1. Wstęp

1.1. Przedmiot opracowania. Przedmiotem opracowania jest metoda obliczania ważniejszych parametrów użytkowych charakteryzujących materiały wybuchowe.

W dalszej treści opracowania nazwa materiały wybuchowe została zastąpiona skrótem MW.

1.2. Obliczane parametry

a) skład chemiczny produktów wybuchu
b) bilans tlenowy MW,
c) objętość właściwa produktów wybuchu,
d) ciepło wybuchu,
e) koncentracja energii MW,
f) temperatura wybuchu,
g) ciśnienie produktów wybuchu
h) idealna praca wybuchu
i) energia właściwa MW.

1.3. Zakres stosowania opracowania. Metoda obliczeniowa opisana w opracowaniu nadaje się do obliczania charakterystyk MW o dodatnim, zerowym oraz nieznacznie (do –10%) ujemnym bilansie tlenowym. Tym samym objęty jest praktycznie pełny asortyment górniczych MW, oraz część wojskowych MW.

2. Metoda obliczania

2.1. Obliczanie składu chemicznego produktów wybuchu.

2.1.1. Ustalenie chemicznego składu MW. Chemiczny skład MW ustalić można przez obliczenie oddzielne dla każdego pierwiastka występującego w MW liczby gramo-atomów pierwiastka (Y_I) w 1 kg MW.

Liczbę gramoatomów i-tego pierwiastka (A_{ij}), odpo-wiadającą procentowej zawartości substancji (S_j) w MW, należy obliczyć wg wzoru

$$A_{ij} = \frac{a_{ij}(S_{ij})x_j}{100} \tag{1}$$

w której:

$a_{ij}(S_{ij})$ – liczba gramoatomów i-tego pierwiastka S_j, odczytana z tablicy wg załącznika 1 lub w razie braku danych w tej tablicy – z innego źródła, które należy podać,

x_j – zawartość składnika S_j w MW, %

Liczbę gramoatomów i-tego pierwiastka w 1 kg MW (Y_i) obliczyć ze wzoru

$$Y_i = \sum_{j=1}^{n} A_{ij} \tag{2}$$

w którym:

A_{ij} – liczba gramoatomów i-tego pierwiastka, obliczona wg wzoru (1).

© Copyright by Janusz Bełzowski (tchemik)

Sporządzić tabelaryczne zestawienie wg tablicy wstawiając w odpowiednich kolumnach i rubrykach wartości A_{ij} obliczone dla poszczególnych składników i pierwiastków MW wg wzoru (1).

Mając obliczone w podany sposób liczby gramoatomów poszczególnych pierwiastków występujących w 1 kg MW, ustalić wzór MW w odniesieniu do 1 kg:

$$C_{Y1}H_{Y2}O_{Y3}N_{Y4}.....P_{iYi} \tag{3}$$

2.1.2. Bilans tlenowy MW obliczyć w procentach wg wzoru:

$$B = 1{,}6 \cdot (Y_3 - 2Y_1 - 0{,}5Y_2 - 1{,}5Y_5 - Y_6 - 0{,}5Y_7 - 0{,}5Y_8 + 0{,}5Y_9 - 2Y_{10} - Y_{11}) \tag{4}$$

2.1.3. Równanie rozkładu MW. Zakładając, że w skład MW wchodzą następujące pierwiastki chemiczne: węgiel (C), wodór (H), tlen (O), azot (N), glin (Al), wapń (Ca), potas (K), sód (Na), chlor (Cl), siarka (S) i bar (Ba) oraz przyjmując bilans tlenowy zgodnie z 2.1.2 i wynikających stąd najbardziej prawdopodobnych z punktu widzenia termodynamiki produktów wybuchu, należy napisać równanie rozkładu 1 kg MW w postaci:

$$\begin{gathered} C_{Y1}H_{Y2}\,O_{Y3}N_{Y4}Al_{Y5}Ca_{Y6}K_{Y7}Na_{Y8}Cl_{Y9}S_{Y10}Ba_{Y11} \rightarrow \\ n_1CO_2 + n_2CO + n_3H_2O + n_4N_2 + n_5O_2 + n_6Al_2O_3 + n_7CaO + n_8KCl + \\ + n_9K_2CO_3 + n_{10}NaCl + n_{11}Na_2CO_3 + n_{12}HCl + n_{13}SO_2 + n_{14}BaO \end{gathered} \tag{5}$$

W zależności od tego czy bilans tlenowy MW jest dodatni czy ujemny, współczynniki równania (5) obliczyć wg pierwszego lub drugiego wariantu równań.

a) Wariant 1; B≥0

$$n_2 = 0 \tag{6}$$

$$n_{12} = Y_9 - Y_7 - Y_8 \tag{7}$$

Jeżeli $Y_9 < Y_7 + Y_8$, to $n_{12} = 0$

$$n_3 = 0{,}5 \cdot (Y_2 - n_{12}) \tag{8}$$

$$n_4 = 0{,}5Y_4 \tag{9}$$

$$n_6 = 0{,}5Y_5 \tag{10}$$

$$n_7 = Y_6 \tag{11}$$

$$n_8 = (Y_6 - n_{12})\frac{Y_7}{Y_7 + Y_8} \tag{12}$$

$$n_9 = 0{,}5 \cdot (Y_7 - n_9) \tag{13}$$

$$n_{10} = (Y_9 - n_{12})\frac{Y_8}{Y_7 + Y_8} \tag{14}$$

$$n_{11} = 0{,}5(Y_8 - n_{10}) \tag{15}$$

$$n_1 = Y_1 - n_9 - n_{11} \tag{16}$$

$$n_{13} = Y_{10} \tag{17}$$

$$n_{14} = Y_{11} \tag{18}$$

© Copyright by Janusz Bełzowski (tchemik)

$$n_5 = 0{,}5 \cdot (Y_3 - n_3 - 3n_6 - n_7 - \\ - 3n_9 - 3n_{11} - 2n_1 - 2n_{13} - n_{14}) \tag{19}$$

b) Wariant 2; B<0

$$n_5 = 0 \tag{19a}$$

$$n_2 = -\frac{B}{1{,}6} \tag{6a}$$

$$n_1 = Y_1 - n_9 - n_{11} - n_2 \tag{16a}$$

Pozostałe współczynniki obliczamy jak dla wariantu 1.

2.2. Obliczanie objętości właściwej produktów wybuchu. Objętość właściwą produktów wybuchu V_0 obliczyć w dm^3/kg wg wzoru

$$V_0 = 22{,}41 \cdot n_g \tag{20}$$

w którym:

n_g – suma moli gazowych produktów wybuchu 1 kg MW, mol/kg, obliczana wg wzoru:

$$n_g = n_1 + n_2 + n_3 + n_4 + n_5 + n_{12} + n_{13} \tag{20a}$$

2.3. Obliczanie ciepła wybuchu.

2.3.1. Ciepło tworzenia MW (Q_0) obliczyć w kJ/kg jako sumę ciepła tworzenia poszczególnych składników MW, wg wzoru

$$Q_p = \sum 0{,}01 \cdot Q_j^0 \cdot x_j \tag{21}$$

w którym:

Q_j – ciepło tworzenia *j*-tego składnika MW, odczytana z tablicy wg załącznika 1 lub w przypadku braku danych w tej tablicy – wzięte z innego źródła, które należy podać, kJ/kg,

x_j – zawartość *j*-tego składnika w MW, %.

2.3.2. Sumaryczne ciepło tworzenia produktów wybuchu (Q_p) obliczyć w kJ/kg wg wzoru

$$Q_0 = \sum E_k \cdot n_k \tag{22}$$

w którym:

E_k – molowa energia wewnętrzna tworzenia *k*-tego produktu wybuchu (równa molowemu ciepłu tworzenia przy stałej objętości) odczytana z tablicy wg załącznika 2,

n_k – liczba moli *k*-tego składnika produktu wybuchu 1 kg MW wg równania rozkładu MW (5), mol/kg.

© Copyright by Janusz Bełzowski (tchemik)

2.3.3. Ciepło wybuchu MW (Q_w) obliczyć w kJ/kg wg wzoru

$$Q_w = Q_p - Q_0 \tag{23}$$

w którym:
Q_p – sumaryczne ciepło tworzenia produktów wybuchu obliczone wg wzoru (22), kJ/kg,
Q_0 – ciepło tworzenia MW, obliczone wg wzoru (21), kJ/kg.

2.4. Koncentracja energii MW. Koncentrację energii MW (E_v) obliczyć wg wzoru

$$E_v = Q_w \cdot d \tag{24}$$

w którym:
Q_w – ciepło wybuchu obliczone wg wzoru (23), kJ/kg,
d – gęstość obliczona MW, kg/dm^3.

2.5. Obliczanie temperatury wybuchu. Temperaturę wybuchu MW należy obliczać metodą kolejnych przybliżeń, zakładając wstępnie spodziewaną temperaturę wybuchu t_1, °C. Dla tej temperatury obliczyć sumę energii wewnętrznych produktów wybuchu (U_1) w kJ/kg wg wzoru

$$\Delta U_1 = \sum \Delta U_k \cdot n_k \tag{25}$$

w którym:
ΔU_1 – energia wewnętrzna k-tego produktu wybuchu, odczytana z tablicy wg załącznika 3 lub 4,
n_k – liczba moli k-tego produktu wybuchu 1 kg MW, mol/kg.

Jeżeli obliczona wg wzoru (25) suma energii wewnętrznych (ΔU_1) różni się od obliczonego wg 2.3 ciepła wybuchu (Q_w), to w zależności od tego, czy jest ona większa lub mniejsza od Q_w, należy założyć odpowiednio nową temperaturę wybuchu (t_1, °C) odpowiednio niższą lub wyższą od poprzednio założonej temperatury t_1 i dla tej temperatury obliczyć ΔU_2.

Jeżeli suma energii wewnętrznych (ΔU_2) dla nowo założonej temperatury wybuchu (t_2) jest w dalszym ciągu większa lub mniejsza (podobnie jak dla temperatury t_1) od Q_w, należy założyć nową temperaturę t_3 i dla niej obliczyć sumę energii wewnętrznych produktów wybuchu wg wzoru (25).

Należy tak postępować tak aż do momentu znalezienia dwóch temperatur (t_n i t_{n+1}), dla których Q_w znajdzie się w przedziale między ΔU_n i ΔU_{n+1}, tzn. $\Delta U_n > Q_w > \Delta U_{n+1}$ lub $\Delta U_n < Q_w < \Delta U_{n+1}$. Mając ustalone w ten sposób temperatury t_n i t_{n+1} obliczyć temperaturę wybuchu w K, wg wzoru

$$T_w = \frac{(Q_w - \Delta U_n) \cdot (t_{n+1} - t_n)}{\Delta U_{n+1} - \Delta U_n} + t_n + 273 \tag{26}$$

w którym:
t_n, t_{n+1} – kolejne zakładane temperatury wybuchu, °C,

© Copyright by Janusz Bełzowski (tchemik)

ΔU_n, ΔU_{n+1} – sumy energii produktów wybuchu, obliczane wg wzoru (25), odpowiednio dla temperatur t_n i t_{n+1}, kJ/kg.

2.6. Obliczanie idealnej pracy wybuchu

2.6.1. Zasada obliczania idealnej pracy wybuchu polega na obliczeniu pracy wykonanej podczas adiabatycznego rozprężania produktów wybuchu do ciśnienia P_1 = 0,1 MPa. Wymaga kolejnego obliczenia średniego ciepła właściwego i wykładnika adiabaty gazowych produktów wybuchu, a także ciśnienia wybuchu.

2.6.2. Średnie ciepło właściwe gazowych produktów wybuchu (c_v) obliczyć w J/mol·K wg wzoru

$$c_v = \frac{1000\left[\Delta U_n^g + (\Delta U_{n+1}^g - \Delta U_n^g)\cdot\frac{T_w - t_n - 273}{t_{n+1} - t_n}\right]}{(T_w - 273)\cdot n_g} \tag{27}$$

w którym:

ΔU_n^g – suma energii wewnętrznych gazowych produktów wybuchu, obliczona wg wzoru (25) dla temperatury t_n wg danych z tablicy załącznika 3, kJ/kg,

ΔU_{n+1}^g – suma energii wewnętrznych gazowych produktów wybuchu, obliczona jw. dla temperatury t_{n+1} wg wzoru (25), kJ/kg,

t_n, t_{n+1} – kolejne założone temperatury wybuchu zgodnie z 2.5, °C,

n_g – suma moli gazowych produktów wybuchu 1 kg MW, mol/kg.

2.6.3. Wykładnik adiabaty gazowych produktów wybuchu (k) obliczyć wg wzoru

$$k = 1 + \frac{R}{c_v} \tag{28}$$

w którym:

R – uniwersalna stała gazowa, równa 8,314, J/ mol·K,

c_v – średnie ciepło właściwe gazowych produktów wybuchu, obliczone wg wzoru (27), J/ mol·K.

2.6.4. Ciśnienie wybuchu (P_w) obliczyć w MPa wg wzoru

$$P_w = n_g \cdot R \cdot T_w \cdot d \cdot 10^{-3} = 0{,}008314 \cdot n_g \cdot T_w \cdot d \tag{29}$$

w którym:

n_g – suma moli gazowych produktów wybuchu 1 kg MW, mol/kg.

T_w – temperatura wybuchu obliczona wg wzoru (26)

d – gęstość MW, kg/dm^3.

© Copyright by Janusz Bełzowski (tchemik)

2.6.5. Idealna praca wybuchu (A) powinna być obliczona w kJ/kg wg wzoru

$$A = Q_w \cdot \left[1 - \left(\frac{P_1}{P_w} \right)^{\frac{k-1}{k}} \right] \tag{30}$$

w którym:

Q_w – ciepło wybuchu obliczone wg wzoru (23), kJ/kg,
P_1 – końcowe ciśnienie produktów wybuchu równe 0,1 MPa,
P_1 – ciśnienie wybuchu, obliczone wg wzoru (29), MPa,
k – wykładnik adiabaty, obliczony wg wzoru (28).

2.7. Obliczanie energii właściwej MW. Energię właściwą (f) obliczyć w kJ/kg wg wzoru

$$f = n_g \cdot R \cdot T_w = 0{,}008314 \cdot n_g \cdot T_w \tag{31}$$

w którym:

n_g – suma moli gazowych produktów wybuchu 1 kg MW, mol/kg,
R – Uniwersalna stała gazowa równa $8{,}314 \cdot 10^{-3}$ kJ/ mol·K,
T_w – temperatura wybuchu obliczona wg wzoru (26), K.

© Copyright by Janusz Bełzowski (tchemik)