

Расчет статических параметров детонационной волны в газах

Введение

Детонационные волны в газах часто являются нежелательными, связаны с быстрым распространением волн химической реакции и сопровождаются сильным повышением давления и температуры. Для оценки последствий детонации важно оценить параметры волны, которые включают скорость распространения и повышение давления / температуры.

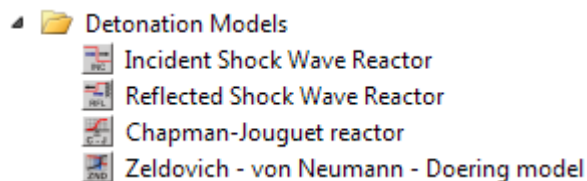
Постановка задачи

Требуется вычислить параметры детонационной волны, распространяющейся в бедной, стехиометрической ($\phi = 1$) и богатой топливом смеси водорода и воздуха.

Решение задачи в Chemical Workbench

Параметры самоподдерживающейся детонационной волны (скорость распространения, давление и повышение температуры), распространяющейся через реакционноспособную газовую смесь, определяются исходными термодинамическими условиями (давлением, температурой) и составом реагирующей смеси.

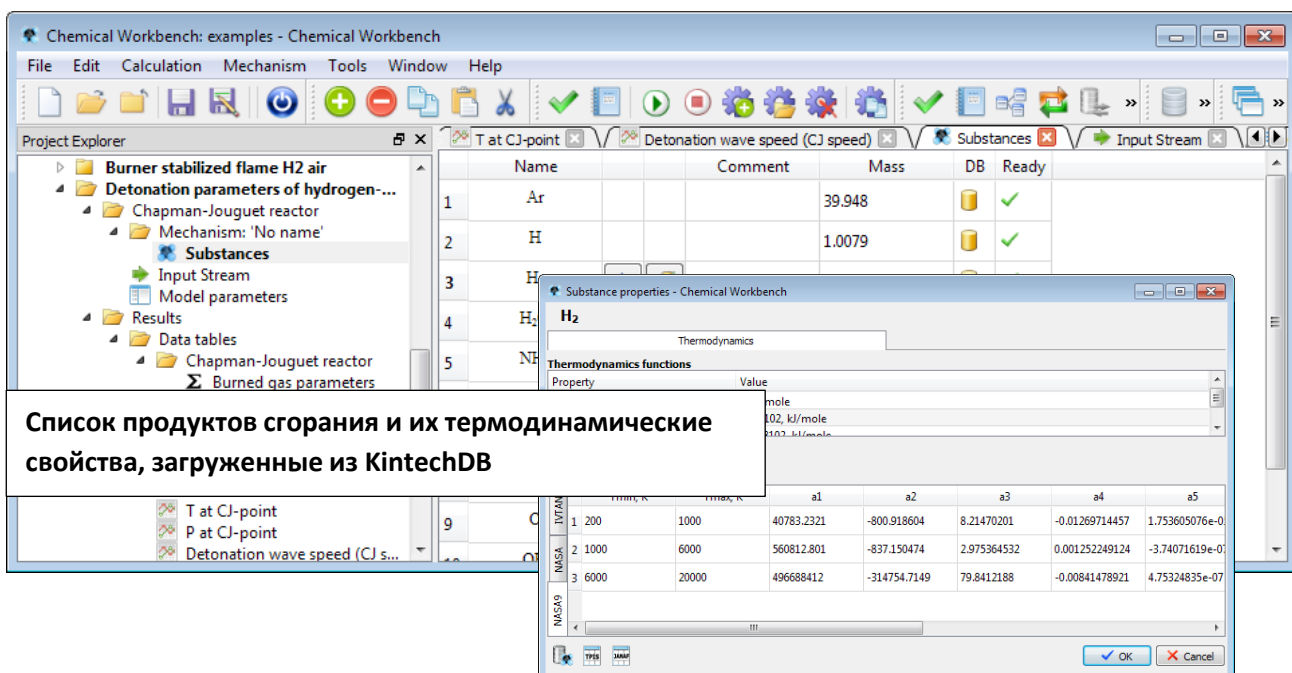
Задача решается в программном комплексе Chemical Workbench с реакторной моделью Чапмана-Жуге (CJR). Эта модель рассчитывает следующие параметры стационарной волны детонации: состав равновесных продуктов сгорания, скорость самоподдерживающейся детонации - так называемая скорость Чапмана-Жуге, температура и давление сразу за детонационной волной - давление и температура Чапмена-Жуге.



Список детонационных моделей

Состав реакционной смеси определяется во входном потоке молярным составом смеси: $[O_2]: [N_2]: [H_2] = 1: 3,76: X$, где $X = 0,5-4$. Начальная температура реакционной смеси – 300 К, начальное давление – 1 атм.

Термодинамические свойства компонентов воздуха и продуктов сгорания автоматически загружаются из базы данных **KintechDB**.



Список продуктов сгорания и их термодинамические свойства, загруженные из KintechDB

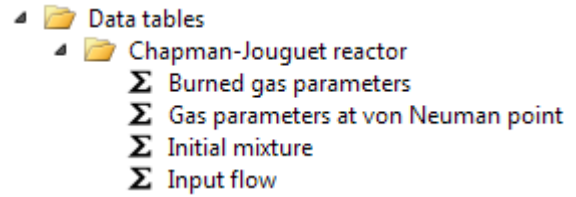
Name	Comment	Mass	DB	Ready
1	Ar	39.948		✓
2	H	1.0079		✓
3	H ₂			
4	H ₂ O			
5	N ₂			

Property	Value
Thermodynamics functions	
mole	
kJ/mole	
kJ/mole	

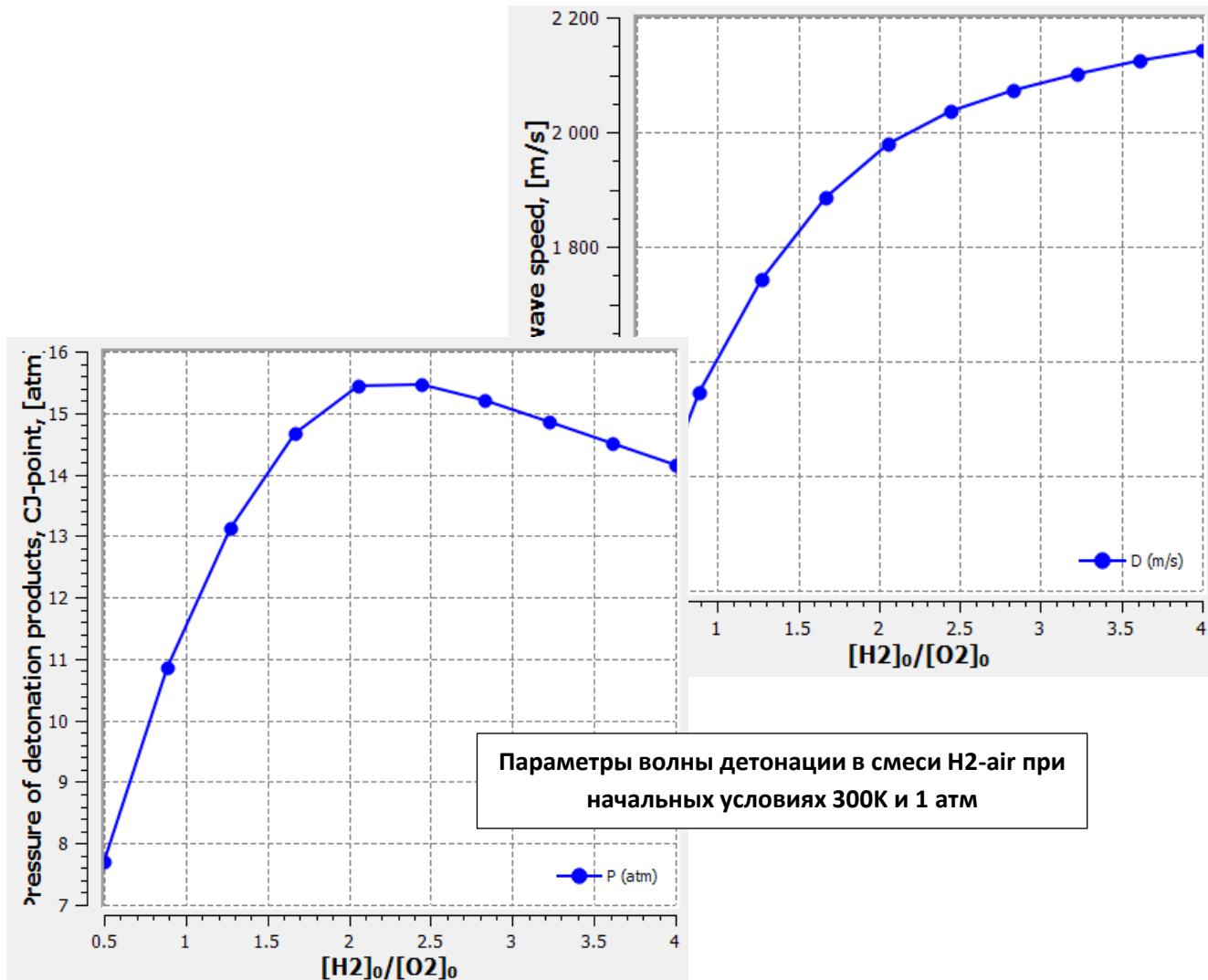
			a1	a2	a3	a4	a5
1	200	1000	40783.2321	-800.918604	8.21470201	-0.01269714457	1.753605076e-0
2	1000	6000	56081.2.801	-837.150474	2.975364532	0.001252249124	-3.74071619e-0
3	6000	20000	496688412	-314754.7149	79.8412188	-0.00841478921	4.75324835e-07

Результаты

Состояние реакционной смеси после сгорания за детонационной волной (точка Чепмена-Жуге) приведены в **Burned Gas Parameters table**. Свойства исходной смеси, включая скорость волны детонации Чепмена-Жуге, приведены в таблице **Initial mixture**. В дополнение к точке Чепмена-Жуге свойства газа вычисляются в условиях точки фон Неймана (состояние исходной смеси за ударной волной, распространяющейся со скоростью CJ) и приведены в таблице **Gas parameters at von Neumann point**



Доступные таблицы результатов в CJR



Следующие шаги

1. Моделируйте параметры детонации смесей метана, этана и пропана с воздухом. Оцените, как скорость детонации зависит от молекулы углеводорода
2. Постройте зависимость точечных параметров фон-Неймана от стехиометрии смеси
3. Оцените параметры детонации любого реального топлива: нецелое число x и y в брутто-формуле C_xH_y