

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
НЕСТАЦИОНАРНЫХ ЭФФЕКТОВ ГОРЕНИЯ  
СФЕРИЧЕСКОГО ЗЕРНА НИТРОЭФИРНОГО  
ПОРОХА С ГЛОБАЛЬНОЙ КИНЕТИКОЙ  
ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

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

ИХФ РАН  
г. Москва, Россия

Горение пороха — сложнейший физико-химический процесс, и его численное моделирование в настоящее время невозможно без значительных упрощений. Тем не менее, в последние годы, благодаря ощутимому прогрессу исследований, были разработаны новые подходы и модели (см., например, обзор [1]), которые позволяют с хорошей точностью воспроизводить расчетным путем основные свойства волны горения в порохе и разнообразные количественные характеристики, наблюдаемые в эксперименте. Это открывает возможности использовать соответствующие подходы и, прежде всего, модели с глобальной кинетикой, которые опираются на упрощенные механизмы химических превращений, в задачах многомерного моделирования внутрикамерных процессов.

Нами разработана своя версия модели с глобальной кинетикой для задачи о воспламенении и горении сферического порохового зерна. В качестве объекта выбран бутантриол тринитрат (БТТН) — жидкий нитроэфир, который по характеристикам горения близок к нитроглицерину. Опираясь на имеющуюся информацию относительно свойств БТТН и следуя рекомендациям, изложенным в [1], относительно механизмов химических превращений, нами подобрана упрощенная схема реакций и входные параметры модели и проведены расчеты, которые показали хорошее согласие

между численным моделированием и экспериментом по основным характеристикам стационарного горения. Затем была проведена серия расчетов по горению сферического зерна БТТН при давлении, изменяющемся во времени по заданному закону. Результаты расчетов в единой постановке воспроизводят нестационарные эффекты, которые наблюдаются при горении пороха в ракетных двигателях на твердом топливе и ствольных установках. К их числу относятся переходные процессы установления стационарного горения при зажигании пороха и при скачкообразных изменениях давления с одного уровня на другой, погасание пороха при сбросе давления, а также увеличение скорости горения вследствие дивергенции потоков тепла и массы по мере уменьшения диаметра зерна и при прогрессивно возрастающем давлении.

Ниже приводится краткая информация о модели и результатах расчетов.

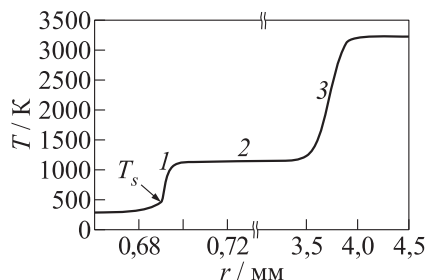
Бутантриол тринитрат  $C_4H_7N_3O_9$ , выбранный в качестве объекта исследования, — это жидкий нитроэфир с плотностью  $1,52 \text{ г/см}^3$ , энтальпией образования  $-389 \text{ кДж/моль}$  и расчетной температурой горения  $3303 \text{ К}$ . Продукты горения имеют молекулярный вес  $26,0 \text{ г/моль}$  и состав (в мольных %):  $16\% \text{ N}_2$ ,  $31\% \text{ H}_2\text{O}$ ,  $25\% \text{ CO}$ ,  $19\% \text{ CO}_2$  и  $5\% \text{ H}_2$ . Модель разработана в одномерном приближении в рамках классического подхода, изложенного в [2], применительно к задаче о воспламенении и горении сферического зерна БТТН, помещенного в неподвижный инертный газ с заданной температурой. Модель включает систему нестационарных дифференциальных уравнений в частных производных, которые описывают многокомпонентную диффузию, теплопроводность и химические реакции отдельно для конденсированной и газовой фаз. Уравнения дополнены условиями «сшивки» решения на поверхности зерна и граничными условиями на большом расстоянии от зерна. Для решения задачи использована неявная разностная схема с матричной прогонкой и подвижной адаптивной расчетной сеткой, сгущающейся вблизи поверхности зерна, радиус которого уменьшается по мере горения. Ранее модель была опробована в [3] на более простом объекте.

Химическое превращение БТТН протекает в три стадии, включая эндотермическую стадию разложения нитроэфира с образованием  $\text{NO}_2$  и органических молекул (в нашей схеме — альдегидов), а

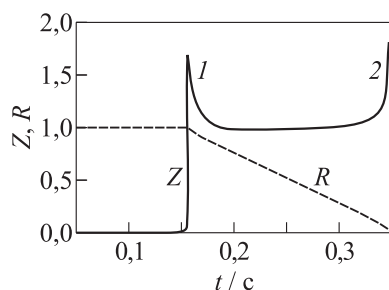
также две экзотермические стадии: окисление альдегидов с участием  $\text{NO}_2$  и  $\text{NO}$  и завершающие реакции, в ходе которых происходит восстановление  $\text{NO}$  до  $\text{N}_2$ . Глобальный механизм этого превращения включает 7 брутто-реакций аррениусовского типа, в которых участвуют 9 промежуточных и конечных продуктов. Разложение БТГН и частичное превращение альдегидов под действием  $\text{NO}_2$  начинается в к-фазе вблизи поверхности зерна. Глубина этих реакций сравнительно невелика, и предполагается, что образующиеся продукты (газы) удерживаются жидкой фазой до тех пор, пока жидкость не выйдет на поверхность частицы, испарится и перейдет вместе с удерживаемыми реагентами в газовую фазу, где химическое превращение продолжается.

Кинетические константы брутто-реакций выбраны с учетом литературных данных и предварительных расчетов. В ходе этих расчетов достигнуто приемлемое согласие между результатами моделирования и экспериментом по основным характеристикам стационарного горения БТГН. В качестве примера приведем результаты расчета для давления 20 атм (в скобках даны экспериментальные значения, взятые из [1]): скорость горения 4,7 (4,2) мм/с с показателем степени по давлению 0,9 (0,86) и температурным коэффициентом  $5,2(4,5) \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$ , температура поверхности пороха 500 (около 600) К, температура в «темной зоне» 1200(1500) К и ширина «темной зоны» 3 (4) мм. На рис. 1 показан расчетный профиль температуры в волне горения.

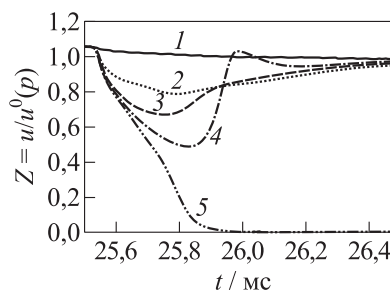
Хотя путем уточнений кинетических констант можно добиться лучшего согласия по указанным характеристикам, мы этого не делали и перешли к основной части исследования — анализу неста-



**Рис. 1** Расчетный профиль температуры в волне горения в сферическом зерне БТГН начального радиуса  $r_0 = 1$  мм при постоянном давлении  $p = 20$  атм:  $T_s$  — температура поверхности зерна; 1 — первичное пламя; 2 — «темная зона», 3 — вторичное пламя



**Рис. 2** Расчетные зависимости скорости горения ( $Z = u/u^0$ ) и радиуса сферического зерна ( $R = r/r_0$ ) модельного пороха БТГН от времени при постоянном давлении  $p = 20$  атм и начальном радиусе зерна  $r_0 = 1$  мм: 1 — переходная фаза после зажигания пороха; 2 — фаза ускорения горения при малом радиусе зерна



**Рис. 3** Отклик горения сферического порохового зерна БТГН начального радиуса 1 мм на сброс давления от 100 до 40 атм при разных характерных временах спада давления: 1 — 1 мс; 2 — 0,2; 3 — 0,15; 4 — 0,14; 5 — 0,135 мс

ционарных режимов горения порохового зерна. Нестационарные явления при горении пороха хорошо известны. Их изучению посвящены многочисленные публикации (см., например, монографии [4–6]). В нестационарных режимах порох горит со скоростью, которая может отличаться от стационарного значения  $u^0(p)$  по разным причинам. Для порохового зерна, горящего при постоянном давлении, расчет дает два нестационарных эффекта (рис. 2): (1) переходный процесс установления стационарного режима горения после зажигания пороха и (2) увеличение скорости горения зерна по мере того, как его диаметр уменьшается и становится исчезающе малым.

Расчеты, проведенные при давлении, которое изменялось в процессе горения по некоторому заданному закону, выявили, в дополнение к перечисленным выше, еще три нестационарных эффекта: (3) переходный процесс установления стационарного режима горения при быстром увеличении давления с одного уровня до другого; (4) аналогичный процесс (вплоть до погасания пороха) при сбросе давления с одного уровня до другого и (5) увеличение скорости го-

рения пороха относительно  $u^0(p)$  при прогрессивно возрастающем давлении (такой характер изменения давления имеет место при выстреле в ствольной установке).

Нестационарные режимы горения анализировали с помощью функции отклика  $Z(t) = u(t)/u^0(p)$ , которую вычисляли как отношение мгновенной скорости горения к стационарной скорости, являющейся известной функцией давления. На рис. 3 представлены примеры зависимостей функции отклика горения от времени для сферического порохового зерна начального радиуса 1 мм при сбросе давления от 100 до 40 атм с характерным временем от 1 до 0,135 мс. Видно, что быстрый сброс давления приводит к погасанию пороха.

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

## Литература

1. Beckstead, M. W., K. Puduppakkam, P. Thakre, and V. Yang. 2007. Modeling of combustion and ignition of solid-propellant ingredients. *Progr. Energy Combust. Sci.* 33:497–551.
2. Вильямс Ф. А. Теория горения. — М.: Наука, 1971.
3. Посвянский В. С., Фролов С. М., Ермолаев Б. С., Беляев А. А. Сопряженная модель воспламенения и горения частицы энергетического материала с учетом реакций в газовой и конденсированной фазах // Горение и взрыв / Под общ. ред. С. М. Фролова. — М.: ТОРУС ПРЕСС, 2009. Вып. 2. С. 58–61.
4. Новожилов Б. В. Нестационарное горение твердых ракетных топлив. — М.: Наука, 1973.
5. Зельдович Я. Б., Лейпунский О. И., Либрович В. Б. Теория нестационарного горения пороха. — М.: Наука, 1975.
6. Ассовский И. Г. Физика горения и внутренняя баллистика. — М.: Наука, 2005.