

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОРГАНИЧЕСКОГО СВС. РОЛЬ КОРКИ ПРОДУКТА ПРИ ОРГАНИЗАЦИИ ВОЛНОВОГО РЕЖИМА.

Климчук Е.Г., Тарасов А.Г.
ИСМАН, 2015

На основе классической тепловой модели СВС, предложенной Мержановым А.Г. и Хайкиным Б.И. для неорганических систем в развитие работ Беляева А.Ф., Зельдовича Я. Б., Новожилова Б.В. и др., проведено моделирование процесса органического СВС в системе пиперазин\малоновая кислота. Процессы, происходящие в ней, относятся к материалобразующим процессам, лежащим в основе синтеза лекарственных противопаразитарных препаратов.

Показано, что классическая тепловая модель удовлетворительно моделирует СВС в выбранной органической системе (рис. 1), что видно по удовлетворительному совпадению теоретически рассчитанной кривой зависимости скорость горения (u) – температура горения (T) во всем массиве измеренных нами экспериментальных зависимостей u , T от различных параметров (состав шихты, дисперсность реагентов, давление прессования и др.) при измеренных и уточненных теплофизических характеристиках процесса.

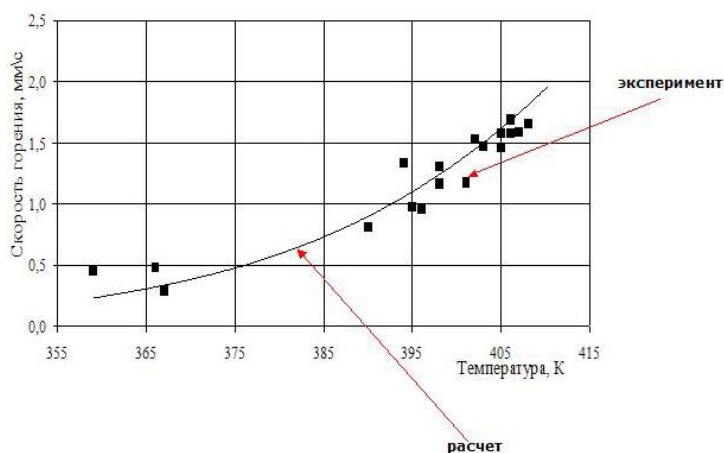


Рис.1 Зависимость u , T от различных факторов

Установлена важная роль “корки” продукта на частицах реагентов, образующейся при перемешивании, как это показано экспериментально. Она приводит к увеличению эффективной энергии активации (E) и существенному изменению динамики тепловыделения.

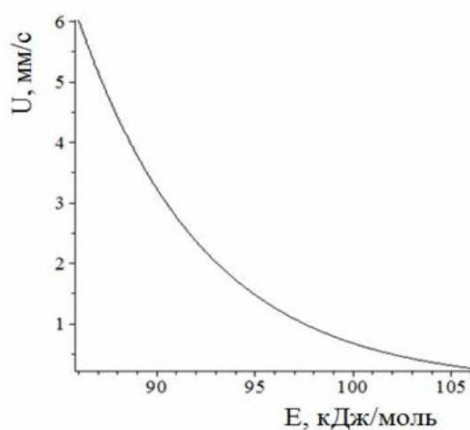


Рис. 2 Зависимость скорости горения от энергии активации

Моделирование этого процесса достигнуто введением варьируемого поправочного коэффициента $0 < k \leq 1$ к энергии активации в уравнении, связывающем скорость и температуру горения. Возрастанию коэффициента k , имеющего физический смысл проницаемости корки продукта, соответствует рост толщины корки продукта и симбатный рост $E_{act} \gg 0$ и существенное замедление скорости реакции (рис. 2).