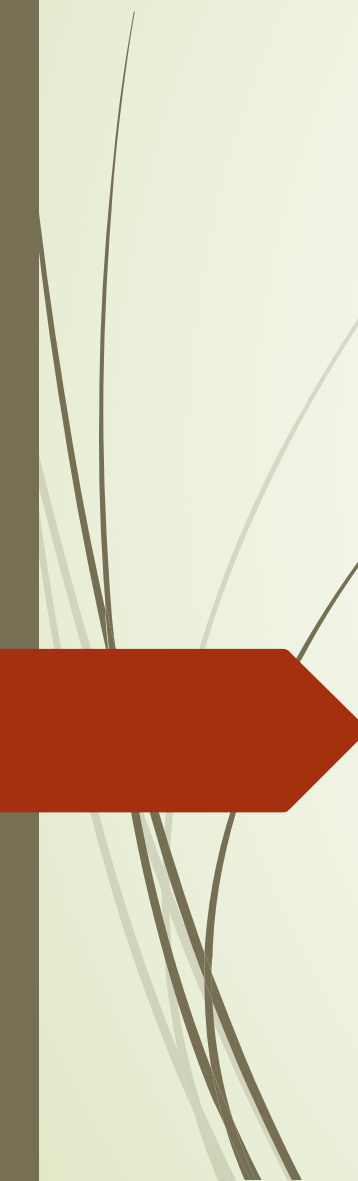




Вопросы достоверности моделирования кинетики в физико-химической газовой динамике

Докладчик: чл.-корр. РАН Азатян В.В.

Москва 2020

Константы скорости

КОНСТАНТЫ СКОРОСТИ БИМОЛЕКУЛЯРНЫХ РЕАКЦИЙ ПРИ ЭНЕРГИЯХ АКТИВАЦИИ (ККАЛ/МОЛЬ): 1- 6,0; 2- 35,6, 3- 53,8

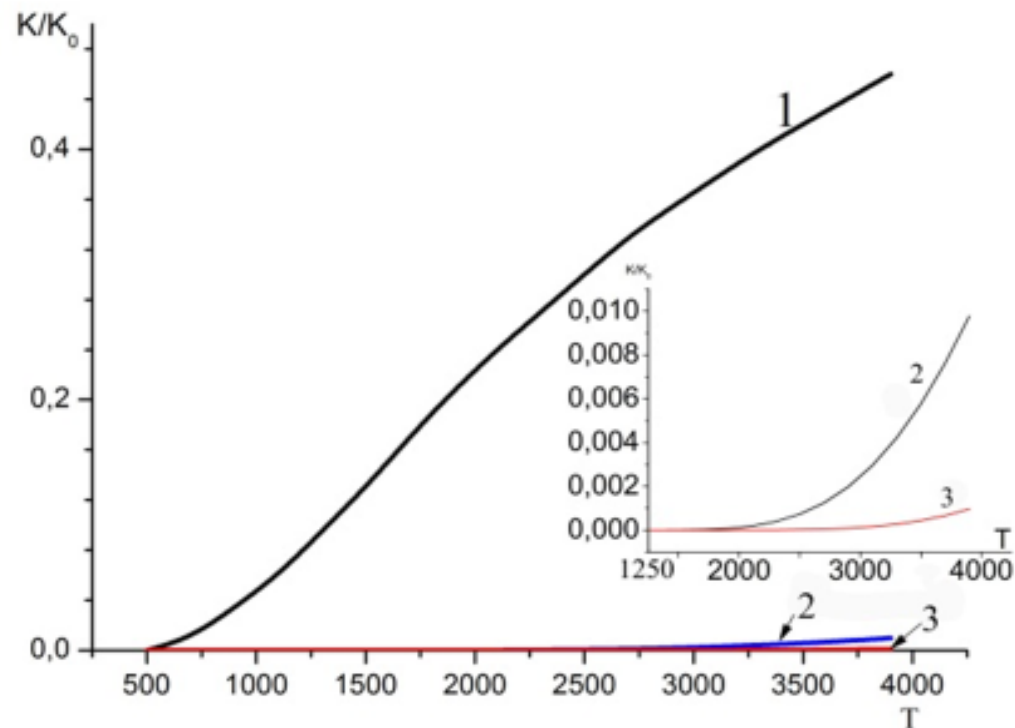
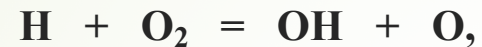


Рис.5 показывает, что, вопреки сложившимся представлениям, чем больше энергия активации, тем меньше не только величина константы скорости, но также абсолютная величина ее роста. Поэтому, вопреки тепловой теории горения, даже при 4000K роль межмолекулярных реакций в горении, взрыве и детонации незначительна. Скорости горения обеспечивают только цепной механизм и специфическая температурная зависимость скорости реакции по закону «экспоненты в положительном показателе степени» (см. книгу и статьи). ИСМАН, ОИВТ.

Протекание процессов горения и детонации газов только по цепному пути было доказано непосредственно: демонстрацией отсутствия какой ни было реакции горения в смеси, в которой была исключена только цепная лавина при всех остальных неизменных параметров. Достигалось это введением в горючую смесь очень малого количества нашего ингибитора, например, пропилена, быстро удаляющего атомарный водород и этим блокирующего цепной путь. То, что константа скорости реакции уничтожения активной частицы:

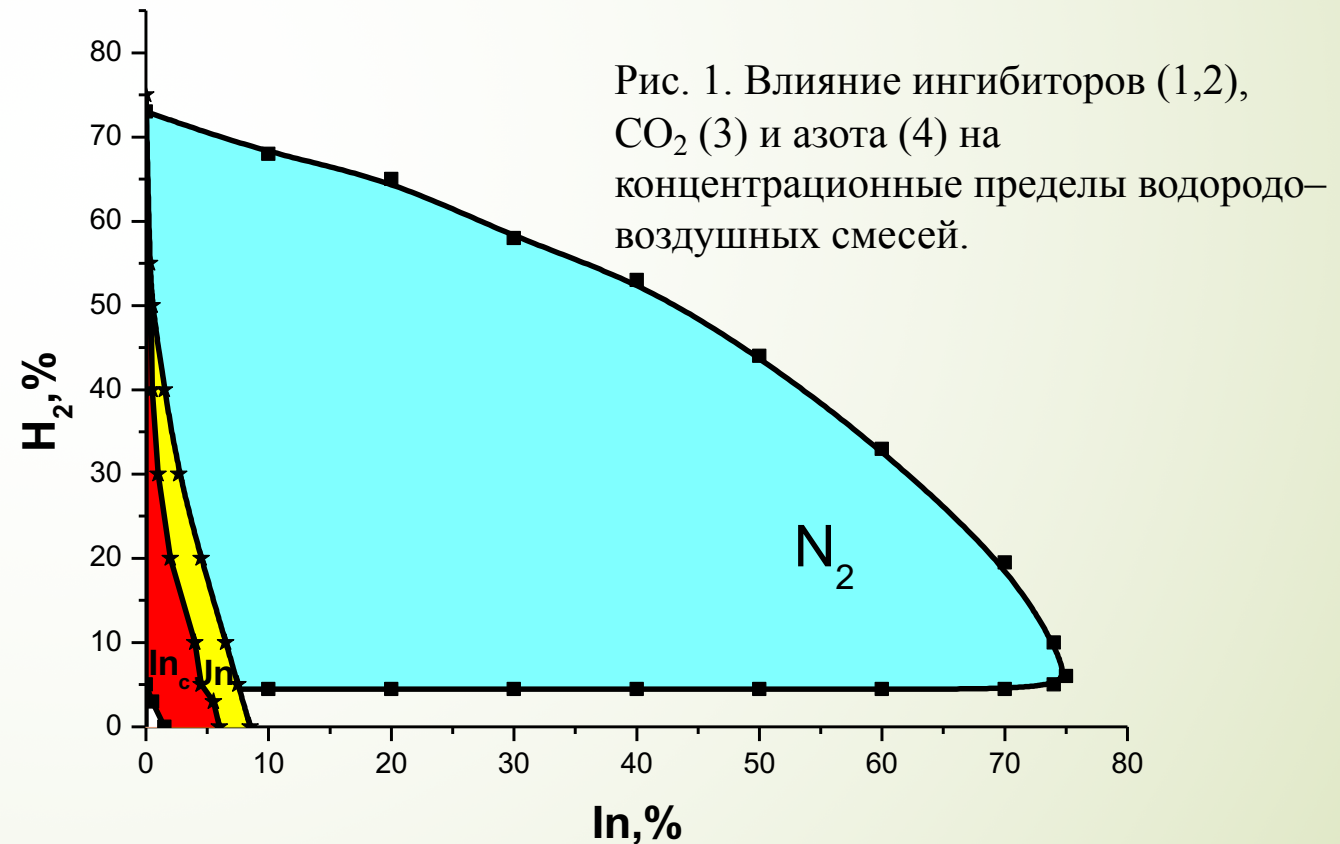


в тысячи раз больше, чем константа скорости реакции разветвления цепей:

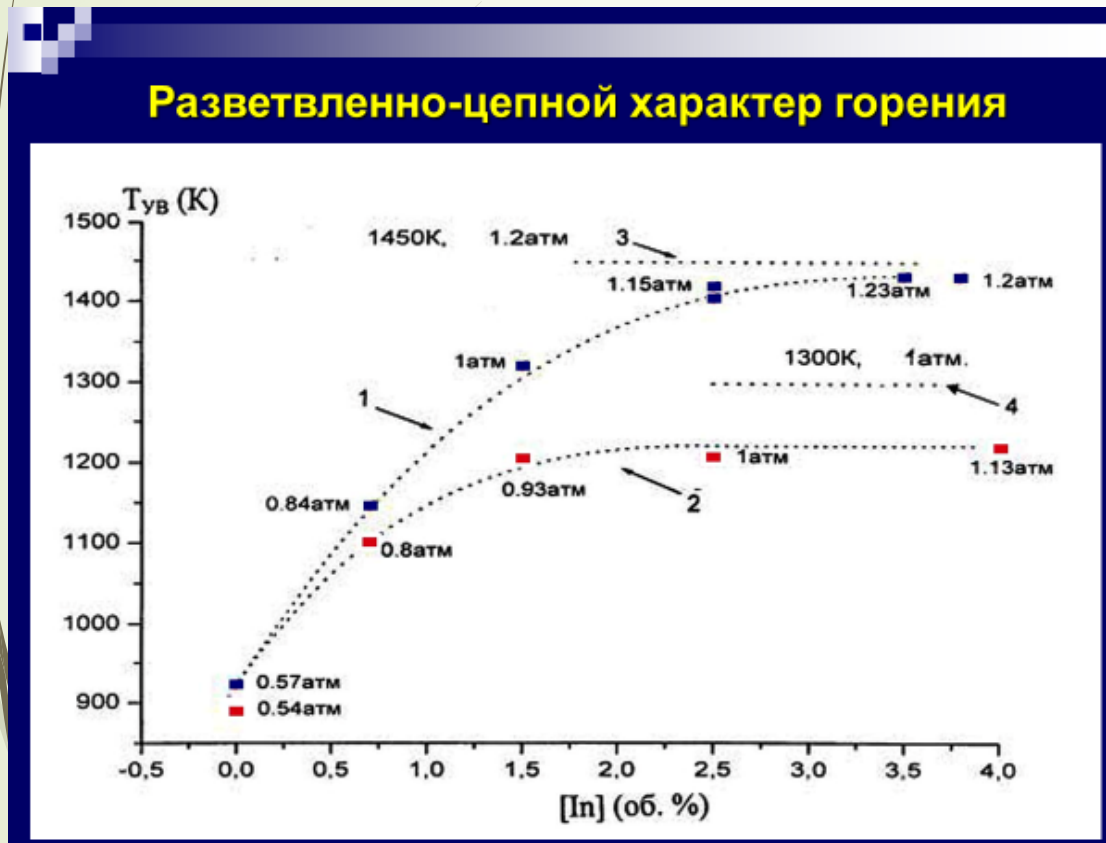


лимитирующей скорость цепной лавины, хорошо известно из литературы. Ее величину еще раньше определил и опубликовал я.

Из рис. 1 видно, что присадки ингибитора (пропилена) в количестве, например 1,5% предотвращают возгорание всех водородо-воздушных смесей, содержащих больше 30% водорода при той же энергии инициирования. ИСМАН



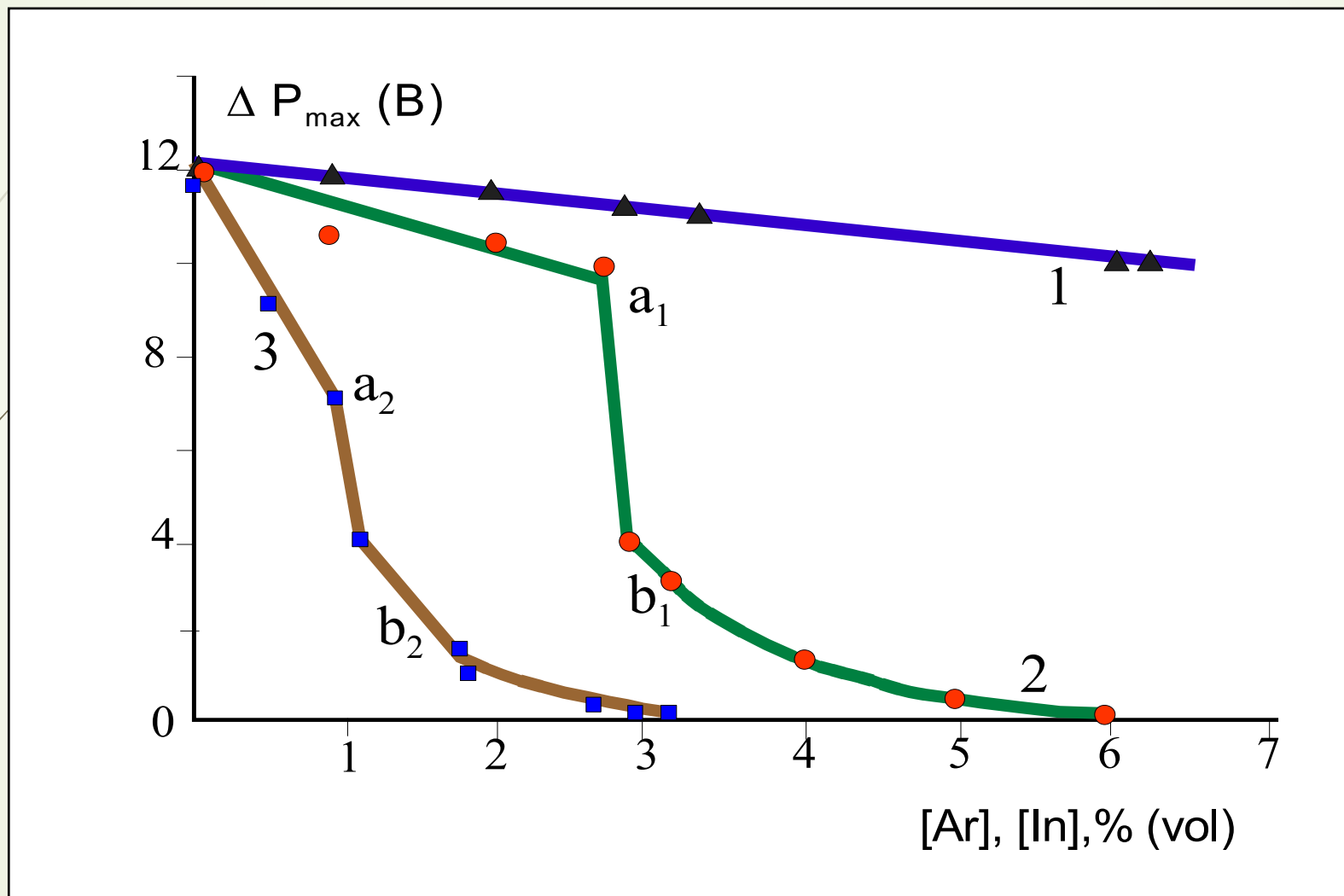
Разветвленно –цепной характер горения



Из рис. 2 видно, что при отключении реакционных цепей с помощью ингибиторов воспламенение стехиометрической смеси водорода и воздуха не происходит также, при высоких начальных температурах, соответствующих пламени. Проявляется также зависимость эффективности ингибитора от его химических свойств. Пары спирта менее эффективны, чем пропилен. Подавление перехода во взрыв и в детонацию показывают также осциллограммы. Совместно с ИМEX МГУ.

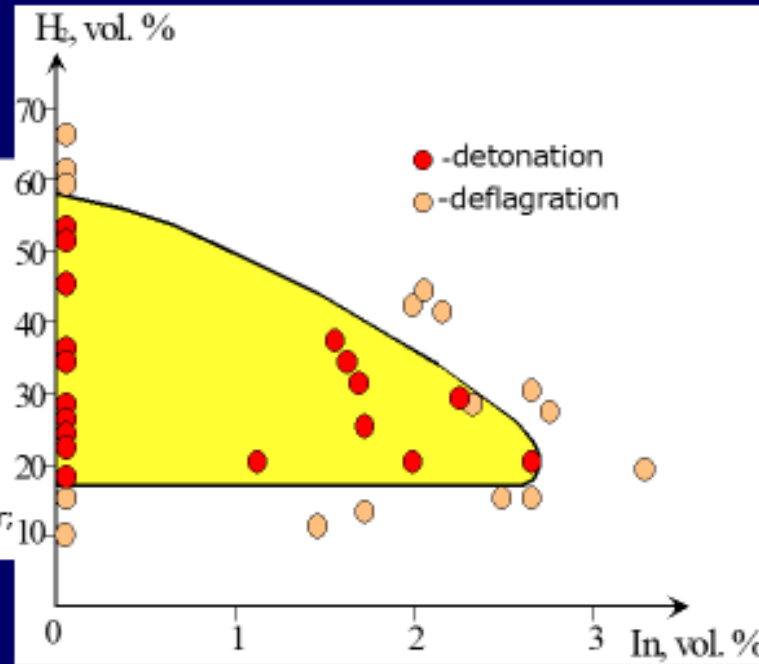
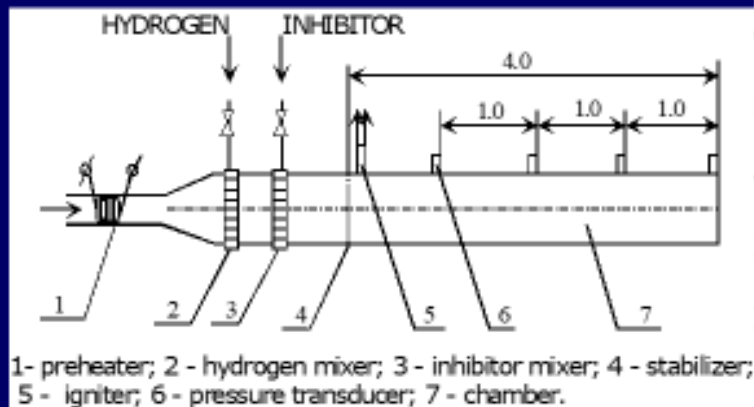
Рис. 2. Влияние пропилена (1) и паров изопропанола (2) на минимальную температуру воспламенения смесей водорода с воздухом. 3, 4 – температуры воспламенения пропена изопропанола в воздухе.

Ингибирование горения и взрыва



Предотвращение перехода дефлаграции в детонацию

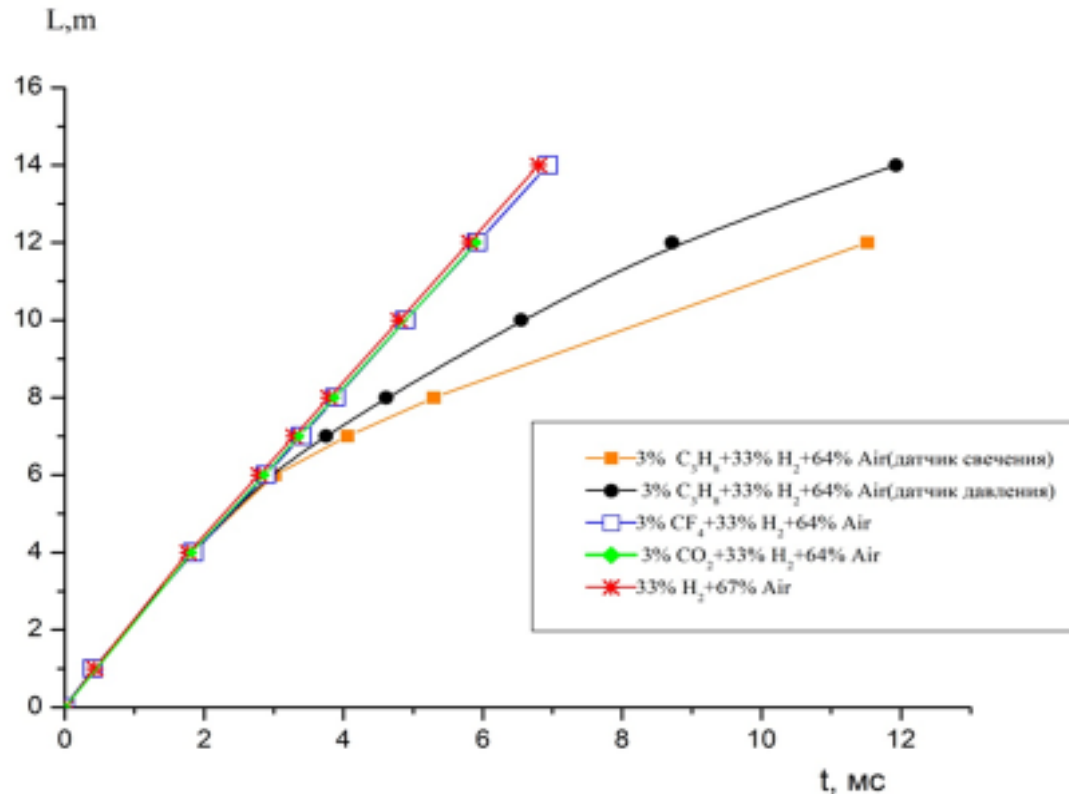
Предотвращение перехода дефлаграции в детонацию



На рис.3 представлено предотвращение перехода распространения пламени в детонацию, в модели ПВРД, вызванное отключением реакционных цепей с помощью ингибитора. Совместно с Институтом им. М. Планка (Германия) и ЦИАМ.

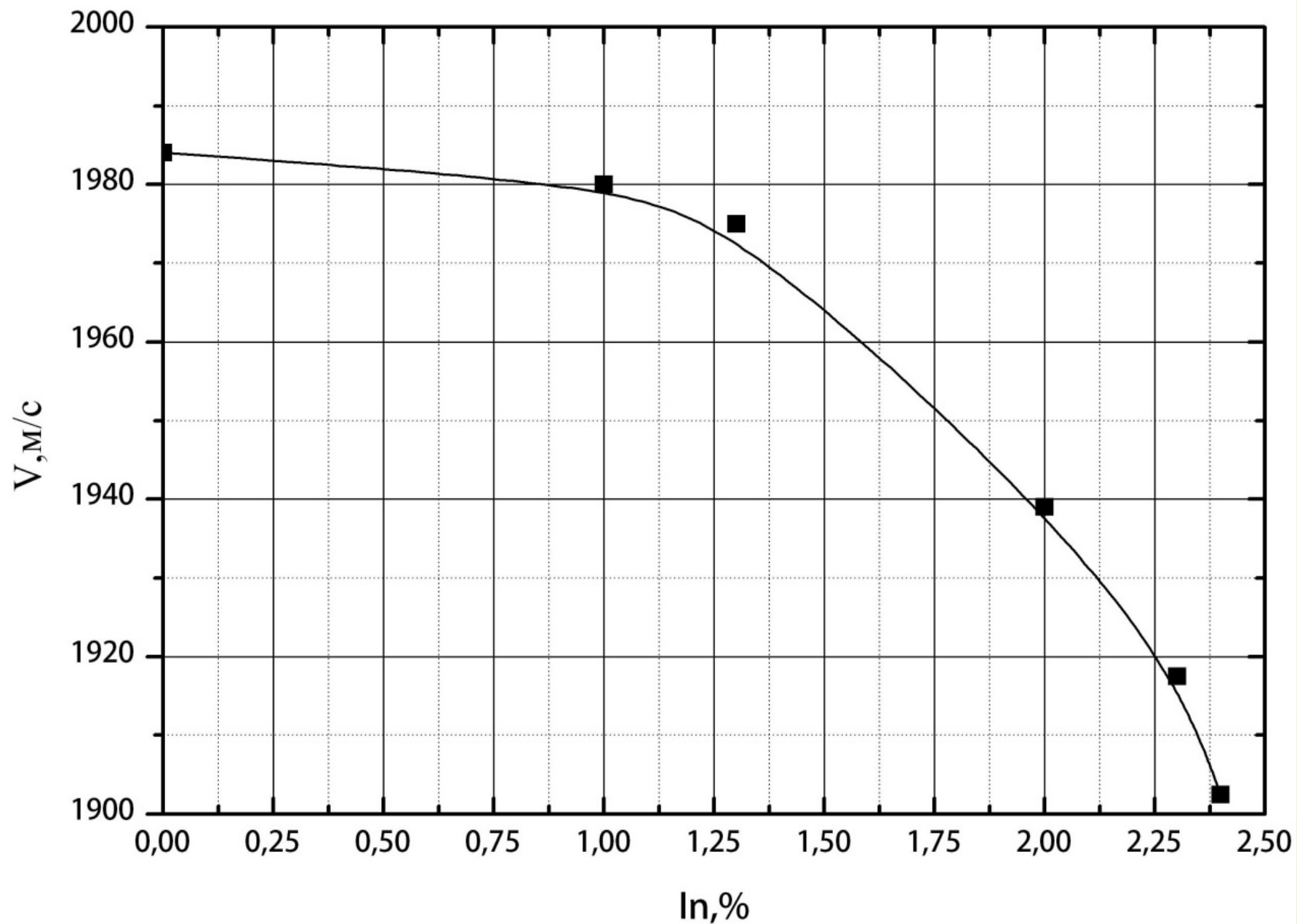
Влияние ингибиторов

Влияние ингибиторов и инертных присадок на детонацию



На рис. 4 приведены результаты, показывающие необходимость цепной лавины в детонации. Видно, что при подавлении цепной лавины ингибитором стационарная детонация распадается на затухающую ударную волну и все больше отстающую от нее затухающую волну взрывной реакции. Подавление перехода во взрыв и в детонацию показывают также осциллограммы. Совместно ОИВТ.

Управление скоростью стационарной детонации



Закон температурной зависимости

$$n = n_o \exp \int_{t_o}^t \left[f_o \exp \left(-\frac{E_p}{RT} \right) - g \right] dt$$

$$\frac{W}{[B]} = k_1 n_o \exp \int_{t_o}^t \left[f_o \exp \left(-\frac{E}{RT} \right) - g \right] dt$$



Спасибо за внимание