

ГОРЕНИЕ ЛЕТУЧИХ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СИСТЕМ ЗА ГРАНИЦЕЙ УСТОЙЧИВОСТИ СТАЦИОНАРНОГО РЕЖИМА

А. А. Беляев, З. И. Каганова, Б. В. Новожилов

Институт химической физики им. Н. Н. Семенова РАН, 119991 Москва, novozh@orc.ru

Численно исследованы нестационарные режимы горения газифицирующихся конденсированных систем за границей устойчивости стационарного режима. Рассмотрение проведено в рамках модели Беляева — Зельдовича с химическими реакциями первого порядка в конденсированной и газовой фазах. Найдена граница устойчивости стационарного режима горения при постоянном давлении. Изменение давления приводит к последовательности бифуркаций удвоения периода осцилляций скорости горения. После четвертой бифуркации возникает хаотический режим горения.

Ключевые слова: порох, нестационарное горение, численное моделирование, бифуркация, удвоение периода, хаос.

ВВЕДЕНИЕ

В теории нестационарного горения порохов [1, 2] показано, что потеря устойчивости стационарного режима горения происходит колебательным образом (частота на границе устойчивости чисто мнимая) [3]. Естественно ожидать, что при удалении от границы устойчивости в процессе горения пороха будут проявляться свойства, характерные для нелинейных динамических систем, которые интенсивно исследуются последние десятилетия (см., например, [4–6]). В ряде работ было проведено аналитическое исследование процессов горения пороха вне области устойчивого горения, однако в связи с сильной нелинейностью задачи рассмотрение ограничивалось лишь областью, непосредственно примыкающей к границе устойчивости. Были найдены и исследованы автоколебательные режимы горения как в устойчивой, так и в неустойчивой области стационарного горения [7, 8]. Обнаружены резонансные явления не только на основной частоте, но и на частотах, кратных ей [9].

Проводилось также численное моделирование нестационарных процессов горения конденсированных систем в области неустойчивости стационарного режима. Отметим в связи с этим работы [10, 11], где исследовались простейшие модели безгазовых систем, и [12], в которой изучалась модель Беляева [13, 14].

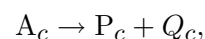
В настоящей работе рассматривается модель Беляева — Зельдовича с химическими ре-

акциями первого порядка в конденсированной и газовой фазах. Сформулированы постановка задачи и ограничения, в рамках которых проводится исследование. Большое внимание уделено обезразмериванию уравнений с целью уменьшения затрат времени на решение задачи при изменении параметров, ее определяющих. Путем численного моделирования найдена граница устойчивости стационарного режима горения при постоянном давлении. Проведены расчеты нестационарной скорости горения за границей устойчивости.

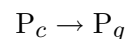
ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Наиболее простой моделью горения газифицирующихся конденсированных систем является модель Беляева — Зельдовича [1, 13, 14]. Она предполагает два пути превращения исходного реагента A_c в продукты горения P_g (здесь и далее индексы c и g относятся соответственно к конденсированной и газовой фазам).

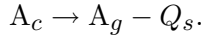
Во-первых, возможно экзотермическое химическое превращение первого порядка в конденсированной фазе



где Q_c — тепловой эффект на единицу массы. Предположим, что энергия связи продукта в конденсированной фазе равна нулю и переход

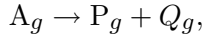


происходит одновременно с испарением или сублимацией исходного вещества:



Здесь Q_s — тепловой эффект этого процесса.

Кроме того, продукт реакции получается в результате газофазной реакции первого порядка



причем $Q_g = Q_c + Q_s$.

В дальнейшем рассматриваются одномерные нестационарные процессы, для уменьшения числа входящих в задачу параметров принимаются следующие упрощения:

а) теплофизические константы конденсированной фазы — плотность ρ_c , теплоемкость c , теплопроводность λ_c — считаются постоянными,

б) теплоемкости конденсированной и газовой фаз одинаковы,

в) число Льюиса равно единице, т. е. $\lambda_g = D\rho_g c$, где D — коэффициент диффузии, ρ_g — плотность газовой фазы,

г) комплекс $D\rho_g^2$ не зависит от температуры и прямо пропорционален давлению,

д) молекулярная масса смеси $\tilde{\mu}$ не меняется в ходе реакции.

Обозначив через $x_s(t)$ зависимость координаты поверхности раздела фаз в лабораторной системе координат от времени, запишем уравнения баланса энергии и исходного реагента в конденсированной фазе:

$$-\infty < x \leq x_s(t):$$

$$\rho_c c \frac{\partial T_c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_c \frac{\partial T_c}{\partial x} \right) + Q_c W_c(\eta, T_c),$$

$$\rho_c \frac{\partial \eta}{\partial t} = W_c(\eta, T_c), \quad (1)$$

$$W_c(\eta, T_c) = \tilde{k}_c \rho_c (1 - \eta) \exp(-E_c/RT_c),$$

где T_c — температура конденсированной фазы, W_c и η — скорость химической реакции и степень превращения исходного реагента, \tilde{k}_c и E_c — кинетические константы, R — универсальная газовая постоянная.

В газовой фазе следует учесть закон сохранения массы, уравнение состояния идеального газа и уравнения баланса энергии и исходного реагента:

$$x_s(t) \leq x < \infty:$$

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \frac{\partial \rho_g v}{\partial x} = 0,$$

$$\rho_g = \frac{p\tilde{\mu}}{RT},$$

$$\rho_g c \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v \frac{\partial T}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_g \frac{\partial T}{\partial x} \right) + Q_g W_g(Y, T), \quad (2)$$

$$\rho_g \left(\frac{\partial Y}{\partial t} + v \frac{\partial Y}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} (\rho_g D \frac{\partial Y}{\partial x}) - W_g(Y, T),$$

$$W_g(Y, T) = \tilde{k}_g \rho_g Y \exp(-E_g/RT).$$

Здесь v — скорость газа, Y — массовая доля реагента, c — удельная теплоемкость. Смысл остальных обозначений очевиден.

К уравнениям (1), (2) должны быть добавлены граничные условия:

$$x \rightarrow -\infty: \quad T_c = T_a, \quad \eta = 0, \quad (3)$$

$$x \rightarrow \infty: \quad \frac{\partial T}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial Y}{\partial x} = 0, \quad (4)$$

условия сшивки решений на границе раздела фаз:

$$x = x_s(t):$$

$$T = T_c,$$

$$\lambda_c \frac{\partial T_c}{\partial x} = \lambda_g \frac{\partial T}{\partial x} + \rho_c (1 - \eta) Q_s \frac{dx_s}{dt}, \quad (5)$$

$$-\rho_c \frac{dx_s}{dt} = -\rho_g \frac{dx_s}{dt} + \rho_g v,$$

$$-\rho_c (1 - \eta) \frac{dx_s}{dt} = -\rho_g Y \frac{dx_s}{dt} + \rho_g v Y - D \rho_g \frac{\partial Y}{\partial x},$$

условие равновесного испарения:

$$Y = \frac{p_r}{p} \exp \left[\frac{E_s}{R} \left(\frac{1}{T_r} - \frac{1}{T} \right) \right]. \quad (6)$$

Здесь p — давление, T_a — начальная температура, T_r — температура кипения при некотором базовом давлении p_r .

Введем безразмерные переменные и константы:

$$z = \frac{p}{p_r}, \quad \theta_c = \frac{T_c}{T_r}, \quad \theta = \frac{T}{T_r},$$

$$\varepsilon_c = \frac{E_c}{RT_r}, \quad \varepsilon_s = \frac{E_s}{RT_r}, \quad \varepsilon_g = \frac{E_g}{RT_r},$$

$$q_c = \frac{Q_c}{cT_r}, \quad q_s = \frac{Q_s}{cT_r}, \quad q_g = \frac{Q_g}{cT_r},$$

$$\theta_a = \frac{T_a}{T_r}, \quad \theta_b = \theta_a + q_c.$$

Для обезразмеривания времени и пространственной координаты полезно определить скорость некоторого базового стационарного режима горения при давлении p_r и начальной температуре $T_{a,r}$. В качестве нее возьмем линейную скорость u_r в модели Беляева (реакция в конденсированной фазе отсутствует) в предположении бесконечно тонкой зоны химического превращения:

$$u_r^2 = 2 \frac{\tilde{k}_g (D\rho_g^2)_r}{\rho_c^2} \left(\frac{\theta_{b,r}^2}{\varepsilon_g q_g} \right)^2 \exp\left(-\frac{\varepsilon_g}{\theta_{b,r}}\right),$$

где

$$\theta_{b,r} = \theta_{a,r} + q_g - q_s, \quad \theta_{a,r} = \frac{T_{a,r}}{T_r}.$$

Поскольку реакция в газовой фазе первого порядка, удобно ввести характерную скорость $u = u_r \sqrt{z}$ и с ее помощью определить безразмерные время и линейную скорость горения:

$$\tau = \frac{u^2}{\varkappa} t, \quad \mu = -\frac{1}{u} \frac{dx_s}{dt}$$

(\varkappa — температуропроводность). Переходя от лабораторной системы координат к системе, связанной с поверхностью раздела фаз, введем в конденсированной фазе безразмерную координату

$$\xi = \frac{u}{\varkappa} [x - x_s(t)], \quad -\infty < \xi \leq 0.$$

При этом уравнения баланса энергии и исходного реагента (1) примут вид

$$\frac{\partial \theta_c}{\partial \tau} + \mu \frac{\partial \theta_c}{\partial \xi} = \frac{\partial^2 \theta_c}{\partial \xi^2} + \frac{k_c q_c}{z} (1 - \eta) \exp\left[\varepsilon_c \left(1 - \frac{1}{\theta_c}\right)\right], \quad (7)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial \tau} + \mu \frac{\partial \eta}{\partial \xi} = \frac{k_c}{z} (1 - \eta) \exp\left[\varepsilon_c \left(1 - \frac{1}{\theta_c}\right)\right],$$

где

$$k_c = \frac{\tilde{k}_c \varkappa}{u_r^2} \exp(-\varepsilon_c). \quad (8)$$

В газовой фазе, как это обычно делается в одномерных задачах, следует перейти к массовой координате

$$\xi = \frac{u}{\varkappa \rho_c \sigma_r z} \int_{x_s(t)}^x \rho(y, t) dy, \quad 0 \leq \xi < \infty,$$

причем

$$\sigma_r = \frac{(D\rho^2)_r}{\varkappa \rho_c^2}.$$

В результате получаем безразмерную форму уравнений сохранения в газовой фазе:

$$\sigma \frac{\partial \theta}{\partial \tau} + \mu \frac{\partial \theta}{\partial \xi} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} + k_g q_g Y \exp\left[\varepsilon_g \left(\frac{1}{\theta_{b,r}} - \frac{1}{\theta}\right)\right], \quad (9)$$

$$\sigma \frac{\partial Y}{\partial \tau} + \mu \frac{\partial Y}{\partial \xi} = \frac{\partial^2 Y}{\partial \xi^2} - k_g Y \exp\left[\varepsilon_g \left(\frac{1}{\theta_{b,r}} - \frac{1}{\theta}\right)\right],$$

где

$$k_g = \frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon_g q_g}{\theta_{b,r}^2} \right)^2, \quad \sigma = \sigma_r z. \quad (10)$$

Условия (3)–(6) в безразмерных переменных имеют вид

$$\begin{aligned} \xi \rightarrow -\infty: \quad & \theta_c = \theta_a, \quad \eta = 0, \\ \xi \rightarrow \infty: \quad & \frac{\partial \theta}{\partial \xi} = 0, \quad \frac{\partial Y}{\partial \xi} = 0, \end{aligned} \quad (11)$$

$$\xi = 0: \quad \theta_c = \theta, \quad \frac{\partial \theta_c}{\partial \xi} = \frac{\partial \theta}{\partial \xi} - \mu q_s (1 - \eta),$$

$$\mu(1 - \eta - Y) + \frac{\partial Y}{\partial \xi} = 0, \quad zY = \exp\left[\varepsilon_s \left(1 - \frac{1}{\theta}\right)\right].$$

В работе численно исследуется система (7), (10), на которую наложены условия (11).

ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД И ПАРАМЕТРЫ ЗАДАЧИ

При численном интегрировании использовалась неявная конечно-разностная схема. Детальное описание метода расчета приведено в [12]. Указанный выше способ обезразмеривания, использующий базовую скорость, пропорциональную квадратному корню из давления, позволяет при широком изменении внешних параметров (давления и начальной температуры)

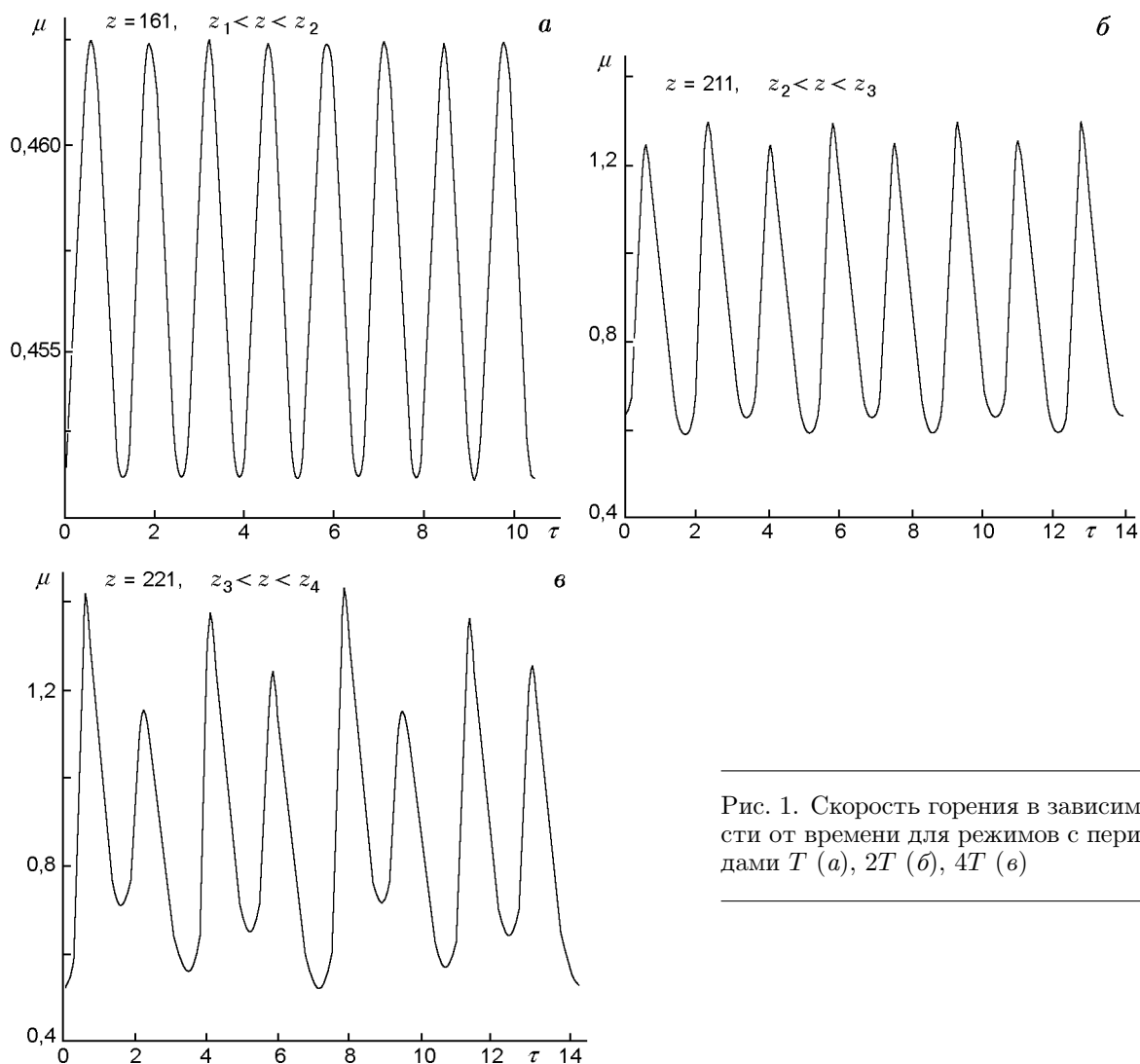


Рис. 1. Скорость горения в зависимости от времени для режимов с периодами T (а), $2T$ (б), $4T$ (в)

практически не менять пространственную сетку. Например, при изменении давления в десятки раз счетное пространство, занятое волной горения, изменяется лишь на несколько процентов. Это обстоятельство существенно сокращает время счета.

В предыдущем параграфе ничего не говорилось о начальных условиях. Это естественно, поскольку рассматривались только установившиеся периодические или хаотические режимы.

Начальные распределения температуры и доли реагента задаются близкими к стационарным распределениям этих величин.

В большинстве расчетов пространственная координата менялась в интервале $-\xi_0 \leq \xi \leq \xi_0$, где $\xi_0 = 10$. Существенное изменение определяемых величин происходит на го-

раздо меньшем пространственном интервале. При исследовании стационарного режима граничные условия для температуры могут быть записаны в виде

$$\xi = -\xi_0: \theta_c = \theta_a; \quad \xi = \xi_0: \frac{\partial \theta}{\partial \xi} = 0.$$

При исследовании периодических или хаотических режимов горения, когда в продуктах горения существуют слаботухающие энтропийные волны, второе граничное условие задавалось в виде

$$\xi = \xi_0: \sigma \frac{\partial \theta}{\partial \tau} + \mu \frac{\partial \theta}{\partial \xi} = 0,$$

что соответствует пренебрежению затуханием этих волн на счетном пространственном интервале.

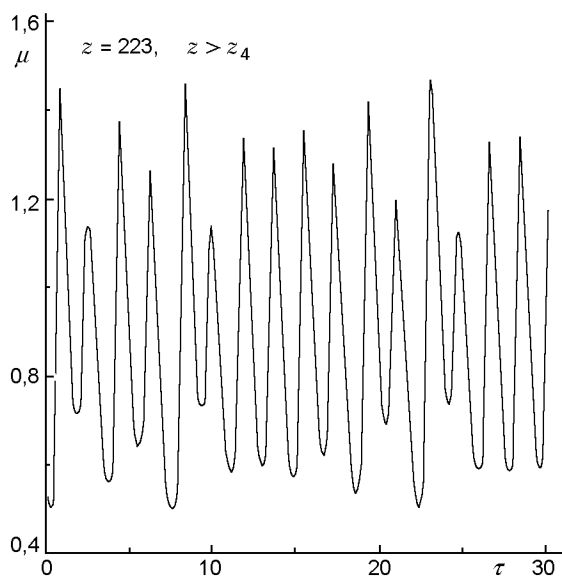


Рис. 2. Скорость горения в зависимости от времени в хаотическом режиме

При проведении расчетов использовались следующие значения безразмерных параметров: $\theta_{a,r} = 0,7$, $q_s = 1,43$, $q_g = 4,12$, $\varepsilon_s = 12,8$, $\varepsilon_g = 33,9$, $\sigma_r = 10^{-4}$, которые соответствуют размерным значениям, принятым в работах [12, 15, 16], где рассматривалось только газофазное химическое превращение. В конденсированной фазе задавались кинетические константы: $\varepsilon_c = 15$, $k_c = 0,1$. Тепловой эффект находился по соотношению $q_c = q_g - q_s$.

Отметим, что при температурах, близких к значению θ_a , источник при проведении расчетов полагался равным нулю, однако, как показала проверка, на результаты расчета это не повлияло.

ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ БИФУРКАЦИЙ И ПЕРЕХОД К ХАОТИЧЕСКОМУ РЕЖИМУ ГОРЕНИЯ

Переход от стационарных режимов горения к неустойчивым осуществлялся изменением давления (z), которое является бифуркационным параметром. Стационарный режим горения устойчив при $z \leq z_1 = \text{const}$. При $z = z_1$ режим горения с постоянной скоростью путем бифуркации Андронова — Хопфа сменяется осциллирующим режимом с периодом T . Дальнейшее увеличение давления приводит к каскаду бифуркаций, при каждой из которых происходит удвоение периода. Приближенные методы численного интегрирования не

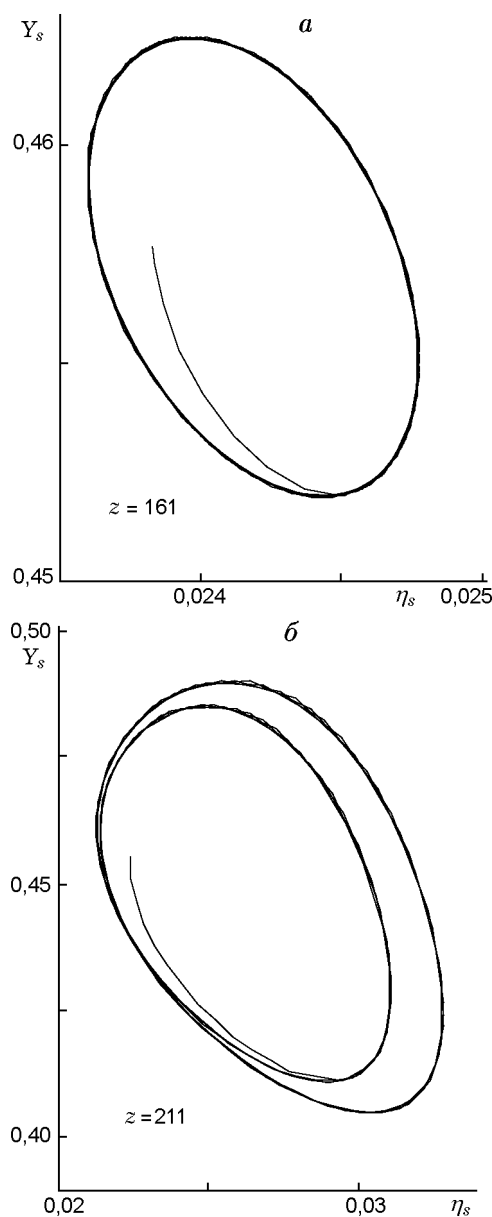


Рис. 3. Предельный цикл для режимов с периодами T (а) и $2T$ (б)

позволяют установить бесконечную последовательность бифуркаций. После четвертой бифуркации наблюдался хаотический режим горения. Таким образом, проведенные расчеты свидетельствуют, что в рассматриваемой системе осуществляется сценарий развития хаоса, основанный на последовательности бифуркаций Фейгенбаума [4, 5].

При указанных выше численных значениях параметров была найдена следующая последовательность бифуркационных значений давления:

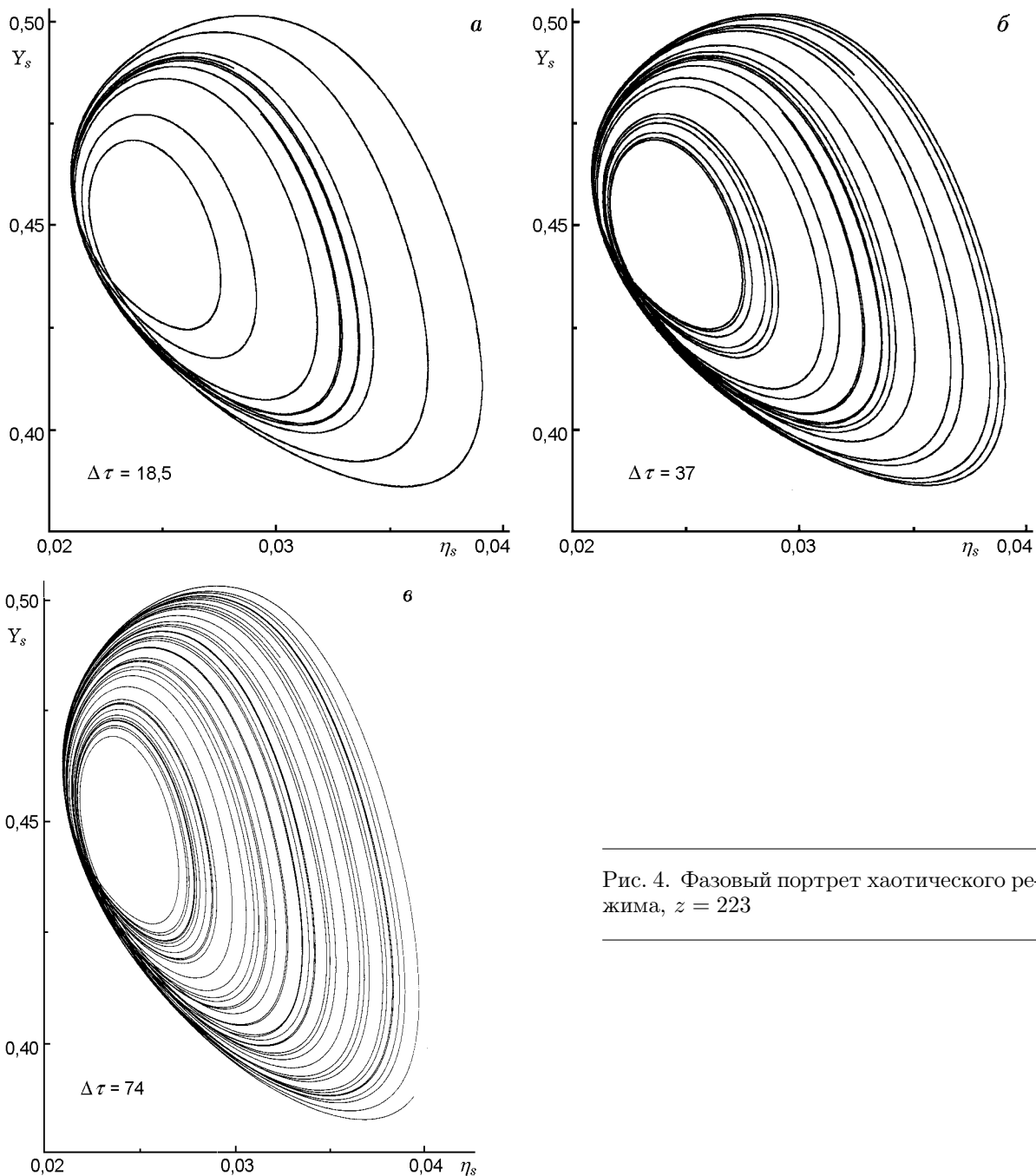


Рис. 4. Фазовый портрет хаотического режима, $z = 223$

$$z_1 \approx 160, \quad z_2 \approx 210, \quad z_3 \approx 220, \quad z_4 \approx 222.$$

Эта последовательность достаточно хорошо подчиняется универсальному закону Фейгенбаума. Для постоянной этой последовательности получаем

$$\frac{z_m - z_{m-1}}{z_{m+1} - z_m} \approx 5,$$

что с хорошей точностью соответствует универсальной постоянной — числу Фейгенбаума $\delta = 4,67$.

На рис. 1 изображены зависимости скорости горения для периодических режимов с периодами T , $2T$ и $4T$. Рис. 2 иллюстрирует хаотический режим горения.

Рассматриваемая система обладает бесконечным числом степеней свободы. Выбрав две степени свободы, можно построить фазовый портрет системы в пространстве состояний. Устойчивые предельные циклы для одно- и дупериодических решений изображены на

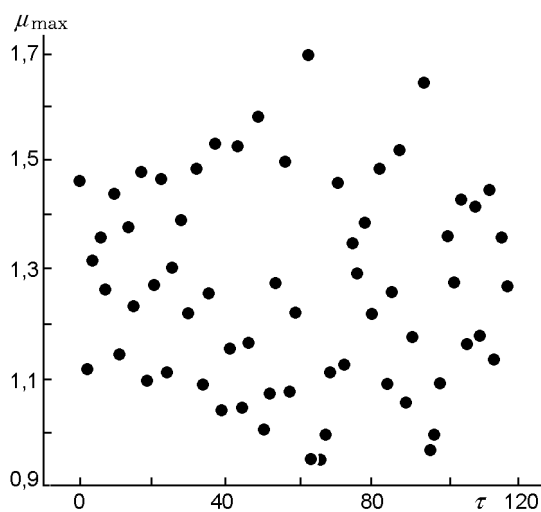


Рис. 5. Последовательность максимумов скорости горения в хаотическом режиме, $z = 223$

рис. 3. В качестве координат взяты степень превращения в конденсированной фазе (η_s) и массовая доля газообразного реагента у поверхности раздела фаз (Y_s). Удвоению периода соответствует изменение простейшей формы предельного цикла (см. рис. 3,а) на сложенный «восьмеркой» устойчивый предельный цикл удвоенного периода (см. рис. 3,б).

Для хаотического режима фазовые траектории заполняют некоторую область пространства состояний. Постепенное заполнение этой области иллюстрирует рис. 4, на котором изображены фазовые портреты для трех временных интервалов $\Delta\tau$ наблюдения за системой. Наконец, на рис. 5 приведена еще одна характеристика хаотического режима — максимумы скорости горения, возникающие в последовательные моменты времени.

В заключение отметим, что исследование вопроса, изложенного в настоящей работе, связано со значительными вычислительными трудностями, главная из которых — необходимость выбора очень малого временного шага. Этим, в частности, объясняется недостаточно точное определение значений точек бифуркации. Остается открытым вопрос о числе бифуркаций, после которого наступает хаотический режим горения. Представляет интерес исследование других моделей горения, отличных от рассмотренной в настоящей работе. Очевидно, что возможность возникновения хаотического режима и сценарий перехода к нему зависят от конкретных особенностей моделей горения энергетических материалов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Зельдович Я. Б. К теории горения порохов и взрывчатых веществ // Журн. эксперим. и теор. физики. 1942. Т. 12, вып. 11/12. С. 498–524.
2. Новожилов Б. В. Нестационарное горение твердых ракетных топлив. М.: Наука, 1973. (Перевод: AFSC FTD-MD-24-317-74).
3. Новожилов Б. В. Горение пороха при гармонически меняющемся давлении // Журн. прикл. механики и техн. физики. 1965. № 6. С. 141–144.
4. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Гидродинамика. М.: Наука, 1986.
5. Лоскутов А. Ю., Михайлов А. С. Введение в синергетику. М.: Наука, 1990.
6. Merzhanov A. G., Rumanov E. N. Physics of reaction waves // Rev. Modern Phys. 1999. V. 71, N 4. P. 1173–1211.
7. Новожилов Б. В. Нелинейные колебания скорости горения // Журн. прикл. механики и техн. физики. 1966. № 5. С. 31–41.
8. Novozhilov B. V., Cozzi F., De Luca L. T. Limit cycles for solid propellant burning rate at constant pressure // Combustion of Energetic Materials. New York: Begel House, 2002. P. 825–836.
9. Novozhilov B. V. Second harmonic nonlinear resonance in propellant combustion // Twenty-Fourth Symp. (Intern.) on Combustion. Pittsburg, PA: The Combustion Inst., 1992. P. 1939–1945.
10. Шкадинский К. Г., Хайкин Б. И., Мержанов А. Г. Распространение пульсирующего фронта экзотермической реакции в конденсированной среде // Физика горения и взрыва. 1971. Т. 7, № 1. С. 19–28.
11. Bayliss A., Matkowsky B. J. Two routes to chaos in condensed phase combustion // SIAM J. Appl. Math. 1990. V. 50, N 2. P. 437–459.
12. Новожилов Б. В., Посвянский В. С. Численное моделирование нестационарных процессов горения конденсированных систем в модели Беляева // Хим. физика. 1991. Т. 10, № 4. С. 534–544.
13. Беляев А. Ф. О горении взрывчатых веществ // Журн. физ. химии. 1938. Т. 12, № 1. С. 93–99.
14. Беляев А. Ф. О горении нитрогликоля // Журн. физ. хим. 1940. Т. 14, № 8. С. 1009–1025.
15. Новожилов Б. В. Влияние инерционности газовой фазы на устойчивость горения летучих конденсированных систем // Хим. физика. 1988. Т. 7, № 3. С. 388–396.
16. Allison C. B., Feath G. M. Open-loop response of a burning liquid monopropellant // AJAA Journal. 1975. V. 13, N 10. P. 1287–1294.

Поступила в редакцию 15/V 2003 г.