

О МОДЕЛЯХ ГОРЕНИЯ ЧАСТИЦЫ
НИТРОЭФИРНОГО ПОРОХА С ГЛОБАЛЬНОЙ
КИНЕТИКОЙ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ,
ПРЕДНАЗНАЧЕННЫХ ДЛЯ АНАЛИЗА
НЕСТАЦИОНАРНЫХ ЭФФЕКТОВ

**Б. С. Ермолаев¹, В. С. Посвянский¹, А. А. Беляев¹,
С. М. Фролов¹, И. В. Семенов²**

¹ИХФ РАН

г. Москва, Россия

²ИАП РАН

г. Москва, Россия

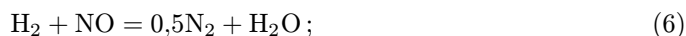
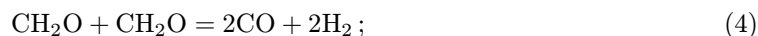
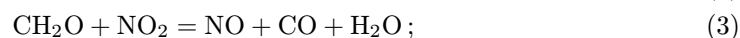
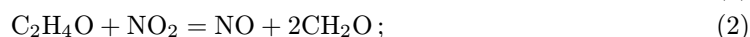
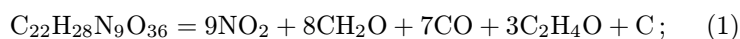
В свое время феноменологическая модель нестационарного горения пороха, развитие которой тесно связано с именами Зельдовича, Новожилова и других российских ученых, обеспечила значительный прогресс теории горения и ее приложений. Плюсы феноменологического подхода по сравнению с альтернативным подходом, основанном на моделях с химическими реакциями, состояли, прежде всего, в точном учете физических закономерностей процесса, которые проявляются независимо от деталей кинетики. Кроме того, несовершенство существовавших на то время кинетических моделей горения также способствовало популярности феноменологического подхода.

По мере развития кинетических моделей горения ситуация стала выравниваться, и к настоящему времени модели с глобальной кинетикой демонстрируют способность количественно воспроизводить все известные свойства волны горения пороха (см., например, работу Бизо и Бэкстеда [1]). Такие модели могут быть использованы для решения газодинамических задач, а также для задач, которые выходят за рамки ограничений, накладываемых допущениями феноменологической модели. Одной из таких задач является

нестационарное горение частиц пороха в области повышенных давлений применительно к условиям артиллерийского выстрела.

Два года назад на этой же конференции мы представили доклад о первом этапе работ по разработке модели горения частицы нитроэфирного пороха с глобальной кинетикой химических реакций в конденсированной и газовой фазе, горящей при постоянном и изменяющемся давлении [2]. Объектом моделирования был жидкий нитроэфир бутантриол тринитрат (БТТН). Работа дала обнадеживающие результаты. Опираясь на имеющуюся в литературе информацию относительно свойств БТТН и механизмов химических превращений в волне горения нитроэфиров, мы подобрали упрощенную схему реакций и входные параметры модели и провели расчеты, которые довольно точно воспроизвели пространственную структуру стационарной волны горения с темной зоной, характеристики волны горения и реакцию горения пороха на изменение давления во времени, известные из литературы.

В данной работе мы предприняли попытку создать аналогичную модель для пироксилинового пороха. Хотя при переходе от БТТН к пироксилиновому пороху общая трехстадийная схема реакций, свойственная нитроэфирам, сохранилась почти без изменений, имеются некоторые существенные различия. Первое различие связано с тем, что из-за высокого содержания углерода в молекуле пироксилинового пороха в продуктах его первичного разложения присутствует сажа. Окончательно формальная кинетическая схема превращения пироксилинового пороха включала следующие реакции:



Здесь реакция (1) представляет первую стадию разложения, в ходе которой происходит первичное отщепление диоксида азота и его взаимодействие с исходными молекулами и продуктами распада, приводящее к образованию набора альдегидов и углеродсодержащих фрагментов. На второй стадии (реакции (2)–(4)) разлагаются альдегиды и диоксид азота восстанавливается до NO. Реакции этой стадии формируют темную зону волны горения. Реакции третьей стадии (5)–(9) формируют высокотемпературное пламя. Они включают брутто-реакции окисления CO, водорода и сажи и реакции равновесия водяного газа (8) и (9).

Другое различие между БТТН и пироксилиновым порохом состоит в способе перехода вещества через границу раздела конденсированная/газовая фаза. Если для молекул БТТН, не успевших разложиться в ходе реакций в к-фазе, этот перенос осуществляется по механизму испарения, то молекулы пироксилинового пороха, пересекая границу раздела, одновременно подвергаются термическому распаду. Для описания фазового перехода мы поначалу выбрали модель пиролиза, согласно которой на поверхности горения происходит полное разложение пороха и в газовую фазу поступают продукты согласно формуле (1). Однако расчеты по этой модели обнаружили ряд расхождений с набором экспериментальных данных, которые мы не смогли ни объяснить, ни устранить. Тогда мы решили взять другую, довольно дискуссионную модель фазового перехода, которая обсуждалась в некоторых работах [3, 4]. Согласно этой модели, в силу достаточно высоких темпов нагрева, свойственных волне горения при интересующих нас давлениях, молекулы пироксилинового пороха, большая часть которых не успевает разложиться в к-фазе, покидают поверхность горения в виде «псевдогаза», переходя в газовую фазу, где быстро разлагаются.

Нами проведены расчеты горения частицы пироксилинового пороха в условиях постоянного и изменяющегося давления по обеим моделям. Результаты расчетов сопоставлены между собой, обсуждены различия и проведено сравнение с литературными данными.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 11-01-12120-офи-м-2011).

Литература

1. Bizot, A, and M. W. Beckstead. 1988. A model for double base propellant combustion. *22nd Symposium (International) on Combustion*. Pittsburgh: The Combustion Institute. 1827–34.
2. Ермолаев Б. С., Беляев А. А., Посвянский В. С., Фролов С. М. Численное моделирование нестационарных эффектов горения сферического зерна нитроэфирного пороха с глобальной кинетикой // Горение и взрыв / Под ред. С. М. Фролова. — М.: ТОРУС ПРЕСС, 2010. Вып. 3. С. 129–133.
3. Шленский О. Ф Предспинодальный взрыв энергоемких конденсированных веществ // Химическая физика, 1995. Т. 14. № 4. С. 142–151.
4. Штейнберг А. С. Быстрые реакции в энергоемких системах. — М.: Физматлит, 2006.