

СРОЧНОЕ СООБЩЕНИЕ

ЭФФЕКТ ДВУСТАДИЙНОГО ЗАЖИГАНИЯ
ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ
С ЖИДКИМ СЛОЕМ НА ПОВЕРХНОСТИ

УДК 536.46

В. Е. Зарко, А. Д. Рычков*, Л. К. Гусаченко

Институт химической кинетики и горения СО РАН, 630090 Новосибирск
* Институт вычислительных технологий СО РАН, 630090 Новосибирск

Математическим моделированием переходных процессов обнаружены режимы двухстадийного зажигания энергетических веществ с жидким слоем на поверхности. Сначала под действием поджигающего лучистого потока реализуется режим вынужденной газификации конденсированной фазы со степенью ее разложения на поверхности 0,1–0,3. Газовая фаза при этом догорает в режиме отрыва. При уменьшении лучистого потока газовое пламя приближается к поверхности и приобретает ведущую роль, а степень разложения конденсированной фазы снижается.

Исследовалась математическая модель нестационарного горения энергетических веществ. На поверхности для непрореагировавшей части конденсированной фазы (к-фазы) использовалось условие равновесия Клапейрона — Клаузиуса. В к-фазе учитывалась одна глобальная реакция первого порядка, в газовой фазе — две последовательные реакции первого и второго порядков. Параметры модели: температура насыщенного пара при атмосферном давлении T_b , теплота испарения L , предэкспоненты $k = 10^n$, энергии активации E и тепловые эффекты всех реакций варьировались, но в качестве базовых были использованы данные для гексогена (взяты, в частности, из опытов с медленным термическим разложением) [1, 2]: $T_b = 613$ К, $L = 112$ кал/г. В к-фазе $n = 18$, $E = 47$ ккал/моль; для первой реакции (разложения пара) в газовой фазе $n = 13,5$, $E = 35$ ккал/моль; для второй реакции (догорания) значения $n = 12,6$, $E = 20$ ккал/моль были подобраны из условия совпадения расчетных и известных из эксперимента значений скорости горения и температуры поверхности.

Какой-либо механизм вывода газообразных продуктов из зоны реакции к-фазы в модель не заложен, поэтому следует соблюдать осторожность при ее использовании для описания режимов с ведущей стадией в к-фазе. Для газовой фазы использованы постоянные коэффициенты теплопроводности $\lambda = 2 \cdot 10^{-4}$ кал/(см·с·К) и диффузии $D = 0,15$ см²/с. «Горячая» граница газовой фазы располагалась на расстоянии h от поверхности и на ней выполнялось условие адиабатичности. В какой-то мере это ограничение, характерное для численной постановки, моделирует действие теплотерь из зоны газовых реакций. В настоящих расчетах принято $h = 0,5$ см.

Нагрев энергетического вещества тепловым излучением моделировался заданием на поверхности тепловыделения $q(t)$, некоторое время постоянного, затем линейно убывающего до нуля и далее равного нулю.

Типичные результаты расчета показаны на рис. 1. Почти до момента достижения на

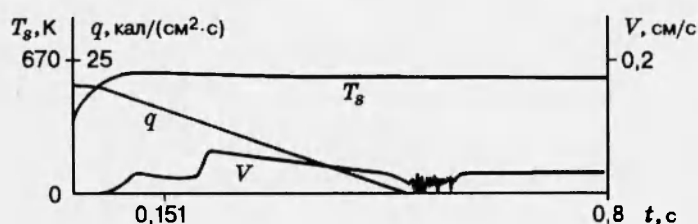


Рис. 1. Результаты расчета: поток излучения q , температура поверхности T_s и скорость горения v как функции времени t

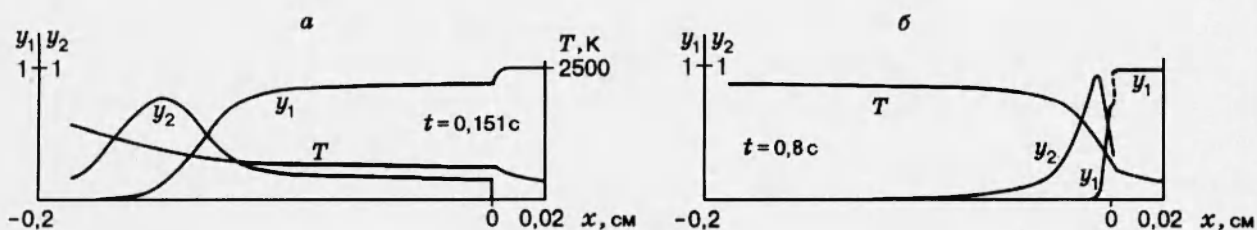


Рис. 2. Профили температуры T , массовой доли непрореагировавшего исходного вещества или его пара y_1 и массовой доли промежуточного продукта y_2 для моментов времени $t = 0,151$ с (а) и $t = 0,8$ с (б) ($X = 0$ — положение поверхности горения)

поверхности равновесной температуры можно пренебречь не только реакциями в к-фазе, но и скоростью испарения: идет «инертный» прогрев.

Когда равновесие на поверхности достигнуто, почти одновременно начинаются испарение (и движение поверхности фазового перехода со скоростью $v(t) \neq 0$) и интенсивные реакции в к-фазе (так, что степень превращения энергетического вещества на поверхности $1 - y_1(0, t) \neq 0$).

Через короткое время устанавливается квазистационарный режим вынужденной газификации со степенью превращения к-фазы $1 - y_1(0, t) \approx 0,1-0,3$. При этом в газе зажигание происходит практически одновременно с началом квазистационарного режима. Однако при использованных значениях параметров горение в газовой фазе реализуется в режиме отрыва, когда тепло из газового пламени практически не поступает на поверхность (рис. 2, а).

По мере уменьшения лучистого потока газовое пламя приближается к поверхности вначале медленно, затем со все более резко возрастающей скоростью. Процесс выходит на новый режим с ведущей ролью газовой фазы (рис. 2, б), при этом скорость горения и полное поступление тепла на поверхность почти скачком возрастают в несколько раз, а степень превращения к-фазы уменьшается. Затем следует переходный процесс: в зависимости от скорости продолжающегося спада лучистого потока горение может прекратиться либо выйти на стационарный режим. На рис. 1 изображена пограничная ситуация, когда выход на стационарный режим происходит после некоторого периода неустойчивости.

Уменьшение при смене режимов горения степени превращения к-фазы не удается объяснить сокращением времени ее пребывания в зоне реакций у поверхности. В самом деле, согласно рис. 1 скорость горения, а с ней и упомянутое время пребывания примерно одинаковы для моментов времени $t = 0,151$ и $0,8$ с. Между тем, видно, что степень превращения к-фазы $1 - y_1(0, t)$ при $t = 0,8$ с существенно меньше, чем при $t = 0,151$ с (см. рис. 2). Причина состоит в том, что при переходе к режиму с ведущей газовой фазой, когда газовое пламя приближается к поверхности и резко увеличиваются все приповерхностные градиенты в газе, диффузия уменьшает величину $y_1(-0)$. Это проявляется в появлении

разрыва при $x = 0$ на профиле $y_1(x)$ (см. рис. 2,б). Уменьшение парциального давления пара над поверхностью фазового перехода согласно закону Клапейрона — Клаузиуса приводит к уменьшению температуры поверхности, при этом уменьшаются скорость реакций в к-фазе и степень ее превращения.

Заметим, что реализация режима вынужденной газификации не определяется однозначно состоянием к-фазы и величиной лучистого потока в данный момент. Дополнительные расчеты показали, что кратковременным включением моделирующего искровой разряд тепловыделения в тонком слое газовой фазы вблизи поверхности можно почти мгновенно перевести процесс в режим с ведущей ролью газовой фазы.

Таким образом, при горении энергетических веществ, для которых окажется пригодной использованная модель, эксперименты с режимом самоподдерживающегося горения могут дать информацию о кинетике в газовой фазе, а эксперименты с режимом вынужденной газификации — о кинетике в к-фазе. Кроме того, химический анализ продуктов стационарной вынужденной газификации без газового пламени может позволить найти величину $y_1(0)$, которую очень трудно определить в экспериментах по самоподдерживающемуся горению.

Работа выполнена при частичной поддержке Международного научного фонда (грант SDY000).

ЛИТЕРАТУРА

1. Буров Ю. М., Назин Г. М. Влияние строения на скорость распада вторичных нитрамин в газовой фазе // Кинетика и катализ. 1982. Т. 23, вып. 1. С. 12–17.
2. Rogers R. N., Daub G. W. Scanning calorimetric determination of vapor-phase kinetic data // Anal. Chem. 1973. V. 45. P. 596–600.

Поступила в редакцию 16/XI 1995 г.
