

СОПРЯЖЕННАЯ МОДЕЛЬ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ
И ГОРЕНИЯ ЧАСТИЦЫ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО
МАТЕРИАЛА С УЧЕТОМ РЕАКЦИЙ В ГАЗОВОЙ
И КОНДЕНСИРОВАННОЙ ФАЗАХ

**В. С. Посвянский, С. М. Фролов, Б. С. Ермолаев,
А. А. Беляев**

ИХФ РАН
г. Москва, Россия

Горение пороха — сложный физико-химический процесс. Для априорного расчета скорости горения даже в простейших стационарных условиях требуется обширная информация по механизмам и кинетике химических реакций в газовой и конденсированной фазах и физическим процессам вблизи и на границе раздела фаз. Поскольку такая информация, как правило, отсутствует, в настоящее время специалисты, занятые исследованиями в области внутренней баллистики и разработкой разнообразных пороховых устройств, используют феноменологические модели горения. Однако имеются задачи, где феноменологического подхода недостаточно. Например, к таким задачам относится начальная фаза выстрела, включающая воспламенение и начало горения пороха: экспериментальные задержки зажигания порохового заряда вдвое превышают расчетные значения.

Цель проекта, в рамках которого выполняется данная работа, — создать адекватную теоретическую и компьютерную модель, которая включала бы все необходимые элементы процесса воспламенения и горения пороха.

На первом этапе исследований планировалось разработать физико-математическую модель и опробовать ее на упрощенном демонстрационном примере. Рассматривали сферическую частицу модельного твердого энергетического материала, которая в начальный момент времени помещена в неподвижный, нагретый до высокой температуры инертный газ. В модели учитывали многокомпонент-

ную диффузию, теплопроводность, химические реакции и фазовые переходы в рамках общего подхода, изложенного в книге [1].

Энергетический материал — гомогенная смесь N_L компонентов. Считали, что свойства материала в каждой точке по радиальной координате определяются температурой T_l и массовыми концентрациями компонентов $Y_{l,i}$. В приповерхностном слое частицы по мере нагрева начинаются химические реакции. Продукты этих реакций включены в число N_L компонентов (в начальном состоянии их концентрации, как правило, равны нулю). Если продукт реакции — газ, то предполагается, что он удерживается материалом до подхода поверхности частицы. Поверхность частицы рассматривается как подвижная граница раздела фаз, на которой все N_L компонентов пороха могут переходить в газовую фазу (если будет достигнута соответствующая температура) благодаря сублимации (испарению) конденсированных компонентов. Одновременно вместе с ними твердую фазу покидают газообразные продукты, удерживаемые материалом. На границе раздела фаз потоки тепла и массы компонентов, а также температура сохраняются непрерывными.

В химических реакциях, проходящих в газовой фазе, участвуют N_g газообразных компонентов. Считали, что свойства газовой смеси в каждой точке по радиальной координате определяются температурой T_g и массовыми концентрациями компонентов $Y_{g,i}$. Давление распределено однородно по расчетной области и задается как функция времени. Оно связано с остальными характеристиками газовой фазы уравнением состояния.

Уравнения модели представлены в виде системы нестационарных дифференциальных уравнений в частных производных. Для решения задачи использовали неявную разностную схему с матричной прогонкой и подвижной адаптивной расчетной сеткой. В качестве демонстрационного примера рассмотрели задачу о зажигании и горении частицы модельного топлива радиусом 1 мм в атмосфере азота с температурой 1500 К при давлении 1 атм. В качестве модельного топлива взяли этилацетат $C_4H_8O_2$. Предположили, что это вещество может разлагаться и в газовой и в конденсированной фазах в ходе необратимой одноступенчатой экзотермической реакции с образованием двух продуктов:



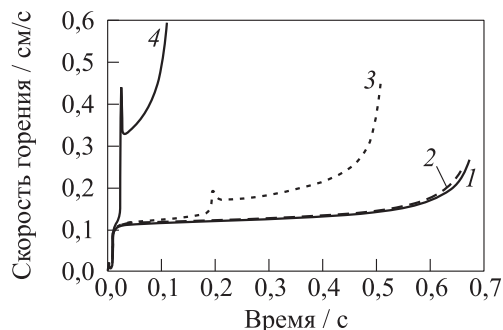


Рис. 1 Расчетные зависимости скорости горения сферической частицы модельного топлива от времени без учета реакции разложения в конденсированной фазе (1) и с ее учетом: 2 — $E_k = 20$ ккал/моль, 3 — 19, 4 — $E_k = 18$ ккал/моль. Давление азота $p = 1$ атм

Выбор этого вещества был связан лишь с тем, что для него и его продуктов в литературе имелись все необходимые теплофизические и термохимические данные. Для конденсированной и газовой фаз значения энергии активации этой реакции были выбраны разными ($E_k = 20$ ккал/моль и $E_g = 40$ ккал/моль соответственно). Согласно оценке, проведенной по формуле Зельдовича–Беляева, в отсутствие химического превращения в конденсированной фазе скорость горения при давлении 1 атм равна 1,08 мм/с.

Результаты расчетов при давлении азота $p = 1$ атм для двух вариантов (с учетом и без учета реакции в конденсированной фазе) приведены на рис. 1. Видно, что при $E_k = 20$ ккал/моль реакция в конденсированной фазе оказывает слабое влияние на скорость горения (кривые 1 и 2). После зажигания частица топлива горит с медленно возрастающей скоростью u_0 , которая близка к расчетной величине. Однако в конце горения скорость резко возрастает, демонстрируя известный эффект, когда размер частицы становится сравнимым с толщиной прогретого слоя. При уменьшении E_k от 20 до 19 ккал/моль в расчете наблюдали ярко выраженную вспышку реакции в конденсированной фазе (пик на кривой 3 в момент времени 0,19 с) с последующим выходом на режим горения частицы с новым уровнем скорости. При уменьшении E_k до 18 ккал/моль (кривая 4) вспышка реакции в конденсированной фазе происходила

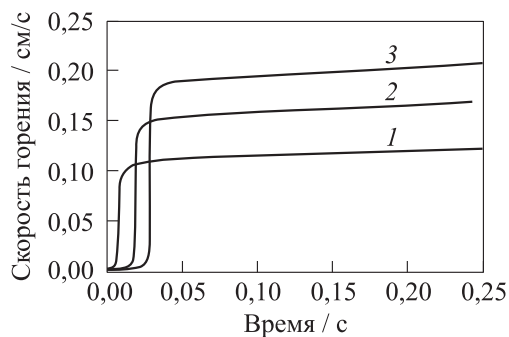


Рис. 2 Расчетные зависимости скорости горения сферической частицы модельного топлива ($E_k = 20$ ккал/моль) от времени при разных давлениях азота: 1 — $p = 1$ атм; 2 — 2; 3 — $p = 3$ атм

практически сразу за вспышкой реакции в газовой фазе, и частица сгорала почти в 7 раз быстрее, чем в случае, соответствующем кривой 1.

На рис. 2 показано влияние начального давления на скорость горения частицы u при $E_k = 20$ ккал/моль. Применение закона скорости горения $u = u_0 r^\nu$ к данным рис. 2 дает значение показателя степени при давлении $\nu \approx 0,45$.

Таким образом, разработана физико-математическая модель воспламенения и горения сферической частицы пороха. Модель опробована на упрощенном демонстрационном примере. Получены физически ясные результаты. На следующем этапе исследований планируется применить эту модель к твердому топливу, приближающемуся по своему составу к двухосновному пороху.

Работа выполнена в рамках Программы РАН «Разработка пакета прикладных программ проектного предсказательного моделирования рабочих процессов в импульсных тепловых машинах и устройствах».

Литература

1. Вильямс Ф. А. Теория горения. — М.: Наука, 1971.