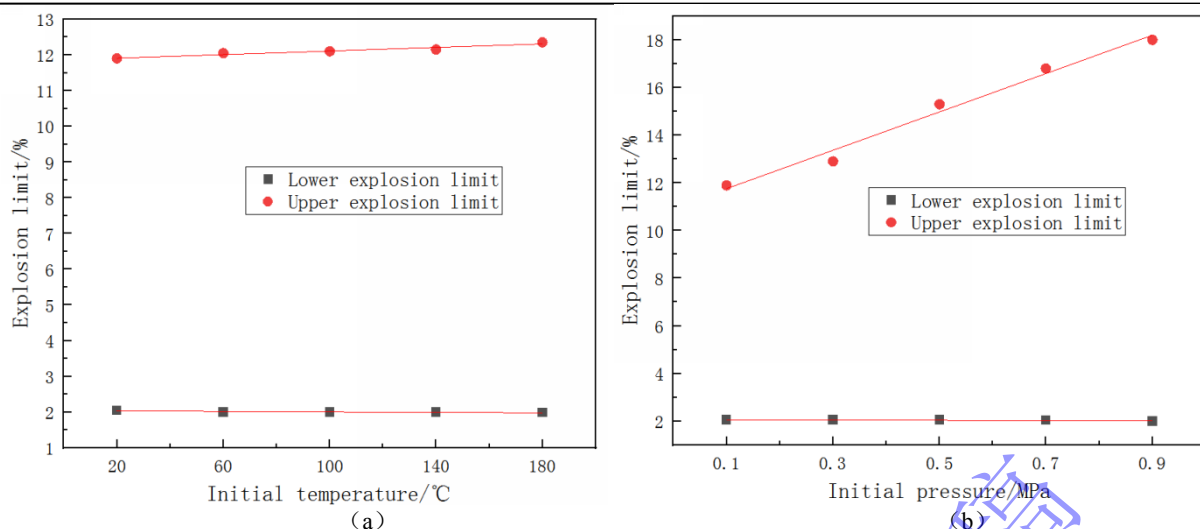


图2 初始温度、压力对丙烯爆炸极限的影响

Fig.2 Propylene explosion limits varied with temperature or pressure

由图2可知，在常压条件下，温度由20 °C升至180 °C，爆炸上限从11.90vol%增至12.35vol%（升高0.45vol%），爆炸下限从2.05vol%降至1.98vol%（降低0.07vol%）；在20 °C条件下，初始压力由0.1 MPa升至0.9 MPa，爆炸上限从11.9vol%增至18.0vol%（升高6.1vol%），爆炸下限从2.05vol%降至2.00vol%（降低0.07vol%）。对数据进行绘图，得到其线性关系式：

$$y=A+Bx \quad (1)$$

式中：y-爆炸极限值，x-温度/压力参数。

当x为温度时， $x \in [20, 180]$ ；当x为压力时， $x \in [0.1, 0.9]$ 。线性公式的系数如表1示。

表1 拟合函数的参数

Table 1 Parameters for fitting function

y/%	x	A	B	R <sup>2</sup>
UEL	°C	11.86±0.044	0.0025±0.0004	0.9346
UEL	MPa	10.955±0.343	8.05±0.59652	0.9838
LEL	°C	2.041±0.0145	-3.5E-4±1.26E-4	0.72
LEL	MPa	2.066±0.0115	-0.06±0.02	0.75

通过比较拟合公式R<sup>2</sup>可知，在上述测试范围内初始温度和初始压力变化对爆炸下限影响相对有限，其线性拟合决定系数较爆炸上限明显偏低。这一现象主要源于两个实验因素：1) 爆炸下限的绝对变化量较小（0.05vol%-0.07vol%），接近测试系统的配气精度极限（0.01vol%）；2) 为确保压力曲线判据的可靠性，测试步长设定为0.02vol%，与下限变化量处于同一数量级。尽管如此，考虑到工业安全标准通常要求0.1vol%的精度等级，本研究建立的线性模型完全能够满足工程应用需求。

### 3 温度、压力对丙烯爆炸极限的耦合影响

#### 3.1 丙烯爆炸上限

图3为丙烯在不同初始压力和初始温度下得到的爆炸上限，由图可知随着温度或压力的升高，丙烯的爆炸上限均逐渐升高，图中曲线斜率随压力或温度的升高也逐渐增大。

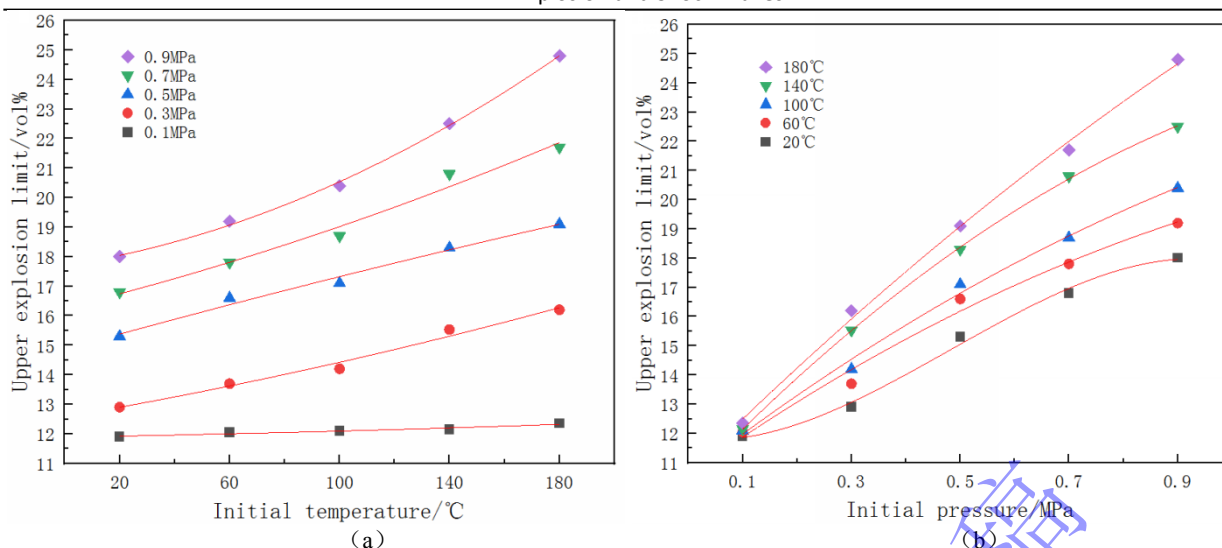


图3 温度、压力对丙烯爆炸上限的影响

Fig.3 Propylene UEL varied with initial temperature or pressure

实验数据表明，温度和压力对丙烯爆炸上限的耦合效应呈现显著的非线性特征。当初始温度和压力同时升高时（见表2），爆炸上限增幅达到108%，远超温度单独作用（3.8%）和压力单独作用（51.3%）的简单叠加（55.1%）。为直观表征这一协同效应，建立了三维响应曲面模型（图4），其拟合优度 $R^2 > 0.99$ ，拟合函数参数详见表3。该模型准确揭示了高温高压区（ $> 120\text{ }^\circ\text{C}$ ， $> 0.6\text{ MPa}$ ）爆炸上限的加速上升现象，为工业安全设计提供了重要依据。

表2 初始温度、压力对爆炸上限的影响

Table 2 Propylene UEL varied with initial temperature or pressure

序号	爆炸上限/vol%	爆炸上限/vol%	上升幅度/%
1	11.9 (20 °C、0.1 MPa)	24.8 (180 °C、0.9 MPa)	108
2	11.9 (20 °C、0.1 MPa)	12.35 (180 °C、0.1 MPa)	3.8
3	11.9 (20 °C、0.1 MPa)	18.0 (20 °C、0.9 MPa)	51.3

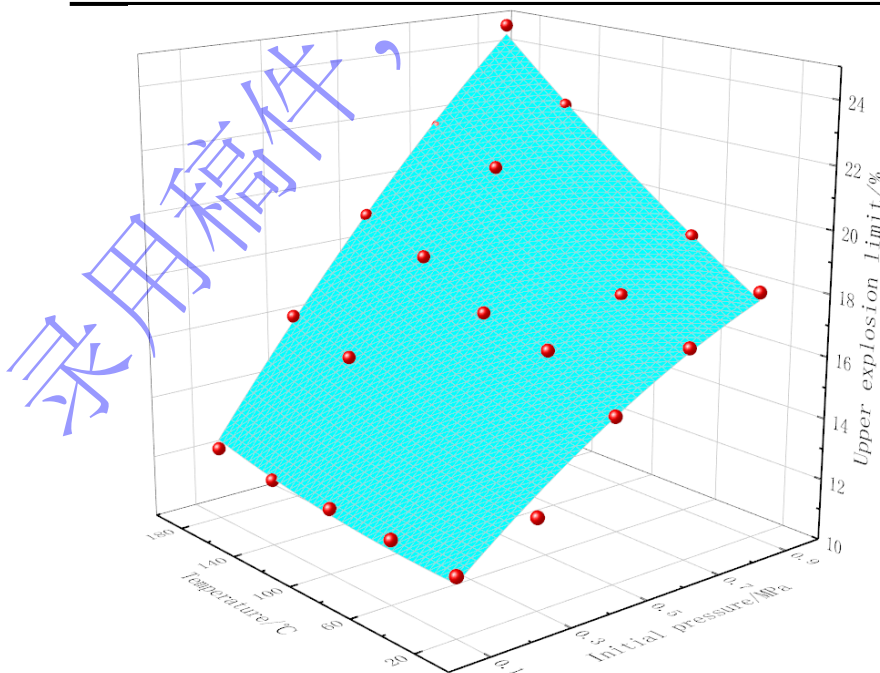


图4 初始温度、压力对丙烯爆炸上限的耦合影响

Fig.4 Propylene UEL curve with initial temperature and pressure

表3 拟合函数的参数

Table3 Parameters for fitting function

模型	Poly2D
----	--------

方程	$z=z_0+a*x+b*y+c*x^2+d*y^2+f*x*y$
$z_0$	$10.69811 \pm 0.38152$
$a$	$10.32931 \pm 1.15623$
$b$	$-0.00637 \pm 0.00578$
$c$	$-3.65357 \pm 1.04212$
$d$	$3.99107E-5 \pm 2.60529E-5$
$f$	$0.04521 \pm 0.00436$
$R^2$	0.99266

实验观察发现：当丙烯在爆炸上限附近爆炸后内会产生大量碳粉。为探究这一现象，采用CHETAH 11.0软件基于吉布斯自由能最小化原理，计算了丙烯在空气中的燃烧产物组成，计算参数设定为：反应温度取丙烯最低火焰温度（LLFT）1418 K，压力为初始压力的1.05倍。如表4所示，模拟结果准确反映了实际观察到的碳粉生成现象，为理解高压条件下碳粉形成机理提供了理论依据。

表4 丙烯180 °C、不同初始压力下燃烧产物计算结果

Table 4 Combustion products of propylene at 180 °C under various pressures

产物	0.1 MPa/%	0.3 MPa/%	0.5 MPa/%	0.7 MPa/%	0.9 MPa/%
Ar	0.57869	0.49768	0.4507	0.41505	0.3771
CH <sub>4</sub>	0.54179	1.8182	3.0962	4.3484	5.7337
CO	19.5	12.289	9.1392	7.2639	5.8482
CO <sub>2</sub>	2.2728	3.0184	2.9603	2.7398	2.3873
H <sub>2</sub>	23.148	23.19	22.724	22.248	22.035
H <sub>2</sub> O	1.8815	3.972	5.1332	5.8523	6.2729
NH <sub>3</sub>	0.0047617	0.0148	0.024235	0.033	0.04168
N <sub>2</sub>	48.248	41.489	37.566	34.59	31.421
C	3.8244	13.711	18.906	22.509	25.882

由表4揭示了丙烯爆炸上限测试时碳粉生成的典型特征：压力升高，爆炸上限升高，体系氧含量降低，耗氧的一氧化碳和二氧化碳总量明显降低，不耗氧的碳生成量增加。同时，压力升高，Boudouard反应 ( $2CO \rightleftharpoons C + CO_2$ ) 向右移动。一氧化碳在这两种作用下大量消耗，但二氧化碳在Boudouard反应的补充下含量变化不明显。实验观察显示，高压条件下爆炸球内碳粉沉积量剧增，这是反应物总量成倍增加与碳生成比例上升共同作用的结果，该发现为理解高压燃烧的碳粉生成机制提供了重要依据。

### 3.2 丙烯爆炸下限

图5展示了丙烯爆炸下限随初始压力和温度的变化规律。在压力影响方面，常压不同温度条件下（0.1 MPa）爆炸下限变化幅度较小（2.05~2.00 vol%），受测试精度限制趋势不明显；随着压力升高，下限呈现明显的线性下降趋势，且降幅随压力增大而增强，该线性规律与已有文献报道结果一致<sup>[26-30]</sup>。在温度影响方面，低温区（ $\leq 60^\circ\text{C}$ ）下限变化受测试精度限制不明显，中温区（ $60^\circ\text{C} \sim 140^\circ\text{C}$ ）呈现线性下降，而高温区（ $> 140^\circ\text{C}$ ）则转变为非线性“滑梯状”下降曲线，这种非线性特征与高温或高压条件下的测试结果相符<sup>[31-32]</sup>。从机理上看，线性段符合经典的链式反应理论，而非线性转变可能与高温/高压耦合下分子碰撞频率的指数增长有关。

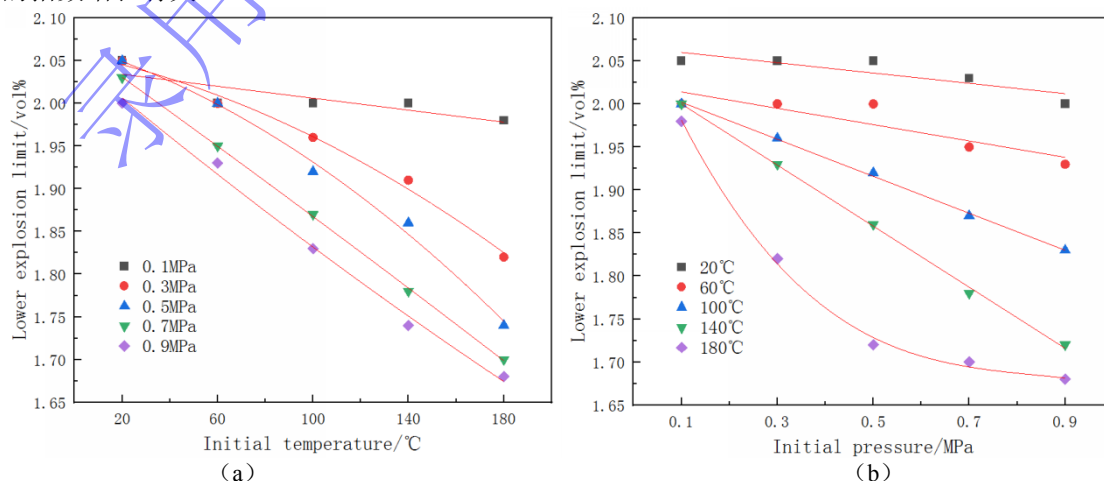


图5 温度、压力对丙烯爆炸下限的影响

Fig.5 Propylene LEL varied with initial temperature or pressure

实验数据表明，温度和压力对丙烯爆炸下限的耦合效应显著。当初始温度和压力同时升高时（见表

5), 爆炸下限降幅为108%, 远超温度单独作用(3.41%)和压力单独作用(2.44%)的简单叠加(5.85%)。为直观表征这一协同效应, 建立了三维响应曲面模型(图6), 其拟合优度 $R^2 > 0.96$ , 拟合函数参数详见表6。

表5 初始温度、压力对爆炸下限的影响  
Table 5 Propylene LEL varied with initial temperature or pressure

序号	爆炸下限/vol%	爆炸下限/vol%	下降幅度/%
1	2.05 (20 °C、0.1 MPa)	1.68 (180 °C、0.9 MPa)	18.05
2	2.05 (20 °C、0.1 MPa)	1.98 (180 °C、0.1 MPa)	3.41
3	2.05 (20 °C、0.1 MPa)	2.00 (20 °C、0.9 MPa)	2.44

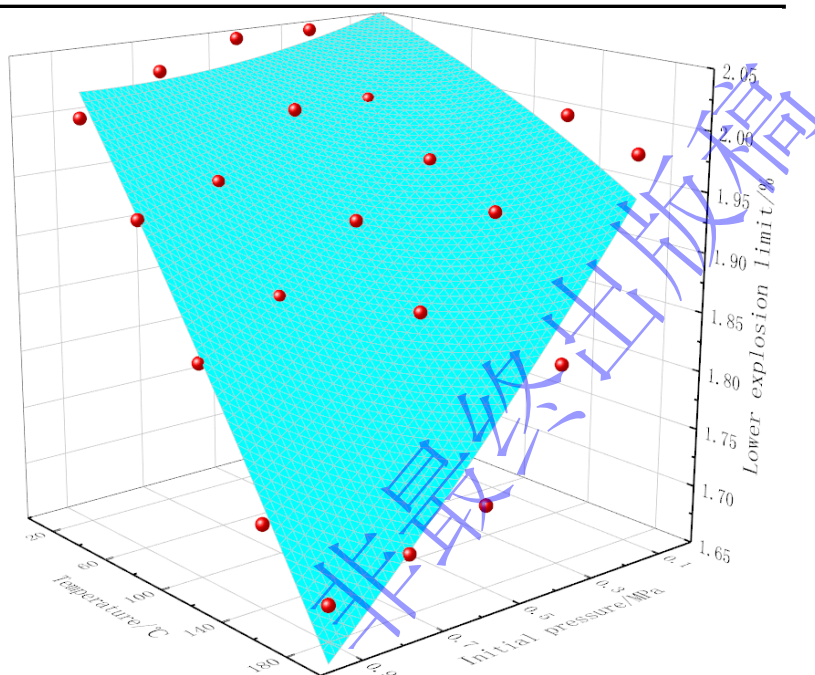
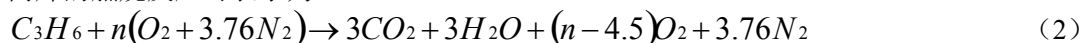


图6 初始温度、压力对丙烯爆炸下限的耦合影响  
Fig.6 Propylene LEL curve with initial temperature and pressure

表6 拟合函数的参数  
Table 6 Parameters for fitting function

模型	Poly2D
方程	$z=z_0+a*x+b*y+c*x^2+d*y^2+f*x*y;$
$z_0$	$2.07291 \pm 0.02862$
$a$	$-0.06986 \pm 0.08673$
$b$	$-1.96429E-4 \pm 4.33653E-4$
$c$	$0.06786 \pm 0.07817$
$d$	$-1.51786E-6 \pm 1.95426E-6$
$f$	$-0.00215 \pm 3.27011E-4$
$R^2$	0.96132

准确测定不同温度压力下可燃气体的爆炸下限对工业燃爆防控至关重要, 本研究采用基于绝热火焰温度法的成熟计算方法, 利用CHEMKIN软件的相平衡模块, 结合AramcoMech3.0燃烧反应动力学机理, 系统模拟了丙烯在不同温度、压力和浓度条件下的绝热火焰温度(CAFT)与爆炸下限的关系。在爆炸下限条件下, 1mol丙烯的燃烧反应可表示为:



假设反应放出的热量全部用来加热产物, 则使用NASA多项式拟合 $C_p(T)$ , 迭代求解能量守恒方程如下

$$\Delta H_{\text{反应}} + \int_{T_i}^{T_{\text{ad}}} (n_{CO_2} C_{p, CO_2} + n_{H_2O} C_{p, H_2O} + n_{O_2} C_{p, O_2} + n_{N_2} C_{p, N_2} + \dots) dT = 0 \quad (3)$$

计算得到丙烯在不同温度、压力下的绝热火焰温度见表7。

表7 丙烯在不同温度、压力下的绝热火焰温度结果

Table 7 Calculated adiabatic flame temperature results of propylene under varying temperature and pressure conditions

温度/K \ 压力	0.1 MPa/%	0.3 MPa/%	0.5 MPa/%	0.7 MPa/%	0.9 MPa/%
293	1457	1457	1457	1447	1433
333	1465	1465	1465	1440	1431
373	1497	1477	1458	1433	1414
413	1529	1495	1461	1422	1405
453	1552	1474	1425	1415	1392

在贫燃料区的爆炸下限测试中，丙烯燃烧过程经历典型的链式反应路径：首先裂解生成H、OH、O等活性自由基，继而转化为H<sub>2</sub>和CO，最终通过CO氧化为CO<sub>2</sub>的强放热过程完成燃烧。这一反应机理导致爆炸下限条件下的绝热火焰温度（CAFT）始终维持在1400 K以上。具体而言，丙烯的CAFT值在0.1 MPa/180 °C时达到峰值1552 K，而在0.9 MPa/180 °C时降至最低值1392 K。由表7可知，在同一温度下，随着压力的升高，CAFT逐渐降低，这是由于：1) 压力增加导致分子间距缩小，爆炸下限随之降低；2) 单位体积反应物燃烧释放的总热量随之减少；3) 产物种类和热容保持相对稳定。研究发现，同一压力下温度对CAFT的影响呈现显著的压力依赖性转变特征。在低压区间（P<0.5 MPa），温度升高使CAFT单调上升，这主要是因为：虽然温度升高导致爆炸下限轻微下降，但初始温度提升直接增加了产物的显热，其热力学增益超过燃烧热减少的影响。而在高压区间（P≥0.5 MPa），温度升高反而导致CAFT下降，这是由于：1) 分子碰撞概率随温度呈指数增长，使爆炸下限显著降低；2) 燃烧热损失速率超过温度提升带来的显热增益。

## 4 结论

随着初始温度或压力的升高，丙烯-空气混合物的爆炸下限轻微降低，爆炸上限显著升高，爆炸极限区域变宽。在高温高压条件下，丙烯爆炸上限测试时观察到大量碳粉生成，通过CHETAH 11.0热力学分析表明，当压力从0.1 MPa升至0.9 MPa时，爆炸产物中碳含量从3.82%急剧增加至25.88%。这种显著增长主要源于两个方面：一是高压条件促进了Boudouard反应向碳生成进行；二是高压环境下反应物总量提升，导致产物总量成倍增加。

在180°C高温条件下，丙烯爆炸下限随压力升高的变化规律呈现出显著的非线性特征，其下降趋势由常规的线性关系转变为明显的“滑梯状”曲线。这一现象暗示在极端工况下可能存在新的反应机理或传质过程。为深入探究这一转变机制并拓展模型适用性，研究团队正在研制最高工作压力达6 MPa的新型爆炸极限测试系统，该系统将用于验证现有数学模型在超高压（>0.9MPa）区间的预测准确性，并为建立更完善的高压爆炸极限理论模型提供实验基础。

初始温度和初始压力对丙烯爆炸上限或下限的耦合影响远超单一因素的简单叠加。具体而言，耦合影响：上限上升 108%，下限降低 18.05%；温度影响：上限上升 3.8%，下限降低 3.41%；压力影响：上限上升 51.3%，下限降低 2.44%。

利用 CHEMKIN 软件揭示了丙烯爆炸下限条件下燃烧特性规律：在贫燃料区，丙烯通过自由基链式反应最终生成 CO<sub>2</sub>，使 CAFT 维持在 1400 K 以上。随着压力升高 CAFT 逐渐减低；随着温度升高 CAFT 呈现压力依赖性转变：低压（<0.5 MPa）时 CAFT 上升，高压时则下降，0.5 MPa 为关键转变阈值。

## 参考文献

- [1] LIU Y J, ZHAO C Y, SUN B, et al. TS-1 with abundant micropore channel-supported Au catalysts toward improved performance in gas-phase epoxidation of propylene [J]. ACS Sustainable Chem. Eng. 2023, 11, 7042-7052. DOI: 10.1021/acssuschemeng.3c00018.
- [2] ZHAO C Y, ZHU H W, LIU Y J, et al. Micropore blocking strategy for mitigating adsorption and diffusion limitations in the direct epoxidation of propylene [J]. Chemical Engineering Science 253 (2022) 117574. DOI: 10.1016/j.ces.2022.117574.
- [3] LIU Y J, ZHAO C Y, SUN B, et al. Preparation and modification of Au/TS-1 catalyst in the direct epoxidation of propylene with H<sub>2</sub> and O<sub>2</sub> [J]. Applied Catalysis A, General 624 (2021) 118329. DOI:10.1016/j.apcata.2021.118329.
- [4] 葛安卡. 台塑集团丙烯泄漏火灾爆炸事故 [J]. 现代职业安全, 2014, (3): 87-89.  
Ge A K. Fire and explosion accident of propylene leakage in Formosa Group [J]. Modern Occupational Safety, 2014, (3): 87-89.

- [5] 张圣柱, 多英全, 石超, 等. 由“7·28”南京丙烯管道爆燃事故探讨我国地下管道存在的安全问题 [J]. 中国安全生产科学技术, 2011, 7(2): 46-49.  
ZHANG S Z, DUO Y Q, SHI C, et al. Investigation of the problems in Chinese underground pipeline from “7·28” propylene pipeline deflagration accident in Nanjing [J]. Journal of Safety Science and Technology, 2011, 7(2): 46-49.
- [6] 赵磊, 文松, 冯俊杰, 等. 丙烯氨氧化制丙烯腈反应器开车过程尾气燃爆危险性研究 [J]. 安全与环境学报, 2019(19)1: 173-179. DOI: 10.13637/j.issn.1009-6094.2019.01.027.  
ZHAO L, WEN S, FENG J J, et al. On the explosion hazards of the exhaust gases in the reactor of propylene ammoxidation to the acrylonitrile process [J]. Journal of Safety and Environment, 2019(19)1: 173-179. DOI: 10.13637/j.issn.1009-6094.2019.01.027.
- [7] 陈战涛. 共氧化法环氧丙烷生产工艺综述 [J]. 河南化工, 2022, 39(1): 5-8. DOI: 10.14173/j.cnki.hnhg.2022.01.022.  
Z T CHEN. Summary of propylene oxide production process by co-oxidation [J]. Henan Chemical Industry, 2022, 39(1): 5-8. DOI: 10.14173/j.cnki.hnhg.2022.01.022.
- [8] 王玲玲, 周贤太, 纪红兵. 催化丙烯选择性环氧化制备环氧丙烷研究进展 [J]. 工业催化, 2023, 31(9): 1-15. DOI: 10.3969/j.issn.1008-1143.2023.09.001.  
WANG L L, ZHOU X T, JI H B. Progress on the selective catalytic epoxidation of propylene to propylene oxide [J]. Industrial Catalysis, 2023, 31(9): 1-15. DOI: 10.3969/j.issn.1008-1143.2023.09.001.
- [9] 胡立峰, 陈彬, 王凤, 等. 我国环氧丙烷生产工艺现状分析及进展 [J]. 山东化工, 2018, 47(4): 39-43. DOI: 10.19319/j.cnki.issn.1008-021x.2018.04.015.  
HU L F, CHEN B, WANG F, et al. Analysis and progress of propylene oxide production process status in China [J]. Shandong Chemical Industry, 2018, 47(4): 39-43. DOI: 10.19319/j.cnki.issn.1008-021x.2018.04.015.
- [10] 罗振敏, 杨勇, 程方明, 等.  $N_2$  和  $CO_2$  惰化丙烯爆炸极限参数实验研究 [J]. CIESC Journal, 2020, 71(4): 1922-1928. DOI: 10.11949/0438-1157.20191167.  
LUO Z M, YANG Y, CHENG F M, et al. Experimental study on explosion limits parameters of propylene with dilution of nitrogen and carbon dioxide [J]. CIESC Journal, 2020, 71(4): 1922-1928. DOI: 10.11949/0438-1157.20191167.
- [11] 罗振敏, 邓婕, 林峰, 等.  $N_2/CO_2$  混合气体对丙烯爆炸特性的影响 [J]. 安全与环境学报, 2023, 23(10): 3568-3574. DOI: 10.13637/j.issn.1009-6094.2022.1199.  
LUO Z M, DENG J, LIN F, et al. Effect of  $N_2/CO_2$  mixture on explosion characteristics of propylene [J]. Journal of Safety and Environment, 2023, 23(10): 3568-3574. DOI: 10.13637/j.issn.1009-6094.2022.1199.
- [12] 高娜, 张延松, 胡毅亭. 温度、压力对甲烷-空气混合物爆炸极限耦合影响的实验研究 [J]. 爆炸与冲击, 2017, 37(3): 453-458. DOI: 10.11883/1001-1455(2017)03-0453-06.  
GAO N, ZHANG Y S, HU Y T. Experimental study on methane-air mixtures explosion limits at normal and elevated initial temperatures and pressure [J]. Explosion and Shock Waves, 2017, 37(3): 453-458. DOI: 10.11883/1001-1455(2017)03-0453-06.
- [13] 刘可心, 刘炜, 孙亚松. 多因素耦合作用对甲烷爆炸特性的影响 [J]. 爆炸与冲击, 2023, 43(3): 20-29. DOI: 10.11883/bzycj-2022-0352.  
LIU K X, LIU W, SUN Y S. Influence of multi-factor coupling on methane explosion characteristics [J]. Explosion and Shock Waves, 2023, 43(3): 20-29. DOI: 10.11883/bzycj-2022-0352.
- [14] 王康, 郭璐, 曹居正. 氧含量对甲烷及丙烯爆炸特性的影响 [J]. 安全, 健康和环境, 2014, 14(12): 37-40.  
WANG K, GUO L, CAO J Z. Influence of oxygen content on the explosive characteristics of methane and propylene [J]. Safety, Health and Environment, 2014, 14(12): 37-40.
- [15] 王振刚, 黄飞, 孙峰, 等. 丙烯燃爆危险性分析 [J]. 中国安全科学学报, 2012, 22(4): 59-63. DOI: 10.16265/j.cnki.issn1003-3033.2012.04.014.  
WANG Z G, HANG F, SUN F, et al. Analysis of propylene explosive hazard [J]. China Safety Science Journal, 2012, 22(4): 59-63. DOI: 10.16265/j.cnki.issn1003-3033.2012.04.014.
- [16] 刘姝廷, 高宪文. 基于 KPLSDE 的丙烯爆炸极限非线性预测研究 [J]. 东北大学学报(自然科学版), 2017, 38(11): 1521-1523+1563. DOI: 10.12068/j.issn.1005-3026.2017.11.001.  
LIU S T, GAO X W. Nonlinear prediction research on explosion limits of propylene based on kernel partial least squares [J]. Journal of Northeastern University(Natural Sciences), 2017, 38(11): 1521-1523+1563. DOI: 10.12068/j.issn.1005-3026.2017.11.001.
- [17] 宋来臣. 极低浓度甲烷气体爆炸后固体产物研究 [J]. 煤炭技术, 2025, 44(1): 194-197. DOI: 10.13301/j.cnki.ct.2025.01.039.  
SONG L C. Research on solid products after explosion of extremely low concentration methane Gas [J].

- Coal Technology, 2025, 44(1): 194-197. DOI: 10.13301/j.cnki.ct.2025.01.039.
- [18] 闫侠, 郑日有, 辛明亮, 等. 可燃气体及蒸气爆炸特性测试研究进展 [J]. 安全, 2024, 45(12): 82-87. DOI: 10.19737/j.cnki.issn1002-3631.2024.12.013.  
YAN X, ZHENG R Y, XIN M L, et al. Research progress on testing the explosion characteristics of combustible gases and vapors [J]. Safety & Security, 2024, 45(12): 82-87. DOI: 10.19737/j.cnki.issn1002-3631.2024.12.013.
- [19] 任常兴, 蒋乐章, 王玥, 等. 高温高压条件下可燃气体爆炸极限测定标准对比研究 [J]. 标准科学, 2023(2): 73-77, 100. DOI: 10.3969/j.issn.1674-5698.2023.02.012.  
REN C X, JIANG L Z, WANG Y, et al. Comparative study on determination standards for the explosion limits of the combustible gas at high temperature and pressure [J]. STANDARD SCIENCE, 2023(2): 73-77, 100. DOI: 10.3969/j.issn.1674-5698.2023.02.012.
- [20] ASTM International. Standard test method for concentration limits of flammability of chemicals(vapors and gases): ASTM E681-09(2023) [S]. West Conshohocken: ASTM International, 2009(2023).
- [21] CEN. Determination of the explosion limits and the limiting oxygen concentration (LOC) for flammable gases and vapors: BS EN1839-2017 [S]. Brussels: European Committee for Standardization, 2017.
- [22] ASTM International. Standard test methods for limiting Oxygen(oxidant) concentration in gases and vapors: ASTM E2079-07 [S]. American Society for Testing and Materials, 2013: 1-2.
- [23] ASTM International. Standard practice for determining limits of flammability of chemicals at elevated temperature and pressure: ASTM E918-83 [S]. West Conshohocken: ASTM International, 2011.
- [24] 中华人民共和国国家质量监督检验检疫总局, 中国国家标准化管理委员会. 空气中可燃气体爆炸极限测定方法: GB/T 12474-2008 [S]. 北京: 中国标准出版社, 2009.  
General Administration of Quality Supervision, Inspection and Quarantine of the People's Republic of China, Standardization Administration of People's Republic of China. Method of test for explosion limits of combustible gases in air: GB/T 12474-2008 [S]. Beijing: Standards Press of China, 2009.
- [25] 国家市场监督管理总局国家标准化管理委员会, 高温高压条件下可燃气体(蒸气)爆炸极限测定方法: GB/T 42368-2023 [S]. 北京: 中国标准出版社, 2023.  
State Administration for Market Regulation and National Standardization Management Committee, Determination of explosion limits of combustible vapors and gases at elevated temperature and pressure: GB/T 42368-2023 [S]. Beijing: Standards Press of China, 2023.
- [26] Lu M, Tang Y, Chen W, et al. Explosion limits estimation and process optimization of direct propylene epoxidation with H<sub>2</sub> and O<sub>2</sub> [J]. Chinese Journal of Chemical Engineering, DOI: 10.1016/j.cjche. 2019. 01. 015.
- [27] VAN DEN SCHOOR F, VERPLAETSEN F. The upper explosion limit of lower alkanes and alkenes in air at elevated pressure and temperature [J]. Journal of Hazardous Materials, 2006, 128(1): 1-9. DOI: 10.1016/j.jhazamat. 2005. 06. 043.
- [28] ZABETAKIS M G, Flammability characteristics of combustible gases and vapors [M]. Bureau of Mines, Washington DC(1965).
- [29] 金满平, 张帆, 孙峰, 等. 温度对烃类物质爆炸极限的影响及其预测模型研究 [J]. 中国安全生产科学技术, 2013, 9(9): 5-10. DOI: 10.11731/j.issn.1673-193x. 2013. 09. 001.  
JIN M P, ZHANG F, SUN F, et al. Influence of temperature on explosion limits of hydro carbons and its prediction model [J]. Journal of Safety Science and Technology, 2013, 9(9): 5-10. DOI: 10.11731/j.issn.1673-193x. 2013. 09. 001.
- [30] CHOI Y J, CHOI J W. Effects of inert gas addition, oxygen concentration, and pressure on explosion characteristics of propylene [J]. Korean J. Chem. Eng., 38(2), 337-341(2021). DOI: 10.1007/s11814-020-0699-7.
- [31] Hans-Peter Schildberg. The course of the explosions of combustible/O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> mixtures in vessel-like geometry [J]. Forsch Ingenieurwes(2009)73: 33-65. DOI: 10.1007/s10010-009-0091-6.
- [32] CICCARELLI G, JACKSON D, VERREAULT J. Flammability limits of NH<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>-N<sub>2</sub>-air mixtures at elevated initial temperatures [J]. Combustion and Flame 144(2006) 53-63. DOI: 10.1016/j.combustflame. 2005. 06. 010.