

реактора на 230 К происходит образование более кристаллической структуры, сопровождаемое снижением концентрации дефектов, причем в случае пироуглерода это снижение более резкое.

ЛИТЕРАТУРА

1. Теснер П. А. Образование углерода из газовой фазы.— М.: Химия, 1972.
2. Bockhorn H., Fetting F. and Wenz H. W. Measurements of the soot concentration and soot particle size in propane-oxygen flames // *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.*— 1983.— 87.— P. 1067.
3. Calcote H. F. The role of ions in soot formation: Abstracts of the III Int. Seminar on flame structure.— Alma-Ata, 1989.
4. Гукасян П. С., Мантян А. А., Саадян В. А. Обнаружение высоких концентраций радикалов в зоне холодного пламени в реакции окисления пропана // *ФГВ.*— 1976.— 12, № 5.— С. 789.
5. Мансуров З. А., Тулеутаев Б. К., Попов В. Т. и др. Получение технического углерода при низкотемпературном окислении метана // *Тез. докл. Всесоюз. конф. «Химические синтезы на основе одноуглеродных молекул».*— М.: Наука, 1987.— С. 128—129.
6. Мансуров З. А., Мироненко А. В., Турешева Г. О. и др. // Исследование окисления бутана в режиме стабилизированных пламен: Сб. Горение гетерогенных и газовых систем/Материалы VIII Всесоюз. симп. по горению и взрыву.— Черноголовка, 1986.
7. Королев Ю. М. Новые данные преобразования ископаемого органического вещества и степени его катагенеза, полученные рентгенографическими методами // *Органическое вещество в современных ископаемых осадках.*— М.: Наука, 1985.— С. 168—173.
8. Королев Ю. М. Рентгенографическое исследование механизма преобразования органических веществ в процессе литогенеза // *Геология нефти и газа.*— 1988.— № 3.— С. 37—41.
9. Мансуров З. А., Тулеутаев Б. К., Пестерев В. И. и др. Исследование полиароматических углеводородов — продуктов низкотемпературного горения метана // *Нефтехимия.*— 1989.— № 2.— С. 188—191.

г. Ама-Ата

Поступила в редакцию 2/VIII 1988,
после доработки — 24/V 1990

УДК 541.126

*Е. Л. Давидчук, В. И. Димитров, М. Л. Рафалович,
Ю. И. Тулунов, Н. А. Славинская*

КИНЕТИКА ГОРЕНИЯ БОРА В СУХОМ ВОЗДУХЕ

В квазигомогенной постановке проведена серия численных экспериментов по горению бора в сухом воздухе. Вариации численных параметров (предэкспоненциальные множители и энергии активации) позволяют выявить кинетическую схему, адекватно описывающую эксперименты по горению бора. Определены границы лимитирующих процессов стадии развитого горения. По кинетическим кривым идентифицированы времена индукции, воспламенения и полного горения. Обнаружено нарушение общепринятой схемы образования высших окислов через низшие.

Основная особенность горения бора в сухом воздухе состоит в существенно гомогенно-гетерогенном характере [1, 2]: к-фаза и гетерогенные процессы — ведущие во всей фазе воспламенения, что же касается процессов в газовой фазе, то их роль становится определяющей лишь на стадии развитого горения и состоит в обеспечении достаточных тепловых потоков к поверхности горящей частицы. Это обстоятельство, а также дефицит необходимых кинетических данных по значениям коэффициентов скоростей элементарных реакций не позволили реализовать систематическое численное моделирование горения В с целью установления как самой кинетической модели, так и получения логических объяснений основных особенностей горения, вытекающих из этой модели и коррелирующих с экспериментально наблюдаемой феноменологией.

Кинетический механизм процесса горения бор/сухой воздух и константы скоростей элементарных стадий (для реакций второго порядка [K^\pm] = [$\text{л} \times \text{мол}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$], третьего — [$\text{л}^2 \cdot \text{мол}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$])

Реакции	\bar{K}^+			K^-			K_p			K_j
	$\lg A$	n	E	$\lg A$	n	E	$\lg A$	n	E	
1. $\text{O} + \text{O} + \text{M} = \text{O}_2 + \text{M}$	8,77	0	0	15,77	-1	121,12	-7	1	-121,12	K_1
2. $\text{N}_2 + \text{O}_2 = 2\text{NO}$	21,96	-2,5	128,5	11	0	75	10,96	-2,5	53,5	K_2
3. $\text{N} + \text{NO}_2 = \text{NO} + \text{O}$	10	0	7,5	6,5	1	39,1	3,5	-1	-31,6	K_3
4. $\text{N} + \text{NO} = \text{N}_2 + \text{O}$	10,44	0	0,5	10,7	0	75,5	-0,26	0	-75	K_4
5. $\text{N} + \text{O} + \text{M} = \text{NO} + \text{M}$	12,08	-1	0	17,59	-1,5	150	-5,51	0,5	-150	K_5
6. $\text{N} + \text{N} + \text{M} = \text{N}_2 + \text{M}$	11,95	-1	0	14,28	-0,5	224,9	-2,32	-0,5	-224,9	K_6
7. $\text{O} + \text{N}_2\text{O} = \text{NO} + \text{NO}$	10,56	0	27,2	20,68	-2,5	85,5	-10,12	2,5	-58,3	K_7
8. $\text{NO} + \text{O} + \text{M} = \text{NO}_2 + \text{M}$	9,04	0	1,87	13,04	0	65	-4	0	-51,96	K_8
9. $\text{O}_2 + \text{N}_2 = \text{O} + \text{N}_2\text{O}$	4,49	-1	85,89	9,18	0	22,4	-4,69	-1	63,5	K_9
10. $\text{N}_2\text{O} + \text{M} = \text{N}_2 + \text{O} + \text{M}$	11,46	0	57,62	7,15	0	20,77	4,54	0	36,85	K_{10}
11. $\text{B}_2 + \text{M} = \text{B} + \text{B} + \text{M}$	7	0	66	5,28	-1,1	0	1,72	1,1	66	K_{11}
12. $\text{BO} + \text{M} = \text{B} + \text{O} + \text{M}$	11	0	192	19,38	-4,15	8	-8,38	4,15	184	K_{12}
13. $\text{B} + \text{O}_2 = \text{BO} + \text{O}$	4,47	0	-6	-10,91	5,15	57	15,38	-5,15	-63	$K_{13} = 1/K_{12}K_1$
14. $\text{BO}_2 + \text{M} = \text{B} + \text{O}_2 + \text{M}$	11	0	197	26,82	-10,1	0	-15,82	10,1	197	$K_{14} = K_1K_{37}$
15. $\text{B} + \text{BO} + \text{M} = \text{B}_2\text{O} + \text{M}$	3,61	-0,33	89,32	7,4	0,55	160	-3,79	-0,88	-70,68	$K_{15} = K_{12}/K_{39}$
16. $\text{B}_2 + \text{BO} = \text{B}_2\text{O} + \text{B}$	4,47	0	-6	6,47	-0,28	-3,38	-2	2,8	-2,62	$K_{16} = K_{11}K_{12}/K_{39}$
17. $\text{B}_2 + \text{O} = \text{B} + \text{BO}$	4,47	0	-6	-5,54	3,04	110	10,1	-3,04	-116	$K_{17} = K_{11}/K_{12}$
18. $\text{B} + \text{B}_2\text{O}_2 = \text{B}_2\text{O} + \text{BO}$	4,47	0	60	3,61	0	19,2	0,86	0	40,8	$K_{18} = K_{38}/K_{39}K_{12}$
19. $\text{B} + \text{B}_2\text{O}_3 = \text{BO} + \text{B}_2\text{O}_2$	4,47	0	-6	-0,59	1,25	34,8	5,06	-1,25	-40,8	$K_{19} = K_{40}/K_{38}K_{12}$
20. $\text{B} + \text{BO}_2 = \text{BO} + \text{BO}$	4,47	0	-6	-3,47	2,1	44	7,94	-2,1	-50	$K_{20} = K_{37}/K_{12}K_1$

21. $B + BO_2 + M = B_2O_2 + M$	11,47	-2,5	60	8,18	0,41	221,34	+3,29	-2,91	-161,34	$K_{21} = K_{37}/K_{38}$
22. $BO_2 + M = BO + O + M$	7,32	0,5	145	7,76	-1,55	10,84	-0,44	2,05	134,16	$K_{22} = K_{37}/K_{12}$
23. $BO_2 + O = BO + O_2$	8,47	0,53	29,4	15,91	-2,52	16,56	-7,44	3,05	12,84	$K_{23} = K_{37}K_1/K_{12}$
24. $BO + BO_2 = B_2O + O_2$	7,6	0,51	120	26,21	-5,86	-6,38	-19,61	6,37	126,38	$K_{24} = K_1K_{12}K_{37}/K_3$
25. $B_2O_2 + M = B_2O + O + M$	7,3	0,5	190	14,82	-3,63	-34,82	-7,52	4,13	224,82	$K_{25} = K_{38}/K_{39}$
26. $B_2O_2 + M = BO + BO + M$	7,3	0,5	127	2,65	-0,31	16,52	4,65	0,81	111,48	$K_{26} = K_{38}/K_{12}^2$
27. $B_2O_2 + O = B_2O + O_2$	8,05	0,54	120	-6,09	-4,59	17,3	14,14	5,13	102,7	$K_{27} = K_{38}K_1/K_{39}$
28. $BO + BO = B_2O + O$	8,5	0,48	120	-3,67	-2,84	6,66	12,17	3,32	113,34	$K_{28} = K_{12}^2/K_{39}$
29. $BO + BO_2 = B_2O_2 + O$	8	0,47	24	13,09	-0,77	1,46	-5,09	1,24	22,54	$K_{29} = K_{12}K_{37}/K_{39}$
30. $B_2O_2 + B_2O_2 = B_2O + B_2O_3$	7,47	0,54	100	11,67	-0,69	18,4	-4,2	1,23	81,6	$K_{30} = K_{38}/K_{39}K_{40}$
31. $BO_2 + BO_2 = B_2O_3 + O$	6,9	0,5	19,9	9,11	0,11	6,28	-2,21	0,39	13,62	$K_{31} = K_{37}^2/K_{40}$
32. $BO_2 + BO_2 = B_2O_2 + O_2$	6,47	0,5	41,9	19	-3,79	5,18	-12,53	4,29	35,72	$K_{32} = K_1K_{37}^*/K_{38}$
33. $B_2O_3 + M = BO + BO_2 + M$	7,3	0,5	133	5,53	-1,16	12,46	1,77	1,66	120,54	$K_{33} = K_{40}/K_{12}K_{37}$
34. $B_2O_3 + M = B_2O_2 + O + M$	7,3	0,5	151	10,62	-2,4	7,78	-3,32	2,9	143,22	$K_{34} = K_{40}/K_{38}$
35. $B_2O_3 + O = B_2O_2 + O_2$	7,05	0,51	33,6	17,37	-3,39	11,5	-10,52	3,9	22,1	$K_{35} = K_{40}K_1/K_{38}$
36. $B_2O_3 + BO = BO_2 + B_2O_2$	7,47	0,48	15,7	10,35	-0,37	6,37	-2,88	0,85	8,98	$K_{36} = K_{40}K_{12}/K_{37}$
37. $BO_2 = B + O + O$							-8,82	6,2	318,18	K_{37}
38. $B_2O_2 = B + B + O + O$							-12,11	9,11	479,52	K_{38}
39. $B_2O = B + B + O$							-4,59	4,98	254,71	K_{39}
40. $B_2O_3 = B + B + O + O + O$							-15,48	12,01	622,74	K_{40}

В настоящей работе такое исследование проведено в квазигомогенной постановке, т. е. рассматривалась такая гомогенная смесь В — воздух, которая кинетически ведет себя аналогично реальной гетерогенной смеси. Для обеспечения такой зависимости потребовался специальный выбор как самого кинетического механизма, так и значений кинетических параметров элементарных стадий.

Основная физическая идея постановки состоит в нахождении корреляции между реальным (скорость испарения частицы) и модельными контролирующими процессами (как известно, в цепной теории таковыми являются реакции зарождения). При таком положении вещей реальное горение одиночной частицы ведет к падению скорости горения (из-за уменьшения ее размера, что подтверждается экспериментально [3]). Что же касается горения взвеси частиц, то из-за сопровождающих горение эффектов деструкции, агломерации и т. д. в ходе горения поверхность частицы не уменьшается, а увеличивается. Это приводит к увеличению скорости горения [3].

В пределе дробления твердой частицы до молекулярного уровня можно прийти к гомогенной (точнее, квазигомогенной) системе. Таким образом, квазигомогенная постановка является собой в сущности предельную экстраполяцию гетерогенного процесса, для реализации которой необходимо иметь оценку времени жизни одиночной частицы.

Время жизни одиночной частицы равно сумме времен ее прогрева и испарения

$$\tau_{ж} = \tau_{\text{прог}} + \tau_{\text{исп.}} \quad (1)$$

Тепловой баланс первой фазы запишем так:

$$c_p \cdot 4/3 \cdot \pi R^3 \rho \Delta T_1 = \alpha 4\pi R^2 \Delta T_2 \tau_{\text{прог.}} \quad (2)$$

Здесь c_p — удельная теплоемкость бора; ρ — плотность, $\Delta T_1 = T_k - T_n$, $\Delta T_2 = T_r - T_n$ — температурные напоры; T_k , T_n , T_r — температуры кипения, поверхности, среды; R — радиус сферической частицы. Из (2) получаем

$$\tau_{\text{прог}} = 2/3 \cdot c_p \rho R^2 \Delta T_1 / \lambda \text{Nu} \Delta T_2. \quad (3)$$

Длительность второй фазы определяется режимом теплопередачи

$$\rho L_{\text{ск}} dR = \alpha \Delta T_2 dt, \quad (4)$$

где $L_{\text{ск}}$ — скрытая теплота испарения; α — коэффициент теплопередачи. Разделяя переменные и интегрируя, из (4) имеем

$$\tau_{\text{исп}} = 2\rho L_{\text{ск}} R^2 / \Delta T_2 \lambda \text{Nu}. \quad (5)$$

Для частиц малого размера ($R < 100$ мкм) в режиме низких относительных скоростей потока ($v < 50$ м/с) с хорошей точностью можно принять $\text{Nu} = \alpha 2R/\lambda \approx 2$. Подставляя (3) и (5) в (1) окончательно получаем

$$\tau_{ж} = \rho R^2 / 3\lambda \Delta T_2 \cdot (c_p \Delta T_1 + 3L_{\text{ск}}). \quad (6)$$

Зависимость $\tau \sim R^2$ позволяет ввести в рассмотрение эмпирическую величину X — скорость убыли свободной поверхности, $[X] = [L^2 T^{-1}]$. По экспериментальным данным [4, 5] X находится в пределах: для угля $\sim 10^{-7}$ м²/с, мазута $\sim 10^{-6}$ м²/с, бора $\sim (10^{-8} \div 10^{-6})$ м²/с. Именно это значение X должно сопоставляться со скоростями реакции зарождения в квазигомогенной постановке. Величина X не может быть слишком большой (переизбыток паров В будет означать, что гетерогенный процесс перестал быть контролирующим) или слишком малой (автотермический самоподдерживающийся режим прекратится и горение затухнет).

В цепочке зависимостей

$$X \sim R^2 / \tau_{ж} \sim K_{\text{зар}}, \quad (7)$$

где $K_{\text{зар}}$ — константа скорости реакции зарождения. Принимая для частиц бора $\lambda = 0,07$ кал/(м² · с · К), $L_{\text{ск}} = 58,9$ кал/г, $R = 40$ мкм, $\rho = 2,3 \cdot 10^3$ кг/м³, можно из (6) получить

$$K_{\text{зар}} = 3 \cdot 10^4 \exp(6000/RT). \quad (8)$$

Априори, однако, не ясно, какая именно из стадий выступает в качестве реальной реакции зарождения, и потому, естественно, в первом приближении это значение $K_{\text{зар}}$ приписать всем возможным реакциям зарождения.

В дальнейшем рассматривается 14-компонентный вектор веществ $Y = \parallel \text{O}, \text{NO}, \text{N}, \text{O}_2, \text{N}_2, \text{NO}_2, \text{N}_2\text{O}, \text{B}, \text{B}_2, \text{B}_2\text{O}, \text{BO}, \text{BO}_2, \text{B}_2\text{O}_2, \text{B}_2\text{O}_3 \parallel$, между которыми возможно протекание реакций, представленных в таблице.

Группа реакций 2—10 с участием азота имеет хорошо известные значения практически всех констант скоростей элементарных стадий и играет кинетически важную роль лишь при температурах процесса $T \approx 3000$ К. При более низких температурах эти реакции не важны и по существу модель вырождается в подсистему, в которой азот играет лишь роль балласта, понижая термодинамически равновесную конечную температуру. Для обменной реакции 11 константа скорости оценена и выбрана по верхнему пределу с тем, чтобы на этой фазе анализа оставить открытым вопрос о том, какой канал зарождения более важен — реакции с участием B или B₂.

В группу реакций разветвления, продолжения и обрыва 22—36 вошли все стадии, которые могут играть более или менее заметную роль, т. е. рассматриваемая подсистема на этой фазе анализа заведомо избыточна. Одна из целей настоящего исследования как раз и состояла в том, чтобы по результатам прямого численного моделирования перейти к малоразмерной модели. Для этой подсистемы часть значений выбирались в соответствии с имеющимися рекомендациями [6], а для ряда процессов впервые была проведена квантово-механическая оценка K_j . Точность таких оценок $\sim 1000\%$, однако, достаточна для решения поставленных задач.

В целом схема кинетически сбалансирована по генерации и стоку, замкнута по конечным продуктам и отвечает условию предельного перехода, т. е. существованию связи $K_p = K^+/K^-$. Для известного K^+ (или K^-) обратное значение K^- (или K^+) определялось через константу равновесия K_p , которая вычислялась по выражению [8]:

$$\lg K_p = -(H - TS)$$

и аппроксимировалась аррениусовой зависимостью

$$K_p = AT^n \exp(-E/RT).$$

Для элементарных стадий при отсутствии данных по H и S значение K_p определялось через комбинации других K_p (таблица, последняя колонка).

В рассматриваемой постановке модель горения подвергнута систематическому численному моделированию. Метод решения — полуневявный A-устойчивый алгоритм, основанный на методе Гира [7].

Переход к малоразмерной модели (сокращение стадий или текущая дискриминация) проводился на основе знания неравновесной термодинамической доли каждого элементарного процесса

$$q_j = \frac{dG_j}{\sum dG_j} = \frac{-RT (w_j^+ - w_j^-) \lg \frac{w_j^+}{w_j^-}}{-RT \sum_j (w_j^+ - w_j^-) \lg \frac{w_j^+}{w_j^-}}. \quad (9)$$

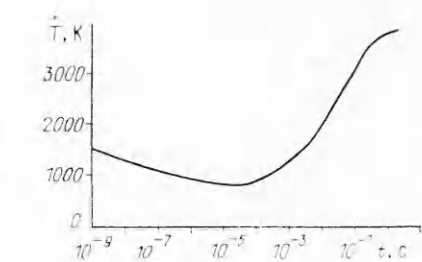
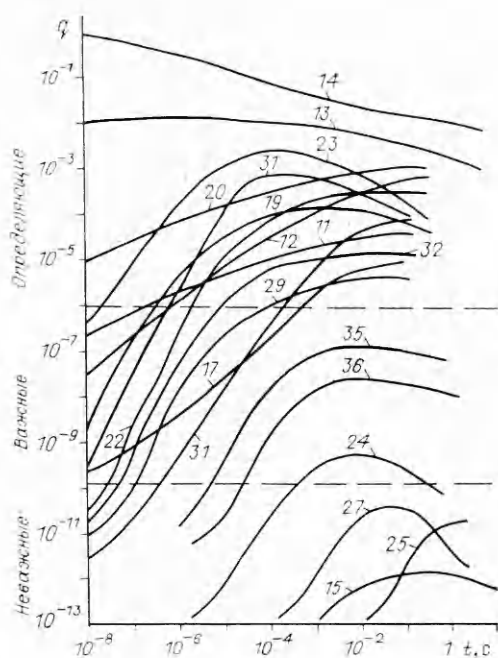


Рис. 2. Динамика поведения температуры при изменении стехиометрии смеси.

Рис. 1. Иерархия стадий, рассчитанная по термодинамическим долям.

Стадия признавалась несущественной и отбрасывалась, если отвечала следующим условиям: 1) ее значения q_j малы (нижние места в общей иерархии стадий), 2) дискриминация стадий не сокращает размерности исходного вектора компонент, 3) стадия является квазиравновесной или линейно зависимой, 4) сохраняется не только в общих чертах динамика всех зависимостей $c = c(t)$, но и их асимптотика (точка предельного перехода — термодинамическое равновесие). Перед принятием окончательного решения об исключении той или иной стадии проводилась очень широкая (3–5 порядков) вариация значений ее K_j (это необходимо в силу упоминавшейся выше низкой точности задания K_j в основной группе реакций 12–36). В ходе численного моделирования также постоянно подвергались анализу не только абсолютные значения всех элементарных скоростей, но и их направление (сдвиг влево — вправо) по знаку чистой скорости $\pm w_j = w_j^+ - w_j^-$ (u_j^\pm — скорость прямой и обратной реакций).

Анализ значимости отдельных элементарных процессов по величинам их термодинамических долей q_j (рис. 1) позволил качественно разделить все стадии на три группы: 1 — реакции 1, 12–14, 17, 19, 20, 23, 31, 32 — определяющая, $q_j \geq 10^{-6}$, неверный выбор значений K_j не просто качественно меняет динамику процесса, но иногда срывает счет; 2 — реакции 2–10, 11, 24, 29 — важная, $10^{-12} < q_j < 10^{-6}$, последовательная вариация значений K_j на два порядка хотя и меняет количественно картину воспламенения, но не приводит к качественно новым эффектам; 3–15, 16, 18, 25, 27, 33–36 — неважная, $q_j < 10^{-12}$ и вариации значений K_j на два порядка не меняют картины воспламенения ни на фазе индукции, ни на фазе развитого процесса. Сокращение исходной модели и переход к малоразмерной адекватной модели осуществляются в первую очередь за счет исключения реакций именно этой группы. В дальнейших расчетах рассматривалась 28-стадийная модель: Γ^{n_j} ($j = 1-14, 16, 18-24, 26, 28, 32$).

Численные расчеты показали, что эта модель в основном верно воспроизводит некоторые особенности реальной феноменологии. Например, невозможность воспламенения при $T < 700$ К либо резкое падение T_r в ходе развитого процесса при изменении стехиометрии (в реальном эксперименте это осуществляется добавкой порошка бора в начале зоны догорания ста-

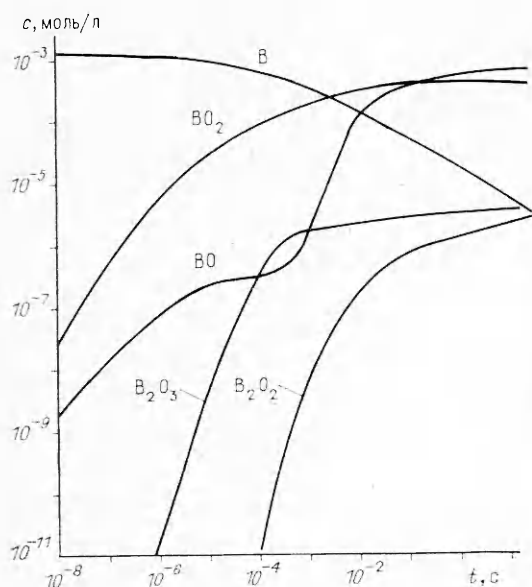


Рис. 3. Динамический портрет процесса горения В в сухом воздухе ($T_r = 1000$ К, $p = 0,1$ МПа, $\alpha = 1$).

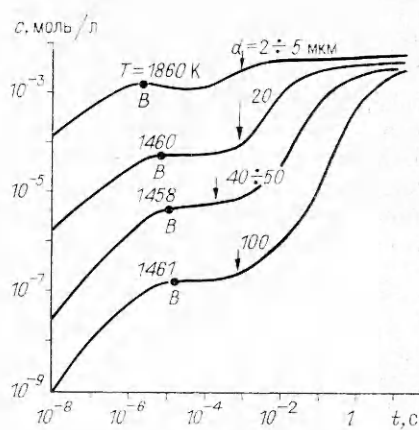


Рис. 4. Кинетика образования ВО в зависимости от различных значений исходного «диаметра» частиц бора ($T = 1000$ К, $p = 0,1$ МПа, $\alpha = 1$).

ционерного факела, а в численном эксперименте — произвольным резким уменьшением показателя стехиометрии). Динамика поведения температуры в этом случае показана на рис. 2. Очевидно, что падение T_r связано с сильноэндетермическими процессами окисления бора в низшие окислы (реакции 12—14, 17, 20), а рост — рекомбинацией ВО и доокислением в стадиях 22—24 низших окислов в высшие.

На динамическом портрете $c_i = c_i(t)$ (рис. 3) видно, что, в то время как все окислы бора демонстрируют гладкие зависимости $c = c(t)$ на кривой $c_{BO}(t)$, всегда имеется характерное плато в районе $10^{-6} \div 10^{-4}$ с. Изменение начальных условий по T и «диаметру» исходных частиц (а в численном эксперименте изменение реального диаметра адекватно изменению предэкспонента в константах зарождения реакций 13, 16, 17, 19, 20) сдвигало начало плато (рис. 4, точка В). Связь между значениями $K_{зар}$ и X , установленная выше, позволяла контролируемым образом сдвигать точку В и постоянно сопоставлять результаты численного моделирования с известными экспериментальными данными [9, 10]. Оказалось, что для частиц с $d \approx (15 \div 100)$ мкм температура воспламенения T_v (точка В) ≈ 1450 К и практически не зависит от диаметра d . Но для частиц с $d < 15$ мкм T_v резко растет вплоть до 1860 К (полное согласие с данными [9]); время воспламенения для малых d меняется в пределах $(3 \cdot 10^{-6} \div 3 \cdot 10^{-5})$ с, а общее время процесса (время горения) — $13 \cdot 10^{-3} \div 16 \cdot 10^{-3}$ с. По данным [11] реальная частица с $d = 37$ мкм сгорает за $15 \cdot 10^{-3}$ с.

Таким образом, полученные результаты подтверждают предположения Мачека [9] о том, что стадия развитого горения для больших частиц лимитируется диффузией, а для малых — кинетикой в газовой фазе, причем переход лежит в области диаметров (15—30 мкм). Один из самых интересных результатов численного моделирования состоит в том, что, по-видимому, не существует кажущейся логически очевидной последовательности получения высших и низших окислов по схеме $B \rightarrow B_2O \rightarrow BO \rightarrow B_2O_2 \rightarrow BO_2 \rightarrow B_2O_3$. Иными словами, динамика образования BO_2 не зависит от динамики образования остальных окислов (см. рис. 3). Аномальное (и хорошо известное) явление, состоящее в том, что концентрация BO_2 очень быстро достигает максимума и далее остается квазистационарной независимо от поведения $B_2O(t)$, $BO(t)$,

$B_2O_2(t)$, $B_2O_3(t)$, объясняется прямым образованием BO_2 по стадиям 20, 22, 23. По достижении плато чистые скорости этих процессов, с одной стороны, резко падают, а с другой — скачком возрастают скорости стока BO_2 по стадиям 24, 29, что и удерживает квазистационарность BO_2 . Подчеркнем, что эта феноменология реализуется на фоне высоких значений неравновесной термодинамической доли реакции 14. И только потом, на фазе интенсивного горения и догорания, BO_2 частично доокисляется в B_2O_3 , а частично раскисляется до B_2O_2 по реакциям 21, 30.

Таким образом, квазигомогенная постановка и представленная кинетическая модель достаточно адекватно отражают реальный гетерогенный процесс воспламенения и горения бора.

ЛИТЕРАТУРА

1. King M. K. Ignition and combustion of boron particles and clouds // J. Spacecraft and Rockets.— 1982.— 19, N 4.— P. 294—306.
2. Mohan G., Williams F. A. Ignition and combustion of boron in O_2 // Inert Atmospheres. AIAA J.— 1972.— 10, N 6.— P. 776—783.
3. Macek A. Combustion of boron particles: Experiment and Theory // XIV Symp. on Combustion, 1972.— P. 1401—1411.
4. Dimitrov V. I. Some mathematical modelling problems in chemical kinetics of highspeed processes // Arch. termod. i spalania.— 1975.— 6, N 1.— P. 545.
5. Штерн В. Я. Окисление углеводородов в газовой фазе.— М.: Изд-во АН СССР, 1956.
6. Bahn G. S. Gas phase chemical kinetic of boron combustion in dry air // Pyrodynamic.— 1968.— 6, N 6.— P. 79—96.
7. Hindmarsh A. S., Birne G. Effective packet of integration and solution of ordinary differential equation (EPISODE), USID 30112.— Univ. of California, 1978.— Rev. 1.
8. Димитров В. И. Простая кинетика.— Новосибирск: Наука, 1982.
9. Macek A., Semple I. M. Composition and combustion characteristics of condensed exhaust from boron-containing fuel-rich rocket motors // 9th JANNAF Combustion Meeting, CPIA, Publ. 231, 1972.— V. 1.
10. Gurevich M. A., Kir'yanov I. M., Ozerov E. S. Combustion of individual boron particles // Combustion, Explosion and Shockwaves.— 1969.— 5, N 2.— P. 15—153.
11. Macek A., Semple I. M. Combustion of boron particles at atmospheric pressure // Combust. Sci. Technol.— 1969.— 1.— P. 181—191.

г. Кишинев

Поступила в редакцию 23/1 1990

УДК 539.196.3

*Е. Л. Давидчук, В. И. Димитров, В. А. Залож,
Н. А. Славинская, Ю. И. Тулупов*

КОЭФФИЦИЕНТЫ ПЕРЕНОСА ПРОДУКТОВ ГОРЕНИЯ БОРА В СУХОМ ВОЗДУХЕ

Проведен расчет коэффициентов диффузии, вязкости и теплопроводности для продуктов горения бора в сухом воздухе и их бинарных смесей. Полученные коэффициенты переноса описаны полиномом пятой степени от температуры.

В настоящее время все большее внимание привлекают металлы как возможный компонент горючего для энергетических установок, транспортных двигателей и т. д. Свойства бора, в частности его высокая массовая теплота сгорания, делают топлива на его основе одними из наиболее перспективных. Решение практических задач по такому использованию, однако, затруднено отсутствием необходимых экспериментальных и расчетных данных по кинетике горения В, а также по свойствам переноса В и его окислов.

С целью определения коэффициентов переноса для химически реагирующей смеси газов [1], образующейся в результате горения В в сухом воздухе, необходимых для математического моделирования процесса, на первом этапе по соотношениям молекулярно-кинетической теории рассчитаны коэффициенты диффузии D , вязкости η , теплопроводности λ