

Математическая модель теплопередачи и массообмена при нейтрализации пороховых газов в боевом отделении бронетехники

Е.А. Мұсатай*, М.И. Тулепов

Казахский национальный университет им. аль-Фараби, пр. аль-Фараби, 71, Алматы, Казахстан

Информация о статье

Получено
28.04.2025

Получено в исправленном виде
16.07.2025

Принято
21.08.2025

Ключевые слова:

бронетехника;
кинетика разложения;
массообмен;
математическое
моделирование;
4D-четырёхмерная
математическая модель

АННОТАЦИЯ

В работе проведено математическое моделирование нейтрализации пороховых газов в боевом отделении бронетехники с использованием пиротехнического состава, включающего нитрат натрия, порошковое железо и активированный уголь. Анализируются основные факторы эффективности нейтрализации – кинетика разложения окислителя, окисление металлов и термическое разложение углерода. Для оценки кинетики применена модель Беляжа-Зельдовича, на основе которой рассчитана скорость реакции и построена зависимость активационной энергии от температуры, что подтвердило соответствие уравнению Аррениуса. Разработана четырехмерная математическая модель, учитывающая теплопередачу, массообмен, температурные градиенты, плотность и скорость газа, а также энерговыделение. Численные расчеты выполнены с использованием программы MATLAB, что обеспечило точное описание процессов горения и нейтрализации газов. Особое внимание уделено адсорбционным процессам на поверхности активированного угля и железа, которые способствуют поглощению токсичных компонентов – CO_2 и оксидов азота, снижая их концентрацию и улучшая санитарно-гигиенические условия в замкнутом пространстве боевого отделения. Предложенная модель служит основой для оптимизации пиротехнических составов и систем нейтрализации, направленных на повышение безопасности эксплуатации бронетехники.

1. Введение

Бронированные машины, включая танки и бронетранспортеры, оснащаются мощными дизельными двигателями внутреннего сгорания, обеспечивающими высокую проходимость и дальность действия в полевых условиях. Выбросы выхлопных газов от этих двигателей в основном состоят из углекислого газа (CO_2) и водяного пара (H_2O) как конечных продуктов полного сгорания топлива. Однако значительная часть токсичных компонентов образуется из-за неполного сгорания и включает монооксид углерода (CO), оксиды азота (NO_x), несгоревшие углеводороды (C_xH_x) и твердые частицы [1]. В замкнутых боевых отсеках выхлопные газы могут задерживаться и при недостаточной вентиляции накапливаться до токсичных концентраций, угрожая здоровью экипажа. Военная техника большинства стран имеет специальные исключения из гражданских норм

по выбросам, что позволяет ей работать без ограничений по NO_x и твердым частицам [2].

Евростандарт (ЕС) – это европейский норматив, устанавливающий предельно допустимые уровни выбросов основных загрязнителей (CO , NO_x , C_xH_x) двигателями внутреннего сгорания (ДВС). При адаптации к бронетехнике аналогичные требования служат технической основой для проектирования систем очистки выхлопа и обеспечения безопасности экипажа [3]. Евростандарт периодически обновляется и ужесточается, чтобы стимулировать разработку и производство более экологичных автомобильных ДВС. Экологически чистыми видами топлива являются водород, биодизель, природный газ и спирты. Такие виды топлива производятся из природного возобновляемого сырья. Эти виды топлива не содержат серы, а их химический состав обеспечивает большую эффективность сгорания. Каждый последующий ЕС устанавливает более строгие

*Corresponding author: Y.A. Mussatay; E-mail address: esenshon104@mail.ru

ограничения на выбросы токсичных веществ, что обуславливает необходимость улучшения характеристик топлива и внедрения специальных решений в конструкцию двигателей [4].

В рамках математического моделирования могут быть определены кинетические параметры компонентов смеси, включая активационную энергию и скорости реакций термического разложения нитрата натрия, окисления порошкообразного железа и пиролиза активированного угля. Также целесообразно учитывать термические характеристики, такие как удельная теплоемкость, теплопроводность и тепловая устойчивость реагентов. Дополнительно модель может включать массообменные и структурные параметры, в том числе пористость, удельную поверхность, коэффициенты диффузии газов и геометрические особенности пиротехнической смеси.

2. Формирование математической модели пиротехнической композиции

Линейная скорость гомогенного горения конденсированной пиротехнической смеси зависит от давления, начальной температуры, состава и ряда других факторов. Гомогенное горение представляет собой процесс, при котором горючее вещество и окислитель находятся в одной фазе. К этому типу горения относятся взрывоопасные газовые и текучие смеси, а также отдельные взрывчатые вещества, сгорание которых происходит в однородной среде.

Математическая модель построена с учетом следующих условий. Линейная скорость горения определяется температурой поверхности конденсированной фазы согласно модели Беляева-Зельдовича [5]. В газовой фазе протекает экзотермическая реакция первого порядка, описываемая уравнением Аррениуса. Процессы горения рассматриваются в изобарических условиях с постоянным давлением и термическим расширением газа. Частицы пиротехнической смеси, состоящей из нитрата натрия, железа и активированного угля, распределяются равномерно по объему и имеют одинаковые размеры. Процесс горения

компонентов описывается на основе известных термохимических характеристик, воспламенение начинается при достижении каждой субстанции своей минимальной критической температуры. Теплообмен между частицами и газом моделируется по закону Ньютона. Движение частиц определяется силами сопротивления газа, которые описываются законом Стокса. При низкой объемной концентрации твердой фазы влияние ее движения на газовое течение не учитывается. Предполагается также, что на поверхности конденсированной фазы не происходит агломерация частиц и отсутствуют взаимодействия между ними в газовой фазе [6].

При построении математической модели горения пиротехнической смеси принимаются ряд начальных допущений и упрощений, направленных на снижение вычислительной сложности без существенной потери точности. Предполагается, что система является гомогенной, а частицы смеси равномерно распределены по объему и обладают одинаковыми размерами. Горение рассматривается в режиме твердого топлива, при этом агломерация частиц и их слипание не происходят. Химическая реакция описывается в рамках упрощенного стехиометрического уравнения без учета побочных путей и многостадийных процессов. Влияние газовой фазы на тепловое поле и динамику горения считается незначительным и потому не включается в расчет. В модели рассматриваются только основные тепловые и кинетические процессы, в то время как эффекты диффузии, турбулентности и радиационного теплообмена не учитываются.

С учетом изложенных предположений, математическая модель основывается на уравнениях сохранения энергии для газа и частиц, включающих нитрат натрия, железо и активированный уголь, уравнениях сохранения массы газа, массы твердых частиц и числа частиц, уравнении выгорания реагентов в газовой фазе, уравнении движения частиц в потоке газа, а также уравнении состояния газа. Система уравнений, сформулированная в системе координат, связанной с поверхностью горения, имеет следующий вид:

$$c_2 \rho_2 \left(\frac{\partial T_2}{\partial t} + u \frac{\partial T_2}{\partial x} \right) = \lambda_2 \frac{\partial^2 T_2}{\partial x^2} + Y \rho_2 k_0 Q_2 \exp \left(-\frac{E_2}{R_y T_2} \right) + 4\pi \alpha_k^2 n (T_3 - T_2) \quad (1)$$

$$\left(\frac{\partial Y}{\partial t} + u \frac{\partial Y}{\partial x} \right) = D_2 \frac{\partial^2 Y}{\partial x^2} - Y k_0 \exp \left(-\frac{E_2}{R_y T_2} \right) \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_2 u)}{\partial x} = -G \quad (3)$$

$$c_3 \rho_3 \left(\frac{\partial T_3}{\partial t} + w \frac{\partial T_3}{\partial x} \right) = 4\pi \alpha r_k^2 n (T_3 - T_2) + G Q_{Fe} \frac{2\mu_{Fe}}{3\mu_0}. \quad (4)$$

Данная система включает уравнения, описывающие энергетические процессы для газовой фазы и частиц (1) и (4), уравнение, определяющее глубину выгорания (2), а также уравнение сохранения массы для газовой фазы (3). Под системой уравнений понимается совокупность математических зависимостей, которые выражают законы сохранения энергии и массы, а также описывают динамику и взаимодействие компонентов в процессе горения, включая теплоперенос, химическую реакцию и движение частиц в газовом потоке.

$$\frac{\partial \rho_3}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_3 w)}{\partial x} = G \quad (5)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + w \frac{\partial w}{\partial x} = -\tau_{fr} \quad (6)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial(nw)}{\partial x} = 0 \quad (7)$$

$$p = \rho_2 R T_2 = const. \quad (8)$$

Эта система состоит из уравнений, которые описывают сохранение массы частиц (5), их движение в газовом потоке (6), изменения числа частиц (7) и уравнение состояния идеального газа (8). Под системой уравнений понимается набор математических моделей, описывающих физические процессы, связанные с движением, изменением массы и численности частиц, а также термодинамическим состоянием газовой фазы, с учетом законов сохранения массы, движения частиц и состояния вещества.

3. Результаты и обсуждение

3.1 Температурная зависимость линейной скорости горения пиротехнических составов

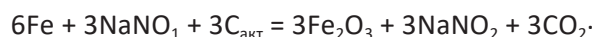
Сначала вычисляется скорость v_k по соответствующей формуле, затем по разностной форме уравнения определяется ее изменение во времени или в зависимости от других параметров, таких как температура, давление или концентрация реагентов в пиротехническом составе.

Согласно модели Беляева-Зельдовича [5], разложение пороха в газовую фазу рассматривается как общая реакция с тепловым эффектом Q_1 и энергией активации E_1 . Линейная скорость горения при этом определяется следующим образом:

$$v_k = k_v \exp\left(\frac{-E_1}{2RT_s}\right). \quad (9)$$

Уравнение отражает влияние температуры поверхности T_s и энергии активации E_1 на линейную скорость горения, что является принципиально важным для расчета кинетики пиротехнических составов и прогнозирования их реакционной способности в технических условиях.

Реакция между нитратом натрия (NaNO_3), порошковым железом (Fe) и активированным углем (C) может быть экзотермической. Типичная реакция, которая может происходить между этими веществами, – это восстановление нитрата натрия с образованием продуктов, таких как оксиды углерода и железа:



Для стандартного пиротехнического состава из нитрата натрия, железа и углерода оптимальные пропорции составляют 50% NaNO_3 , 20% Fe и 30% активированный уголь, что обеспечивает стабильное и интенсивное горение с эффектами искр и яркого пламени. В зависимости от требуемых эффектов состав может быть скорректирован для достижения нужных результатов.

Таблица 1. Расчетные значения энергии активации для разных температурных интервалов

Температура (К)	Скорость реакции, (см/с)	E_a , кДж/моль	v_k – линейная скорость, (см/с)
873	0,37	77,6	0,372
973	1,11	81,8	1,097
1073	2,85	89,0	2,842
1173	6,67	92,1	6,594

Результаты расчетов показывают, что при температуре 873 К скорость горения составляет 0,37, при 973 К – 1,11, при 1073 К – 2,85, а при 1173 К – 6,67, т.е. с ростом температуры скорость горения значительно увеличивается, что подтверждает теорию о том, что активационная энергия играет ключевую роль в процессе химической реакции.

Энергия активации (E_a) пиротехнической смеси – это минимальный объем энергии, необходимый для инициирования и устойчивого протекания ее горения, определяющий температуру воспламенения и скорость распространения пламени. Энергия активации пиротехнической смеси (50% NaNO_3 , 20% Fe, 30% C) рассчитана «через экспоненту» по формуле Аррениуса. Для вычисления энергии активации на разных участках зависимости скорости v от температуры T удобно использовать аналитическую формулу Аррениуса [6] между двумя точками:

$$E_a = \frac{R \ln(v_2 / v_1)}{\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}}. \quad (10)$$

Данное выражение (10) используется для расчета энергии активации E_a на основе экспериментально полученных скоростей реакции при двух различных температурах, что позволяет оценить термочувствительность пиротехнического состава.

Для выражения скорости горения через массу смеси рассмотрим следующий пример: 1 г спрессованной пиротехнической композиции с плотностью 1,8 г/см³ в форме цилиндра с площадью поперечного сечения 1,1 см² полностью сгорает за 1,5 с. При достижении локальной температуры, при которой достаточное число молекул преодолевает энергию активации (E_a), начинается горение активированной смеси. Для расчета скорости горения по формуле (9) необходимо знать предэкспоненциальный множитель k_v – эмпирическую константу, зависящую от природы реагентов, механизма реакции и условий ее протекания, значение которой определяется экспериментально и может варьироваться, что делает ее важным параметром при расчете скорости реакции.

Прежде чем приступить к расчетам, необходимо привести энергию активации E_a к единицам Дж/моль. При этом скорость горения состава пиротехнической смеси зависит от температуры и величины энергии активации. Для вычисления экспоненциальной функции используют основание натурального логарифма – число $e \approx 2,718$, т.е. $\exp(x) = e^x$.

Согласно уравнению Аррениуса, с повышени-

ем температуры молекулы приобретают больше энергии, что увеличивает частоту эффективных столкновений и, как следствие, экспоненциально ускоряет скорость горения.

В ходе исследования гомогенной реакции горения составов, включающих нитрат натрия, железо и углерод, было установлено, что расчеты скорости горения, выполненные на основе массы таблетки и ее площади, дают одинаковые результаты с предсказаниями по уравнению Аррениуса, что объясняется взаимным влиянием температуры и эмпирической константы k_v , приводящим к одинаковым значениям при учете как изменений температуры, так и активационной энергии.

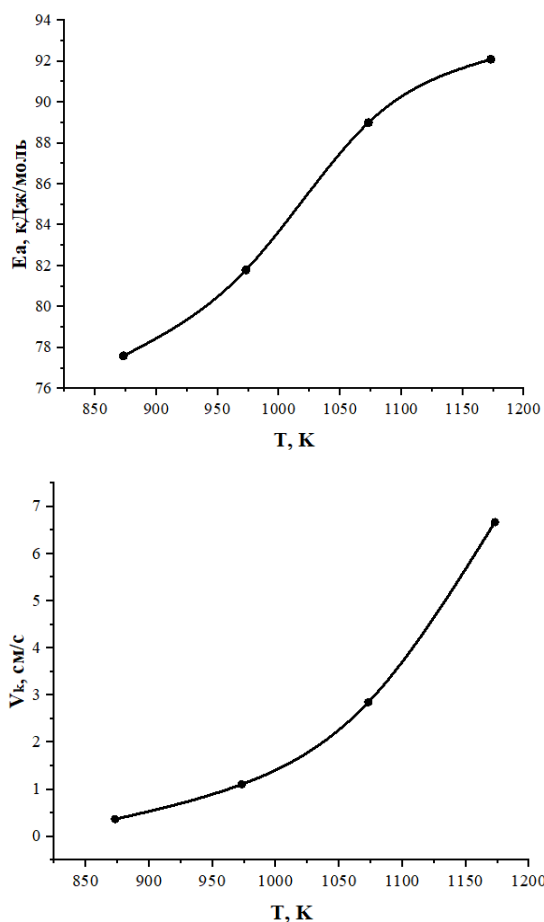


Рис. 1. Зависимость энергии активации и линейной скорости горения пиротехнического состава ($\text{NaNO}_3 + \text{Fe} + \text{C}_{\text{акт}}$) от температуры.

В работе [7] указывается, что для пиротехнических составов более точной характеристикой считается линейная скорость горения, так как она отражает продвижение фронта реакции в пространстве. Однако в случае рассматриваемого состава, где горение протекает в гомогенной фазе, наблюдается равномерное распределение компонентов и однородное течение реакции.

Анализ графиков на рис. 1 показывает, что с ростом температуры увеличиваются как линейная скорость горения, так и энергия активации, что может свидетельствовать об изменении механизма реакции. Энергия активации (E_a) изменяется с температурой из-за зависимости кинетики реакции от тепловых условий, что отражено в уравнении Аррениуса. Следовательно, для обеспечения стабильности процесса и предотвращения неконтролируемого ускорения горения необходимо строго контролировать температурный режим. Составы с низкой E_a иницируются за счет повышенной чувствительности, но обладают меньшей стабильностью, тогда как высокоактивационные смеси более термоустойчивы, хотя и требуют иницирующего источника с повышенной мощностью.

3.2 Оценка динамических параметров пиротехнической среды при различных температурах

Уравнения неразрывности и импульса, применяемые в механике сплошных сред, могут быть адаптированы для описания поведения пиротехнических составов. Пиротехнические составы представляют собой гомогенные смеси, в которых протекают экзотермические химические реакции, сопровождающиеся выделением тепла, света, газа и других эффектов.

Уравнение неразрывности для газовых смесей описывает сохранение массы в потоке многокомпонентного газа, учитывая возможные химические реакции и диффузию компонентов:

$$\frac{d}{d(x)}(\varepsilon_g(r_g, x)p_g U_g(r_0, x)) = 0 \quad (11)$$

$$U_g(r_0, x) = \frac{U_g}{\varepsilon_g(r_0, x)}. \quad (12)$$

Уравнение импульса для пиротехнической модели описывает динамику движения газов и твердых частиц:

$$\frac{d}{d(x)}(\varepsilon_{pd}(r_0, x)\rho_g \vec{U}_p(r_0, x)) = R_s - R_d \quad (13)$$

$$U_{pd}(r_0, x) = \frac{U_p}{\varepsilon_{gpd}(r_0, x)}. \quad (14)$$

По представленному уравнению видно, что в модели пиротехнической системы учитываются плотности газовой смеси. В уравнении используются индексы: g обозначает газовую фазу, а pd относится к пороховой (твердой) фазе.

Пиротехнический состав, сформированный в виде уплотненного слоя порошка (packed bed), представляет собой спрессованную или упорядоченно размещенную смесь твердых частиц, включающую окислители, горючие компоненты и вспомогательные вещества. Уплотненный слой играет ключевую роль в управлении скоростью реакции и распределением энергии внутри пиротехнической системы.

$$\frac{d}{dx}((\varepsilon_z + \varepsilon_s(r_0, x))p_{zps}(r_0, x)\vec{U}_x) = R_d - R_s \quad (15)$$

Используя указанное уравнение [8], можно определить локальные энергии, которые описывают взаимодействие как с газовой, так и с твердой фазой в контексте пиротехнической системы. На основе этих уравнений формулируются итоговые выражения, которые характеризуют локальные энергии для пиротехнического состава, позволяя провести более глубокий анализ его термодинамических и кинетических свойств.

Локальная энергия играет ключевую роль в обеспечении безопасности пиротехнических изделий, включая системы, используемые для выстрелов в танках, где при выстреле выделяется пороховой газ, опасный для человека, поскольку она позволяет моделировать и контролировать термодинамические и кинетические процессы, снижая риски воздействия вредных газов на оператора и окружающих [9].

Для определения плотности газа на одну молекулу используется выражение:

$$\varepsilon_g = \frac{pM}{RT}. \quad (16)$$

Молекулярная масса газа $28,97$ г/моль = $0,02897$ кг/моль, температурные условия исследования составляют $T = 873$ К, 973 К, 1073 К, 1173 К. Согласно расчетным данным, плотность газа при всех рассматриваемых температурах составляет $\varepsilon_g = 0,0397$ кг/м³.

Импульс газа и скорость звука играют важную роль в анализе термодинамических процессов в пиротехнических системах. Скорость звука в идеальном газе определяется по формуле, зависящей от показателя адиабаты, который для воздуха составляет $\gamma = 1,4$. Эти параметры позволяют получить данные, необходимые для дальнейшего моделирования процессов, связанных с воздухом в пиротехнических устройствах.

Используя уравнение для скорости звука в идеальном газе:

$$v = \sqrt{\gamma RT / M}, \quad (17)$$

можно определить значение скорости звука в среде, моделируемой как идеальный газ.

Таблица 2. Динамические параметры пиротехнической среды

T, K	ε_g , кг/м ³	v, мм/с	p, кг·мм/с	U_g , дж/м ³	U'_g , кДж/м ³
873	0,0397	329,1	13,1	2161,96	54,5
973	0,0359	357,4	12,8	2295,62	63,9
1073	0,0326	384,3	12,5	2406,32	73,8
1173	0,0300	409,1	12,3	2510,32	83,7

В табл. 2 представлены значения плотности, скорости и давления газа в зависимости от температуры от 873 до 1173 K. Наблюдается уменьшение плотности газа с ростом температуры, сопровождающееся увеличением скорости и энергии газа. Эти данные важны для описания динамики и энергетического состояния пороховых газов в процессе их нейтрализации и служат основой для построения четырехмерной математической модели теплопередачи и массообмена.

Для расчета общей энергии (U_g) на единицу объема можно использовать следующую формулу для кинетической энергии идеального газа:

$$U_g = \frac{1}{2} \cdot \varepsilon_g \cdot v^2. \quad (18)$$

Пиротехнические составы имеют более высокую локальную энергию, чем общую, из-за высокой активности компонентов, участвующих в реакции, а также их способности быстро выделять большое количество тепла и газа. Это связано с тем, что такие составы содержат вещества, обеспечивающие интенсивные реакции горения или взрыва, что приводит к повышению локальной энергии в определенных зонах. Этот эффект необходим для достижения желаемых пиротехнических результатов, таких как яркие вспышки или мощные звуковые эффекты, но также требует тщательного контроля для предотвращения возможных рисков.

При температурах (873, 973, 1073 и 1173 K) плотность газа и импульс изменяются в зависимости от температуры, при этом скорость звука и плотность газа увеличиваются с ростом температуры, но импульс остается относительно стабильным, так как плотность газа также уменьшается

с увеличением температуры. На основе динамических расчетов для пиротехнического состава ($\text{NaNO}_3 + \text{Fe} + \text{C}_{\text{акт}}$) была построена четырехмерная математическая модель с использованием программы MATLAB.

4D-четырёхмерная математическая модель [10] для пиротехнического состава показывает зависимость температуры, плотности газа, скорости звука и энергии, позволяя прогнозировать поведение состава при различных условиях. Четырёхмерная модель позволяет комплексно анализировать взаимосвязи между ключевыми физико-химическими параметрами (температурой, плотностью газа, скоростью звука и энергией) в динамике, что необходимо для точного прогнозирования поведения пиротехнической смеси при различных условиях функционирования. По данным, представленным на рис. 2, четырехмерное моделирование показывает, что энергия при различных температурах влияет на характер движения, схожий с ламинарным потоком. Модель демонстрирует изменения скорости и поведения пиротехнического состава, что позволяет предсказать его динамику, включая процесс формирования пламени. Рисунок 2 также иллюстрирует как изменения температуры влияют на эффективность состава, что имеет важное значение для оптимизации его применения.

Модель термодинамического равновесия широко применяется при исследовании пиротехнических составов, особенно для анализа их поведения при высоких температурах, когда происходят интенсивные химические реакции и фазовые превращения, влияющие на эффективность и безопасность функционирования систем. Одним

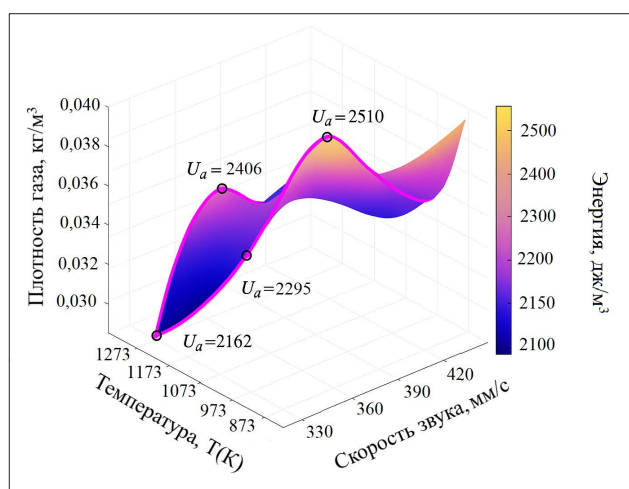


Рис. 2. 4D-четырёхмерная математическая модель по динамическим расчетам пиротехнического состава ($\text{NaNO}_3 + \text{Fe} + \text{C}_{\text{акт}}$).

из ключевых преимуществ термодинамического метода является его универсальность, позволяющая анализировать системы с произвольным химическим составом, опираясь исключительно на справочные данные о термохимических и термодинамических свойствах индивидуальных веществ – компонентов равновесия.

3.3 Механизмы термодинамических и каталитических процессов в пиротехнических составах для повышения безопасности

Термодинамические расчеты для химической реакции, указанной выше, были выполнены при стандартной температуре 298 К. Для определения изменений энтальпии (ΔH), энтропии (ΔS) и свободной энергии Гиббса (ΔG) использовались табличные значения термодинамических свойств веществ в стандартных условиях. Все расчеты были выполнены с помощью программы TERRA [11], которая позволяет точно вычислять термодинамические показатели и изменения для различных химических процессов.

Стандартная энтальпия образования пиротехнического состава – это тепловой эффект реакции образования одного моля данного пиротехнического материала из простых веществ, находящихся в стандартных состояниях (температура 298 К и давление 1 атм), выражающий суммарные энергетические изменения, сопровождающие процесс синтеза вещества.

Если энтальпия реакции составляет $\Delta H_{(p-r)} = 2830$ кДж, это означает, что реакция экзотермическая, выделяет тепло и будет самопроизвольной, так как энергия продуктов ниже энергии реагентов, что делает систему более стабильной, и в контексте пиротехнического состава указывает на значительное выделение энергии при реакции.

Изменение энтропии реакции $\Delta S_{(p-r)} = 0,6123$ кДж/(К·моль) указывает на рост степени беспорядка системы, что означает, что после реакции продукты имеют более высокую степень хаоса по сравнению с исходными веществами. Это также может свидетельствовать о переходе в состояние с большим количеством микросостояний, например, при образовании газов или других структурных изменений.

Согласно расчетам, выполненным в программе Terra, энергия Гиббса для данной реакции была определена как -3012,5 кДж. Отрицательное значение энергии Гиббса указывает на самопроизвольность реакции при стандартных условиях. Это свидетельствует о том, что процесс

сопровождается выделением тепла (экзотермическая реакция) и увеличением степени беспорядка в системе. Увеличение энтропии связано с образованием газообразных продуктов, таких как углекислый газ, что способствует повышению молекулярной подвижности и, как следствие, росту беспорядка в системе.

В ходе комплексных расчетов, включающих термодинамические, кинетические и динамические анализы, была подтверждена самопроизвольность реакции с выделением значительного количества тепла и образованием газообразных продуктов, таких как углекислый газ, угарный газ и оксид азота. Эти вещества могут оказывать серьезное влияние на условия, в которых находится экипаж, особенно в замкнутых пространствах, создавая риск отравления, кислородного голодания или других опасных эффектов, что требует особого внимания к системам вентиляции и безопасности при применении таких пиротехнических составов.

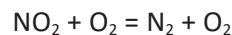
Состав пиротехнического комплекса включает добавление железа, которое выполняет функцию катализатора, ускоряя реакции горения и улучшая кинетические характеристики процесса. Железо способствует образованию искровых эффектов, что является важным аспектом в пиротехнических композициях. Помимо этого, добавление активированного угля способствует поглощению вредных газов, снижая их токсичность и повышая безопасность использования состава, за счет уменьшения воздействия токсичных продуктов горения.

Каталитический нейтрализатор эффективно работает только в определенном диапазоне состава выхлопных газов. Эффективность нейтрализатора снижается, если состав газа выходит за пределы этого диапазона [12]. Температура также является важным фактором, влияющим на эффективность каталитического нейтрализатора. При слишком низкой температуре эффективность нейтрализатора снижается. При слишком высокой температуре некоторые части нейтрализатора могут выйти из строя. Невозможно создать каталитический нейтрализатор с максимальной эффективностью для различных составов газов и при любой температуре [13]. Эффективность каталитических нейтрализаторов зависит от их конструкции и размеров, которые должны быть оптимизированы для конкретного двигателя и автомобиля. Небольшое изменение размера или конструкции может снизить их производительность. Качество топлива также в значительной степени влияет на работу каталитического нейтрализатора.

Впоследствии, по мере диффузии молекул выхлопных газов к стенке, происходит их адсорбция на поверхностях деталей. Как известно [14], силовые поля на поверхности не сбалансированы. Процесс горения топливовоздушной смеси начинается вблизи свечи зажигания. Выхлопные газы также попадают в зону, находящуюся в непосредственной близости от свечи зажигания, и распределяются по объему камеры сгорания. В результате концентрация молекул выхлопных газов в центре камеры сгорания становится высокой, а концентрация молекул в пристеночном слое – низкой. Разница в концентрации способствует диффузии молекул к стенкам деталей камеры сгорания. Некомпенсированное силовое поле обладает избыточной энергией и поглощает молекулы газа на поверхности после контакта с ними в течение некоторого времени. Некоторые молекулы покидают поверхность (явление десорбции). Их место занимают более новые. Устанавливается равновесие, при котором скорость адсорбции равна скорости десорбции. Адсорбция – это экзотермический процесс, подобный многим другим процессам образования новых соединений.

Процесс нейтрализации заключается в взаимодействии компонентов выбросов двигателя, таких как CO , NO_2 и CN , с поверхностью катализатора (Fe). Этот процесс включает обмен активными атомами, что приводит к нейтрализации токсичных газов. В результате образуются новые вещества, такие как CO_2 , N_2 и N_2O . Молекулы кислорода адсорбируются на поверхности катализатора, формируя связи «катализатор-кислород», которые ослабляют взаимодействия между атомами кислорода. Когда молекулы токсичных веществ (CO , NO_x , C_xH_y) приближаются к адсорбированному кислороду, происходит образование новых химических соединений. Учитывая катали-

затор в виде покрытия, полученного методом микродугового окисления, химические уравнения нейтрализации принимают следующий вид:



Состав пиротехнического комплекса включает железо и активированный уголь^у, которые значительно влияют на абсорбционные и диффузионные процессы в ходе реакции. Железо, являясь катализатором, ускоряет процесс горения и способствует образованию искровых эффектов, тогда как активированный уголь играет ключевую роль в поглощении вредных газов, таких как угарный газ и оксиды азота. В результате, этот состав минимизирует выделение токсичных продуктов горения, обеспечивая их эффективное поглощение в процессе реакции. Такое взаимодействие между компонентами не только повышает безопасность, но и снижает токсикологическое воздействие состава на экипаж боевых машин за счет уменьшения концентрации вредных газов и предотвращения их проникновения в замкнутое пространство. Эти выводы подтверждаются как химическими уравнениями реакции, так и визуальными данными, представленными на рисунках, что наглядно демонстрирует эффективность данного подхода.

Диффузия молекул газа на поверхности активированных материалов включает стадию адсорбции, которая усиливается при повышенных температурах пиротехнической реакции. Таким образом, предложенная композиция способствует не только стабилизации горения, но и снижению токсичности выделяемых газов, что зна-

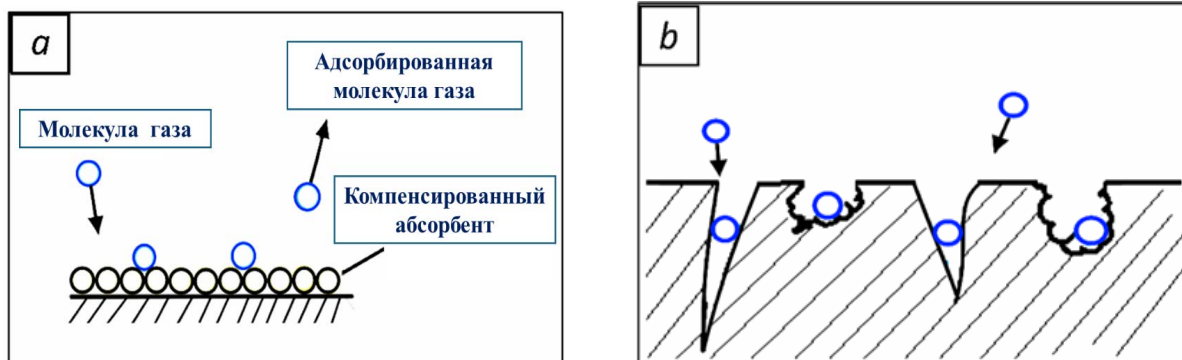


Рис. 3. Адсорбция и диффузия молекул газа на поверхности: (а) – адсорбция молекул газа на поверхности; (б) – диффузия молекул газа внутри пор и трещин на поверхности.

чительно повышает безопасность применения данного состава, особенно в замкнутых пространствах, таких как боевые машины. Эффективность работы состава подтверждается термодинамическими расчетами (энтальпией, энтропией, энергией Гиббса) и результатами кинетического моделирования, а снижение выбросов токсичных продуктов доказывается стехиометрическим анализом химических уравнений и экспериментальными данными.

В ходе работы пиротехнического состава одновременно с процессами адсорбции происходит десорбция – высвобождение молекул газа с поверхности активных материалов. Десорбция может усиливаться при повышении температуры, изменении давления или при насыщении адсорбционной поверхности. В условиях высоких температур пиротехнических реакций отдельные молекулы углекислого газа, оксидов азота и других соединений могут покидать поры активированного угля или металлосодержащих структур. Тем не менее, развитая микропористая структура угля и каталитические свойства железа способствуют удержанию части молекул или их участию в дальнейших химических преобразованиях.

Нейтрализация вредных газов осуществляется как за счет физического захвата молекул, так и за счет их химического превращения. На поверхности активированного угля могут происходить реакции окисления и восстановления, в результате которых угарный газ превращается в углекислый газ, а оксиды азота восстанавливаются до азота. Наличие железа ускоряет данные реакции благодаря своим каталитическим свойствам. В результате синергетического действия угля и железа достигается не только эффективное связывание вредных веществ, но и их последующая нейтрализация, что значительно снижает токсичность газовой среды и повышает экологическую безопасность применения пиротехнического комплекса.

Заключение

В ходе данного исследования был проведен комплексный анализ математического моделирования процесса нейтрализации пороховых газов в боевом отделении. Для определения кинетических параметров пиротехнического состава применена модель Беляжа-Зельдовича, что позволило рассчитать линейную скорость реакции и построить график зависимости активационной энергии от температуры. Полученные результаты

подтверждают соответствие пиротехнического состава уравнению Аррениуса, где повышение температуры приводит к увеличению активационной энергии.

Динамические расчеты включали разработку четырехмерной (4D) математической модели, учитывающей зависимости температуры, плотности и скорости газа. Это позволило детально описать процесс горения и нейтрализации пороховых газов, а также выявить ключевые параметры, влияющие на эффективность этого процесса. Модель пламени, полученная в результате расчетов, сыграла важную роль в понимании поведения газа при его сгорании и нейтрализации. Рассмотрено влияние активированного угля и железа на процессы адсорбции и десорбции молекул газа. Эти компоненты помогают поглощать вредные продукты горения, такие как углекислый газ и оксид азота, что снижает токсичность и улучшает безопасность в боевых условиях. Процесс нейтрализации пороховых газов через абсорбцию и адсорбцию молекул на поверхности активированного угля и железа имеет решающее значение для защиты экипажа от воздействия токсичных веществ.

Термодинамические расчеты, включающие данные об энтальпии и энтропии реакции, подтверждают высокую энергетическую эффективность состава и его способность снижать уровень токсичности. Таким образом, использование активированного угля и железа в составе пиротехнических материалов для нейтрализации пороховых газов оказывает значительное влияние на безопасность боевых машин и эффективность их работы в условиях ограниченной вентиляции.

Результаты исследования открывают новые перспективы для разработки более безопасных и эффективных систем нейтрализации пороховых газов, что имеет важное значение для улучшения защиты экипажа в боевых условиях. Применение предложенной модели в практических системах может значительно повысить безопасность эксплуатации военной техники и снизить риски для здоровья персонала.

Список литературы (ГОСТ)

- [1]. Almetwally A. A., Bin-Jumah M., Allam A. A. Ambient air pollution and its influence on human health and welfare: An overview // Environ. Sci. Pollut. Res. 2020. Vol. 27. P. 24815–24830.
- [2]. Порядок использования для защиты личного состава вооружения и техники // Лицен-

- зир. учеб. курсы пов. квалиф. спец. 2010. URL: <https://voen-pravo.ru/komandirskaya-podgotovka/konspekty/rkhhb-zashchita/4007/>
- [3]. Mock P. ICCT's comments and technical recommendations on future EURO 7/VII emission standards. Berlin: International Council on Clean Transportation, 2021.
- [4]. Rodriguez F., Bernard Y., Dornoff J., Mock P. Recommendations for post-Euro 6 standards for light-duty vehicles in the European Union. Berlin: International Council on Clean Transportation Europe, 2019. URL: <https://www.theicct.org/publications/recommendations-post-euro-6-eu>
- [5]. Зельдович Я. Б. К теории горения порохов и взрывчатых веществ // Журн. эксперим. и теорет. физики. 1942. Т. 12. С. 498–524. (В кн.: Зельдович Я. Б. Избранные труды. Химическая физика и гидродинамика. М.: Наука, 1984. 374 с.).
- [6]. Зуев В. В. Определение константы скорости иодирования анилина: Метод. указания. СПб: НИУ ИТМО, 2014. 50 с.
- [7]. Леонов Г. Н. Температура поверхности горения НЦ-порохов как определяющий фактор линейной скорости горения при высоких давлениях // Электрон. физ.-техн. журн. 2007. Т. 2. С. 55–62.
- [8]. Немцев М. Ю. Численное моделирование процессов горения пористых энергетических материалов в широком диапазоне объемной доли: Дис. ... канд. физ.-мат. наук. М., 2023. С. 26–30.
- [9]. Menshov I. S., Nemtsev M. Y., Semenov I. V. Numerical modeling of wave processes accompanying combustion of inhomogeneously distributed composite propellant // Comput. Math. Math. Phys. 2019. Vol. 59. No. 9. P. 1528–1541.
- [10]. Кирюшкина М. И., Поляков Е. П. Математическая модель процесса горения пиротехнического топлива пористой структуры при различных способах отвода продуктов газогенерации из зоны горения // Изв. ТүлГУ. Техн. науки. Сер. Термогазодинамика. Тепломассообмен. 2014. Вып. 12. Ч. 1.
- [11]. Трусов Б. Г. Программная система ТЕРРА для моделирования фазовых и химических равновесий в плазмохимических системах // Вестн. МГТУ им. Н. Э. Баумана. 2011. Вып. 2. С. 1–4.
- [12]. Katara P. Review paper on catalytic converter for automobile exhaust emission // Int. J. Innov. Res. Sci. Eng. Technol. 2016. Vol. 5. Issue 9.
- [13]. Khurana S., Rayat K. K., Tadepalli S., Mishra Sh. Review paper on catalytic converter for automotive exhaust emission // Int. J. Inf. Comput. Sci. 2018. Vol. 5. No. 6. P. 144–154.
- [14]. Abhinesh, Arun Kumar, Dinesh Kumar. Minimization of engine emission by using non-noble metal based catalytic converter // Int. J. Curr. Res. 2014. Vol. 4. Issue 11. P. 2663–2468.

References

- [1]. A.A. Almetwally, M. Bin-Jumah, A.A. Allam. Ambient air pollution and its influence on human health and welfare: An overview, Environ. Sci. Pollut. Res. 27 (2020) 24815–24830. <https://doi.org/10.1007/s11356-020-09042-2>.
- [2]. Procedure for use in the protection of personnel, weapons, and equipment, Licensed advanced training courses for specialists (2010). <https://voen-pravo.ru/komandirskaya-podgotovka/konspekty/rkhhb-zashchita/4007/>.
- [3]. P. Mock. ICCT's comments and technical recommendations on future EURO 7/VII emission standards, Int. Counc. Clean Transp., Berlin (2021).
- [4]. F. Rodriguez, Y. Bernard, J. Dornoff, et al. Recommendations for post-Euro 6 standards for light-duty vehicles in the European Union, Int. Counc. Clean Transp. Europe, Berlin (2019). <https://www.theicct.org/publications/recommendations-post-euro-6-eu>.
- [5]. Ya.B. Zeldovich. On the theory of propellant and explosive combustion, Zh. Exp. Teor. Fiz. 12 (1942) 498–524 (in Russian). [Also in: Ya.B. Zeldovich, Selected works. Chemical physics and hydrodynamics, Nauka, Moscow, 1984, 374 p.].
- [6]. V.V. Zuev. Determination of the rate constant of aniline iodination: Methodological guidelines, ITMO Univ., St. Petersburg (2014) 50 p. (in Russian).
- [7]. G.N. Leonov. Burning surface temperature of nitrocellulose propellants as the determining factor of linear burning rate at high pressures, Electron. Phys.-Tech. J. 2 (2007) 55–62 p. (in Russian).
- [8]. M.Y. Nemtsev. Numerical modeling of the combustion processes of porous energy materials in a wide range of volume fraction, Diss. Cand. Phys.-Math. Sci., Moscow (2023) 26–30 p. (in Russian).
- [9]. I.S. Menshov, M.Y. Nemtsev, I.V. Semenov. Numerical modeling of wave processes accompanying combustion of inhomogeneously distributed composite propellant, Comput. Math. Math. Phys. 59 (2019) 1528–1541. <https://doi.org/10.1134/S0965542519090148>.
- [10]. M.I. Kiryushkina, E.P. Polyakov. Mathematical model of the combustion process of pyrotechnic

- fuel of porous structure with various methods of removal of gas-generation products from the combustion zone, *Izv. TulsU. Tech. Sci. Ser. Thermogasodyn. Heat Mass Transfer* 12 (2014) 1 p. (in Russian).
- [11]. B.G. Trusov. The TERRA software system for modeling phase and chemical equilibria in plasma-chemical systems, *Vestn. Bauman MSTU* 2 (2011) 1–4 p. (in Russian).
- [12]. P. Katara. Review paper on catalytic converter for automobile exhaust emission, *Int. J. Innov. Res. Sci. Eng. Technol.* 5 (2016) 9. <https://doi.org/10.4028/p-lpSwm2>.
- [13]. S. Khurana, K.K. Rayat, S. Tadeipalli, et al. Review paper on catalytic converter for automotive exhaust emission, *Int. J. Inf. Comput. Sci.* 5 (2018) 144–154. <https://www.ijics.com/volume5-issue6-2018.php>.
- [14]. Abhinesh, Arun Kumar, D. Kumar. Minimization of engine emission by using non-noble metal based catalytic converter, *Int. J. Curr. Res.* 4 (2014) 2663–2468. <https://www.acadpubl.eu/jsi/2018-119-7/articles/7b/37.pdf>.

Сведения об авторах

Е.А. Мұсатай – докторант 2-го курса, КазНУ им. аль-Фараби, кафедра химической физики и материаловедения, Алматы, Казахстан
E-mail: esenshon104@mail.ru
ORCID: 0000-0002-3735-0886

М.И. Тулепов – кандидат химических наук, ассоциированный профессор кафедры химической физики и материаловедения, факультет химии и химической технологии, Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан
E-mail: marat.tulepov@kaznu.kz
ORCID: 0000-0002-6449-9571

Mathematical Model of Heat Transfer and Mass Transfer During Neutralization of Powder Gases in the Fighting Compartment of Armored Vehicles

Y.A. Mussatay*, M.I. Tulepov

Al-Farabi Kazakh National University, al-Farabi ave., 71, Almaty, Kazakhstan

ABSTRACT

The article models the neutralization of powder gases in the fighting compartment using a pyrotechnic composition (sodium nitrate, powdered iron, activated carbon). Thermochemical pyrotechnic systems are characterized by a high reaction rate and intense gas and heat generation. Due to these properties, they are used in the reservation of machinery to create barriers that effectively separate powder gases and protect internal components from thermal and mechanical stress. The key factors of chemical neutralization efficiency are analyzed: the kinetics of oxidant decomposition, oxidation of the metal component, and thermal decomposition of carbon. A mathematical model of heat transfer, mass transfer, and chemical transformations in the interaction of gases with pyromass is proposed. Numerical analysis shows a significant decrease in concentrations of nitrogen and carbon oxides, which improves the sanitary and hygienic conditions of the crew. The developed algorithms are applicable to the design of air purification systems in armored vehicles and the creation of new pyrotechnic neutralizers.

Keywords: armored vehicles, kinetics of decomposition, mass transfer, mathematical modeling, 4D is a four-dimensional mathematical model.

Бронетехниканың жауынгерлік бөлімінде оқ газдарын бейтараптандыру кезінде жылу беру мен масса алмасудың математикалық моделі

Е.А. Мұсатай*, М.И. Түлепов

Әл-Фараби атындағы ҚазҰУ, әл-Фараби д., 71, Алматы, Қазақстан

АҢДАТПА

Мақалада пиротехникалық құрамды (натрий нитраты, ұнтақ темір, белсендірілген көмір) қолдана отырып, жауынгерлік бөлімдегі оқ газдарын бейтараптандыру үшін модель ұсынылды. Пиротехникалық типтегі термохимиялық жүйелер жоғары реакция жылдамдығымен және қарқынды газ және жылу шығарумен сипатталады. Осы қасиеттердің арқасында олар ұнтақ газдарын тиімді бөліп шығаратын және ішкі компоненттерді термиялық және механикалық әсерден қорғайтын тосқауылдар жасау үшін техниканы брондауда қолданылады. Химиялық бейтараптандыру тиімділігінің негізгі факторлары талданды: тотықтырғыштың ыдырау кинетикасы, металл компонентінің тотығуы және көміртектің термиялық ыдырауы. Газдардың пиромассамен әрекеттесуі кезінде жылу берудің, масса алмасудың және химиялық түрленудің математикалық моделі ұсынылған. Сандық талдау азот пен көміртегі оксидтерінің концентрациясының айтарлықтай төмендеуін көрсетеді, бұл экипаждың санитарлық-гигиеналық жағдайын жақсартады. Әзірленген алгоритмдер бронды машиналардағы ауаны тазарту жүйелерін жобалауға және жаңа пиротехникалық түрлендіргіштерді жасауға қолданылады.

Түйін сөздер: бронды машиналар, ыдырау кинетикасы, масса алмасу, математикалық модельдеу, 4D-төртөлшемді математикалық модель.