

РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ ДЕТОНАЦИИ СМЕСЕЙ АЦЕТИЛЕНА

УДК 534.222.2

А. И. Валишев

Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН,
630090 Новосибирск

Выполнен расчет параметров детонации смесей ацетилена с кислородом и воздухом в широкой области концентраций. Показано, что основным источником энергии, питающим детонационную волну при высоких содержаниях ацетилена, является теплота конденсации углерода.

Расчету параметров детонации различных газовых смесей с учетом образования конденсированной фазы в продуктах реакции посвящены, в частности, работы [1–3]. В [1] исследованы параметры детонации чистого ацетилена в широком диапазоне начальных давлений. Результаты [1] получены с погрешностями, вытекающими из расчета производных как отношения конечных разностей. В [2] рассчитаны детонационные параметры в смесях некоторых газовых топлив с воздухом, а также аэрозвесей распыленных твердых углерода и алюминия. В [2] отсутствуют данные о детонации ацетиленокислородных смесей. В [3] на основе метода минимизации термодинамических потенциалов при решении задачи термодинамического равновесия в химически реагирующих средах совместно с уравнением состояния с пятью вириальными коэффициентами рассчитаны параметры детонации ряда газообразных и дисперсных смесей и низкоплотных конденсированных взрывчатых веществ в области повышенных давлений и температур. В [3] для сравнения с экспериментальными данными [4] выполнен расчет параметров и состава продуктов детонации ацетиленокислородной смеси при содержании ацетилена менее 80 %.

Цель настоящей работы — расчет параметров детонации смесей ацетилена с кислородом и воздухом в широком диапазоне концентраций.

Решение задачи химического и фазового равновесий в настоящей работе проводилось по методикам [5]. При определении химического состава при постоянных давлении и температуре начальное приближение числа молей какого-либо конденсированного вещества в равновесном составе задавалось в виде $n_k^s = (p - p_k^s(T))/(AT + BT^2)$, где A , B — коэффициенты, эмпирически подобранные на основе тестовых расчетов; T — температура; p — давление; $p_k^s(T)$ — давление насыщенного пара данного компонента, зависящее только от температуры и вычисляемое по табличным данным [6]. Для улучшения сходимости метода применялся алгоритм минимизации нормы вектора невязок. На каждом итерационном шаге подсчитывалась сумма квадратов правых частей уравнений и варьировались поправки к переменным для минимизации нормы. Использование данного алгоритма несколько увеличивало время счета, однако гарантировало сходимость.

Уравнения сохранения массы, импульса и энергии совместно с задачей определения равновесного состава определяли точку на равновесной детонационной адиабате при произвольном давлении. Давление в точке Чепмена — Жуге рассчитывалось в рамках односкоростной модели из условия $M_e = 1$, где M_e — число Маха, определенное по равновесной скорости звука. Поправки к давлению на итерациях находились аналогично [7].

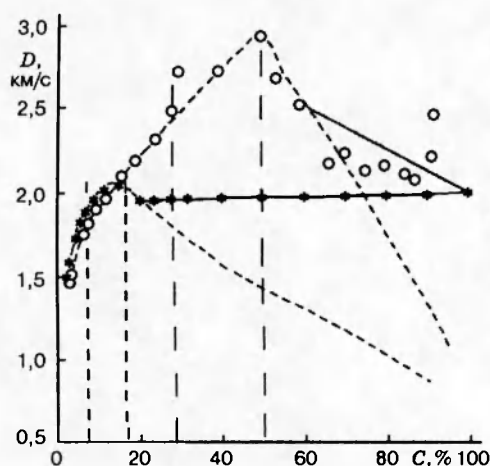


Рис. 1

Рис. 1. Зависимость скорости детонации D от начального содержания ацетилена C для ацетиленовоздушных и ацетиленокислородных смесей

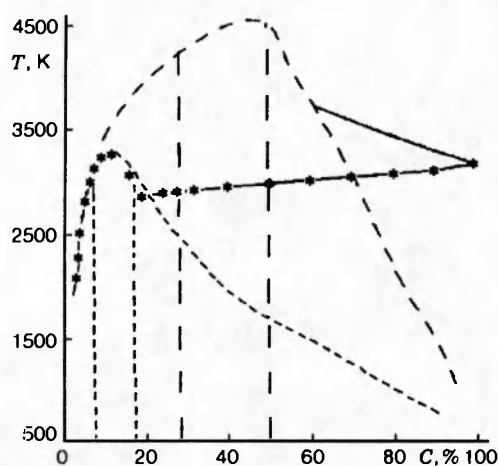


Рис. 2

Рис. 2. Зависимость температуры T в точке Чепмена — Жуге от начального содержания ацетилена C для ацетиленовоздушных и ацетиленокислородных смесей

Для сравнения с результатами [2] проведен расчет параметров детонации ацетиленовоздушной смеси при мольном содержании ацетилена в диапазоне $3 \div 100\%$. Исходная формула воздуха $O_2 + 3,76N_2$, начальное давление $0,1$ МПа, температура $20^\circ C$. Звездочками на рис. 1–3 отмечены результаты работы [2]. Штриховыми кривыми в области высоких содержаний ацетилена показаны расчетные параметры для гипотетического случая, когда весь свободный углерод оставался в газовой фазе. Кривые с относительно более высокими величинами относятся к ацетиленокислородной смеси. При начальном содержании ацетилена менее 21% в ацетиленовоздушной смеси конденсированный углерод в продуктах детонации отсутствует. Отклонение параметров, рассчитанных с учетом только газовой фазы, возрастает с увеличением концентрации ацетилена. Вертикальные штриховые линии соответствуют стехиометрической ($7,75\%$) и эквимольной по кислороду ($17,36\%$) концентрациям ацетилена в смеси с воздухом (соответственно $28,57$ и 50% в смеси с кислородом). Имеется хорошее согласие между настоящими результатами и данными работы [2], несмотря на малые отличия в представлении воздуха.

На рис. 1 кружками отмечены экспериментальные данные [4], где измерения выполнены при начальном давлении $p_0 = 1$ атм и комнатной температуре. Почти точное совпадение с опытными результатами имеет место вплоть до концентраций ацетилена 60% . Различия между [4] и настоящими данными становятся существенными при больших концентрациях. Как показывает расчет, в случае детонации ацетиленокислородной смеси сажа образуется при $C > 61,5\%$. В диапазоне концентраций $60 \div 75\%$ экспериментальные данные [4] лежат ближе к кривой, рассчитанной при отсутствии конденсации углерода. Можно предположить, что конденсация в реальном процессе идет в волне разрежения за точкой Чепмена — Жуге.

Максимальные значения скорости детонации и давления соответствуют эквимольной

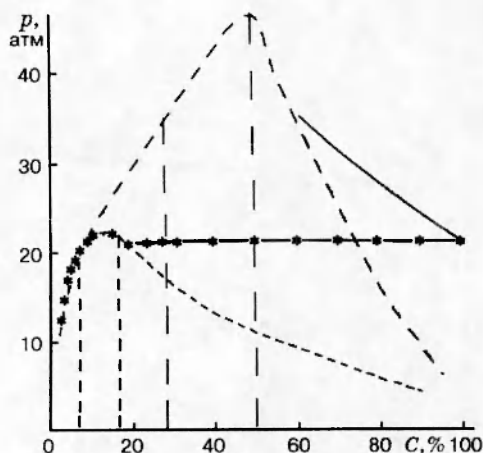


Рис. 3

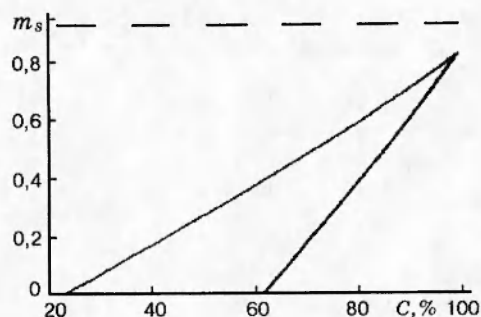


Рис. 4

Рис. 3. Зависимость давления p в точке Чепмена — Жуге от начального содержания ацетилена C для ацетиленовоздушных и ацетиленокислородных смесей

Рис. 4. Зависимость массовой доли конденсированного углерода m_s в продуктах детонации от начального содержания ацетилена C для воздушных и кислородных смесей

ным смесям, но наибольшая температура находится в промежутке между стехиометрической и эквимольной концентрациями.

На рис. 4 наблюдается почти линейная связь. Максимальная величина $m_s = 0,808$. Штриховая линия соответствует массовой доле углерода в ацетилене $m_s = 0,923$.

В отличие от [1], наши расчеты показали, что с повышением начального давления ацетилена скорость детонации монотонно снижается от 1978 м/с при $p_0 = 0,5$ атм до 1950 м/с при $p_0 = 33,8$ атм. Отметим, что при $p_0 = 1 \div 8$ атм подавляющее большинство экспериментальных значений $D < 2000$ м/с [1]. Согласно настоящим расчетам давление за фронтом волны в 20 раз превышает p_0 вплоть до давления перед фронтом в 50 атм. В [1] при $p_0 = 33,8$ атм получено значение 1000 атм за фронтом. Различия в других параметрах, в частности температуре, между [1] и настоящими данными не столь существенны. В целом набор экспериментальных данных по скорости детонации ацетилена вблизи предела в [1, 4] имеет большой разброс, и вопрос о соответствии экспериментальных и расчетных значений требует специального изучения. Ясно, что относительно высокие параметры (по сравнению с процессом в отсутствие конденсированной фазы) обусловлены выделением теплоты конденсации углерода. По расчетам разность энтальпий образования продуктов и исходной смеси при стандартной температуре в случае детонации чистого ацетилена составляет 7,2 кДж/г. Согласно [6] теплота сублимации графита 59 кДж/г, причем эта величина слабо зависит от температуры.

Автор выражает благодарность М. Е. Топчиану за плодотворные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Борисов А. А., Гельфанд Б. Е. К расчету параметров детонационных волн в газах

- и двухфазных системах // Физика горения и взрыва. 1970. Т. 6, № 2. С. 186–195.
2. **Васильев В. М., Вольперт А. И., Клычников Л. В. и др.** Расчет параметров детонации смесей горючих веществ с воздухом // Физика горения и взрыва. 1980. Т. 16, № 3. С. 127–134.
 3. **Губин С. А., Михалкин В. Н., Одинцов В. В. и др.** Расчет параметров и состава продуктов детонации низкоплотных смесей различного агрегатного состояния // Хим. физика. 1983. № 3. С. 420–427.
 4. **Льюис В., Эльбе Г.** Горение, пламя и взрывы в газах. М.: Мир, 1968.
 5. **Алемасов В. Е., Дрегаллин А. Ф., Тишин А. П., Худяков В. А.** Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания. Т. 1: Методы расчета. М.: ВИНТИ, 1971.
 6. **Термодинамические свойства индивидуальных веществ:** Справочник / Под ред. В. П. Глушко. М.: Изд-во АН СССР, 1962.
 7. **Николаев Ю. А., Топчийн М. Е.** Расчет равновесных течений в детонационных волнах в газах // Физика горения и взрыва. 1977. Т. 13, № 3. С. 393–404.

Поступила в редакцию 30/I 1996 г.
