

Глушков Дмитрий Олегович

**ЗАЖИГАНИЕ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ ИСТОЧНИКАМИ
С ОГРАНИЧЕННЫМ ТЕПЛОСОДЕРЖАНИЕМ**

01.04.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика
экстремальных состояний вещества

01.04.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет»

Научные руководители:

доктор физико-математических наук,
профессор Кузнецов Гений Владимирович

кандидат физико-математических наук,
доцент Стрижак Павел Александрович

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук,
старший научный сотрудник
Ханефт Александр Вилливич

доктор физико-математических наук,
профессор Ильин Александр Петрович

Ведущая организация:

ФГУП Федеральный центр двойных
технологий «Союз», Московская область

Защита состоится «__» _____ 2011 г. в 15⁰⁰ на заседании совета по защите докторских и кандидатских диссертаций Д 212.269.13 при ФГБОУ ВПО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» по адресу: 634050, г. Томск, ул. Усова, 7, корпус 8, ауд. 217.

С диссертацией можно ознакомиться в читальном зале научно-технической библиотеки ФГБОУ ВПО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет».

Автореферат разослан «__» _____ 2011 г.

Ученый секретарь совета Д 212.269.13
кандидат технических наук, доцент

А.С. Матвеев

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы

Общая теория зажигания конденсированных веществ разработана фундаментально (работы Я.Б. Зельдовича, А.Т. Мержанова, В.И. Вилунова, В.Е. Зарко, Н.Н. Семенова, Д.А. Франк-Каменецкого) для условий конвективного, радиационного и кондуктивного механизмов переноса энергии в зону реакции. Но еще в 60-х годах прошлого столетия отмечалось (М. Саммерфилд, П.Л. Кауан), что условия зажигания твердых ракетных топлив одиночными нагретыми до высоких температур частицами отличаются от условий воздействия массивных энергоёмких источников (например, больших пластин), температура которых может обоснованно приниматься постоянной в течение всего индукционного периода.

В последние годы (2003–2011 гг.) получены результаты, отражающие масштабы влияния локальности источника нагрева конденсированного вещества на условия воспламенения (работы Г.В. Кузнецова, Г.Я. Мамонтова, Г.В. Таратушкиной, П.А. Стрижака, Н.В. Барановского, А.В. Захаревича, О.В. Высокоморной, В.И. Максимова, Р.С. Буркиной). Решены задачи твердофазного зажигания однородных твердых конденсированных веществ, получены экспериментальные данные об условиях и характеристиках зажигания модельных топливных композиций, жидких топлив и легковоспламеняющихся жидкостей при локальном нагреве.

Но до настоящего времени не решены задачи зажигания полимерных материалов (ПМ), широко используемых в строительстве и при производстве различных промышленных изделий, в случае воздействия локальных источников тепла (например, одиночных «горячих» частиц, образующихся при сварке и резке металлов). Механизмы физико-химических превращений при высокотемпературном нагреве термопластичных полимеров, жидких топлив и твердых ракетных топлив существенно отличаются. Поэтому разработанные вышеперечисленными исследователями математические модели и методы решения задач зажигания нельзя формально использовать при прогностическом моделировании процессов, протекающих при интенсивном локальном нагреве термопластичных полимеров.

Перспективы развития ракетной техники, необходимой для вывода на орбиту космических аппаратов различного назначения (связи, телерадиовещания, навигации, метеорологии и других), связаны с разработкой новых твердых ракетных топлив с мелкодисперсными частицами алюминия. Экспериментальные исследования показали, что условия и характеристики зажигания таких топливных композиций существенно зависят от фракционного состава металла и его концентрации. Но результатов решения задач зажигания металлизированных смесевых твердых топлив (СТТ) в рамках моделей, учитывающих в явной форме гетерогенную структуру топлив, до настоящего времени не опубликовано.

По этим причинам численное исследование макроскопических закономерностей процессов зажигания полимерных материалов и структурно-неоднородных смесевых топлив одиночной нагретой до высоких температур частицей является актуальной, нерешенной до настоящего времени задачей.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации (МК-330.2010.8) и федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 г. (госконтракт № П2225).

Цель диссертационной работы

Целью диссертационной работы является численное исследование макроскопических закономерностей газофазного зажигания термопластичных полимерных материалов и твердофазного зажигания структурно-неоднородных металлизированных смесевых топлив одиночной нагретой до высоких температур частицей малых размеров в рамках математических моделей, учитывающих двумерный теплоперенос, термическое разложение полимера, диффузию и конвекцию газообразных продуктов пиролиза в среде окислителя, кинетику процессов пиролиза и воспламенения ПМ.

Для достижения поставленной цели решены следующие задачи:

1. Разработаны математические модели газофазного зажигания термопластичного полимерного материала и твердофазного зажигания структурно-неоднородного смесевого твердого топлива источниками с ограниченным теплосодержанием.
2. Разработаны алгоритмы численного моделирования и оценки достоверности полученных результатов.
3. Выделены масштабы влияния группы значимых факторов (температура, размеры, теплофизические характеристики источника энергии, процесс конвекции газообразных продуктов пиролиза ПМ и окислителя, неидеальный контакт на границе «частица – СТТ») на условия и характеристики зажигания.

Научная новизна работы

1. Впервые поставлены и решены задачи газофазного зажигания полимерного материала и твердофазного зажигания структурно-неоднородного металлизированного смесевого топлива одиночной нагретой до высоких температур частицей малых размеров в рамках моделей, учитывающих теплоперенос, диффузию, конвекцию, пиролиз, кинетику процессов газификации и воспламенения. Сформулированы системы нелинейных нестационарных дифференциальных уравнений в частных производных с соответствующими начальными и граничными условиями. При постановке задачи зажигания ПМ впервые учтено совместное протекание группы процессов: нагрев и термическое разложение вещества, диффузионно-конвективный перенос газообразных продуктов пиролиза в среде окислителя. При постановке задачи зажигания СТТ впервые учтена гетерогенная структура вещества и возможное влияние газового зазора на границе «частица – СТТ». Решенные задачи не имеют аналогов по постановке, методу решения и полученным результатам.

2. Выявлены масштабы влияния на времена задержки зажигания КВ значимых параметров, определяющих теплосодержание локального источника ограниченной энергоемкости, в частности – начальной температуры, размеров и теплофизических характеристик частицы.

3. Установлено, что при совместном влиянии конвекции и диффузии интенсивность химической реакции окисления газообразных продуктов пиролиза ПМ характеризуется в большей степени переносом тепла вместе с горючими газами за счет конвекции.

4. Показано, что усреднение по объему СТТ теплофизических характеристик всех компонентов топлива приводит к значительному возрастанию по сравнению с известными экспериментальными данными времени задержки зажигания и предельной температуры зажигания вещества при прочих равных условиях.

5. Сформулированные теоретические следствия являются основой прогностического моделирования пожарной опасности технологических процессов, технических систем и условий работы различных специальных объектов с использованием полимерных материалов и смесевых твердых топлив.

Практическая значимость работы

1. Разработанные математические модели в сочетании с адаптированными к новым задачам зажигания методами численного решения могут быть использованы для оценки пожарной опасности процессов взаимодействия типичных полимерных материалов с одиночными горячими частицами, а также оптимизации технологий зажигания смесевых твердых топлив локальными источниками энергии в специальных энергетических системах. Результаты исследований создают объективные предпосылки для прогнозирования последствий и объяснения механизмов пожароопасного взаимодействия полимерных материалов с источниками ограниченной энергоемкости.

2. Получены 2 свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ.

Достоверность полученных результатов численного моделирования подтверждается удовлетворительной согласованностью с известными экспериментальными данными и проверкой консервативности разностной схемы. Тестирование выбранных методов и разработанных алгоритмов решения систем нелинейных нестационарных дифференциальных уравнений в частных производных выполнено при решении менее сложных задач теплопроводности и конвективного теплообмена.

Защищаемые положения

1. Математическая модель процесса газофазного зажигания полимерного материала источником с ограниченным теплосодержанием, отличающаяся от известных описанием комплекса совместно протекающих процессов: двумерного теплообмена в системе «полимерный материал – окислительная среда – одиночная нагретая до высоких температур частица», термического разложения ПМ, диффузии и конвекции газообразных продуктов пиролиза в среде окислителя, непосредственного воспламенения газовой смеси.

2. Математическая модель процесса твердофазного зажигания смесевого топлива одиночной нагретой до высоких температур частицей малых размеров, отличающаяся от известных учетом существенной структурной неоднородности топлива (детализацией конфигурации и теплофизических свойств частиц алюминия, интегрированных в структуру топливной композиции).

3. Время задержки зажигания смесевого металлизированного топлива существенно выше аналогичной характеристики для неметаллизированного состава с неизменными кинетическими параметрами твердофазной реакции зажигания.

4. Учет неоднородной структуры смесевой топливной композиции создает объективные предпосылки для более точного расчета времён задержки зажигания СТТ.

5. Установлена возможность зажигания полимерного термопластичного материала при локальном нагреве одиночной нагретой до высоких температур частицей.

Личный вклад автора

Состоит в постановке задач газофазного зажигания полимерного материала и твердофазного зажигания структурно-неоднородного смесевого топлива источни-

ком с ограниченным теплосодержанием, выборе методов и разработке алгоритмов решения, проведении теоретических исследований влияния различных факторов на характеристики процессов зажигания КВ, обработке и анализе полученных результатов, формулировке основных выводов диссертационной работы.

Апробация работы

Основные положения и результаты диссертации докладывались и обсуждались на II Всероссийской научно-практической конференции «Теплофизические основы энергетических технологий» (Томск, 2011), VII Всероссийском семинаре ВУЗов по теплофизике и энергетике (Кемерово, 2011), Международной молодежной конференции «Энергосберегающие технологии» (Томск, 2011), XVII Всероссийской научно-технической конференции «Энергетика: эффективность, надежность, безопасность» (Томск, 2011).

Публикации

Основные результаты диссертации представлены в 9 работах, включающих 4 статьи в журналах, рекомендованных ВАК для публикации научных результатов диссертации на соискание ученой степени кандидата наук. Список публикаций приведен в автореферате.

Структура и объём работы

Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения, списка литературы, включающего 155 наименований, содержит 37 рисунков, 15 таблиц, 135 страниц.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы диссертационной работы, сформулирована цель и задачи исследований, отражена практическая значимость и новизна полученных численных результатов, представлены защищаемые автором положения.

Первая глава отражает современное состояние теоретических и экспериментальных исследований процессов зажигания конденсированных веществ в условиях локального подвода энергии. В ней описаны основные результаты работ по зажиганию высокоэнергетических твердых веществ, легко воспламеняющихся и горючих жидкостей источниками с ограниченным теплосодержанием. Установлено отсутствие результатов теоретических и экспериментальных исследований процессов зажигания полимерных материалов при локальном нагреве, а также результатов численных исследований процессов зажигания структурно-неоднородных металлизированных смесевых топлив одиночными горячими частицами малых размеров.

Во второй главе представлена постановка задач газофазного зажигания полимерного материала и твердофазного зажигания смесевого структурно-неоднородного топлива одиночной нагретой до высоких температур частицей в форме параллелепипеда. Приведено описание используемых численных методов и алгоритмов решения задач. Для оценки достоверности получаемых результатов при решении систем дифференциальных уравнений, описывающих исследуемые процессы, приведены алгоритмы проверки консервативности разностных схем. Представлены результаты решения тестовых задач теплопроводности для верификации используемых методов и разработанного алгоритма. Решение тестовых задач показало удовлетворительное соответствие полученных теоретических следствий с результатами других авторов.

Общая постановка задачи зажигания представляет следующую последовательность стадий исследуемого процесса. Частица, нагретая до температуры, существенно превышающей температуру ПМ, инерционно выпадает на его поверхность (рис. 1, а).

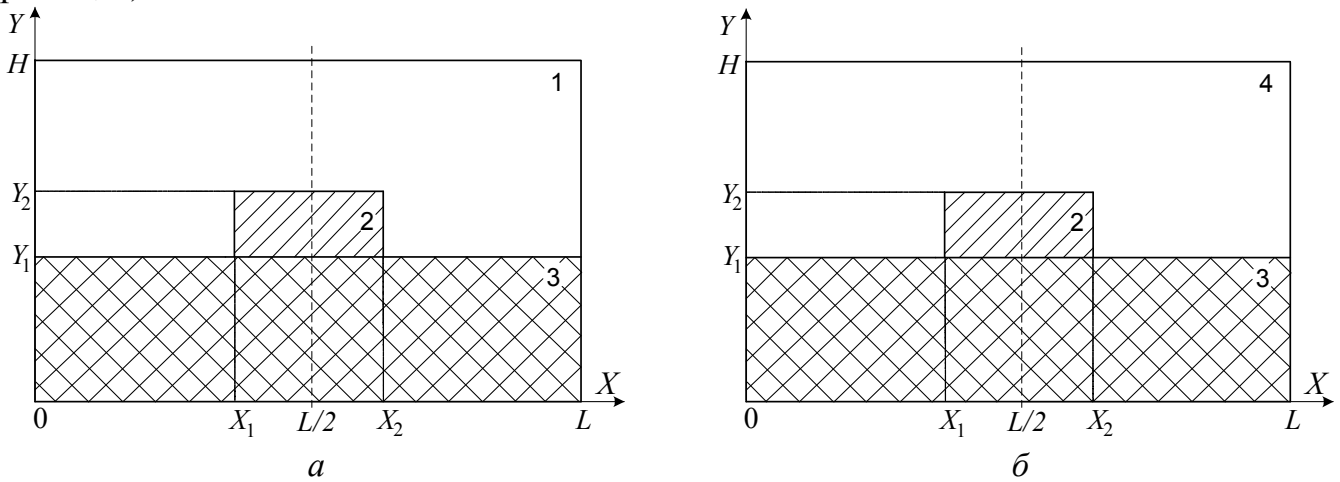


Рис. 1. Схема области решения задачи в начальный ($\tau=0$) момент времени (а) и при $0 < \tau < \tau_d$ (б): 1 – воздух, 2 – частица, 3 – полимерный материал, 4 – газовая смесь

При прогреве приповерхностного слоя полимера за счет тепла горячей частицы достигаются условия термической деструкции. В результате последующего прогрева значительно ускоряется процесс газификации ПМ вблизи нижней грани источника энергии. За счет диффузионно-конвективного массопереноса газообразные продукты термического разложения перемешиваются с воздухом и разогреваются. Формируется газовая смесь (рис. 1, б), состоящая из окислителя (воздуха) и продуктов пиролиза вещества. В результате достижения предельных значений концентрации компонентов и температуры газовой смеси реакция окисления принимает необратимый характер. Как следствие, происходит газофазное зажигание.

В качестве источников воспламенения рассматривались типичные одиночные нагретые до высоких температур частицы в форме параллелепипеда малых размеров $l_p = (2,4 \div 6,4) \cdot 10^{-3}$ м, $h_p = (1,2 \div 3,2) \cdot 10^{-3}$ м. В веществе и воздухе выделялись области, существенно превышающие размеры частиц $l = 20 \cdot 10^{-3}$ м, $h = 20 \cdot 10^{-3}$ м. Исследования выполнены для широко распространенного полимерного материала – полистирола.

Численный анализ исследуемого процесса выполнен при следующих допущениях:

1. Газоприход с участка поверхности, закрытого частицей ($Y=Y_1, X_1 < X < X_2$), определяется в малой окрестности частицы.
2. В результате термической деструкции ПМ образуется одно вещество с известными теплофизическими и термохимическими характеристиками.
3. Теплофизические характеристики материала частицы, полимера и воздуха не зависят от температуры.
4. Не учитывается возможное выгорание полимерного материала.

Приняты условия воспламенения:

1. Тепло, выделяемое в результате химической реакции горючих газов с окислителем, больше тепла, передаваемого от частицы полимерному материалу.
2. Температура газовой смеси превышает начальную температуру частицы.

Система нестационарных дифференциальных уравнений, соответствующая сформулированной физической постановке задачи, в декартовой системе координат и безразмерных переменных имеет следующий вид:

при $0 < X < X_1$, $Y_1 < Y < Y_2$; $X_2 < X < L$, $Y_1 < Y < Y_2$; $0 < X < L$, $Y_2 < Y < H$:

$$\frac{1}{Sh} \frac{\partial \Omega}{\partial \tau} + U \frac{\partial \Omega}{\partial X} + V \frac{\partial \Omega}{\partial Y} = \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 \Omega}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \Omega}{\partial Y^2} \right) + \frac{Gr}{Re^2} \frac{\partial \Theta_4}{\partial X}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial Y^2} = \Omega, \quad (2)$$

$$\frac{1}{Sh} \frac{\partial \Theta_4}{\partial \tau} + U \frac{\partial \Theta_4}{\partial X} + V \frac{\partial \Theta_4}{\partial Y} = \frac{1}{RePr} \left(\frac{\partial^2 \Theta_4}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \Theta_4}{\partial Y^2} \right) + \frac{Q_o W_o l}{\rho_4 C_4 \Delta T V_0}, \quad (3)$$

$$\frac{1}{Sh} \frac{\partial C_f}{\partial \tau} + U \frac{\partial C_f}{\partial X} + V \frac{\partial C_f}{\partial Y} = \frac{1}{ReSc} \left(\frac{\partial^2 C_f}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 C_f}{\partial Y^2} \right) - \frac{W_o l}{\rho_4 V_0}; \quad (4)$$

при $X_1 < X < X_2$, $Y_1 < Y < Y_2$:

$$\frac{1}{Fo_2} \frac{\partial \Theta_2}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \Theta_2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \Theta_2}{\partial Y^2}; \quad (5)$$

при $0 < X < L$, $0 < Y < Y_1$:

$$\frac{1}{Fo_3} \frac{\partial \Theta_3}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \Theta_3}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \Theta_3}{\partial Y^2} + \frac{Q_3 W_3 l^2}{\lambda_3 \Delta T}. \quad (6)$$

Массовая скорость газификации ПМ вычислялась по формуле:

$$W_3 = \phi_3 \rho_3 k_3^0 \exp \left(-\frac{E_3}{RT_3} \right). \quad (7)$$

Массовая скорость реакции окисления газообразных продуктов пиролиза ПМ вычислялась по формуле:

$$W_o = \rho_4 C_o^n C_f^m k_4^0 \exp \left(-\frac{E_4}{RT_4} \right), \quad (8)$$

где $n=m=1$.

Начальные ($\tau=0$) условия (рис. 1, а):

$$0 < X < L, \quad 0 < Y < Y_1 \quad \Theta_3 = \Theta_0, \quad \phi_3 = \phi_0; \quad (9)$$

$$X_1 < X < X_2, \quad Y_1 < Y < Y_2 \quad \Theta_2 = \Theta_p; \quad (10)$$

$$0 < X < X_1, \quad X_2 < X < L, \quad Y_1 < Y < Y_2; \quad 0 < X < L, \quad Y_2 < Y < H \quad \Theta_1 = \Theta_0, C_f = 0, \Psi = 0, \Omega = 0. \quad (11)$$

Граничные условия (рис. 1, б) при $0 < \tau < \tau_d$:

на границах «частица – газовая смесь» ($Y=Y_2$, $X_1 < X < X_2$; $X=X_1$, $X=X_2$, $Y_1 < Y < Y_2$), «частица – ПМ» ($Y=Y_1$, $X_1 < X < X_2$) граничные условия IV рода для уравнений энергии и уравнения теплопроводности, условие равенства нулю градиента соответствующих функций – для уравнения диффузии, движения, Пуассона; на границах «ПМ – газовая смесь» ($Y=Y_1$, $0 < X < X_1$, $X_2 < X < L$) для уравнения энергии заданы граничные условия IV рода с учетом газификации полимера, для уравнений диффузии, движения, Пуассона заданы граничные условия второго рода с учетом вдува

газообразных продуктов пиролиза в газовую область; на внешних границах ($X=0, 0<Y<H$; $X=L, 0<Y<H$; $Y=0, 0<X<L$; $Y=H, 0<X<L$) для всех уравнений задано условие равенства нулю градиента соответствующих функций.

Приняты следующие обозначения: Ω – безразмерный аналог вектора вихря; Ψ – безразмерный аналог функции тока; X и Y – безразмерные составляющие координат декартовой системы, соответствующие x и y ; U и V – безразмерные составляющие скорости горючих газов в проекции на ось x и y соответственно; Θ – безразмерная температура; T – температура; T_0 – начальная температура воздуха и вещества; T_p – начальная температура частицы; ΔT – разность температур ($\Delta T = T_p - T_0$); C_f – концентрация газообразных продуктов пиролиза ($0 < C_f < 1$); C – удельная теплоёмкость; ρ – плотность; λ – коэффициент теплопроводности; Q_0 – тепловой эффект реакции окисления газовой смеси; Q_3 – тепловой эффект реакции термического разложения полимера; ϕ – объёмная доля вещества ($0 < \phi < 1$); V_0 – масштаб скорости конвекции газов вблизи поверхности КВ; t_0 – масштаб времени; τ – безразмерное время; τ_d – безразмерное время задержки зажигания; Sh , Re , Gr , Pr , Sc , Fo – число Струхала, Рейнольдса, Грасгофа, Прандтля, Шмидта, Фурье соответственно; индексы «1», «2», «3», «4» соответствуют воздуху, частице, ПМ, газовой смеси.

Для решения системы уравнений (1)–(6) с краевыми условиями использован метод конечных разностей. Разностные аналоги дифференциальных уравнений решены локально-одномерным методом. Система одномерных разностных уравнений решена методом прогонки с использованием неявной четырехточечной разностной схемы. Для решения нелинейных одномерных уравнений применен метод итераций.

Из-за отсутствия экспериментальных данных оценка достоверности полученных в ходе вычислений результатов проводилась проверкой консервативности разностной схемы. На каждом шаге по времени определялась точность выполнения закона сохранения энергии в выделенной области решения. При численном моделировании исследуемых процессов установлены зависимости точности вычислений от шага по времени Δt и координатам $h_x = h_y$. Установлено, что погрешность вычислений уменьшается с увеличением числа узлов пространственной сетки и уменьшением Δt . Численный анализ показал, что точность вычислений в большей степени определяется выбором шага по времени и в меньшей степени от шагов по координатам.

Постановка задачи твердофазного зажигания смесового топлива аналогична приведенной выше постановке. Отличие состоит в учете реальной неоднородной структуры СТТ, а также отсутствии пиролиза вещества и диффузионно-конвективного тепломассопереноса в газовой области.

В третьей главе приведены результаты численных исследований процесса взаимодействия типичного полимерного материала (полистирола) с одиночной горячей частицей, выполнен анализ зависимостей времени задержки зажигания τ_d от размеров и начальной температуры источника зажигания.

Установлено (табл. 1, 2), что при диффузионном механизме переноса газообразных продуктов термической деструкции ПМ в среде окислителя снижение начальной температуры частицы и уменьшение её размеров приводит к возрастанию времени задержки зажигания, а при температурах ниже 1,3 (при $L_p = H_p = 0,2$) и размерах менее 0,08 (при $\Theta_p = 1,5$) в рассматриваемой системе зажигания не происходит. Полученный результат объясняется тем, что при уменьшении начальной температуры и размеров стальной частицы снижается ее теплосодержание. При уменьшении

размеров сокращается также площадь контакта локального источника энергии с веществом. Меньшее количество тепла передается ПМ, уменьшается зона его прогрева, менее интенсивно происходит газификация. Вследствие этого процессы тепломассопереноса в газовой и твердой фазах вблизи поверхности стальной частицы протекают менее интенсивно. В таких условиях увеличивается время задержки зажигания.

Таблица 1. Времена задержки зажигания в системе «стальная частица – ПМ – окислитель» в зависимости от начальной температуры источника зажигания при $L_p=H_p=0,2$

Θ_p	2	1,9	1,8	1,7	1,6	1,5	1,4	1,3	1,2
τ_d	0,096	0,121	0,148	0,181	0,230	0,315	0,483	0,909	нет зажигания

Таблица 2. Времена задержки зажигания в системе «стальная частица – ПМ – окислитель» в зависимости от размеров источника зажигания при $\Theta_p=1,5$

$L_p=H_p$	0,36	0,32	0,28	0,24	0,2	0,16	0,12	0,08	0,04
τ_d	0,293	0,294	0,298	0,304	0,315	0,336	0,389	0,715	нет зажигания

По результатам численного анализа установлено неочевидное положение зоны локализации ведущей экзотермической реакции (рис. 2) в малой по размерам газовой области около боковой поверхности частицы.

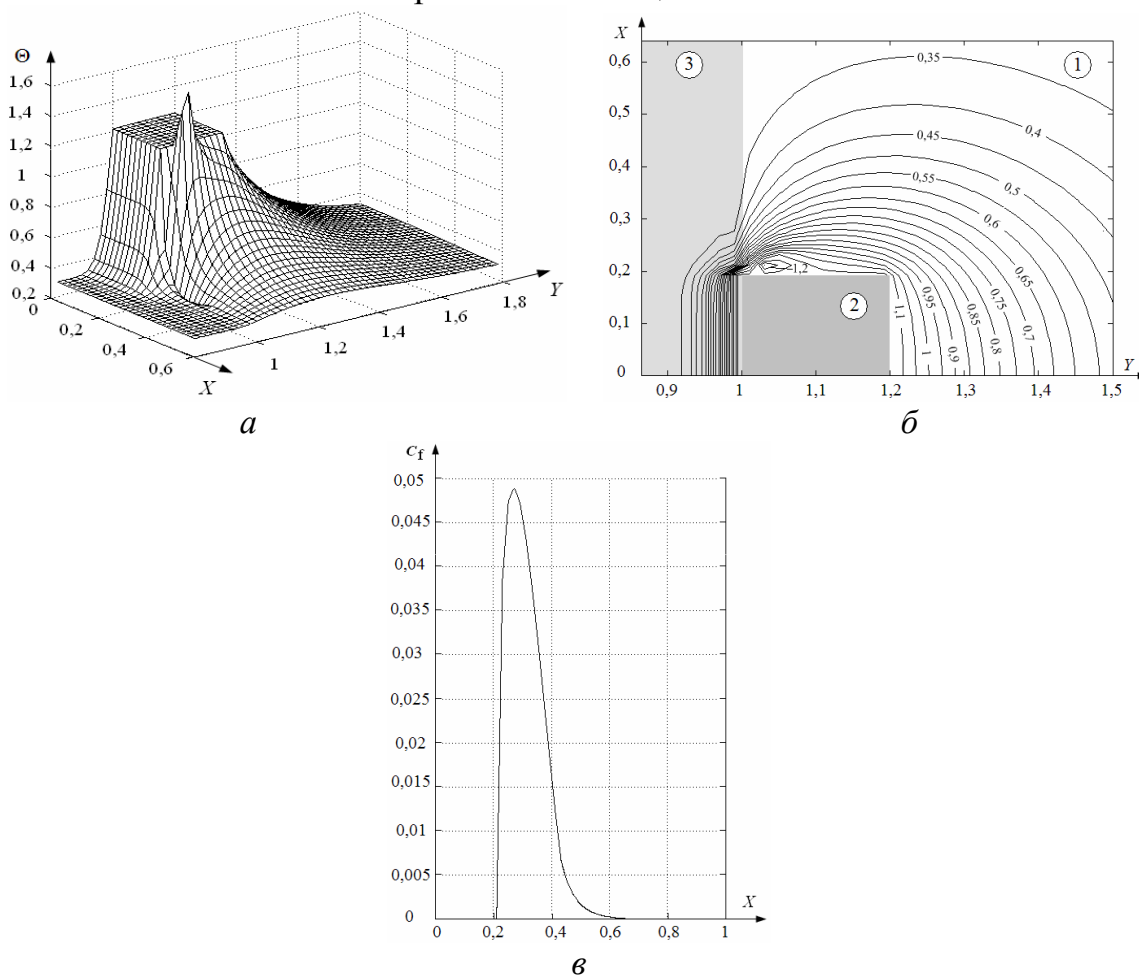


Рис. 2. Распределение температур (а), положение характерных изотерм (Θ) (б), распределение концентрации продуктов пиролиза ПМ по оси X при $Y=1,125$ (в) в момент воспламенения при $L_p=H_p=0,2$, $\Theta_p=1,5$: 1 – газовая смесь, 2 – частица, 3 – полимерный материал

Полученные распределения (рис. 2) показывают достаточно существенные отличия в условиях зажигания твердых КВ при диффузионном механизме переноса газообразных продуктов термической деструкции ПМ и, например, жидких топлив, при общности газофазного механизма химического взаимодействия горючего и окислителя. Наиболее значимыми являются отличия в положении зоны непосредственного воспламенения газовой смеси относительно граней локального источника нагрева. При пиролизе полимеров температура поверхности нагрева всегда выше, чем температура испаряющейся жидкости при адекватных значениях тепловых потоков от источника нагрева. Это обусловлено тем, что тепловой эффект фазового перехода – испарения много больше теплоты термического разложения любого полимерного материала. Кроме того, поглощение теплоты фазового превращения происходит в очень узкой по размерам зоне вблизи поверхности испарения.

Теплота же термического разложения поглощается в достаточно широком температурном диапазоне, соответствующем толщинам в десятые доли миллиметра. При этом газообразные продукты разложения термопластов, каковым является полистирол, проходят через расплавленный приповерхностный слой полимера. В итоге температура газообразных продуктов термического разложения полимеров может быть существенно выше температуры испарения жидких горючих веществ при идентичных тепловых нагрузках. Так, например, температура поверхности термопластичных полимеров может достигать в определенных условиях 600 К (при высоких скоростях нагрева). Разогреть до таких температур поверхность испарения жидких топлив практически невозможно в нормальных (по давлению) условиях. Соответственно продукты пиролиза полимеров при оттоке от поверхности нагрева имеют существенно более высокую по сравнению с параметрами горючих жидкостей температуру. Для зажигания газовой смеси, образующейся при пиролизе полимерных материалов, достаточно дополнительного прогрева при обтекании сравнительно небольшой поверхности частицы.

В результате анализа также установлено (табл. 3, 4) хорошее соответствие результатов численного исследования процесса газофазного зажигания ПМ при диффузионно-конвективном массопереносе газообразных продуктов термической деструкции полимера в среде окислителя аналогичным зависимостям (табл. 1, 2).

Таблица 3. Времена задержки зажигания в системе «стальная частица – ПМ – окислитель» в зависимости от начальной температуры источника зажигания при $L_p=0,2$, $H_p=0,1$

Θ_p	2	1,9	1,8	1,7	1,6	1,5	1,4
τ_d	0,129	0,142	0,155	0,175	0,2	0,381	нет зажигания

Таблица 4. Времена задержки зажигания в системе «стальная частица – ПМ – окислитель» в зависимости от размеров источника зажигания при $\Theta_p=1,5$

L_p	0,32	0,28	0,24	0,2	0,16	0,12
H_p	0,16	0,14	0,12	0,1	0,08	0,06
τ_d	0,296	0,304	0,321	0,381	0,836	нет зажигания

Сравнивая значения τ_d , приведенные в таблицах 1 и 3, можно сделать вывод о том, что с учетом движения газовой смеси в воздухе усложняются процессы пере-

носа тепла и массы в рассматриваемой системе. В таком случае более длительной становится стадия прогрева продуктов пиролиза ПМ в воздухе. Вследствие этого снижается как температура газовой смеси, так и скорость движения потока газов от поверхности газификации, что приводит, в свою очередь, к уменьшению концентрации горючего в воздухе и снижению вероятности воспламенения. Как следствие, времена задержки зажигания превышают аналогичные показатели для диффузионной модели зажигания.

По результатам численного анализа впервые установлено положение зоны локализации ведущей химической реакции (рис. 3) в малой по размерам газовой области над верхней гранью частицы.

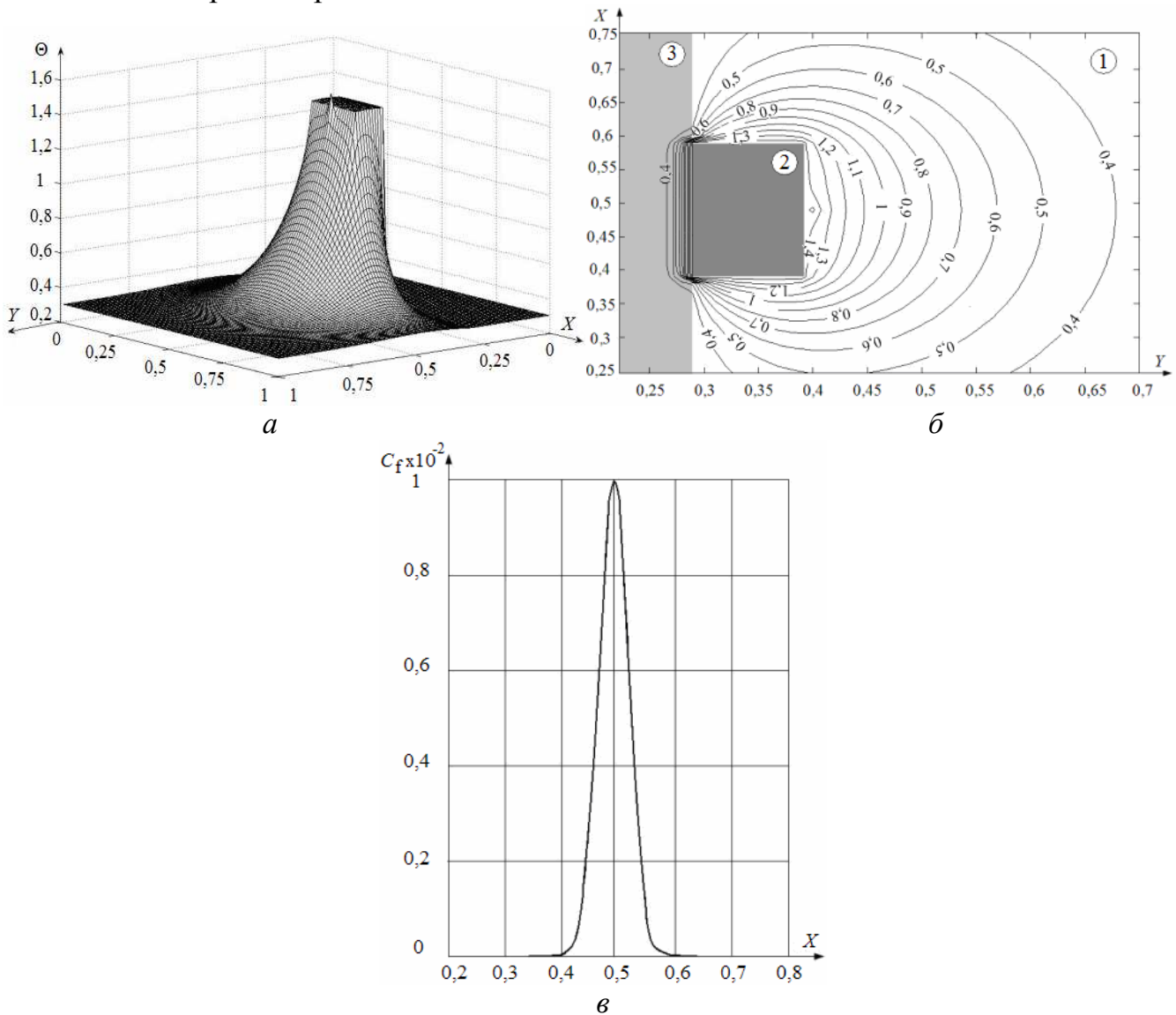


Рис. 3. Распределение температур (а), положение характерных изотерм (Θ) (б), распределение концентрации продуктов пиролиза ПМ по оси X при $Y=0,4$ (в) в момент воспламенения при $L_p=0,2$, $H_p=0,1$, $\Theta_p=1,5$: 1 – газовая смесь, 2 – частица, 3 – полимерный материал

Полученные распределения (рис. 3) показывают достаточно существенные отличия механизма газофазного зажигания ПМ в условиях конвекции по сравнению с диффузионной моделью тепломассопереноса при воспламенении полимера.

Установлено, что зажигание происходит в малой по размерам газовой области над частицей в районе оси симметрии. Это объясняется тем, что температура продуктов термической деструкции ПМ в условиях конвекции ниже температуры, соответствующей началу химической реакции их окисления, а интенсивность процесса массопереноса выше по сравнению со скоростью движения газов при диффузии. Вследствие этого продукты пиролиза в условиях конвекции быстрее удаляются от поверхности полимера и медленнее нагреваются при теплообмене с боковыми гранями частицы. В итоге газы достигают максимальных температур и массовых концентраций (рис. 3) только над частицей.

Из результатов выполненных численных исследований установлено, что в отличие от твердых топлив и жидких конденсированных веществ невозможна реализация нескольких режимов зажигания ПМ. Для систем (рис. 1) с ПМ возможно либо выполнение условий зажигания при достижении предельных концентраций продуктов пиролиза полимера и температуры газовой смеси, либо отсутствие возгорания (происходит газификация с последующим затуханием процесса).

В четвертой главе приведены результаты численного моделирования зажигания смесового твердого топлива источником с ограниченным теплосодержанием, выполнен анализ зависимостей τ_d от размеров, начальной температуры и теплофизических характеристик частицы. Определено влияние газового зазора (из-за шероховатости поверхности вещества, обусловленной выступающими частицами металла) между локальным источником тепла и топливом на характеристики исследуемого процесса, выполнено сравнение с известными экспериментальными данными.

В результате численного исследования показано, что время задержки зажигания СТТ главным образом зависит от энергетического запаса источника нагрева – одиночной «горячей» частицы.

Таблица 5. Времена задержки зажигания в системе «одиночная частица – смесовое топливо – газ» при идеальном контакте СТТ с источником нагрева в зависимости от размеров и материала частицы при $\Theta_p=1$

Размеры частицы	L_p	0,15	0,15	0,2	0,2	0,2	0,25	0,3	0,3
	H_p	0,06	0,08	0,1	0,12	0,14	0,14	0,12	0,1
		τ_d							
Материал частицы	Сталь	1,586	1,092	0,836	0,763	0,717	0,664	0,678	0,737
	Углерод	2,754	1,42	0,933	0,876	0,826	0,774	0,79	0,876

Таблица 6. Времена задержки зажигания в системе «одиночная частица – смесовое топливо – газ» при отсутствии идеального контакта СТТ с источником нагрева в зависимости от размеров и материала частицы при $\Theta_p=1$

Размеры частицы	L_p	0,15	0,15	0,2	0,2	0,2	0,25	0,3	0,3
	H_p	0,06	0,08	0,1	0,12	0,14	0,14	0,12	0,1
		τ_d							
Материал частицы	Сталь	1,882	1,376	1,089	1,009	0,959	0,922	0,939	0,995
	Углерод	2,446	1,576	1,199	1,105	1,042	1,003	1,022	1,094

Зависимости времен задержки зажигания СТТ от теплофизических свойств материала частицы (табл. 5, 6) показывают, что процессы взаимодействия стальных частиц с топливом происходят более интенсивно, чем с углеродистыми частицами. Это объясняется тем, что у металла теплопроводность и плотность существенно превышают аналогичные показатели для углерода.

Установлены зависимости времени задержки зажигания гетерогенного топлива от начальной температуры «горячей» частицы – $\tau_d = f(\Theta_p)$. Выполнено сравнение (рис. 4) полученных данных с известными результатами экспериментов.

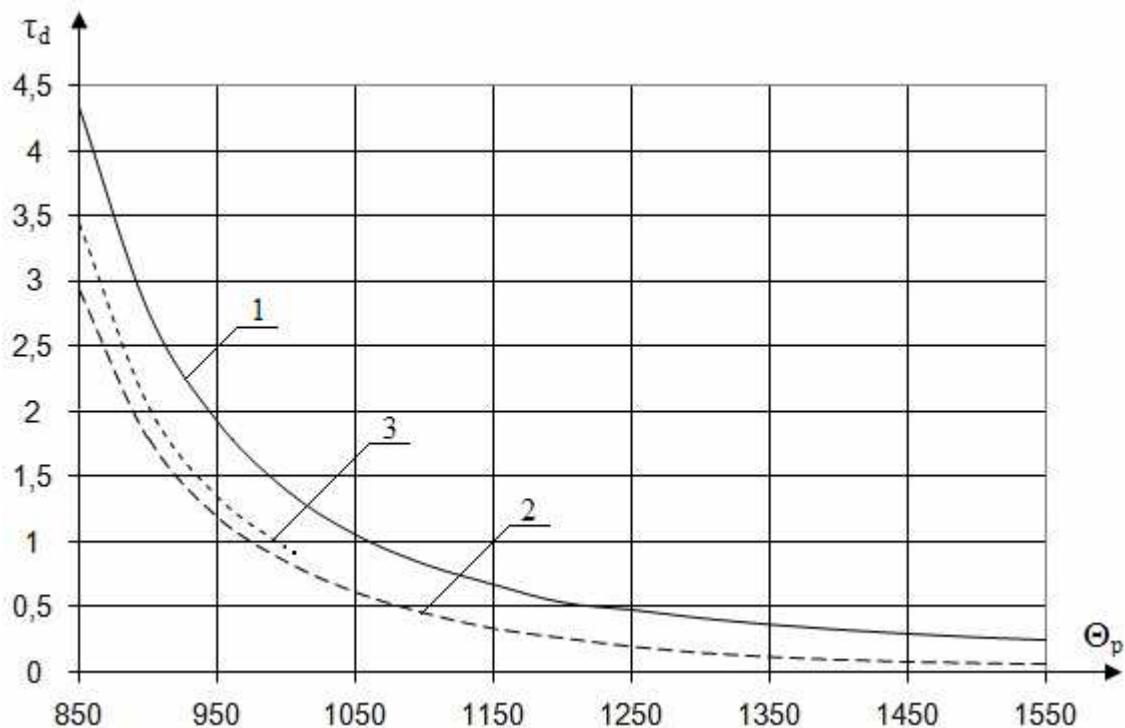


Рис. 4. Зависимость времени задержки зажигания от начальной температуры стальной частицы: 1 – однородная структура смесового топлива, 2 – гетерогенная структура смесового топлива, 3 – экспериментальная кривая

При сравнении полученных зависимостей с экспериментальными данными (рис. 4), сделан вывод о том, что усреднение по объему СТТ теплофизических характеристик всех компонентов топлива приводит к значительному возрастанию по сравнению с экспериментальными данными времени задержки зажигания и предельной температуры зажигания вещества при прочих равных условиях. Это объясняется увеличением теплопроводности приповерхностного слоя гомогенизированного вещества по сравнению с условиями эксперимента. Соответственно возрастает скорость отвода энергии от поверхности нагрева вглубь топлива по сравнению с опытом. В результате приповерхностный слой СТТ прогревается быстрее и температура поверхности нагрева в идентичные моменты времени достигает меньших значений по сравнению с реальными.

Очень хорошее (отклонения по τ_d не превышают 25 %) соответствие теоретической зависимости (кривая 2, рис. 4) и экспериментальных данных (кривая 3, рис. 4) обусловлено тем, что хотя через частицу алюминия тепло отводится вглубь топлива значительно быстрее, чем через «связку» горючего и окислителя, в зоне «связки» теплопроводность вещества очень низкая и температура приповерхностного слоя СТТ растет гораздо быстрее по сравнению с «гомогенной» моделью. В итоге можно

сделать вывод о том, что «гетерогенная» модель смесового металлизированного топлива существенно более адекватно описывает процесс прогрева реакционноспособного слоя СТТ вблизи поверхности нагрева.

Установлено, что при наличии газового зазора между топливом и источником нагрева (частицей) отклонения расчетных значений $\tau_d = f(\Theta_p)$ (рис. 5) относительно экспериментальной кривой, составляющие менее 25 %, не выходят за интервал погрешности определения экспериментальных данных. Теоретические зависимости $\tau_d = f(\Theta_p)$ (кривые 1, 2, рис. 5) также объясняют достаточно большие разбросы значений τ_d при постоянной начальной температуре частицы, установленные в экспериментах. Для определения экспериментальной зависимости $\tau_d = f(\Theta_p)$ проводилось 6–8 опытов при постоянной начальной температуре «горячей» частицы. Т.к. структурно-неоднородное СТТ содержит частицы алюминия, то поверхность всех образцов топлива имела шероховатую структуру. Это достаточно существенно ухудшает условия теплопередачи от частицы к веществу. Как следствие для разных образцов металлизированного топлива характерны большие или меньшие отклонения τ_d относительно среднего значения.

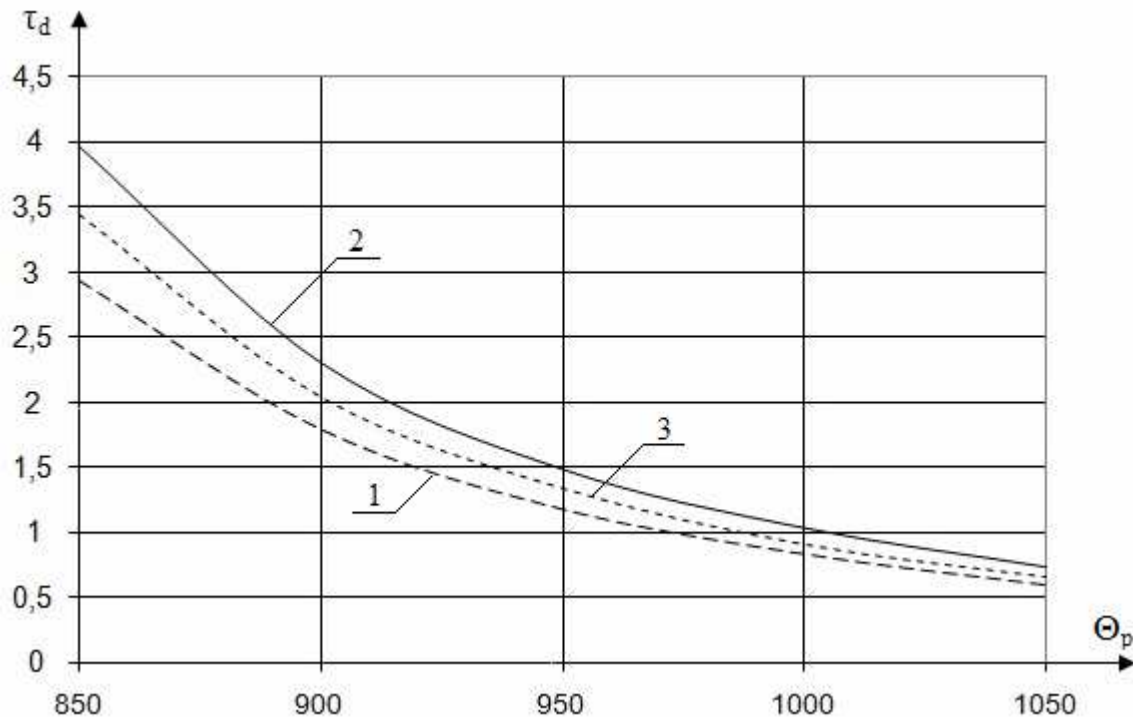


Рис. 5. Зависимость времени задержки зажигания от начальной температуры стальной частицы: 1 – гетерогенная структура смесового топлива при идеальном контакте с источником нагрева, 2 – гетерогенная структура смесового топлива при наличии газового зазора, 3 – экспериментальная кривая

Анализ распределения температуры (рис. 6) на поверхности СТТ вдоль оси X и изотерм (рис. 7) в области решения задачи в момент зажигания топлива для «гетерогенной» модели металлизированного состава позволяет сделать вывод, что максимальные градиенты температур соответствуют оси симметрии «горячей» частицы ($0 < X < X_1$). Минимальные градиенты характерны для участка $X_1 < X < X_2$, соответствующего расположению частицы алюминия в приповерхностном слое КВ. При дальнейшем увеличении координаты $X_2 < X < X_3$ наблюдается снижение температуры

в зоне контакта с источником нагрева за счет значительного теплоотвода от боковой поверхности «горячей» частицы.

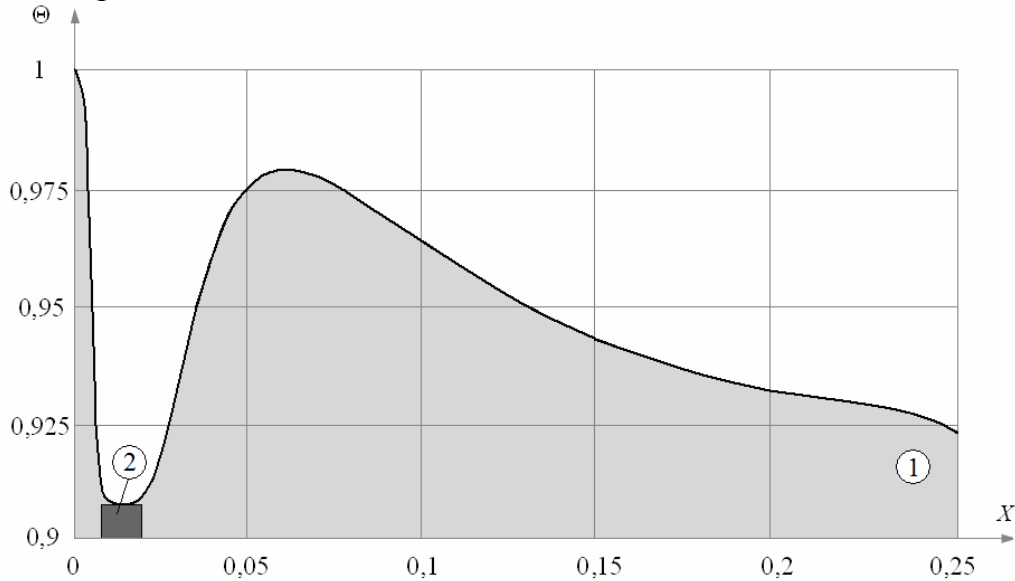


Рис. 6. Распределение температуры по X в момент зажигания ($\tau_d=0,721$) при $Y=0,5$, $\Theta_p=1$:
1 – СТТ, 2 – частица алюминия

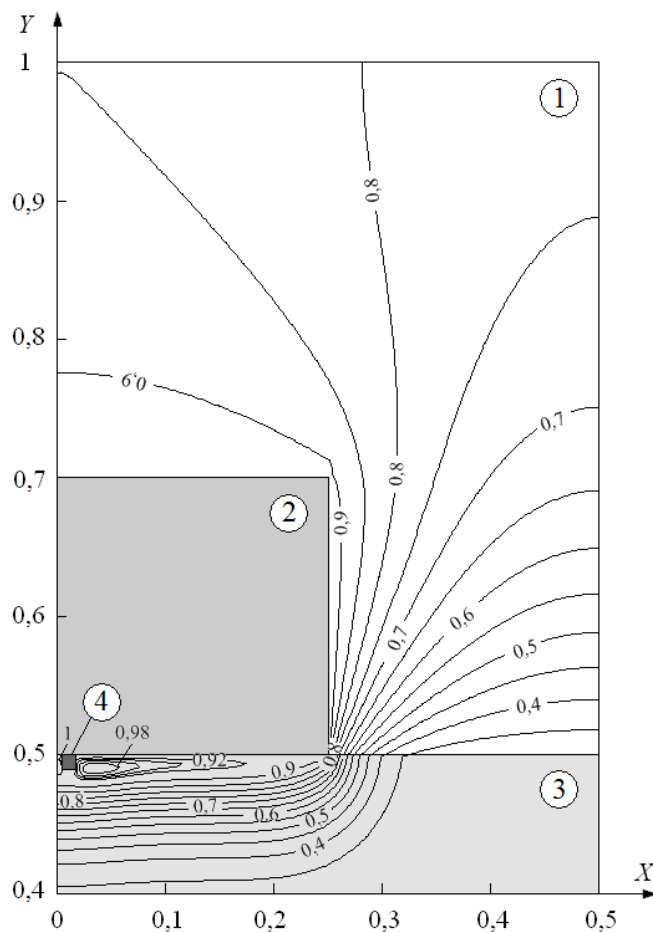


Рис. 7. Изотермы (Θ) системы «одиночная частица – смесевое топливо – газ» в момент зажигания ($\tau_d=0,721$) при $\Theta_p=1$: 1 – газ, 2 – «горячая» частица, 3 – СТТ, 4 – частица алюминия

По результатам численного анализа впервые установлено, что за время τ_d приповерхностный слой СТТ ввиду относительно малой теплопроводности вещества

прогревается до уровня интенсивного развития экзотермической реакции на глубину соизмеримую с размерами частиц алюминия. Последние в свою очередь несколько увеличивают эффективную теплопроводность приповерхностного слоя КВ, что приводит к возрастанию времени задержки зажигания по сравнению с «гомогенной» моделью СТТ. При этом зона локализации ведущей химической реакции окисления формируется на оси симметрии «горячей» частицы. В этом сечении теплоотвод в поперечном направлении минимален и, соответственно, температура максимальна в каждой точке по сравнению с другими сечениями.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Сформулированы физические модели зажигания КВ для наиболее типичных систем: «одиночная частица – полимерный материал – окислитель», «одиночная частица – смесевое твердое топливо – газ».

2. Впервые поставлена и решена нелинейная нестационарная задача газозного зажигания полимерного материала одиночной нагретой до высоких температур частицей малых размеров с учетом теплопереноса в полимере и газе, термического разложения полимера, диффузионно-конвективного массопереноса газообразных продуктов пиролиза вещества в среде окислителя.

3. Впервые поставлена и решена нелинейная нестационарная задача твердофазного зажигания смесового топлива локальным источником энергии при учете реальной неоднородной структуры КВ.

4. Выявлены масштабы влияния на времена задержки зажигания КВ значимых параметров, определяющих теплосодержание локального источника ограниченной энергоемкости, в частности – начальной температуры, размеров и теплофизических характеристик.

5. Установлено, что при совместном влиянии конвекции и диффузии интенсивность химической реакции окисления газообразных продуктов пиролиза полимерного материала характеризуется в большей степени не диффузией, а переносом тепла вместе с горючими газами за счет конвекции.

6. Определены масштабы влияния структурной неоднородности на времена задержки зажигания смесового топлива при взаимодействии с локальным источником ограниченной энергоемкости. Показано, что при учете реальной неоднородной («гетерогенной») структуры КВ отклонения расчетных значений τ_d относительно экспериментальных не выходят за интервал погрешности экспериментальных данных.

7. Сформулированные теоретические следствия являются основой прогностического моделирования пожарной опасности технологических процессов, технических систем и условий работы различных специальных объектов с использованием полимерных материалов и смесевых топлив.

ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Глушков Д.О., Кузнецов Г.В. Стрижак П.А. Численное моделирование твердофазного зажигания металлизированного конденсированного вещества нагретой до высоких температур частицей // Химическая физика. – 2011. – № 12. – С. 35–41.
2. Глушков Д.О., Стрижак П.А. Зажигание полимерного материала одиночной, нагретой до высоких температур частицей // Пожаровзрывобезопасность. – 2011. – № 9. – С. 3–8.
3. Стрижак П.А., Глушков Д.О. Газофазное зажигание конденсированного вещества неподвижным локальным источником энергии // Бутлеровские сообщения. – 2011. – № 16. – С. 26–34.
4. Глушков Д.О., Стрижак П.А. Зажигание полимерного материала нагретой до высоких температур металлической частицей в условиях конвективного тепло-массопереноса // Пожаровзрывобезопасность. – 2011. – № 12. – С. 3–12.
5. Глушков Д.О. Численный анализ концентраций газообразных продуктов пиролиза полимерного материала при взаимодействии с источником ограниченной энергоемкости // Теплофизические основы энергетических технологий : сборник научных трудов второй Всероссийской научно-практической конференции. – Томск : Изд-во Том. политех. ун-та, 2011. – С. 75–81.
6. Глушков Д.О. Кузнецов Г.В., Стрижак П.А. Тепломассоперенос при газофазном зажигании полимерного материала локальным источником энергии // Сборник докладов седьмого Всероссийского семинара ВУЗов по теплофизике и энергетике. – Кемерово : Изд-во КузГТУ, 2011. – С. 167–170.
7. Глушков Д.О., Кузнецов Г.В. Зажигание твердых конденсированных веществ одиночной нагретой до высоких температур частицей // Энергосберегающие технологии : материалы докладов международной молодежной конференции. – Томск : СПБ Графикс, 2011. – С. 261–266.
8. Глушков Д.О. Кузнецов Г.В., Стрижак П.А. Программа расчета характеристик зажигания структурно-неоднородного твердого ракетного топлива при неидеальном контакте с локальным источником нагрева // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2011612792. – Бюлл. прогр. № 2, 2011.
9. Глушков Д.О. Кузнецов Г.В., Стрижак П.А. Программа расчета концентраций продуктов пиролиза полимерного материала при взаимодействии с источником ограниченной энергоемкости // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2011612793. – Бюлл. прогр. № 2, 2011.