

УДК 534.222.2

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕТОНАЦИОННОГО СГОРАНИЯ УГЛЕРОДНОЙ ПЫЛИ

**Е. С. Прохоров**

Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 630090 Новосибирск, prokh@hydro.nsc.ru

Представлены результаты расчетов детонации однородной газовзвеси ультрадисперсных углеродных частиц с окислителем (кислородом или воздухом) в предположении химического равновесия в продуктах детонационного сгорания. Численно исследовано влияние массовой доли углерода в таких смесях на скорость детонационного фронта и основные газодинамические параметры продуктов сгорания. Установлено, что расчеты коррелируют с имеющимися экспериментальными данными по скорости детонации во взвеси частиц угля в кислороде и воздухе.

Ключевые слова: взрыв, детонация, химическое равновесие, газовзвесь, углерод, уголь.

DOI 10.15372/FGV2023.9293

EDN KRDTGM

## ВВЕДЕНИЕ

В [1, 2] предложен унифицированный подход к расчету равновесных течений реагирующих газов. Он сформулирован на основе развитой приближенной модели равновесия, которая позволяет получать численные решения при детонации газовых смесей с различными соотношениями между углеводородным топливом и окислителем. В приближенной модели по сравнению с точными (более детальными) моделями используются дополнительные физические предположения, позволяющие не только расширить область ее применения, но и существенно упростить вид системы решаемых уравнений. Показано, что для адекватных (согласованных с экспериментом) расчетов газодинамики детонационных течений вполне достаточно описывать компоненты продуктов сгорания стандартным и ограниченным по количеству набором веществ. Предложена процедура однозначного определения молярных долей этих веществ в состоянии химического равновесия, основанная только на относительных концентрациях атомов, таких как кислород, углерод, водород, азот и любые другие одноатомные инертные вещества (например, аргон). Такое приближение удобно при численном решении нестационарных задач, когда химический состав продуктов детонации может быть переменным. В этом случае проще отслеживать перемещение атомов за счет движения среды независимо от того, в состав каких молекул они входят.

Унифицированный подход способен адекватно описывать детонационные течения даже при недостатке кислорода, когда в продуктах сгорания может в заметных количествах появляться свободный углерод не только в газообразной, но и в конденсированной фазе. Потребность в таких исследованиях обусловлена возросшим интересом к получению наноразмерного углерода путем детонационного разложения газообразных углеводородов [3]. Отметим, что данная проблема представляется достаточно актуальной не только с точки зрения получения технического углерода (сажи), но и в связи с развитием методов получения водорода из ацетилена [4].

Одним из стимулов для развития унифицированного подхода послужили результаты работы [3], где предпринята попытка с помощью компьютерной программы «Безопасность» рассчитать параметры самоподдерживающейся детонации газовых смесей на основе ацетилена при недостатке кислорода, когда в продуктах химической реакции возможно появление свободного углерода. Для этого был использован вычислительный алгоритм [5], частично совпадающий с методами расчета химического равновесия газообразных продуктов сгорания углеводородных топлив [6]. Программа «Безопасность» позволяет вычислять параметры детонации Чепмена — Жуге на основе классического подхода к анализу равновесного состава продуктов сгорания, имеющих по сравнению с [6] большое количество различных компонентов. Расчеты выполнены для

двух предельных случаев: 1) углерод находится в продуктах детонации только в газообразном состоянии, 2) углерод находится только в конденсированном состоянии. Сопоставление расчетов с данными измерения скорости фронта детонации показало, что численное решение в обоих случаях существенно отличается от опытных данных. Экспериментальные точки располагаются примерно посередине между расчетными кривыми на графике и расхождение в значениях скорости детонационного фронта достигает более 10 %. Поэтому к таким расчетам следует относиться как к оценке. Таким образом, использование точных известных моделей не позволяет согласовать численное решение с экспериментом.

Однако в рамках унифицированного подхода удается добиться хорошей корреляции между расчетной и экспериментальной зависимостями скорости детонационного фронта от концентрации ацетилена в смеси. Для этого пришлось выдвинуть предположение, что температура плавления наноразмерного углеродного материала, получаемого при детонационном сгорании ацетилена, ниже, чем у графита, и составляет около 3 100 К. При такой корректировке температуры плавления получено наилучшее согласование (с точностью около 3 %) между численным решением и опытными данными.

Результаты и выводы работ [1, 2] позволяют приблизиться к решению другой важной задачи, а именно к моделированию детонации в смеси углеродной пыли с окислителем (кислородом или воздухом). То есть предлагается не получать мелкодисперсный углеродный материал, а, наоборот, сжигать его детонационным способом. Актуальность постановки такой задачи связана с возможностью оценки последствий аварийных взрывов в шахтах угольной пыли, в основном состоящей из углерода. Кроме того, в связи с производством углеродных наночастиц в промышленных масштабах возникает потребность в исследовании их потенциальной взрывоопасности в окислительной среде [7]. Наибольшую угрозу представляют взрывы, приводящие к формированию детонационных волн. Поэтому информация о скорости детонационного фронта, давлении, динамическом напоре и температуре продуктов детонации является востребованной. Ранее подобные вопросы были рассмотрены в работе [8], где при использовании вышеупомянутой ком-

пьютерной программы «Безопасность» проведены оценки параметров детонации при стандартных условиях. Расчеты выполнены для смесей углерода с окислителем в виде однородной газовзвеси частиц пренебрежимо малого размера. При этом ошибочно предполагалось, что соотношение между газовой и конденсированной фазами углерода (графитом) перед детонационным фронтом может быть произвольным. В результате в расчетах с преобладанием газовой фазы углерода получены нереальные значения температуры продуктов детонации, более 8 000 К, что, цитируя [8], «выше температуры на поверхности Солнца». Кроме того, ограниченность методики расчета в [8] обусловлена требованием избытка кислорода, чтобы его хватало до окисления углерода, по крайней мере, до CO, что позволит исключить появление свободного углерода в продуктах детонации.

В настоящей работе в рамках унифицированного подхода [1, 2] удалось снять это ограничение и рассчитать параметры самоподдерживающейся (Чепмена — Жуге) детонации при варьировании в широких пределах концентрации углеродной пыли в смесях с кислородом и воздухом.

## ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Пусть при стандартных начальных условиях (давлении  $p_0 = 1$  атм и температуре  $T_0 = 298.15$  К) по неподвижной (массовая скорость  $u_0 = 0$ ) звезды углеродной пыли в газообразном окислителе (далее для краткости — газовзвеси), например, в кислороде O<sub>2</sub> или воздухе, имеющем следующий состав: 0.21O<sub>2</sub> + 0.78N<sub>2</sub> + 0.01Ar, распространяется фронт детонации со скоростью  $D$ . Химический состав такой реагирующей газовзвеси будем характеризовать относительными концентрациями атомов кислорода  $z_O$ , углерода  $z_C$ , азота  $z_N$  и аргона  $z_{Ar}$ , связанных между собой соотношением

$$z_O + z_C + z_N + z_{Ar} = 1. \quad (1)$$

Если предположить, что масса углеродной пыли в  $\lambda$  раз превышает массу кислорода, то будет справедливым соотношение

$$z_C/z_O = \lambda \mu_O/\mu_C, \quad (2)$$

где  $\mu_C$  и  $\mu_O$  — молярные массы атомарного углерода и кислорода соответственно. Объединяя (1) и (2), можно выразить концентрации

атомов через параметр  $\lambda$ . Так, для газовзвеси в кислороде получаем

$$\begin{aligned} z_O &= \frac{1}{1 + \lambda\mu_O/\mu_C}, & z_C &= \frac{\lambda\mu_O/\mu_C}{1 + \lambda\mu_O/\mu_C}, \\ z_N &= z_{Ar} = 0, \end{aligned} \quad (3)$$

а для газовзвеси в воздухе с учетом его состава имеем

$$\begin{aligned} z_O &= \frac{1}{\pi + \lambda\mu_O/\mu_C}, & z_C &= \frac{\lambda\mu_O/\mu_C}{\pi + \lambda\mu_O/\mu_C}, \\ z_N &= \frac{0.78/0.21}{\pi + \lambda\mu_O/\mu_C}, & z_{Ar} &= \frac{0.01/0.42}{\pi + \lambda\mu_O/\mu_C}, \end{aligned} \quad (4)$$

где  $\pi = 1.99/0.42 \approx 4.738$ .

Поскольку атомарный баланс должен соблюдаться и при протекании химических реакций, то соотношения (1)–(4) будут справедливы и для продуктов детонации, т. е. во всей области газодинамического течения.

Если  $z_C/z_O > 1$ , то в соответствии с [1, 2] в продуктах детонации возможно появление одновременно газообразной (C) и конденсированной (графит,  $C^*$ ) фаз углерода. Частицы конденсированного вещества являются «большими молекулами»  $C_k^*$  [9], состоящими из большого количества  $k$  обычных молекул. Как правило, полагают  $k = 10^3$ . Согласно оценкам размер таких «больших молекул» порядка 150 нм и при этом их концентрация в продуктах детонации пренебрежимо мала, т. е. их можно представлять в виде наноразмерных конденсированных частиц с незначительным парциальным давлением. В зависимости от температуры частицы за детонационным фронтом могут быть в твердом, жидким или частично расплавленном состоянии. Согласно [2] температура их плавления  $T_m = 3100$  К. Проверка показала, что увеличение или уменьшение количества молекул  $k$  в несколько раз практически не влияет на результаты расчетов параметров продуктов детонации. Это позволяет говорить о слабом влиянии размеров «больших молекул» на численное решение.

В [1] приведена процедура однозначного определения при заданных давлении  $p$  и температуре  $T$  молярных долей компонентов продуктов детонации  $y_s$  ( $\sum y_s = 1$ ) в состоянии химического равновесия, основанная только на относительных концентрациях атомов. Отметим, что расчеты  $y_s$  для случаев, когда кислорода достаточно ( $z_C/z_O \leq 1$ ) для окисления

углерода до CO, также не имеют принципиальных сложностей [10]. С учетом (1) среди компонентов продуктов детонации могут быть только следующие:  $s = \{\text{CO}_2, \text{CO}, \text{O}, \text{C}, \text{C}_k^*, \text{O}_2, \text{N}_2, \text{Ar}\}$ . Таким образом, варьируя давление и температуру, можно определять для любого компонента функциональную зависимость  $y_s = y_s(p, T)$ , а также, используя известные методы численного дифференцирования, находить частные производные  $y_{s,p} = \left(\frac{\partial y_s}{\partial p}\right)_T$  и  $y_{s,T} = \left(\frac{\partial y_s}{\partial T}\right)_p$ .

Установленные зависимости в дальнейшем позволяют рассчитывать для продуктов детонации среднюю молярную массу  $\mu = \sum_s y_s \mu_s$  и удельную (на единицу массы) энталпию  $H = \left(\sum_s y_s H_s\right)/\mu$ , где  $H_s = H_s^0(T) - \Delta H_s$  — энталпия 1 моля вещества  $s$ . Здесь  $H_s^0(T)$  соответствует функциональной зависимости энталпии от температуры, а  $\Delta H_s$  — энталпия реакции образования (сублимации для конденсированных веществ) при  $T = 0$  К. Для справки приведем значения  $\Delta H_s$  для компонентов  $s$  [1]:  $\Delta H_O = \Delta H_C = \Delta H_{Ar} = 0$ ,  $\Delta H_{C^*} = 711.185$ ,  $\Delta H_{O_2} = 493.566$ ,  $\Delta H_{N_2} = 941.636$ ,  $\Delta H_{CO} = 1071.780$ ,  $\Delta H_{CO_2} = 1597.893$  кДж/моль. В [9] при вычислении энталпии конденсата в виде «больших молекул» рекомендовано использовать формулу  $H_{C_k^*} = kH_{C^*}$ . Из вышеизложенного следует, что молярная масса  $\mu = \mu(p, T)$  и энталпия  $H = H(p, T)$  также являются однозначными функциями давления и температуры.

Эти представления можно привлечь и для описания газовзвеси перед детонационным фронтом. Поскольку при стандартных условиях давление насыщенных паров углерода очень низкое, то будем полагать, что весь углерод сосредоточен в «больших молекулах».

Таким образом, исходный компонентный состав газовзвеси можно представить в следующем виде:  $\frac{z_C}{k} C_k^* + \frac{z_O}{2} O_2 + \frac{z_N}{2} N_2 + z_{Ar} Ar$ .

Этому составу в рамках модели идеального газа будут соответствовать средние значение молярной массы  $\mu_0$  и плотности  $\rho_0$ :

$$\begin{aligned} \mu_0 &= \frac{z_C \mu_C + z_O \mu_O + z_N \mu_N + z_{Ar} \mu_{Ar}}{z_C/k + z_O/2 + z_N/2 + z_{Ar}}, \\ \rho_0 &= \frac{p_0 \mu_0}{R T_0}. \end{aligned} \quad (5)$$

Из (5) следует, что при увеличении размеров (при  $k \rightarrow \infty$ ) углеродных частиц («больших молекул»)  $\mu_0$  и  $\rho_0$  будут стремиться асимптотически к некоторым предельным значениям.

Если привлечь справочные данные [11] по теплофизическим свойствам исходных веществ  $s_0 = \{\text{C}_k^*, \text{O}_2, \text{N}_2, \text{Ar}\}$ , включая их энергию образования из атомов, то можно рассчитать и исходную энталпию газовзвеси. Так, удельная (на единицу массы) энталпия будет равна

$$\begin{aligned} H_0 &= \\ &= \left( (z_{\text{C}}/k)H_{\text{C}_k^*} + (z_{\text{O}}/2)H_{\text{O}_2} + (z_{\text{N}}/2)H_{\text{N}_2} + \right. \\ &\quad \left. + z_{\text{Ar}}H_{\text{Ar}} \right) / \left( z_{\text{C}}/k + z_{\text{O}}/2 + z_{\text{N}}/2 + z_{\text{Ar}} \right). \end{aligned} \quad (6)$$

Применение законов сохранения массы, импульса и энергии на скачке уплотнения (сильном разрыве) дает три уравнения, связывающих газодинамические параметры перед и за детонационным фронтом, имеющим скорость  $D$ :

$$\begin{aligned} \rho_0 D &= \rho(D - u), \\ p_0 + \rho_0 D^2 &= p + \rho(D - u)^2, \\ H_0 + D^2/2 &= H + (D - u)^2/2. \end{aligned} \quad (7)$$

Здесь полагаем, что энталпию продуктов детонации  $H$  можно представить в виде функции (в общем случае неявной) давления  $p$  и плотности  $\rho$ :  $H = H(p, \rho)$ .

Для самоподдерживающейся детонации Чепмена — Жуге также справедливо условие

$$D - u = c, \quad (8)$$

где  $c$  — равновесная скорость звука в среде, определяемая с учетом уравнения первого начала термодинамики  $dU = d(H - p/\rho) = TdS - pd(1/\rho)$  из соотношения

$$c^2 = \left( \frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_S = \frac{H_\rho}{1/\rho - H_p}, \quad (9)$$

$$H_p = \left( \frac{\partial H}{\partial p} \right)_\rho, \quad H_\rho = \left( \frac{\partial H}{\partial \rho} \right)_p.$$

В нашем случае  $H = H(p, T)$ , тогда производные  $H_p$  и  $H_\rho$  находим следующим образом:

$$\left( \frac{\partial H}{\partial p} \right)_\rho = \left( \frac{\partial H}{\partial p} \right)_T + \left( \frac{\partial H}{\partial T} \right)_p \left( \frac{\partial T}{\partial p} \right)_\rho,$$

$$\left( \frac{\partial H}{\partial \rho} \right)_p = \left( \frac{\partial H}{\partial T} \right)_p \left( \frac{\partial T}{\partial \rho} \right)_p,$$

где для вычисления  $\left( \frac{\partial T}{\partial p} \right)_\rho$  и  $\left( \frac{\partial T}{\partial \rho} \right)_p$  используется уравнение состояния для идеального газа, которое можно представить в виде  $\rho = (p/RT)\mu(p, T)$ . При этом полный дифференциал для средней молярной массы определяем как  $d\mu = \left( \sum_s y_{s,p} \mu_s \right) dp + \left( \sum_s y_{s,T} \mu_s \right) dT$ . Отметим, что с учетом  $y_{s,p}$  и  $y_{s,T}$  расчет производных  $\left( \frac{\partial H}{\partial p} \right)_T$  и  $\left( \frac{\partial H}{\partial T} \right)_p$  также не имеет принципиальных трудностей.

Система уравнений (1)–(9) замкнута, ее численное решение находили методом Ньютона. Это решение позволяет установить зависимости параметров детонации Чепмена — Жуге от относительного содержания углеродной пыли в газовзвеси, т. е. от величины  $\lambda$ . Учитывая слабое влияние параметра  $k$  на численное решение, для простоты полагаем, что углеродные частицы («большие молекулы») перед и за детонационным фронтом имеют одинаковые размеры ( $k = 1\ 000$ ).

## ДЕТОНАЦИЯ УГЛЕРОДНОЙ ПЫЛИ В КИСЛОРОДЕ

На рис. 1 представлены результаты расчетов скорости фронта детонационной волны, распространяющейся по газовзвеси углеродная пыль + кислород. Расчеты выполнены при варьировании относительного содержания углерода  $\lambda$  в газовзвеси в широком диапазоне, который соответствует изменению отношения  $z_{\text{C}}/z_{\text{O}}$  от 0.02 до 4.5. Зависимость  $D = D(\lambda)$  немонотонная, с явно выраженным максимумом  $\bar{D} = 2420$  м/с при  $\lambda = \bar{\lambda}$ , где  $\bar{\lambda} \approx 0.75$ , что аналогично  $z_{\text{C}}/z_{\text{O}} = 1$ .

При  $\lambda > \bar{\lambda}$ , когда  $z_{\text{C}}/z_{\text{O}} > 1$  и кислорода недостаточно для окисления всего углерода до CO, в продуктах детонации уже присутствуют углеродные частицы. Причем из-за высокой температуры ( $T > T_m$ ) они вблизи экстремума кривой  $D = D(\lambda)$  находятся в жидкому состоянии.

Для иллюстрации в табл. 1 представлен равновесный химический состав продуктов сгорания за фронтом детонации Чепмена — Жуге в диапазоне  $\lambda = 0.1 \div 1$ .

Таблица 1

Молярные доли компонентов продуктов детонации в состоянии химического равновесия при различных значениях относительного содержания углерода в газовзвеси углеродная пыль + кислород

$\lambda$	$y_{\text{CO}_2}$	$y_{\text{CO}}$	$y_{\text{C}}$	$y_{\text{C}_k^*}$	$y_{\text{O}_2}$	$y_{\text{O}}$
0.1	0.22024	0.03643	—	—	0.70484	0.03848
0.2	0.25443	0.19796	—	—	0.44208	0.10553
0.3	0.23062	0.36965	—	—	0.27008	0.12965
0.4	0.18778	0.52836	—	—	0.15502	0.12884
0.5	0.13695	0.67298	—	—	0.07798	0.11209
0.6	0.08189	0.80670	—	—	0.02888	0.08252
0.7	0.02489	0.93484	—	—	0.00341	0.03686
0.8	—	0.99782	0.00212	0.0006	—	—
0.9	—	0.99973	0.00007	0.00020	—	—
1.0	—	0.99966	—	0.00033	—	—

На рис. 2 можно проследить, как при этом изменяются другие характеристики детонационной волны, такие как давление  $p$ , температура  $T$ , массовая скорость  $u$  и динамический напор  $\rho u^2$  продуктов детонации. Приведем их максимальные значения, которые реализуются при  $\lambda = \bar{\lambda}$ :  $\bar{p} = 58.39$  атм,  $\bar{T} = 4933$  К,  $\bar{u} = 1051$  м/с,  $\bar{\rho} \bar{u}^2 = 44.04$  атм.

В поведении всех кривых, представленных на рисунках, выделяется участок  $0.94 < \lambda < 1.29$ , в котором температура продуктов детонации равна  $T_m = 3100$  К. На этом участке углеродные частицы будут находиться в частично расплавленном состоянии. При дальнейшем увеличении относительного содержания углерода в газовзвеси ( $\lambda > 1.29$ ) частицы за фронтом детонационной волны будут твердыми.

На рис. 2 (точками), как и на рис. 1, приведены расчетные данные [8] параметров детонации стехиометрической смеси состава  $\text{C}^* + \text{O}_2$  ( $z_{\text{C}}/z_{\text{O}} = 0.5$ ). Эти расчеты выполнены при запрете на объединение конденсированного углерода в более крупные молекулы, т. е. когда углерод находится в газовзвеси в атомарном состоянии. Это подтверждается нашим численным решением (при  $k = 1$ ), отличие которого от данных [8] не превышает 0.5 %.

Обращает на себя внимание тот факт, что точки [8] для давления и динамического напора лежат значительно ниже кривых на рис. 2, a, g. Это связано с тем, что в случае  $z_{\text{C}}/z_{\text{O}} = 0.5$ , согласно (5), начальная плотность газовзвеси  $\rho_0$  при  $k = 1000$  будет примерно в два раза выше, чем при  $k = 1$ . С увеличением  $\rho_0$  естественно возрастут давление  $p$  и плотность продуктов детонации  $\rho$ , а значит, и динамический напор  $\rho u^2$ .

Если полагать, что угольная пыль в основном состоит из углерода, то имеет смысл соопоставить имеющиеся данные эксперименталь-

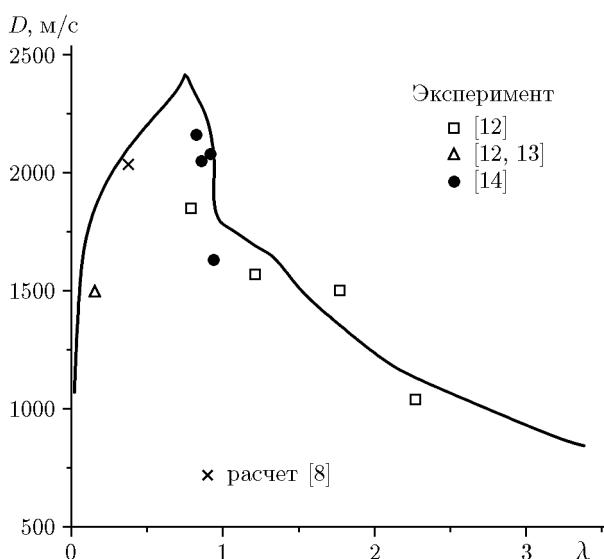


Рис. 1. Влияние относительного содержания углерода на скорость фронта самоподдерживаемой (Чепмена — Жуге) детонационной волны в газовзвеси углеродная пыль + кислород

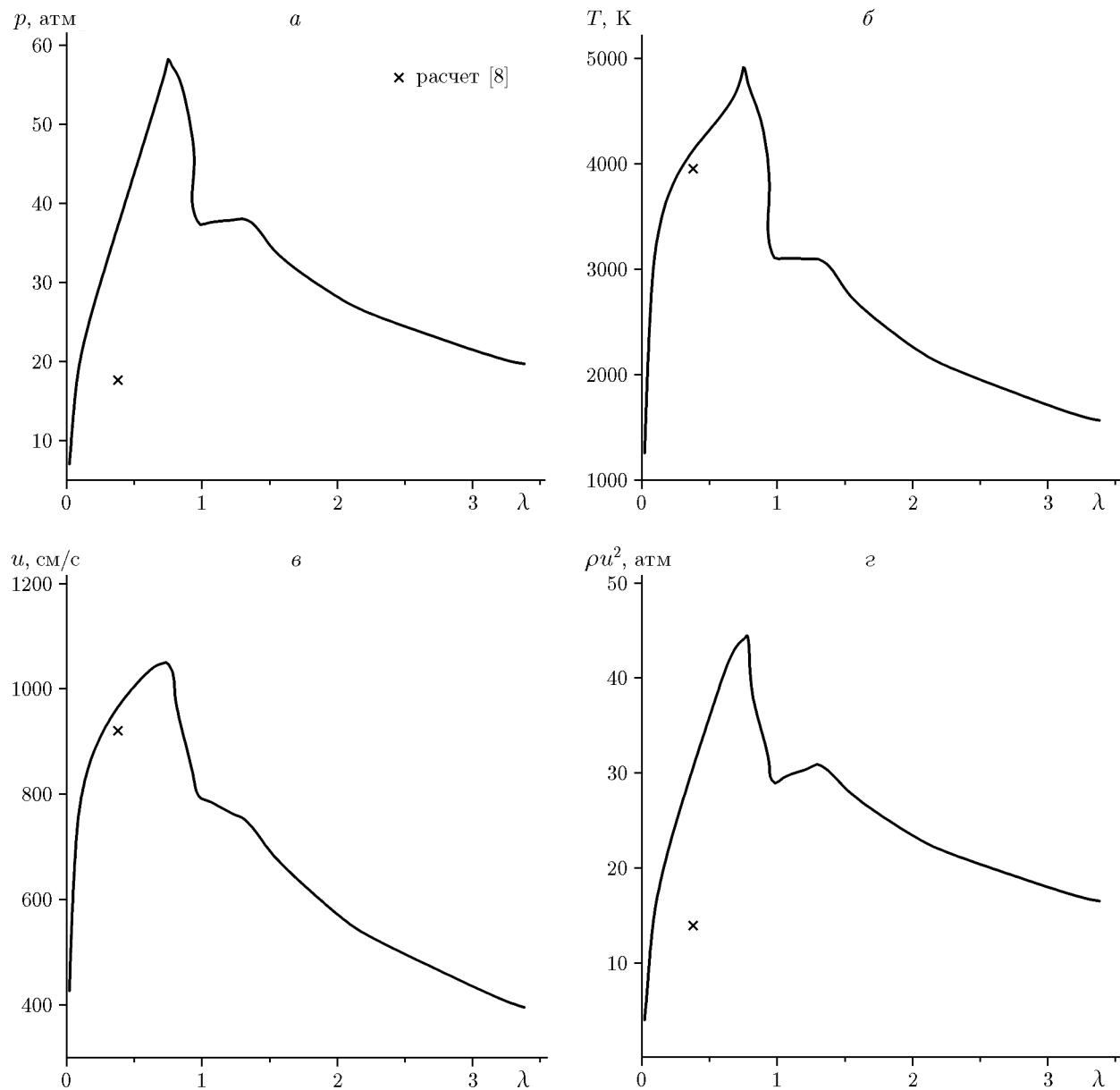


Рис. 2. Давление (*а*), температура (*б*), массовая скорость (*в*) и динамический напор (*г*) продуктов детонации на фронте волны Чепмена — Жуге в зависимости от относительного содержания углерода в газовзвеси углеродная пыль + кислород

ных измерений скорости детонации во взвеси частиц угля в кислороде [12–14] с результатами расчетов, представленными на рис. 1. Отметим, что эксперименты были выполнены для достаточно крупных частиц угля (размером  $25 \div 120$  мкм), а в качестве  $\lambda$  для экспериментальных точек подразумевается отношение массы угля к массе кислорода. Тем не менее они в целом коррелируют с нашим численным решением, которое при  $k \geq 1000$  практически не зависит от размеров углеродных частиц («больших молекул»).

## ДЕТОНАЦИЯ УГЛЕРОДНОЙ ПЫЛИ В ВОЗДУХЕ

Как уже говорилось ранее, в качестве окислителя в детонирующей газовзвеси вместо кислорода возможно использование воздуха. Для иллюстрации в табл. 2 представлен равновесный химический состав продуктов сгорания за фронтом детонации Чепмена — Жуге в диапазоне  $\lambda = 0.1 \div 1$ .

Результаты расчетов основных параметров детонации такой газовзвеси при варьировании  $\lambda$  представлены на рис. 3 и 4. Вид-

Таблица 2

Молярные доли компонентов продуктов детонации в состоянии химического равновесия при различных значениях относительного содержания углерода в газовзвеси углеродная пыль + воздух

$\lambda$	$y_{\text{CO}_2}$	$y_{\text{CO}}$	$y_{\text{C}}$	$y_{\text{C}_k^*}$	$y_{\text{O}_2}$	$y_{\text{O}}$	$y_{\text{N}_2}$	$y_{\text{Ar}}$
0.1	0.05600	—	—	—	0.15400	—	0.78000	0.01000
0.2	0.11151	0.00046	—	—	0.09810	0.00019	0.77975	0.01000
0.3	0.14962	0.01680	—	—	0.04899	0.00203	0.77266	0.00991
0.4	0.15137	0.06506	—	—	0.01768	0.00265	0.75360	0.00966
0.5	0.12526	0.13564	—	—	0.00218	0.00083	0.72678	0.00932
0.6	0.07451	0.22387	—	—	0.00003	0.00003	0.69268	0.00888
0.7	0.02369	0.30795	—	—	—	—	0.65990	0.00846
0.8	—	0.34710	0.00001	0.00002	—	—	0.64461	0.00826
0.9	—	0.34708	—	0.00007	—	—	0.64458	0.00826
1.0	—	0.34707	—	0.00012	—	—	0.64455	0.00826

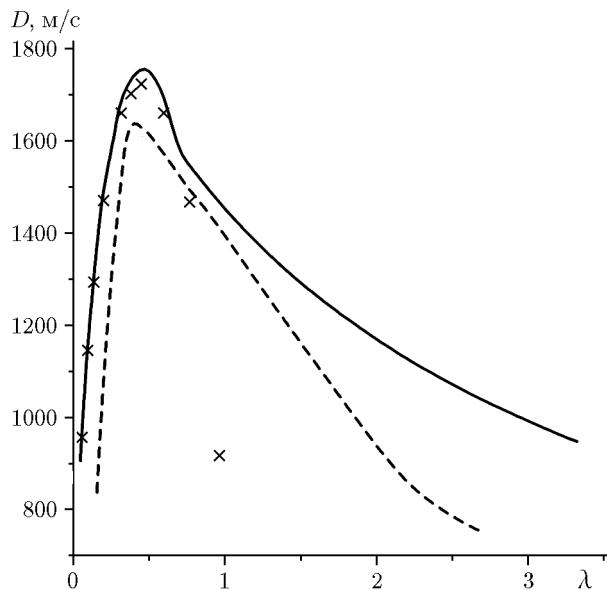


Рис. 3. Влияние относительного содержания углерода на скорость фронта самоподдерживающейся (Чепмена — Жуке) детонационной волны в газовзвеси углеродная пыль + воздух: точки — расчет [8]; штриховая линия — аппроксимация в [13] экспериментальных данных по скорости детонации во взвеси частиц угля в смеси кислорода и азота, близкой по составу к воздуху

но, что замена кислорода воздухом приводит к значительному снижению детонационных параметров. Их максимальные значения, которые реализуются при  $\lambda = 0.45$ , для всех кривых (сплошные линии) на рис. 3 и 4 составляют:  $D = 1756 \text{ м/с}$ ,  $p = 18.65 \text{ атм}$ ,  $T = 2941 \text{ K}$ ,

$u = 779.5 \text{ м/с}$ ,  $\rho u^2 = 14.09 \text{ атм}$ . В точке экстремума  $z_{\text{C}}/z_{\text{O}} = 0.6$ , т. е. меньше 1, что указывает на отсутствие свободного углерода в продуктах детонации.

Полученное численное решение при малом содержании углеродной пыли в газовзвеси ( $\lambda < 0.2$ ) практически совпадает с расчетными данными [8]. Однако с ростом  $\lambda$  между ними уже достаточно существенное расхождение, особенно это касается расчетов давления  $p$  (рис. 4, а) и динамического напора  $\rho u^2$  (рис. 4, г) продуктов детонации. Основная причина, как уже отмечалось, заключается в разных подходах к определению начальной плотности газовзвеси  $\rho_0$ . Кроме того, при  $\lambda > \bar{\lambda}$  кислорода уже не хватает для окисления всего углерода до CO, что приводит к появлению углеродных частиц в продуктах детонации. Необходимо отметить, что результаты, полученные автором, являются более точными, чем приведенные в [8]. Об этом свидетельствуют крайние расчетные точки на рисунках при  $\lambda = 0.96$ , по сути, означающие срыв детонации.

На рис. 3 также представлена кривая (штриховая), полученная в [13] при аппроксимации экспериментальных данных по скорости детонации во взвеси частиц угля (диаметров 25 и 54 мкм) в смеси кислорода и азота, близкой по составу к воздуху. При ее построении в качестве  $\lambda$  подразумевается отношение массы угля к массе кислорода. Обращает на себя внимание то, что сплошная и штриховая линии достаточно хорошо согласуются между собой.

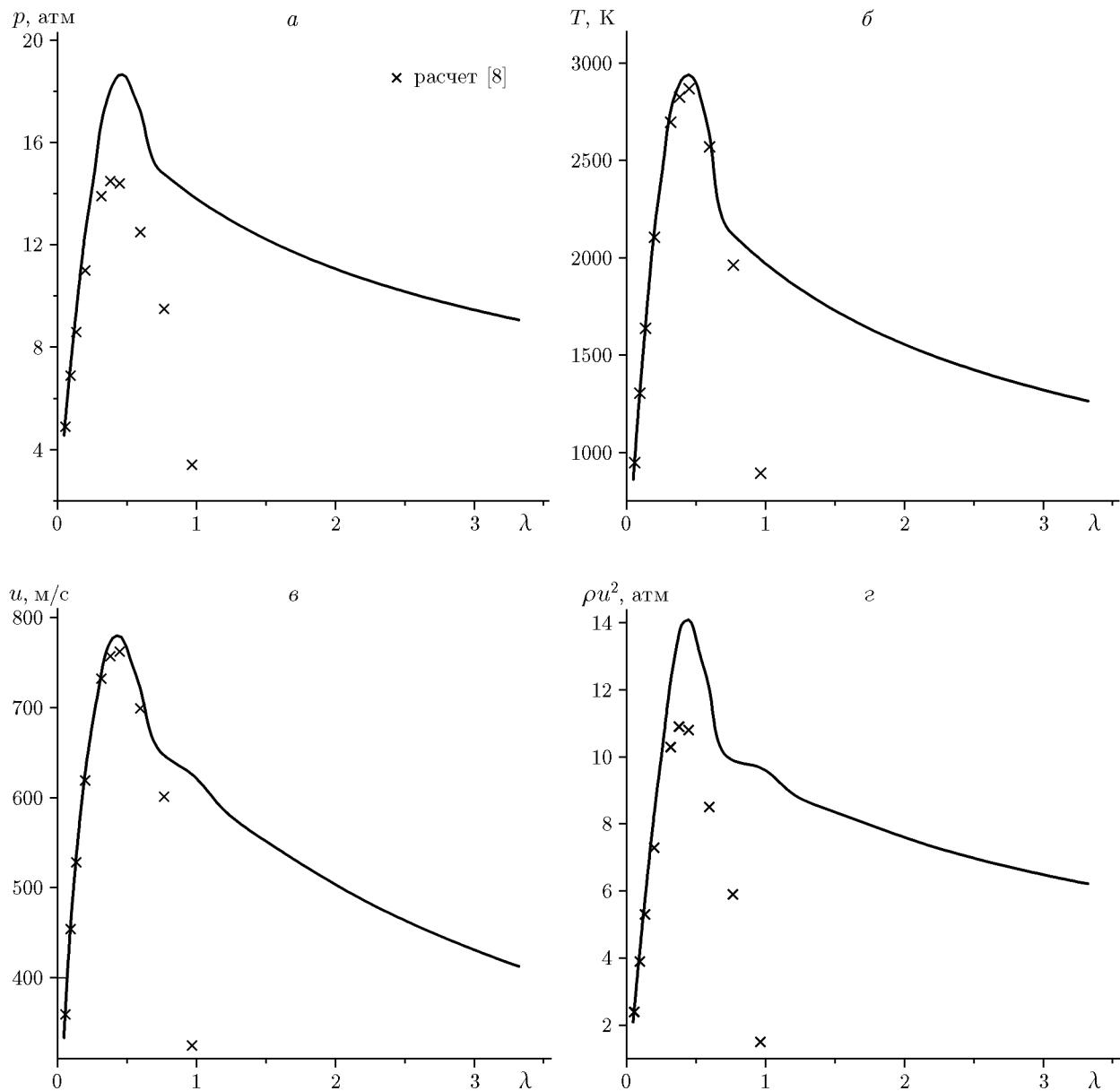


Рис. 4. Давление (*а*), температура (*б*), массовая скорость (*в*) и динамический напор (*г*) продуктов детонации на фронте волны Чепмена — Жуге в зависимости от относительного содержания углерода в газовзвеси углеродная пыль + воздух

У них практически совпадают значения  $\lambda$ , при которых реализуются максимальные значения  $D$ . Скорость детонации Чепмена — Жуге является важнейшей и наиболее значительной характеристикой взрывчатого вещества. Ее значение в первую очередь зависит от теплового эффекта химических реакций на фронте детонационной волны. В составе угля кроме углеродного материала присутствуют летучие вещества, имеющие более низкие значения удельной теплоты сгорания, чем у углерода. В экспериментах [13] использованы два вида угля:

с содержанием летучих 16 и 32 %. Поэтому штриховая линия на рис. 3 логично располагается ниже сплошной линии.

На основании этого можно предположить более высокую степень адекватности наших расчетов реальным процессам, чем представленных в [8].

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложена математическая модель для описания детонационного сгорания газовзвеси уг-

леродной пыли в окислителе (кислороде или воздухе), базирующаяся на основных положениях унифицированного подхода, разработанного для описания равновесных течений реагирующих газов. Модель позволяет рассчитать параметры самоподдерживающейся детонации при варьировании в широких пределах отношения массы углеродной пыли к массе кислорода, сосредоточенного в окислителе. Эти расчеты достаточно хорошо коррелируют с имеющимися экспериментальными данными для скорости детонации взвеси угольной пыли. Численно определены концентрации углеродной пыли в смесях с кислородом и воздухом, при которых реализуются максимальные значения основных характеристик детонации Чепмена — Жуге. Оказалось, что у продуктов детонации давление и динамический напор могут быть существенно выше, чем ранее предсказывалось при традиционных подходах к моделированию детонационного сгорания. Поэтому этот факт нужно учитывать при прогнозировании последствий несанкционированных аварийных взрывов углеродной (или угольной) пыли.

### ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена в рамках государственного задания Институту гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН (номер госрегистрации 121121600293-2).

### КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Автор данной работы заявляет, что у него нет конфликта интересов.

### ЛИТЕРАТУРА

1. **Прохоров Е. С.** К расчету равновесных состояний продуктов сгорания углеродов при недостатке кислорода // Сиб. физ. журн. — 2019. — Т. 14, № 4. — С. 74–81. — DOI: 10.25205/2541-9447-2019-14-4-74-81.
2. **Prokhorov E. S.** On melting temperature of carbon produced in detonation combustion of acetylene // J. Phys.: Conf. Ser. — 2022. — V. 2233. — 012003. — DOI: 10.1088/1742-6596/2233/1/012003.
3. **Батраев И. С., Васильев А. А., Ульянинский В. Ю., Штерцер А. А., Рыбин Д. К.** Исследование газовой детонации переобогащенных смесей углеводородов с кислородом // Физика горения и взрыва. — 2018. — Т. 54, № 2. — С. 89–97. — DOI: 10.15372/FGV20180210. — EDN: YWJNHE.
4. **Stertser A. A., Ulianitsky V. Yu., Rybin D. K., Batraev I. S., Prokhorov E. S., Vlaskin M. S.** Production of hydrogen and carbon black by detonation of fuel-rich acetylene–oxygen mixtures // Int. J. Hydrogen Energy. — 2022. — V. 47, N 30. — P. 14039–14043. — DOI: 10.1016/j.ijhydene.2022.02.164.
5. **Васильев А. А., Валишев А. И., Васильев В. А., Панфилова Л. В., Топчиян М. Е.** Параметры детонационных волн при повышенных давлениях и температурах // Хим. физика. — 1997. — Т. 16, № 11. — С. 114–118.
6. **Николаев Ю. А., Топчиян М. Е.** Расчет равновесных течений в детонационных волнах в газах // Физика горения и взрыва. — 1977. — Т. 13, № 3. — С. 393–404.
7. **Turkevich L. A., Fernback J., Dastidar A. G., Osterberg P.** Potential explosion hazard of carbonaceous nanoparticles: screening of allotropes // Combust. Flame. — 2016. — V. 167. — P. 218–227. — DOI: 10.1016/j.combustflame.2016.02.010.
8. **Васильев А. А.** Характеристики горения и детонации метаноугольных смесей // Физика горения и взрыва. — 2013. — Т. 49, № 4. — С. 48–59. — EDN: QIXTJT.
9. **Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания: справочник / под ред. В. П. Глушко.** — М.: ВИНТИ, 1973. — Т. 3.
10. **Прохоров Е. С.** Анализ химического равновесия продуктов сгорания углерода при недостатке кислорода // Инж.-физ. журн. — 2019. — Т. 92, № 6. — С. 2489–2496. — EDN: NYUUPC.
11. **Термодинамические свойства индивидуальных веществ: справочное изд.: в 4 т. / под ред. В. П. Глушко.** — М.: Наука, 1978.
12. **Nettleton M. A., Stirling R.** Detonations in suspensions of coal dust in oxygen // Combust. Flame. — 1973. — V. 21, N 3. — P. 307–314. — DOI: 10.1016/S0010-2180(73)80053-7.
13. **Эдвардс Д., Фёрнлей Р., Неттлтон М.** Исследование детонации взвесей угольной пыли в смесях кислорода с азотом в ударной трубе // Физика горения и взрыва. — 1987. — Т. 23, № 2. — С. 129–136.
14. **Fangrat J., Glinka W., Wolański P., Woliński M.** Detonation structure in organic dust-oxygen mixtures // Archivum Combustionis. — 1987. — V. 7, N 3/4. — P. 321–332.

Поступила в редакцию 10.01.2023.

После доработки 05.04.2023.

Принята к публикации 24.05.2023.