

## СРОЧНОЕ СООБЩЕНИЕ

УДК 536.46

## ТРЕХМЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ПРОЦЕССА ГОРЕНИЯ ГЕТЕРОГЕННЫХ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СИСТЕМ

О. Г. Глотов

Институт химической кинетики и горения СО РАН, 630090 Новосибирск, glotov@ns.kinetics.nsc.ru

Описан подход, включающий: (1) построение модели геометрической структуры в виде неплотной упаковки сферических частиц разных сортов и размеров, размещенных в гомогенной матрице; (2) представление структуры в виде совокупности кубических ячеек — клеток, обладающих заданным набором свойств. Расчеты распространения волны горения проведены для модельной системы с поверхностью раздела «твердое вещество — газообразные продукты», все компоненты которой способны к самостоятельному горению. Использован метод клеточных автоматов. Время сгорания клетки определяется индивидуальной скоростью горения вещества, заполняющего клетку, и текущим окружением клетки. Вследствие различия локальных скоростей горения поверхность горения неплоская, что приводит к увеличению скорости горения по сравнению с гомогенной эстафетной моделью.

Ключевые слова: гетерогенная система, геометрическая структура, упаковка сферических частиц, скорость горения, клеточный автомат, рельеф поверхности горения.

Конденсированные горючие гетерогенные системы (ГС) суть смеси компонентов, играющих роль горючего, окислителя, связующего или иные. ГС чрезвычайно разнообразны по функциональному назначению, компонентному и гранулометрическому составу [1]. В большинстве случаев одной из важнейших характеристик является скорость горения, поскольку она определяет темп реализуемых физико-химических превращений ГС. Соответственно математическое моделирование, как средство прогнозирования, обычно нацелено на определение скорости горения в зависимости от параметров ГС и условий горения и на выявление влияния скорости горения на другие характеристики горения. В моделировании наибольшее распространение получил тепловой подход, основанный на описании взаимосвязи скорости горения и скорости тепловыделения химических реакций [2, 3]. Также типично использование для гетерогенных систем гомогенного приближения, несмотря на ясное понимание того, что многие важные аспекты процесса горения в значительной мере зависят от структуры ГС [2–4]. Например, для смесового ракет-

ного топлива (типичный случай ГС с поверхностью горения, разделяющей конденсированную и газовую фазы) характерны явления агломерации и диспергирования, которые неоднородны и дискретны по физической сути. В последние десятилетия появляются работы, в которых предпринимаются попытки описать трехмерную структуру ГС и распространение волны горения в этой структуре [5–7]. Такие модели требуют значительных вычислительных ресурсов и зачастую реализуются на суперкомпьютерах [6].

В данной работе представлен подход, включающий упрощенное дискретное трехмерное описание геометрической структуры ГС и макрокинетическое описание ключевых процессов в конденсированной фазе, обеспечивающих распространение волны горения. Для описания структуры используется сравнительно небольшое количество кубических ячеек, что позволяет решать задачу на обычном персональном компьютере, но при этом учитывать физические проявления гетерогенности, в частности обусловленные неплоской формой поверхности горения. Полуэмпирическое

описание распространения волны горения с использованием локальных скоростей горения позволяет вычислять макроскопическую скорость горения ГС «в среднем». Разбиение ГС на ячейки позволяет рассматривать дискретные пространственно-локализованные процессы (агломерация, диспергирование) и концептуально соответствует методу конечных элементов, что дает основу для последующего усовершенствования описания процессов внутри ячеек. Кроме того, имеется принципиальная возможность построения иерархии «вложенных» моделей путем рассмотрения внутри ячейки моделей с иными физическими масштабами пространства и времени.

**Моделирование структуры.** Определим представительный кубический объем горючей смеси (ПКОГС) как минимальный объем вещества, в котором присутствуют частицы всех сортов и размеров в количестве, соответствующем массовым долям компонентов в ГС. В ПКОГС самая «редко встречающаяся» частица (обычно она же самая крупная) находится в единственном экземпляре, т. е. ПКОГС соответствует объему, приходящемуся на самую редкостную частицу. Для заданной гетерогенной системы всегда можно вычислить параметры ПКОГС — его размер и массу, а также количество содержащихся в нем частиц каждого сорта и размера.

Следующая стадия моделирования структуры — частичная гомогенизация. Частицы мельче определенного заданного размера  $D_{homo}$  будем рассматривать как составляющие некоторой гомогенной матрицы, в которой размещены частицы с  $D > D_{homo}$ . Размер гомогенизации  $D_{homo}$  следует выбирать с учетом характерных масштабов задачи, таких как толщина прогретого слоя, длина пути диффузии реагентов и т. п. Разумные значения  $D_{homo}$  имеют порядок десятков микронов. Например, для ГС на основе перхлората аммония предположение о гомогенности считается справедливым, если размер частиц порядка 10 мкм [4]. Задав значение  $D_{homo}$ , можно рассчитать компонентный состав гомогенизированной части ГС — матрицы, а также модифицированные штучные количества частиц гетерогенных компонентов в ПКОГС.

На третьей стадии моделирования решается задача размещения полученного набора частиц различных сортов и размеров в кубе ПКОГС. Частицы считаются твердыми сфера-

ми, на гранях куба выполняются условия периодичности. (Если часть сферы пересекает грань куба и выходит за его пределы, то соответствующий сферический сегмент появляется на противоположной грани, входя в куб извне.) Отметим, что в ряде работ (например, [6, 7]) эта задача решена применительно к структуре ГС. Поскольку вследствие частичной гомогенизации упаковка шаров «неплотная» (типично шары занимают около половины объема ПКОГС), мы используем собственные упрощенные алгоритмы, сочетающие генерацию случайных координат центра очередного вставляемого шара и раздвигание уже размещенных шаров. В результате решения задачи структура ГС описывается таблицей, содержащей номер, сорт, диаметр и координаты центра каждого шара в ПКОГС. Пространство между шарами заполнено гомогенизированной матрицей.

Финальной стадией моделирования структуры является представление построенной упаковки в виде клеточного пространства — трехмерного массива размерности  $N \times N \times N$ , состоящего из структурных элементов в форме кубических ячеек с размером  $a = A/N$ , где  $A$  — размер ребра куба ПКОГС. В соответствии с терминологией клеточных автоматов [8] эти структурные элементы будем называть клетками. Шары в клеточном пространстве представляют собой ступенчатые области, составленные из контактирующих кубиков-клеток, заполненных соответствующим веществом (рис. 1). Очевидно, что точность такого представления структуры

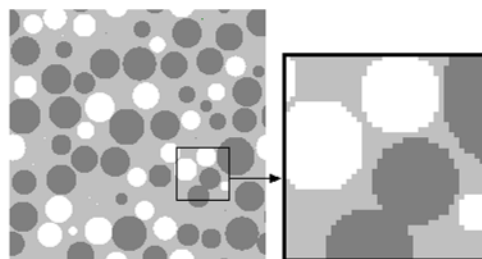


Рис. 1. Произвольное сечение ПКОГС в клеточном представлении при  $N = 200$ :

«шары» двух сортов (темные и светлые) размещены в гомогенной матрице (серый цвет); в клеточном пространстве «шары» сложены из кубических клеток, которые в сечении представлены квадратами (границы клеток не изображаются); справа — увеличенный фрагмент сечения

определяется размером клеток  $a$ . На практике размерность клеточного пространства  $N$  выбирается в зависимости от производительности компьютера.

**Моделирование распространения волны горения** в построенной структуре проводили методом клеточных автоматов посредством задания «правил поведения» клеток. Еще в 1994 г. было указано (см. обзор [9]) на перспективность применения метода клеточных автоматов в физике горения и взрыва. В настоящее время исследователи все чаще обращаются к дискретным моделям, в том числе клеточным автоматам, которые позволяют с единых позиций описать поведение различных систем там, где континуальные подходы испытывают трудности [10]. Известно [11] применение клеточных автоматов для моделирования распространения волны горения по безгазовой системе, состоящей из горючих частиц-клеток, распределенных в инертной матрице, путем эстафетной передачи горения от одной горючей клетки к другой. Все горючие частицы-клетки одинаковы, т. е. распределение частиц по размерам в [11] не учитывалось.

Рассмотрим в качестве примера ГС с поверхностью горения, которая разграничивает несгоревшее твердое вещество и газообразные продукты. Описание поведения клеток в общем случае должно включать множество физических и химических процессов, совокупность и взаимодействие которых составляют процесс горения системы в целом. Однако при всей сложности физики и химии составляющих, в конечном итоге всё сводится к тому, что разные участки поверхности ГС имеют разную скорость горения. Поэтому здесь ограничимся простейшим примером. Пусть имеется ГС, все компоненты которой способны к самостоятельному горению. Определим правила поведения клеток. (1) Кубик-клетка начинает гореть, когда хотя бы одна из его граней «открывается», т. е. оказывается на поверхности горения. (2) По истечении определенного промежутка времени клетка сгорает — твердое вещество клетки замещается газом (превращается в газообразные продукты), что обеспечивает перемещение поверхности горения. (3) Время сгорания клетки зависит от скорости горения ее вещества и от ее окружения. Если клетка горит лишь с одной грани, то время ее сгорания определяется из уравнения  $t = a/r_i$ , где  $r_i$  — заданная индивидуальная скорость горе-

ния вещества сорта  $i$ , из которого состоит клетка. Если у клетки открыты две или более граней, время ее сгорания уменьшается, что учитывается путем использования «ускоряющего» коэффициента  $k$  (эффективная скорость горения такой клетки увеличивается в  $k$  раз). Например, если клетка горит с двух противоположных граней, то она сгорит вдвое быстрее ( $k = 2$ ). Значения  $k$  выведены из геометрических соображений. В случае одной горячей грани  $k = 1$ , для двух смежных граней  $k = \sqrt{2} \approx 1.414$ , и так далее до  $k = 6$  для случая шести горящих граней (возможно всего 9 вариантов количества и взаимного расположения открытых граней). Данный пример задания правил поведения клеток и значений  $k$  демонстрирует отклонение формы поверхности от плоской вследствие различий локальных скоростей горения, обусловленных лишь двумя эффектами: различием индивидуальных скоростей горения вещества клетки; количеством и расположением горящих граней. Правила поведения клеток легко модифицировать с учетом других аспектов «геометрического окружения» клетки. Например, можно учесть эффект взаимодействия компонента-горючего и компонента-окислителя путем увеличения значений  $k$  для клеток, находящихся на границе контакта горючего и окислителя.

**Результаты расчетов** для некоторой трехкомпонентной ГС иллюстрирует рис. 2. Гетерогенные компоненты, превышающие размер гомогенизации  $D_{homo}$ , представлены светлыми и темными частицами, имеющими мономодальные распределения по размерам в диапазоне  $180 \div 450$  мкм для светлых и  $240 \div 670$  мкм для темных частиц. Расчетный размер ребра ПКОГС  $A = 2915$  мкм, в ПКОГС размещено 625 шаров. Дискретная размерность ПКОГС —  $200 \times 200 \times 200$  клеток. На рис. 2 приведены заданные скорости горения  $r_i$  и рассчитанные объемные доли компонентов  $(V_f)_i$ .

Для рассматриваемой ГС примерно через 0.4 с после начала горения поверхность приобретает характерный рельеф. Глубина рельефа (максимальный перепад высот в пределах ПКОГС) варьирует с размахом  $\pm 15\%$  и в среднем составляет около 700 мкм. Среднее значение скорости горения  $r = 1.3$  мм/с. Для сравнения, расчет по простейшей формуле «эстафетной модели»  $1/r = \sum_i (V_f)_i / r_i$  [3, с. 129] дает значение  $r = 1.0$  мм/с. Таким образом, для дан-

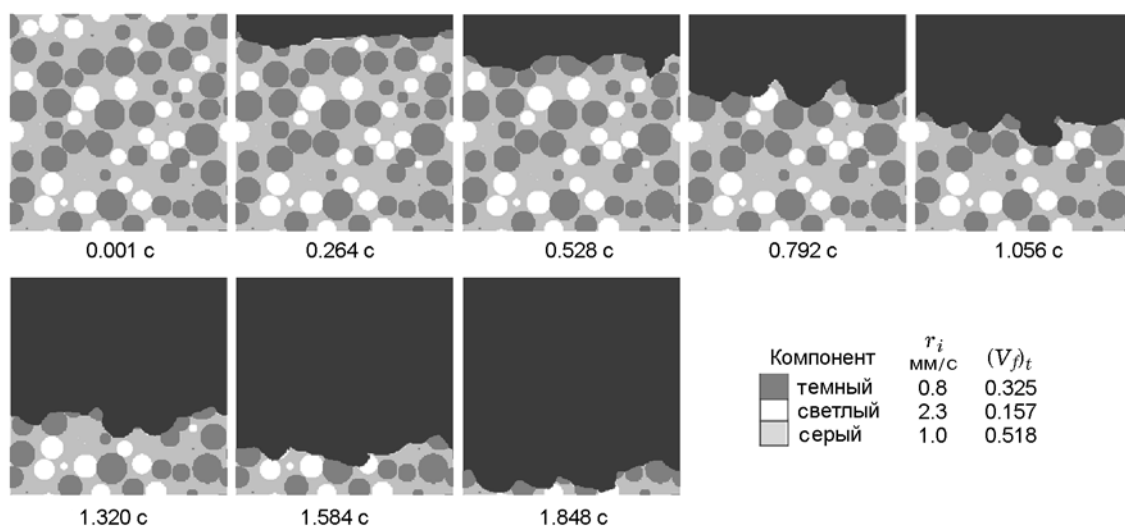


Рис. 2. Распространение волны горения по гетерогенной системе с частицами: показано центральное вертикальное сечение ПКООГС в разные моменты времени; в начальный момент времени горение инициируется путем поджигания всех клеток верхней грани ПКООГС, волна горения движется вниз, черный цвет — отсутствие вещества

ной ГС только чисто геометрические трехмерные эффекты, связанные с отклонением формы поверхности горения от плоской (без учета взаимодействия компонентов), приводят к увеличению скорости горения в 1.3 раза. За время горения ПКООГС зарегистрировано менее 50 событий отделения фрагментов, во всех случаях с размером 1–2 клетки, так что для рассматриваемой ГС диспергирование несущественно.

**Достоинства подхода.** В части моделирования структуры предложенный подход достаточно универсален. Разнообразные гетерогенные системы сложной геометрической формы можно приближенно представить в виде совокупности кубических ячеек-клеток, обладающих заданным набором свойств. Описание взаимодействия элементов структуры методом клеточных автоматов также универсально, поскольку интересующие аспекты поведения системы могут быть учтены при формулировании правил поведения клеток. Универсальность в данном случае означает не «всеохватность», а возможность применения для разнообразных систем. Основные достоинства подхода — универсальность и простота. Можно надеяться, что он найдет применение в исследованиях отдельных важных аспектов поведения сложных трехмерных систем наряду с традиционными подходами.

Представленные результаты демонстрируют перспективность предложенного подхо-

да на примере анализа гетерогенной системы с частицами. Даже в простейшем виде модель позволяет исследовать трехмерные эффекты, обусловленные пространственной неоднородностью системы — формирование и эволюцию рельефа поверхности горения, диспергирование и т. д. (в том числе в зависимости от гранулометрического состава компонентов). Следующими этапами развития этой модели будут геометрическое описание агломерации металлического компонента и учет распределения температуры.

## ЛИТЕРАТУРА

1. **Энергетические** конденсированные системы: краткий энциклопедический словарь / под ред. Б. П. Жукова. — М.: Янус-К, 2000.
2. **Теория** горения порохов и взрывчатых веществ / под ред. О. И. Лейпунского, Ю. В. Фролова. — М.: Наука, 1982.
3. **Гусаченко Л. К., Зарко В. Е., Зырянов В. Я., Бобрышев В. П.** Моделирование процессов горения твердых топлив. — Новосибирск: Наука, 1985.
4. **Бекстед М. В.** Современный прогресс в моделировании горения твердого топлива // Физика горения и взрыва. — 2006. — Т. 42, № 6. — С. 4–24.
5. **Ивлева Т. П., Мержанов А. Г.** Трехмерное моделирование твердопламенного хаоса // Докл. АН. — 2001. — Т. 381, № 2. — С. 210–213.
6. **Публикации** Центра современного моделирования ракет (CSAR — Center

- for Advanced Simulation of Rockets). — <http://www.csar.uiuc.edu/~tlj/references.htm>.
7. **Рашковский С. А.** Статистическое моделирование процессов горения гетерогенных смесей: дис. ... д-ра физ.-мат. наук / Ин-т проблем механики РАН. — М., 2004.
  8. **Тоффоли Т., Марголус Н.** Машины клеточных автоматов. — М.: Мир, 1991.
  9. **Ершов А. П.** Газодинамика клеточных автоматов (обзор) // Физика горения и взрыва. — 1994. — Т. 30, № 1. — С. 107–117.
  10. **Механика** — от дискретного к сплошному / под ред. В. М. Фомина. — Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2008.
  11. **Алешин В. В., Пивкина А. Н., Фролов Ю. В.** Динамика распространения волны горения в гетерогенных конденсированных системах: моделирование методом клеточных автоматов // Хим. физика. — 2002. — Т. 21, № 11. — С. 106–109.

*Поступила в редакцию 20/VII 2010 г.*

---