DOI: 10.11883/bzycj-2026-0021

N_2/CO_2 协同抑制正丁烷爆炸机理研究*

李言省[1], 陈金射[1,2,3], 李寒雪[1], 陈海燕[1,2], 齐千宇[1], 王　磊[1], 张仰敏[4], 亓冠圣[1,2]

（1. 山东科技大学安全与环境工程学院, 山东 青岛 266590;
2. 山东科技大学露天煤矿灾害防治与生态保护国家重点实验室, 山东 青岛 266590;
3. 青岛市生产安全火灾事故智能控制工程中心, 山东 青岛 266590;
4. 山东鲁轻安全评价技术有限公司, 山东 济南 250101）

摘要： 正丁烷是一种用途极其广泛的低级烷烃, 不仅是清洁、高效的能源载体, 更是现代石油化学工业的关键起始原料之一。正丁烷固有的高可燃性与易爆性, 在生产、储存、运输及使用过程中构成了显著的安全挑战。为降低爆炸风险, 利用多视窗气体/粉尘/液雾爆炸抑爆综合实验装置研究了正丁烷-空气混合物的爆炸过程及单一 N_2、N_2/CO_2 混合气对爆炸过程的抑制作用: 对比不同正丁烷浓度下的实验结果, 确定了正丁烷的最佳爆炸浓度; 调整惰性气体比例, 发现了 N_2/CO_2 的物理化学协同抑制效果优于单一 N_2 的物理抑制效果; 利用高速摄像机从火焰速度和火焰结构的变化进一步验证了协同抑制效果的优越性。最后, 通过 Chemkin 数值模拟研究了正丁烷/空气混合物的爆炸机理及惰性气体协同抑制的抑制机理, 结果表明, CO_2 对反应过程中的 H 自由基和 OH 自由基有很强的抑制作用, 且影响了基元反应的最大 ROP。研究结果为惰化正丁烷爆炸技术提供了实验依据和理论支撑。

关键词： 正丁烷爆炸; 火焰传播; 爆炸抑制; 协同效应; CHEMKIN 模拟

中图分类号： B　　**国标学科代码：**　　**文献标志码：** A

Study on the synergistic inhibition mechanism of N_2/CO_2 on n-butane explosion

LI Yansheng[1], CHEN Jinshe[1,2,3], LI Hanxue[1], CHEN Haiyan[1,2], QI Qianyu[1], WANG Lei[1], ZHANG Yangmin[4], QI Guansheng[1,2]

（1. *College of Safety and Environmental Engineering, Shandong University of Science and Technology, Qingdao* 266590, *Shandong China*;
2. *State Key Laboratory of Disaster Prevention and Ecology Protection in Open-pit Coal Mines, Shandong University of Science and Technology, Qingdao* 266590, *Shandong China*;
3. *Qingdao Intelligent Control Engineering Center for Production Safety Fire Accident, Qingdao* 266590, *Shandong China*;
4. *Shandong Luqing Safety Assessment Technology Co., Ltd., Jinan* 250101, *Shandong China*）

Abstract: N-butane is a highly versatile low-molecular-weight alkane that serves not only as a clean and efficient energy carrier but also as a key feedstock in the modern petrochemical industry. However, its inherently high flammability and explosibility pose significant safety challenges during production, storage, transportation, and utilization. To effectively mitigate explosion risks, an integrated multi-view gas/dust/liquid-mist explosion-suppression test apparatus was employed to investigate the explosion behavior of n-butane–air mixtures and the suppression effects of pure N_2 and N_2/CO_2 mixtures. By varying the n-butane concentration, the most explosive concentration was first determined. Subsequently, different concentrations of nitrogen and N_2/CO_2 mixtures with varying proportions were introduced. As the proportion of CO_2 increased,

* **收稿日期:** 2026-01-14；**修回日期:** 2026-05-07
基金项目: 国家自然科学基金(52374215, 52374216);山东省自然科学基金(ZR2025MS907, ZR2023ME074)
第一作者: 李言省(2002—　), 男, 硕士研究生。 505813178@qq.com
通信作者: 陈金射(1985—　), 男, 博士, 副教授. skd1643@sdust.edu.cn

the maximum explosion pressure, maximum pressure rise rate, and explosion index of the n-butane–air mixture progressively decreased, whereas the times required to reach the peak pressure and maximum pressure rise rate were progressively prolonged. Adjustment of the inert-gas composition revealed that the physicochemical synergistic suppression effect of the N_2/CO_2 mixture was stronger than the purely physical suppression effect of N_2 alone. High-speed camera observations of changes in flame velocity and morphology further confirmed the superiority of this synergistic suppression effect. It was therefore concluded that the physicochemical synergistic suppression effect of N_2/CO_2 is superior to the physical suppression effect of pure N_2. Furthermore, the chemical reaction kinetics of premixed n-butane–air mixtures under different conditions were investigated using Chemkin numerical simulation software. The results demonstrate that, as the proportion of CO_2 in the inert-gas mixture increases, the sensitivity of explosion pressure gradually decreases and the explosion reaction rate is substantially reduced. Compared with pure N_2, CO_2 exhibits a stronger synergistic physicochemical inhibitory effect on H and OH radicals during the reaction process. Moreover, it alters the maximum reaction rates (ROPs) of elementary reactions, thereby effectively suppressing the explosion reactions of premixed n-butane gas. These findings provide experimental evidence and theoretical support for technologies aimed at suppressing n-butane explosions.

Keywords: n-butane explosion; flame propagation; explosion suppression; synergistic effect; Chemkin simulation

1　引　言

近年来，伴随全球能源需求的持续增长与工业化进程的深入，正丁烷的市场应用呈显著扩张态势。正丁烷（C_4H_{10}）作为一种重要的直链烷烃化合物，因其较高的热值、较低的毒性以及广泛的工业应用，在能源与化工领域扮演着关键角色。然而，C_4H_{10} 的高挥发性使其在环境温度下极易形成易燃蒸气-空气混合物，其固有的高可燃性与易爆性，在生产、储存、运输及使用过程中构成了显著的安全挑战。同时，丁烷气罐在遭受机械撞击或暴露于异常升高的环境温度下易发生泄漏事故并造成严重后果，此类安全问题已成为制约该行业可持续发展的关键瓶颈。

目前防止可燃气体爆炸的措施中，抑爆相对积极有效。部分学者采用惰性气体进行了可燃气体的抑爆研究[1-3]。Wang 等[4]、张迎新等[5] 及 Li 等[6] 研究了不同 N_2/CO_2 比例对 CH_4/空气混合物爆炸压力及爆炸极限的影响。Wei 等[7] 与 Gao 等[8] 通过实验对比了 $Ar/N_2/CO_2$ 混合气体对 H_2/空气混合物受限燃烧过程的影响，结果表明：随着惰性气体含量的增加，冲击波逐渐减弱或消失；CO_2 因其较高的比热容，能更有效地降低反应速率和火焰传播速度。Li 等[9] 研究了 CO_2 对 H_2 与空气混合物中不稳定火焰传播的影响，发现随着 CO_2 添加量的增加，流体动力学不稳定性的不稳定效应逐渐减弱。Li 等[10] 获得了不同当量比下 He、Ar、N_2 和 CO_2 稀释的 H_2/O_2 混合物的爆炸特性。由于其相对强烈的第三体效应，CO_2 是缓解游离 H_2 云爆炸最有效的气体。Zhong 等[11] 和 Gant 等[12] 的研究表明，CO_2 能显著抑制 CH_4 爆炸，展现出作为惰性抑制剂的显著效能。罗振敏等[13] 比较了 N_2 和 CO_2 对液化石油气（LPG）的惰化与抑爆效能，结论指出 CO_2 在 LPG 抑爆性能方面优于 N_2。刘振翼等[14] 研究了 N_2 和 CO_2 在高温高压条件下对 $CH_4/C_2H_6/C_3H_8$ 混合物的爆炸抑制效果，在所有初始条件下，CO_2 的惰化效果均显著优于 N_2。Azatyan 等[15] 通过数值模拟研究了多种添加剂（N_2、CO_2、H_2O）对 H_2/空气混合物层流燃烧速度的影响，模拟结果表明，3 种添加剂均显著抑制了层流燃烧速度，在富混合物条件下效果尤其显著，主要归因于热效应与化学效应的协同作用。Li 等[16] 采用球形容器实验研究了富氢丙烷-空气混合物的爆炸行为，测量结果量化了不同混合物组分下的最大爆炸压力和最大压力上升速率。以上研究证实了惰性气体爆炸抑制作为成熟的防爆措施，能有效降低爆炸的反应速率和火焰传播速度。值得注意的是，现有惰化研究主要集中于 H_2/空气混合物、CH_4 及 LPG。尽管对于 LPG 抑爆材料的开发以及丁烷的燃烧机理已有较多研究，但前者侧重于多组分混合物，后者则多聚焦于稳态燃烧工况的反应动力学模拟，均未能系统揭示正丁烷在突发性爆炸瞬态条件下的压力演化规律、火焰传播行为和爆炸指数变化特性。正丁烷作为化工原料的相关研究多聚焦于基础燃烧特性或单一惰性气体抑爆，缺乏 N_2/CO_2 混合体系对正丁烷爆炸的协同抑制机理，亟待深入探索。

反应机理研究通过阐明燃烧过程中的关键基元反应、自由基演化和能量传递途径，为在微观分子层面分析可燃气体的燃烧行为提供了理论基础，是实现对其宏观燃烧特性进行精确预测与调控的关键。Gao 等[17] 采用 Chemkin 18.1 一维自由传播火焰反应器模拟了 CHF_3 与 C_2HF_5 对 H_2/空气混合物爆炸特性的影响，数值模拟结果表明，2 种抑制剂均能有效降低反应体系中关键自由基的摩尔浓度，从而抑制爆炸反应的进行。Rajpara 等[18] 通过实验与数值模拟方法，研究了富氢 CH_4 的燃烧特性，发现氢掺混可形成“宽而短”的火焰形态。

计算流体力学进展为诸多复杂燃烧现象提供了理性理论解释。YANG 等[19] 阐明了特定当量比下封闭管道内氢燃烧中郁金香形火焰的形成机制、关键影响因素及其畸变现象。Hu 等[20] 运用 Chemkin-pro 模拟了烷烃气体的爆炸过程，重点分析关键自由基反应与基本反应，发现羟基自由基对乙烷爆炸的贡献远大于对 C_3H_8 和 CH_4 爆炸的贡献。Zhou 等[21] 通过数值模拟开发了融合湍流、物种传输及精细化学反应机制的爆炸模型，准确预测了 H_2 在 LPG/二甲醚（dimethyl ether, DME）混合物中的爆炸促进动力学，提出 H_2 通过引发关键基本反应并改变流场结构，显著增强了 LPG/DME 混合物的爆炸超压、火焰传播速度及热危害性。Su 等[22] 采用 ReaxFF 分子动力学模拟与基于 Chemkin 的化学动力学模拟结合的方法，揭示了抑制剂 C_2HF_5 抑制乙烯/空气预混爆炸呈现浓度依赖的双重机制。刘洋等[23] 采用 CFD 数值模拟软件 FLACS，对长直管道内添加 CO_2、N_2 和水蒸气抑制 CH_4 爆炸的超压及振荡过程进行了三维仿真分析，结果表明 3 种添加气体均能有效抑制爆炸超压的振荡，其压力振幅和振荡频率均随添加气体体积分数的增加而减小。Liu 等[24] 通过实验与数值模拟方法，系统研究了球形 NH_3/O_2 预混火焰的传播特性，在不同当量比（ER）和初始压力条件下，测定了层流燃烧速度（LBV）和临界火焰半径。Lee 等[25-26] 的实验与计算工作表明，向 H_2/空气混合物火焰中掺入 NH_3 可显著降低火焰温度与 LBV，从而提升火焰的安全性。上述研究证实，现有针对各类气体的燃烧与爆炸过程的研究主要集中于 H_2/空气混合物、CH_4 及 LPG/DME 混合物的动力学行为与火焰演化规律，对正丁烷的爆炸特性及抑制机制的相关研究尚显不足。

综上所述，大量研究致力于不同惰性气体的抑爆效果及抑爆机理的模拟分析，但正丁烷的爆炸抑制技术，特别是利用惰性混合气体实现协同抑制的系统性研究则相对较少，缺乏对正丁烷抑爆机理的深入探究。为此，本文针对 N_2/CO_2 混合气体协同抑制正丁烷的爆炸过程，结合实验并采用 Chemkin 进行模拟，探究单一 N_2 和 N_2/CO_2 混合抑爆的机理差异，以期防范正丁烷在生产工艺中潜在的爆炸风险。

2　实　验

2.1　实验设备

实验采用多视窗气体/粉尘/液雾爆炸抑爆综合实验装置，如图 1 所示，主要包括 20 L 球形容器、温

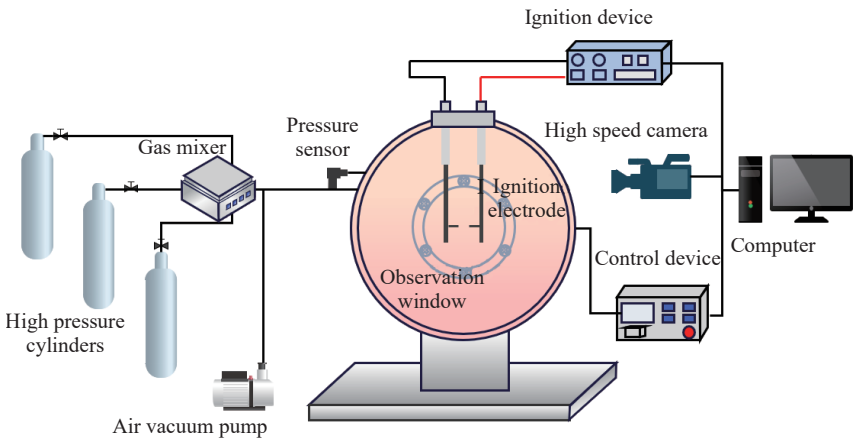


图 1　多视窗气体/粉尘/液雾爆炸抑爆综合实验装置

Fig. 1　Multi-window gas/dust/liquid mist explosion suppression integrated test facility

度控制系统、真空系统、爆炸参数同步采集处理系统、精密能量点火装置、精密配气系统和高速摄像机。其中：压力传感器的量程为 0～4 MPa，精度为±0.25% FS；温度控制系统用于自动调控不同的实验温度，实现爆炸罐体的恒温控制，实验初始温度范围为室温至 150 ℃，可控精度为 0.5℃；真空系统配置抗爆炸冲击过滤器，防止燃烧爆炸产物堵富管路，污染配气系统，真空范围为 0～100 kPa，采用旋片式真空泵；爆炸参数同步采集处理系统配置 4 通道数据采集系统，设定控制参数，实验装置按设定参数自动抽真空、自动将粉尘、可燃气体、可燃液体样品配入 20 L 爆炸容器、自动点火自动采集爆炸参数并存储到数据文件；精密配气系统采用分压法精密比例配气，配置独立的精密配气压力传感器及阀门；精密能量点火装置中点火电极位于球形容器的几何中心，通过电火花点火，电压为 15 KV，点火持续时间为 300 ms；高速摄像机的采集频率为每秒 5 000 帧。

2.2　实验步骤

在室温和大气压的初始条件下，使用真空泵抽空容器，在容器中的空气被完全抽出后，根据道尔顿分压定律，将正丁烷和惰性气体引入容器中。待混合物均匀分布后，点燃混合物，采用高速摄像机拍摄混合物爆炸产生的火焰图像。实验结束后，再抽真空 3 次，为下一次实验提供更准确的实验环境。为了使误差最小化，每个工作条件重复不少于 3 次。

2.3　实验内容

首先，实验测试了浓度分别为 3.4%、3.6%、3.8%、4.0%、4.2% 的正丁烷的爆炸特性和火焰传播特性。随后，在 3.8% 浓度的正丁烷的条件下加入 5%、10%、15%、20% 浓度的 N_2，研究不同浓度 N_2 对正丁烷爆炸特性和火焰传播特性的影响。最后，在相同浓度正丁烷的条件下加入 10%N_2 和 5%CO_2、7.5%N_2 和 7.5%CO_2、5%N_2 和 10%CO_2 以及 15%CO_2，研究其爆炸特性的变化。每次实验结束后，通过爆炸参数同步采集处理系统得到爆炸产生的最大爆炸压力和最大爆炸压力上升速率，并通过下式计算爆炸指数：

$$K = \left(\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t}\right)_m V^{\frac{1}{3}}$$

式中：K 为爆炸指数，p 为，t 为，m 为，V 为。

2.4　模型选择

化学反应过程中的详细反应步骤无法从实验中获得。因此，使用 Chemkin-pro 软件求解了本文中的简化机理吧，并进行简化机理的验证和产量反应速率（reaction rate, ROP）分析。为系统研究正丁烷的化学反应动力学原理，根据不同的研究目标，分别采用了一维预混火焰模型与零维均质反应器模型进行计算。采用零维均质定容反应器模型进行压力敏感性分析，模型假设空间内组分与温度均匀分布，忽略输运过程，模拟理想化的密闭爆炸过程。采用一维预混火焰速度求解器计算关键自由基的生成速率（ROP）与主要参与物质分析，该模型耦合了详细化学反应机理与多组分输运特性。

本次模拟初始条件设置为 1 个标准大气压和 1 200 K，针对正丁烷/空气混合气体爆炸，选用 USC Mech Ⅱ（University of Southern California Mechanism Ⅱ）详细反应机理，该机理包含 111 种组分、784 个基元反应，可精准描述 C1～C4 烷烃的氧化、燃烧及爆炸反应过程。

一维预混层流火焰模型是燃烧研究中的一种理想化模型，它假设火焰在无限大平面上沿法向方向一维传播，燃料和氧化剂在反应前已充分混合。层流火焰速度是预混火焰的关键参数，代表了火焰面相对于未燃气体的传播速度，反映了燃料/氧化剂混合物在特定条件下的化学反应速率和热释放特性。通过在不同惰性气体条件下，模拟正丁烷和惰性气体混合物的燃烧过程，可得燃烧反应过程中自由基 H 和 OH 的摩尔分数的变化规律。

3　实验结果与结论

3.1　爆炸特性分析

爆炸压力是爆炸强度最直观的表现，不同浓度正丁烷的最大爆炸压力如表 1 所示。本文对几个关键

参数进行分析，包括：峰值压力、最大压力上升速率、峰值压力到达时间、最大压力上升速率到达时间。

在加入 3.8% 浓度的正丁烷的条件下，本文研究了常温常压下以 0%、5%、10%、15%、20% 的比例加入惰性气体对正丁烷/空气混合物爆炸特性的影响。图 2 显示了不同浓度正丁烷/空气混合物的爆炸压力曲线，可以得到最大爆炸压力、最大压力上升速率、压力峰值到达时间和爆炸指数等特征参数。随着正丁烷浓度的增加，最大爆炸压力先上升后下降，当浓度为 3.8% 时，正丁烷的最大爆炸压力达到最大值 0.841 MPa。因此，3.8% 是正丁烷的最佳爆炸浓度。基于最佳爆炸浓度的正丁烷进行抑爆研究，如图 3、图 4、图 5、图 6 所示，其正丁烷浓度均为 3.8%。

表 1　不同浓度正丁烷的最大爆炸压力

Table 1　Maximum explosion pressure of n-butane at different concentrations

浓度/%	最大爆炸压力/MPa
3.4	0.780
3.6	0.824
3.8	0.841
4.0	0.821
4.2	0.751

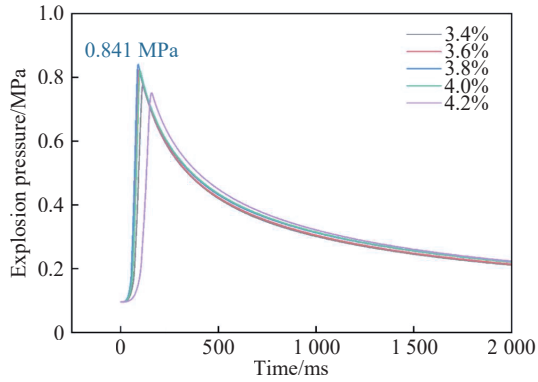


图 2　不同浓度正丁烷-空气混合物的爆炸压力曲线

Fig. 2　Explosion pressure curves for n-butane-air mixtures at different concentrations

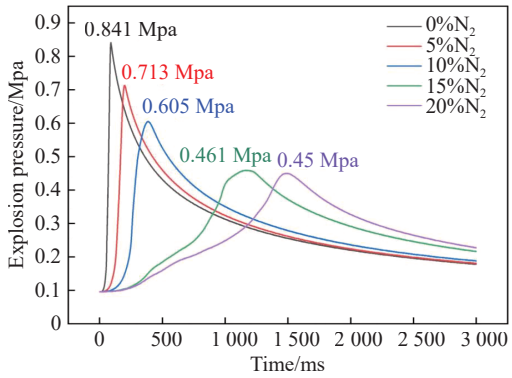


图 3　不同浓度 N_2 下正丁烷-空气混合物的爆炸压力曲线

Fig. 3　Explosion pressure curves of n-butane-air mixtures at different N_2 concentrations

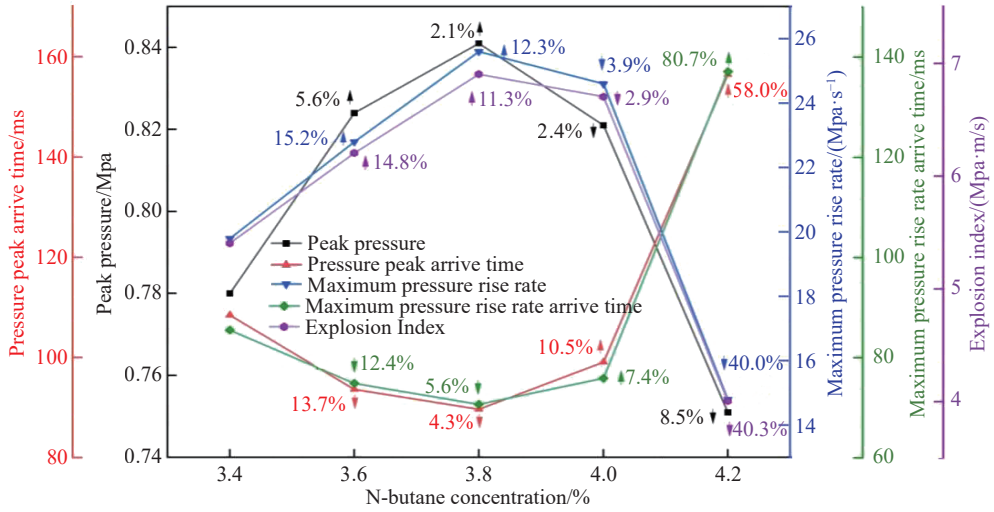


图 4　不同浓度正丁烷-空气混合物的最大爆炸压力、最大压力上升速率、压力峰值到达时间、最大压力上升速率到达时间和爆炸指数

Fig. 4　Maximum explosion pressure, maximum pressure rise rate, pressure peak arrive time, maximum pressure rise rate arrive time, and explosion index for n-butane-air mixtures at different concentrations

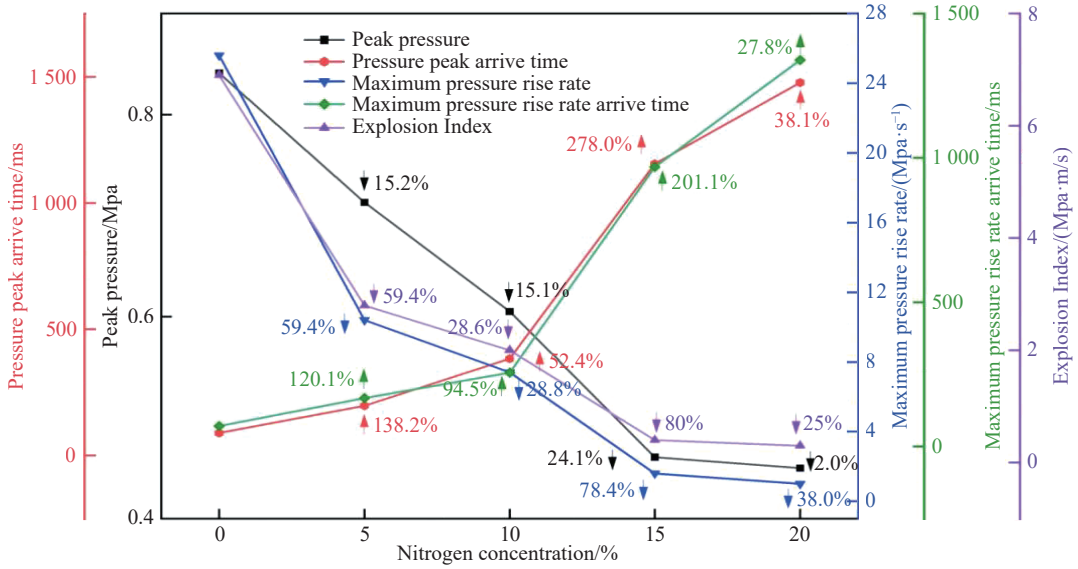


图 5　不同 N_2 浓度下正丁烷-空气混合物的最大爆炸压力、最大压力上升速率、压力峰值到达时间、最大压力上升速率到达时间和爆炸指数

Fig. 5　Maximum explosion pressure, maximum pressure rise rate, pressure peak arrive time, maximum pressure rise rate arrive time, and explosion index of n-butane-air mixtures at different N_2 concentrations

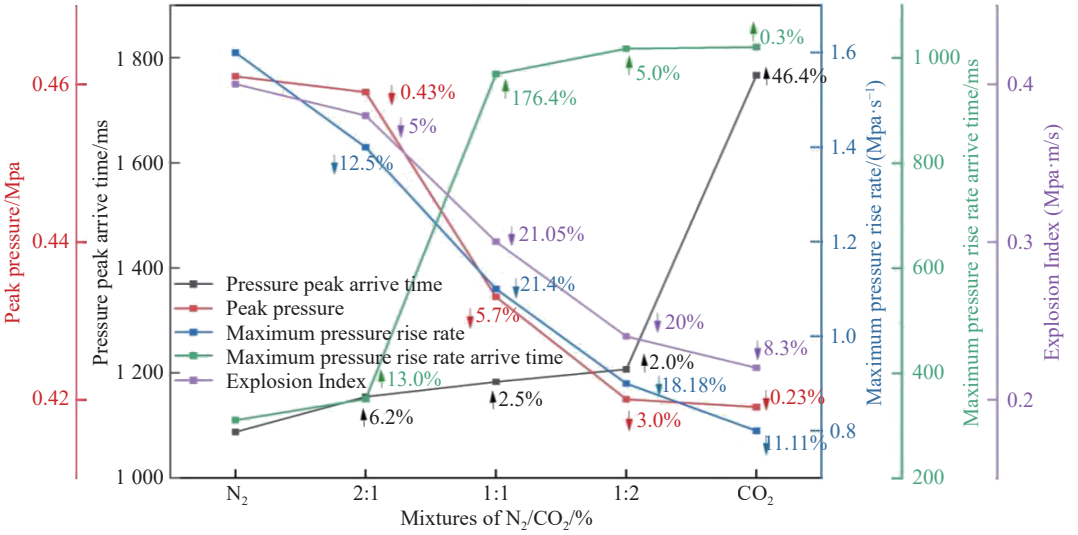


图 6　不同掺混浓度下正丁烷-空气混合物的最大爆炸压力、最大压力上升速率、压力峰值到达时间、最大压力上升速率到达时间和爆炸指数

Fig. 6　Maximum explosion pressure, maximum pressure rise rate, pressure peak arrive time, maximum pressure rise rate arrive time, and explosion index of n-butane-air mixtures at different blending concentrations

图 3 展示了不同惰性气体比例下正丁烷/空气混合物的爆炸压力曲线，其点火后爆炸过程经历 3 个阶段：缓慢升压阶段、快速升压阶段和缓慢降压阶段[27]。惰性气体的加入降低了爆炸压力，延迟了压力峰值的到达时间，且随着惰性气体添加量的增加，其抑制效果更为显著[28]。

图 4 显示了不同浓度正丁烷/空气混合物的爆炸特征参数，当正丁烷浓度为 3.8% 时，最大压力上升速率及爆炸指数达到最大值，压力峰值到达时间及最大压力上升速率到达时间到达最低点，这些特征参数随正丁烷浓度增加的变化进一步验证了 3.8% 是正丁烷的最佳爆炸浓度。

图 5 显示了不同惰性气体比例下正丁烷/空气混合物的爆炸特征参数。随着惰性气体比例的增加，峰值压力和最大压力上升速率以及爆炸指数逐渐降低，而峰值压力到达时间和最大爆炸压力上升速率到达

时间逐渐增加。图 6 显示了不同惰性气体混合浓度下正丁烷-空气混合物的爆炸特征参数，在惰性气体浓度均为 15% 时，单一 N_2 影响下的最大爆炸压力为 0.461 MPa，而 7.5%N_2/7.5%CO_2 混合气体影响下的最大爆炸压力为 0.433 MPa，且相比于对比单一 N_2 抑制下的最大爆炸压力的降低幅度，不同体积分数单一 N_2 影响下的降低幅度分别为 15.2%、15.1%、24.1%、2.0%，混合气体抑制下的最大爆炸压力的降低幅度分别为 17.8%、18.2%、25.8%、25.3%，压力抑制幅度显著优于单一 N_2 抑制条件。相较于单一 N_2 仅依靠物理稀释与惰化作用，N_2/CO_2 混合气体在抑爆过程中表现出明显的协同效应，抑爆能力明显优于单一 N_2 抑制体系。

3.2　火焰传播特性

由于压力和火焰可相互加强，需探索压力对火焰速度的影响以证实抑爆有效性。以点火时刻到火焰到达窗口边缘的时间计算火焰的平均传播速度。

火焰结构与其传播速度相关。当火焰为球形时，其传播过程中拉伸速率降低，导致结构不稳定性增加，火焰最终分裂成蜂窝状结构。这种蜂窝结构增加了火焰表面积，增强了燃料与氧化剂的接触，从而加速火焰传播速度[29]。因此，研究火焰结构的变化至关重要。根据球形火焰的传播规律和爆炸压力的动态变化特征，并兼顾实验观测的可操作性、数据的可比性和抑爆效果的梯度分析需求，选取 3 个关键时刻进行分析，分别为：初始时刻（T1）对应缓慢升压阶段、火焰抵达窗口中点时刻（T2）对应快速升压阶段、火焰接触窗口边缘时刻（T3）对应峰值压力阶段。

图 7 展示了不同浓度正丁烷爆炸过程中的火焰图像。蜂窝状结构主要由流体动力学不稳定性和扩散-热不稳定性共同引发[30]。随着正丁烷浓度逐渐升高，火焰抵达窗口边缘所需时间先缩短后延长。当正丁烷体积分数为 3.8% 时，火焰顶部的蜂窝结构最为显著。

图 8 显示了不同浓度的 N_2 对正丁烷爆炸时火焰图像的影响，10% 和 15% 浓度的 N_2 下，到达 T3 时刻所用时间分别为 27 和 43 ms，而在相同浓度的 CO_2 下所用时间分别为 37 和 54 ms，可知 CO_2 作用下的火焰达到 T3 时刻所用时间要比 N_2 更长。

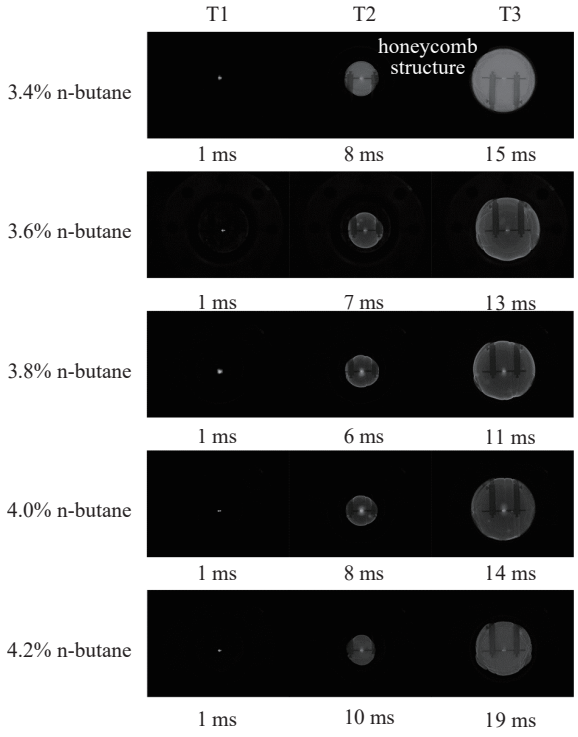


图 7　不同浓度的正丁烷火焰图像

Fig. 7　Flame images of n-butane at different concentrations

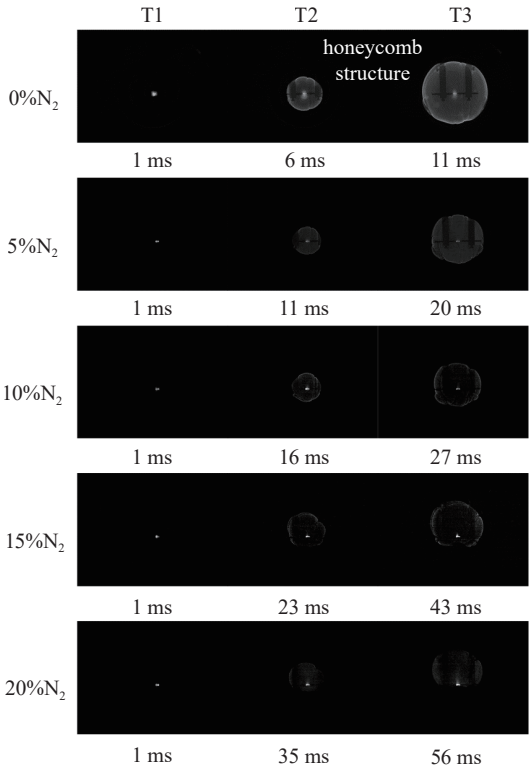


图 8　不同浓度 N_2 下的正丁烷火焰图像

Fig. 8　Flame images of n-butane under different concentrations of N_2

图 9 展示了不同惰性气体混合浓度下正丁烷爆炸的球形火焰图像。可以看出，随着 N_2 和 CO_2 混合比例的变化，火焰的传播特性呈现出复杂的非线性行为。在较低掺杂比的情况下，例如 15%N_2 或 10%N_2/5%CO_2，火焰结构虽有一定程度的削弱，但仍能维持较为完整的球形形态，且火焰前锋到达观察窗口的时间延迟相对较短。当混合气体中 CO_2 的比例逐渐增加时，火焰形态迅速发生变化，不仅球形火焰的尺寸显著缩小，其表面的褶皱和细胞结构也大幅减少甚至完全消失。当掺杂比为 7.5%N_2/7.5%CO_2 时，火焰的细胞结构完全消失，表明该比例下的混合气体对火焰传播的抑制作用达到新的临界点。当掺杂比更高（5%N_2/10%CO_2）时，虽然火焰的细胞结构尚未完全消失，但数量已明显减少，同时火焰传播速度也有所下降。这一结果表明，相较于单一 N_2 仅依靠物理稀释与惰化作用实现抑爆，N_2 与 CO_2 混合气体在抑制正丁烷空气混合物爆炸过程中表现出显著的协同效应。其中：N_2 主要通过降低体系氧浓度、稀释可燃混合气浓度，从物理层面削弱爆炸反应的物质基础；而 CO_2 凭借更高的定压热容可高效吸收爆炸反应热，快速降低体系温度并抑制火焰传播。

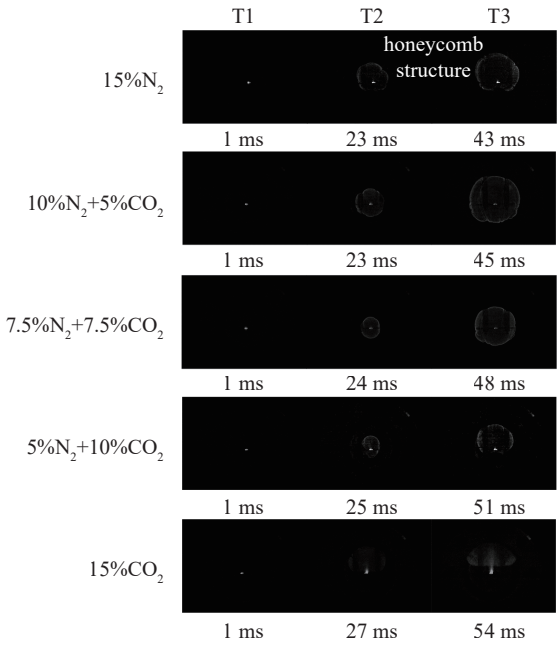


图 9　不同浓度惰性混合气体下的正丁烷火焰图像

Fig. 9　Flame images of n-butane under different concentrations of inert mixture gas

3.3　数值模拟结果分析

为研究正丁烷预混气体爆炸过程中关键基元反应在不同浓度 N_2/CO_2 混合气下对压力的敏感性，模拟以下 6 组实验获得相关实验数据，并进行可视化处理，即不添加惰性气体的标准工况以及 N_2/CO_2 的浓度比例分别为 3∶17（15%N_2）、2∶1、1∶1、1∶2、17∶3 的 5 组工况。图 10 绘制了此类关键基元反应不同惰性气体浓度对压力的一阶敏感性峰值分析图。在物质转化的研究中，核心参与组分的精准解析始终是揭示作用机制的关键路径。为研究正丁烷在不同惰性条件下爆炸过程中发挥枢纽作用的活性物质，通过分子摩尔组分随时间的占比变化对反应物、中间产物及终端产物进行系统性追踪。特别关注 O_2、CO_2 以及时间的变化趋势，旨在分析混合惰性气体的添加对爆炸过程的影响。从分子层面解构复杂体系的物质流变规律，不仅为正丁烷预混气体爆炸提供了分子层面的反应变化依据，更为优化抑制正丁烷预混气体爆炸提供理论支撑。

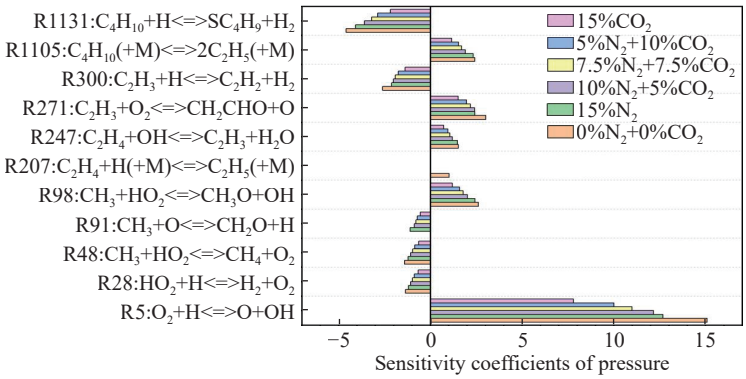


图 10　不同惰性混合气体下的压力敏感系数

Fig. 10　Pressure sensitivity coefficient under different Inert mixture gases

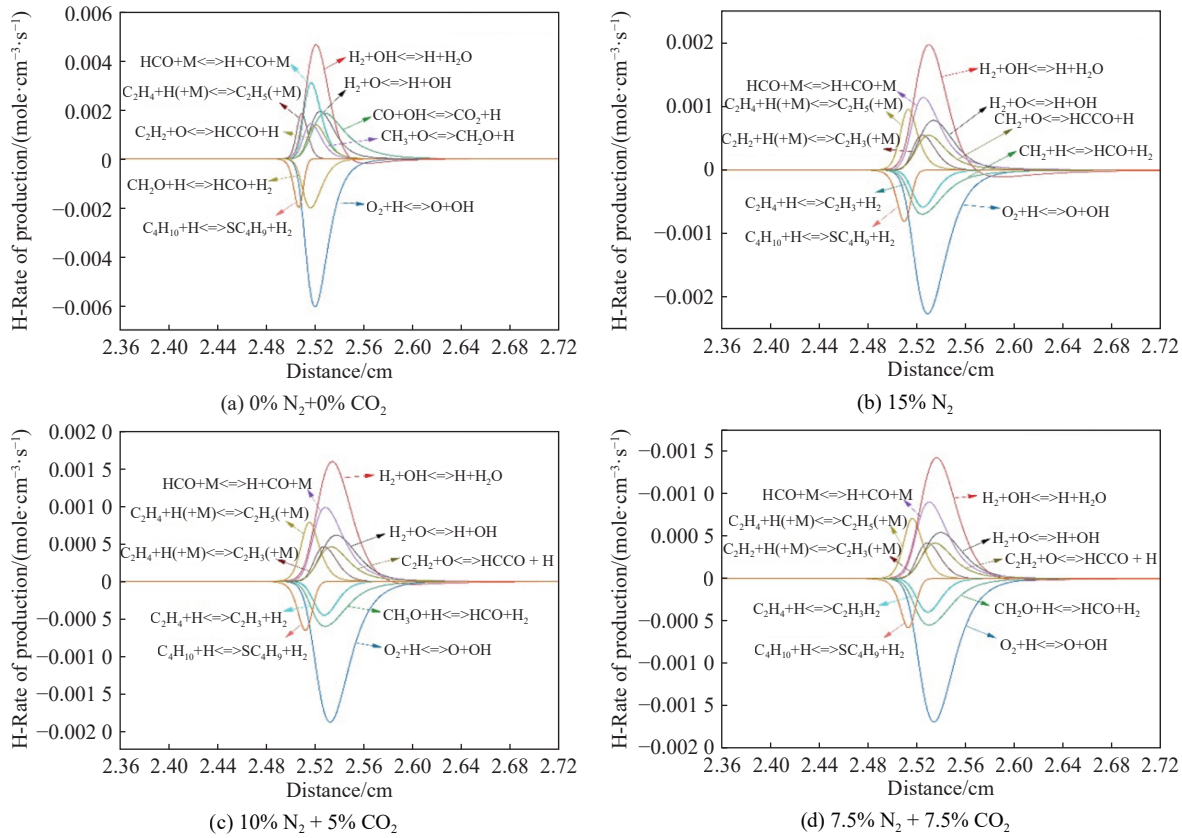
从本质上讲，正丁烷的燃烧和爆炸是一个复杂的链式反应，在此过程中，自由基 H、O 和 OH 起重要作用。通过分析自由基摩尔分数的变化，得到了这 2 种惰性气体对爆炸早期的影响。自由基 H、O 和 OH 的摩尔分数在左右出现峰值。自由基之间以及自由基与饱和分子之间存在化学作用，并释放出大量能量。最后，活性分子相互碰撞或与反应器壁碰撞以形成稳定的分子，直到链式反应结束。从燃烧过程中关键基元反应的角度出发，研究惰性气体对正丁烷爆炸的影响，可以掌握惰性气体抑制正丁烷爆炸的机理。

3.3.1　压力敏感性分析

基于图 10 进行关键基元反应不同惰性气体浓度下正丁烷空气预混气体对压力的敏感性峰值分析。敏感性系数大于 0 表示该基元反应促进压力的增大，其数值越大则促进程度越大，敏感性系数小于 0 表示该基元反应抑制压力的增大，且其绝对值越大则抑制程度越大。R5、R28、R48、R91、R98、R207、R247、R271、R300、R1105、R1131 是影响正丁烷空气预混气体爆炸的 11 个主要基元反应，并影响整个反应过程中的爆炸压力，其爆炸压力敏感性峰值随着惰性混合气体中 CO_2 占比的增加而逐渐增加，且在 CO_2 浓度最高时达到最大值。R5、R98、R207、R247、R271、R1105 基元反应敏感性系数大于 0，促进压力增大，其中 R5 对于促进压力增加的敏感性程度更高，该链式反应消耗了大量 H 自由基生成 O 与 OH 自由基，促进了爆炸压力增大，在贫氧条件下，H 自由基与 O_2 发生的 R5 基元反应的生成速率峰值逐渐减小。另一方面，R28、R48、R91、R300、R1131 抑制压力上升，随着 CO_2 添加量的增加，对体系内爆炸压力增大的抑制作用也持续减弱。CO_2 通过化学消耗与物理稀释作用，大幅降低了 H、OH 等关键自由基浓度，削弱了链支化反应对爆炸压力的促进贡献，因此 CO_2 惰性气体占比的增加不仅降低了爆炸压力敏感性，同时降低了抑制爆炸压力的敏感性，即通过降低全部基元反应的敏感性达到抑爆目的。

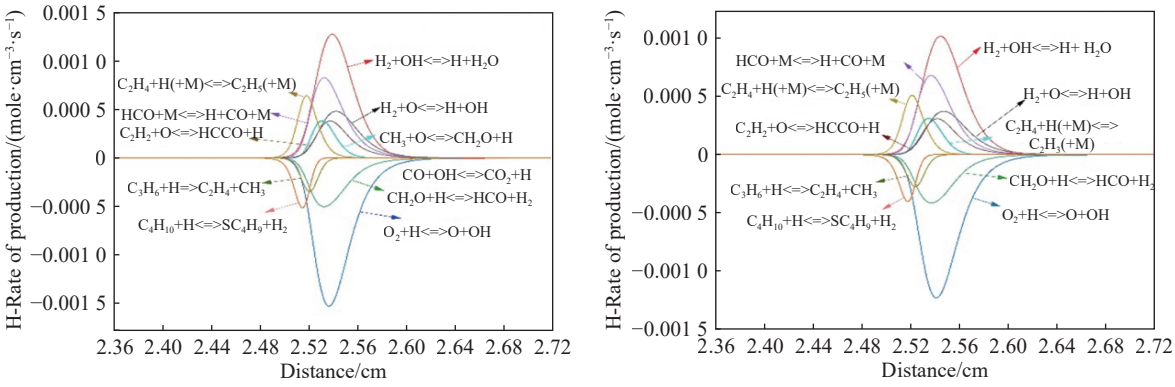
3.3.2　关键自由基的生成速率分析

正丁烷空气预混气体燃烧和爆炸的链式反应中，自由基 H 和 OH 起重要作用。图 11 以对 H 自由基影响最大的 10 个反应为例，描述了不同惰性混合气体比例的情况下，化学反应中自由基 H 生成速率的变化。由图 11 可知，产生 H 自由基最明显的是 $H_2+OH<=>H+H_2O$，且随着惰性混合气体中 CO_2 占比的



(a) 0% N_2+0% CO_2　　(b) 15% N_2

(c) 10% N_2 + 5% CO_2　　(d) 7.5% N_2 + 7.5% CO_2



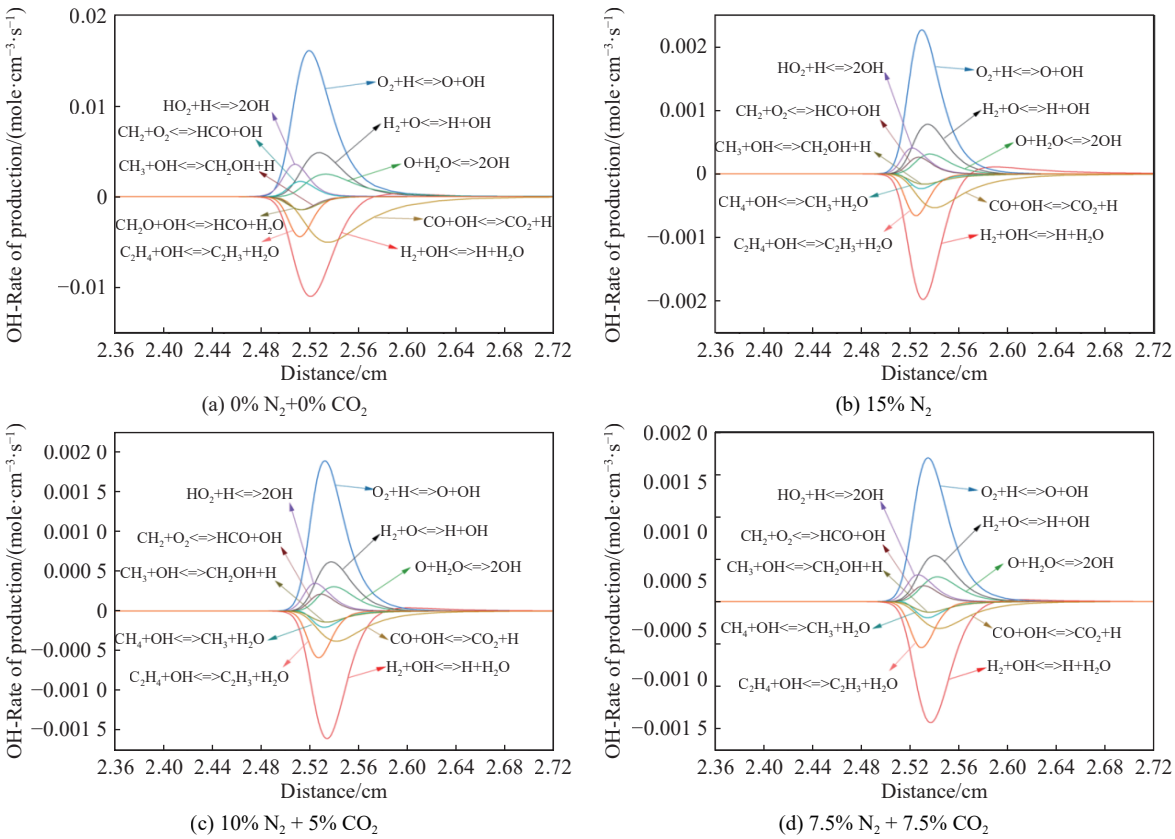
(e) 5% N_2 + 10% CO_2　　(f) 15% CO_2

图 11　正丁烷空气预混气体爆炸过程中 H 自由基生成速率变化

Fig. 11　Variation in H radical formation rate during the explosion of n-butane-air premixed gas

增加，反应强度逐渐降低，各反应的峰值逐渐降低，H 自由基的生成速率也随之降低。消耗 H 自由基最快的反应是 O_2+H<=>O+OH，当 CO_2 占比增加时，H 自由基的消耗速率也随之降低、峰值减小。随着惰性混合气体的加入，C_2H_2+O<=>HCCO+H、C_2H_2+H(+M)<=>C_2H_3(+M)、C_2H_4+H<=>C_2H_3+H_2 这 3 个基元反应取代了 CO+OH<=>CO_2+H、C_2H_2+O<=>HCCO+H、CH_3+O<=>CH_2O+H 成为对 H 自由基影响最大的 10 个基元反应之一，减少了 H 自由基的生成以及 H_2O 的产生。由此可见，惰性气体通过降低主导 H 自由基反应的 ROP，直接影响自由基的摩尔分数，进而间接扰动了自由基燃烧链式反应的进程。

图 12 以对自由基 OH 影响最大的 10 个反应为例，给出了不同惰性混合气体比例的情况下，化学反应中自由基 OH 的生成速率的变化。由图 12 可知，产生 OH 自由基最快的是 O_2+H<=>O+OH，且随着



(a) 0% N_2+0% CO_2　　(b) 15% N_2

(c) 10% N_2 + 5% CO_2　　(d) 7.5% N_2 + 7.5% CO_2

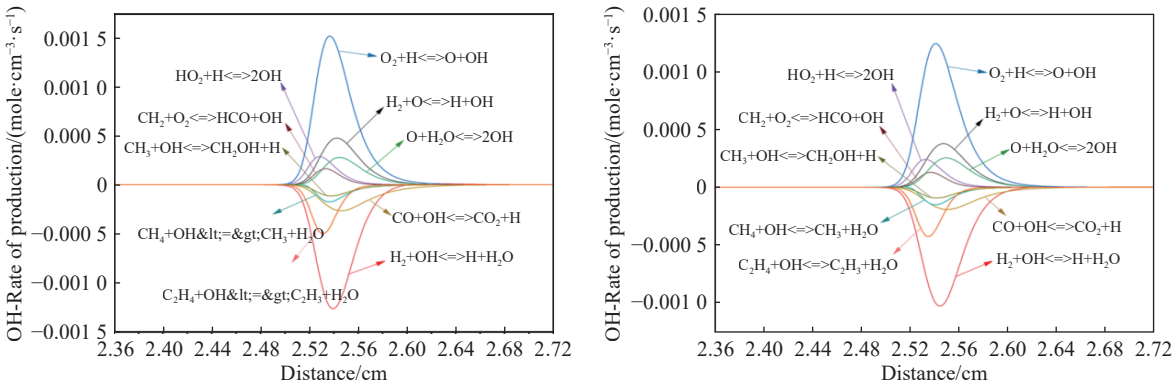


图 12　正丁烷空气预混气体爆炸过程中 OH 自由基生成速率变化

Fig. 12　Variation in OH radical formation rate during the explosion of n-butane-air premixed gas

惰性混合气体中 CO_2 占比的增加，反应强度逐渐降低，各反应的峰值以及 OH 自由基的生成速率也随之逐渐降低。消耗 OH 自由基最明显的基元反应是 $H_2+OH<=>H+H_2O$，随着惰性混合气体中 CO_2 占比的增加，OH 自由基的消耗速率逐渐降低、峰值减小。加入惰性气体后，$CH_4+OH<=>CH_3+H_2O$ 取代了 $CH_2O+OH<=>HCO+H_2O$ 反应作为对 OH 自由基影响最大的 10 个基元反应之一，减少了 OH 自由基以及 H_2O 的产生。由此可见，惰性气体通过降低主导 OH 自由基反应的 ROP，直接影响了自由基的摩尔分数，进而间接扰动了自由基燃烧链式反应的进程。

3.3.3　主要参与物质分析

为了研究在不同惰性条件下正丁烷空气预混气体爆炸过程中发挥枢纽作用的活性物质，通过分子摩尔组分随时间的占比变化对反应物、中间产物及终端产物进行系统性追踪，重点关注 CO_2 占比变化对爆炸过程的影响，从分子层面揭示复杂体系的流变行为规律，不仅为正丁烷预混气体的爆炸过程提供了微观反应机制方面的解释，也为优化其爆炸抑制策略奠定了坚实的理论基础。

由图 13 可以看出，正丁烷空气预混气体爆炸过程中的主要参与物质有 CO_2、CO、O_2、H_2O、C_4H_{10}、IC_4H_{10}，其中：随着爆炸过程的进行，C_4H_{10} 摩尔分数在点火阶段陡然降低至一定含量并维持不变；O_2 的摩尔分数在经历点火阶段的缓慢下降后，出现大幅度降低，最后趋于稳定；CO_2 的摩尔分数在点火阶段后逐渐上升至一个稳定含量，且随着惰性混合气中 CO_2 占比的增加，CO_2 的上升速度逐渐放缓，从陡然上升演变为缓慢爬升；在没有添加惰性气体的条件下，CO 的摩尔分数在点火阶段后急速上升，然后缓慢下降至一定含量并保持稳定，而在惰性气体的影响下，爆炸过程中的 CO 的摩尔分数经历了点火阶段后的上升阶段就稳定在了一定含量；H_2O 的摩尔分数在经历了急速上升后维持稳定在一定含量。这是因为在点火初期，点火能量会引发部分 O_2、C_4H_{10} 发生链式反应，生成大量自由基，进而推动反应持续进行；随后进入剧烈爆炸阶段，各组分浓度发生显著变化；最终，系统达到化学平衡状态，各组分浓度趋于稳定。

在爆炸过程中，O_2 的起始摩尔分数逐渐降低是因为 CO_2 占比的增加挤占了 O_2 的摩尔分数，且随着 CO_2 占比的增加，O_2 的摩尔分数降低速度逐渐放缓，随着 CO_2 占比的增加，CO 的生成量呈现上升趋势，而 H_2O 的生成量则逐渐减少。这表明 CO_2 在一定程度上促进了 CO 和 H_2O 的生成，但其作用机制较为复杂。具体而言，H_2O 摩尔分数随 CO_2 添加量增加而降低，主要是由于 CO_2 对整体反应产生抑制效应，导致反应速率和反应程度减弱，从而减少了 H_2O 的生成。另一方面，CO 摩尔分数上升可归因于 CO_2 参与多个基元反应，这些反应均直接生成 CO。同时，随着 CO_2 比例提高，体系内 O_2 浓度相对降低，反应趋于不完全，进一步促使 CO 积累。在反应后期阶段，CO 含量出现下降，这是由于在高温高压条件下，CO 与残余 O_2 发生反应，重新生成 CO_2。

基于以上分析可以得出，混合气体的抑爆效果并非两种单一抑爆剂的简单叠加，而是存在明显的协

同增强作用：CO_2 通过化学抑制（消耗 H、OH 等自由基）降低反应速率，而 N_2 主要通过物理稀释和吸热降低氧浓度及火焰温度；两者混合时，CO_2 的高效化学抑制作用与 N_2 的物理稀释作用相互补充，在较低总抑爆剂浓度下即可有效阻断链式反应传播。

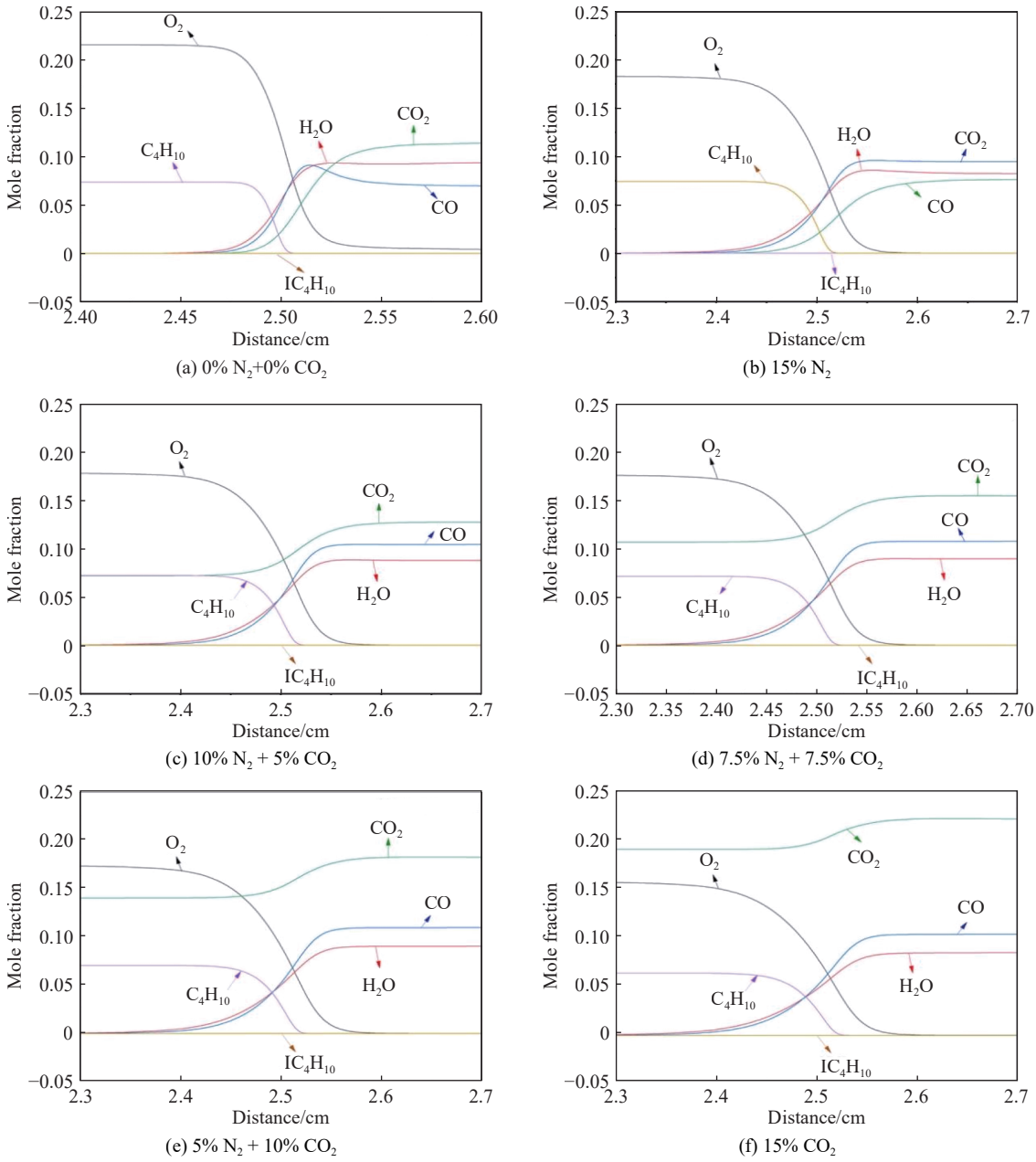


图 13　不同惰性条件下主要参与物质的摩尔分数变化情况

Fig. 13　Changes in molar fractions of key reactants under different inert conditions

相较于单一 N_2，混合气体特别 CO_2 可更显著地降低爆炸核心的敏感基元反应 R5（O_2+H<=>O+OH）的敏感性系数，从根源上削弱链式反应强度；混合体系对 H、OH 等关键活性自由基的淬灭效果远强于单一 N_2，可更高效地中断链式反应传递；组分演化结果进一步证实，混合气体更显著地延缓了正丁烷氧化、O_2 消耗进程，通过物理惰化与化学淬灭的协同作用，实现了对爆炸过程的多路径强化抑制，因此其抑爆性能显著优于单一 N_2。

4　抑爆机理分析

图 14 展示了 N_2 与 CO_2 对正丁烷-空气预混气体爆炸过程中的主要物质变化及抑制机理。N_2 主要通过物理抑制影响爆炸过程：一方面通过稀释作用降低混合气中氧气的分压，破坏了反应体系中的氧气环境；另一方面作为第 3 个分子(M)影响基元反应 H(+M)+ O_2<=>O+OH(+M)，通过大量的物理碰撞，消耗自由基动能的同时，减缓了链式反应的传播速度，并带走了反应体系中大量的热量，降低了混合气体的温度。CO_2 则是通过物理化学协同抑制影响反应体系，化学抑制方面主要通过 CO_2+H<=>CO+OH 影响反应体系中的 H 自由基和 OH 自由基，在爆炸过程的不同时间里，改变 H 自由基和 OH 自由基的生成速率和消耗速率，进而影响 C_4H_{10}+H⇌SC_4H_9+H 等反应，对爆炸过程进行化学抑制。

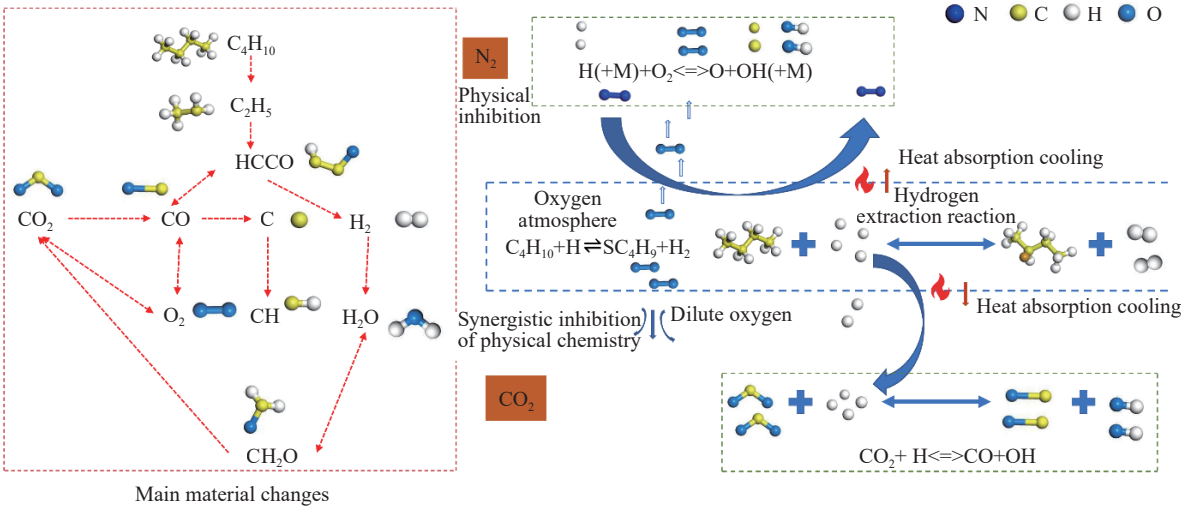


图 14　惰性气体抑制正丁烷爆炸机理

Fig. 14　N_2/CO_2 suppression mechanism for n-butane explosion

5　结　论

本文研究了惰性混合气体 N_2/CO_2 对正丁烷的协同抑制作用，并结合 Chemkin 模拟建立了一维预混层流火焰速度模型，对自由基反应机理和惰性气体协同抑制机理进行了深入分析，以期降低正丁烷生产工艺中的爆炸风险，得到以下主要结论。

(1) 在室温和大气压的初始条件下，通过测试不同浓度正丁烷的最大爆炸压力及最大爆炸压力上升速率等参数，确定 3.8% 正丁烷浓度为最佳爆炸浓度，并对 3.8% 浓度正丁烷进行惰化实验，分别加入不同浓度 N_2 及不同混合比例的 N_2/CO_2 混合气体。随着 CO_2 占比的增加，正丁烷-空气混合物的最大爆炸压力、最大压力上升速率及爆炸指数均在不断降低，压力峰值到达时间、最大压力上升速率到达时间在不断推迟，与单一 N_2 相比，N_2/CO_2 的协同抑制效果更佳。

(2) 观察不同条件下的火焰传播速度及火焰结构变化，与单一 N_2 相比，N_2/CO_2 协同抑制下的火焰传播速度显著减缓，15%N_2 下火焰到达 T3 需要 43 ms，而 7.5%N_2/7.5%CO_2 下需要 48 ms，且相比 15%N_2 条件下，7.5%N_2/7.5%CO_2 下的火焰，其表面的褶皱和细胞结构也大幅减少甚至完全消失。

(3) 借助 Chemkin 数值计算软件研究了不同条件下正丁烷-空气预混气体化学反应动力学过程。结果表明，随着 N_2/CO_2 混合气体中 CO_2 占比的增加，其爆炸压力敏感性逐渐降低，爆炸反应速率大幅降低，与单一 N_2 相比，CO_2 对反应过程中的 H 自由基和 OH 自由基有更强的物理化学协同抑制作用，且影响了基元反应的最大 ROP，有效的抑制了正丁烷预混气体爆炸反应。

参考文献：

[1] MITU M, PRODAN M, GIURCAN V, et al. Influence of inert gas addition on propagation indices of methane-air deflagrations [J]. Process Safety and Environmental Protection, 2016, 102: 513–522. DOI: 10.1016/j.psep.2016.05.007.

[2] 路长, 刘洋, 王鸿波, 等. CO_2、H_2 对 CH_4/Air 预混气爆炸特性的影响 [J]. 安全与环境学报, 2018, 18(5): 1788–1795. DOI: 10.13637/j.issn.1009-6094.2018.05.024.
LU C, LIU Y, WANG H B, et al. Experimental study of the effects of CO_2/H_2 on the characteristic features of methane/air bursts [J]. Journal of Safety and Environment, 2018, 18(5): 1788–1795. DOI: 10.13637/j.issn.1009-6094.2018.05.024.

[3] WU S Y, LIN N K, SHU C M. Effects of flammability characteristics of methane with three inert gases [J]. Process Safety Progress, 2010, 29(4): 349–352. DOI: 10.1002/prs.10411.

[4] WANG Z R, NI L, LIU X, et al. Effects of N_2/CO_2 on explosion characteristics of methane and air mixture [J]. Journal of Loss Prevention in the Process Industries, 2014, 31: 10–15. DOI: 10.1016/j.jlp.2014.06.004.

[5] 张迎新, 吴强, 刘传海, 等. 惰性气体 N_2/CO_2 抑制瓦斯爆炸实验研究 [J]. 爆炸与冲击, 2017, 37(5): 906–912. DOI: 10.11883/1001-1455(2017)05-0906-07.
ZHANG Y X, WU Q, LIU C H, et al. Experimental study on coal mine gas explosion suppression with inert gas N_2/CO_2 [J]. Explosion and Shock Waves, 2017, 37(5): 906–912. DOI: 10.11883/1001-1455(2017)05-0906-07.

[6] LI M H, XU J C, WANG C J, et al. Thermal and kinetics mechanism of explosion mitigation of methane-air mixture by N_2/CO_2 in a closed compartment [J]. Fuel, 2019, 255: 115747. DOI: 10.1016/j.fuel.2019.115747.

[7] WEI H Q, XU Z L, ZHOU L, et al. Effect of hydrogen-air mixture diluted with argon/nitrogen/carbon dioxide on combustion processes in confined space [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2018, 43(31): 14798–14805. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2018.06.038.

[8] GAO H B, QU Z G, TAO W Q, et al. Experimental investigation of methane/(Ar, N_2, CO_2)-air mixture combustion in a two-layer packed bed burner [J]. Experimental Thermal and Fluid Science, 2013, 44: 599–606. DOI: 10.1016/j.expthermflusci.2012.08.023.

[9] LI Y C, BI M S, YAN C C, et al. Inerting effect of carbon dioxide on confined hydrogen explosion [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2019, 44(40): 22620–22631. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2019.04.181.

[10] LI Y C, BI M S, HUANG L, et al. Hydrogen cloud explosion evaluation under inert gas atmosphere [J]. Fuel Processing Technology, 2018, 180: 96–104. DOI: 10.1016/j.fuproc.2018.08.015.

[11] ZHONG F X, LI Q Z, LI B T, et al. Chemical mechanism analysis on flame propagation properties of methane/air deflagration mix-diluted by $CO_2 + N_2$ [J]. Fuel, 2024, 361: 130710. DOI: 10.1016/j.fuel.2023.130710.

[12] GANT S E, PURSELL M R, LEA C J, et al. Flammability of hydrocarbon and carbon dioxide mixtures [J]. Process Safety and Environmental Protection, 2011, 89(6): 472–481. DOI: 10.1016/j.psep.2011.06.017.

[13] 罗振敏, 解超, 王九柱, 等. N_2 和 CO_2 对液化石油气 (LPG) 惰化抑爆效能对比分析 [J]. 化工进展, 2019, 38(6): 2574–2580. DOI: 10.16085/j.issn.1000-6613.2018-1788.
LUO Z M, XIE C, WANG J Z, et al. Comparative analysis of the inert effects of N_2 and CO_2 on LPG explosion [J]. Chemical Industry and Engineering Progress, 2019, 38(6): 2574–2580. DOI: 10.16085/j.issn.1000-6613.2018-1788.

[14] 刘振翼, 李嘉璐, 李鹏亮, 等. 高温高压下 N_2 和 CO_2 对 $CH_4/C_2H_6/C_3H_8$ 混合气抑爆效果研究 [J]. 北京理工大学学报, 2023, 43(2): 111–117. DOI: 10.15918/j.tbit1001-0645.2022.048.
LIU Z Y, LI J L, LI P L, et al. Study on the explosion suppression effect of N_2 and CO_2 on $CH_4/C_2H_6/C_3H_8$ mixtures at high temperature and high pressure [J]. Transactions of Beijing Institute of Technology, 2023, 43(2): 111–117. DOI: 10.15918/j.tbit1001-0645.2022.048.

[15] AZATYAN V V, SHEBEKO Y N, SHEBEKO A Y. A numerical modelling of an influence of CH_4, N_2, CO_2 and steam on a laminar burning velocity of hydrogen in air [J]. Journal of Loss Prevention in the Process Industries, 2010, 23(2): 331–336. DOI: 10.1016/j.jlp.2009.12.002.

[16] LI Y C, BI M S, GAO W, et al. Interaction of flame instabilities and pressure behavior of hydrogen-propane explosion [J]. Journal of Loss Prevention in the Process Industries, 2020, 64: 104078. DOI: 10.1016/j.jlp.2020.104078.

[17] GAO M D, BI M S, YE L L, et al. Suppression of hydrogen-air explosions by hydrofluorocarbons [J]. Process Safety and Environmental Protection, 2021, 145: 378–387. DOI: 10.1016/j.psep.2020.08.036.

[18] RAJPARA P, SHAH R, BANERJEE J. Effect of hydrogen addition on combustion and emission characteristics of methane fuelled upward swirl can combustor [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2018, 43(36): 17505–17519. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2018.07.111.

[19] YANG X F, YU M G, ZHENG K, et al. Corrigendum to 'An experimental investigation into the behavior of premixed flames of hydrogen/carbon monoxide/air mixtures in a half-open duct' [Fuel 237 (2019) 619–629] [J]. Fuel, 2019, 256: 115993. DOI: 10.1016/j.fuel.2019.115993.

[20] HU S T, HONG Z J, GAO J C, et al. Effect of magnetic field on alkane gas explosions [J]. Combustion and Flame, 2022, 246: 112427. DOI: 10.1016/j.combustflame.2022.112427.

[21] ZHOU G, KONG Y, QIAN X M, et al. Explosion dynamics and sensitivity analysis of blended LPG/DME clean fuel promoted by H_2 in a confined elongated space [J]. Fuel, 2023, 331: 125816. DOI: 10.1016/j.fuel.2022.125816.

[22] SU M Q, CHEN S N, JIANG B Y, et al. Determination the suppression effect and mechanism of C_2HF_5 on premixed ethylene-air explosion through experiment and simulation [J]. Process Safety and Environmental Protection, 2025, 195: 106031. DOI: 10.1016/j.psep.2024.07.058.

[23] 刘洋, 李展, 方秦, 等. 惰性气体和水蒸气对长直空间燃气爆炸超压及其振荡的抑制作用 [J]. 高压物理学报, 2021, 35(5): 055201. DOI: 10.11858/gywlxb.20200654.
LIU Y, LI Z, FANG Q, et al. Inert gas and water vapor suppressing overpressure and its oscillation of gas explosion in long straight space [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2021, 35(5): 055201. DOI: 10.11858/gywlxb.20200654.

[24] LIU Q M, CHEN X, HUANG J X, et al. The characteristics of flame propagation in ammonia/oxygen mixtures [J]. Journal of Hazardous Materials, 2019, 363: 187–196. DOI: 10.1016/j.jhazmat.2018.09.073.

[25] LEE J H, LEE S I, KWON O C. Effects of ammonia substitution on hydrogen/air flame propagation and emissions [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2010, 35(20): 11332–11341. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2010.07.104.

[26] LEE J H, KIM J H, PARK J H, et al. Studies on properties of laminar premixed hydrogen-added ammonia/air flames for hydrogen production [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2010, 35(3): 1054–1064. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2009.11.071.

[27] WANG T, LUO Z M, WEN H, et al. The explosion enhancement of methane-air mixtures by ethylene in a confined chamber [J]. Energy, 2021, 214: 119042. DOI: 10.1016/j.energy.2020.119042.

[28] RAZUS D, BRINZEA V, MITU M, et al. Inerting effect of the combustion products on the confined deflagration of liquefied petroleum gas-air mixtures [J]. Journal of Loss Prevention in the Process Industries, 2009, 22(4): 463–468. DOI: 10.1016/j.jlp.2009.03.002.

[29] WEI S M, YU M G, PEI B, et al. Suppression of CO_2 and H_2O on the cellular instability of premixed methane/air flame [J]. Fuel, 2020, 264: 116862. DOI: 10.1016/j.fuel.2019.116862.

[30] 李艳超, 毕明树, 张大为, 等. 热扩散不稳定和流体动力学不稳定对氢气/空气爆炸胞状火焰的影响 [J]. 爆炸与冲击, 2018, 38(5): 1064–1070. DOI: 10.11883/bzycj-2017-0069.
LI Y C, BI M S, ZHANG D W, et al. Effects of diffusive-thermal instability and hydrodynamic instability on cellular flame during hydrogen/air explosion [J]. Explosion and Shock Waves, 2018, 38(5): 1064–1070. DOI: 10.11883/bzycj-2017-0069.

(责任编辑　陈棠)