

УДК 536.46+662.61

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОГАСАНИЯ ПОРОХА Н ПРИ РЕЗКОМ СБРОСЕ ДАВЛЕНИЯ НА ОСНОВЕ СОПРЯЖЕННОЙ МОДЕЛИ ГОРЕНИЯ

А. Ю. Крайнов, В. А. Порязов

Томский государственный университет, 634050 Томск, akrainov@ftf.tsu.ru

Представлена физико-математическая модель горения пороха Н, в которой учитываются химические реакции в конденсированной и газовой фазах. На поверхности горения ставятся граничные условия четвертого рода (условия сопряжения). Результаты расчета скорости горения пороха Н при постоянном давлении хорошо согласуются с известными экспериментальными данными. Проведено моделирование погасания горения пороха Н при резком сбросе давления. Расчеты граничных значений глубины и скорости сброса давления, при которых происходит погасание пороха Н, удовлетворительно согласуются с опубликованными данными измерения.

Ключевые слова: порох Н, скорость горения, сброс давления, погасание.

DOI 10.15372/FGV20150607

Горение пороха представляет собой последовательность физико-химических процессов, начинающихся в твердой фазе и завершающихся в газовой фазе на некотором расстоянии от поверхности пороха образованием продуктов сгорания. Теория стационарного горения пороха построена Я. Б. Зельдовичем [1]. В [2] описаны особенности нестационарного горения пороха при изменении давления и дано качественное объяснение погасания при сбросе давления. В [3] представлены результаты экспериментального исследования погасания пороха при резком уменьшении давления. Были определены границы горения и погасания пороха в зависимости от глубины и скорости падения давления. Результаты обработаны в безразмерных переменных, имеющих смысл относительного конечного давления при спаде давления и безразмерной скорости его спада. В [4] представлены результаты измерения температуры пороха под поверхностью горения и температуры газа над ней при спаде давления в случае погасания и продолжения горения. В работах [5–7] приведены результаты теоретического исследования погасания пороха при резком уменьшении давления на основе феноменологической модели нестационарного горения, получены критерии погасания при рез-

ком уменьшении давления. В [8] описан новый алгоритм оценки нестационарной скорости горения конденсированного вещества в рамках феноменологической теории. В [9] представлен метод расчета нестационарной скорости горения пороха в рамках феноменологической теории Зельдовича — Новожилова, в котором не используется аналитическая зависимость стационарной скорости горения от начальной температуры. На основе предложенного авторами [9] подхода проведено моделирование погасания пороха при сбросе давления. В [10] с использованием феноменологического подхода к определению скорости горения пороха решается задача об эрозионном горении. В модели учитываются процессы реагирования и конвективного переноса в газовой фазе над поверхностью горения.

В работах [2, 5–8] условия погасания пороха определяются на основе феноменологических моделей нестационарного горения. В работах [11–15] представлены физико-математические модели горения газифицирующихся конденсированных веществ, в которых учитываются перенос тепла и химические реакции в газовой и конденсированной фазах. На границе перехода твердого вещества в газ ставятся условия сопряжения, имеющие смысл равенства потоков массы и тепла на поверхности перехода твердого вещества в газ. В рамках такой постановки не требуется введения в математическую модель феноменологической зави-

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (государственное задание № 10.1329.2014/К).

© Крайнов А. Ю., Порязов В. А., 2015.

симости скорости горения пороха от температуры его поверхности.

В настоящей работе путем моделирования горения пороха Н в сопряженной постановке исследуется процесс его погасания при резком спаде давления. Модель строится на основе модели, представленной в [12].

Сформулируем основные положения математической модели. Рассматриваются одномерные нестационарные процессы при горении пороха. Предполагается, что в твердом веществе идут химические реакции, продуктами которых является газ, содержащий летучие горючие компоненты. Газообразные продукты разложения высвобождаются на последней стадии реакции по достижении глубины превращения 0.99. Летучие горючие компоненты реагируют в газовой фазе до конечных продуктов. Предполагается, что теплофизические характеристики твердой фазы — плотность, удельная теплоемкость, теплопроводность — являются постоянными величинами. Удельная теплоемкость газовой фазы не зависит от температуры и равна удельной теплоемкости твердого вещества, число Льюиса газовой фазы равно единице, коэффициент диффузии не зависит от температуры, молекулярная масса газовой фазы принимается постоянной, параметры состояния газа подчиняются уравнению состояния идеального газа. В твердом веществе пороха и в газовой фазе протекают химические реакции первого порядка, скорость которых зависит от температуры по закону Аррениуса. Давление газа над поверхностью горения не зависит от координаты, но может зависеть от времени.

В системе координат, связанной с поверхностью твердого вещества, система уравнений математической модели записывается в следующем виде.

Для конденсированной фазы,  $-\infty < x < x_s$ :

$$\rho_1 c \left( \frac{\partial T_1}{\partial t} + u \frac{\partial T_1}{\partial x} \right) = \lambda_1 \frac{\partial^2 T_1}{\partial x^2} + Q_1 k_1 \rho_1 (1 - \eta) \exp \left( -\frac{E_1}{RT_1} \right), \quad (1)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + u \frac{\partial \eta}{\partial x} = k_1 (1 - \eta) \exp \left( -\frac{E_1}{RT_1} \right). \quad (2)$$

Для газовой фазы,  $x_s < x < \infty$ :

$$\rho_2 c \left( \frac{\partial T}{\partial t} + v \frac{\partial T}{\partial x} \right) =$$

$$= \lambda_2 \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{dp}{dt} + Q_2 k_2 \rho_2 Y \exp \left( -\frac{E_2}{RT} \right), \quad (3)$$

$$\frac{\partial Y}{\partial t} + v \frac{\partial Y}{\partial x} = D \frac{\partial^2 Y}{\partial x^2} - k_2 Y \exp \left( -\frac{E_2}{RT} \right), \quad (4)$$

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2 v}{\partial x} = 0, \quad (5)$$

$$\rho_2 = \frac{p\mu}{RT}. \quad (6)$$

Граничные условия:

$$\lambda_1 \frac{\partial T_1(x_s, t)}{\partial x} = \lambda_2 \frac{\partial T(x_s, t)}{\partial x},$$

$$T_1(x_s, t) = T(x_s, t),$$

$$\frac{\partial T_1(-\infty, t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial T(\infty, t)}{\partial x} = 0,$$

$$\rho_1 u = \rho_2(x_s, t) v(x_s, t), \quad (7)$$

$$\rho_1 u = \rho_2(x_s, t) v(x_s, t) Y(x_s, t) -$$

$$- D \rho_2(x_s, t) \frac{\partial Y(x_s, t)}{\partial x},$$

$$\frac{\partial Y(\infty, t)}{\partial x} = 0.$$

Начальные условия:

$$-\infty < x < x_s: \quad T_1(x, 0) = T_0, \quad \eta(x, 0) = 0,$$

$$x_s < x < \infty: \quad T(x, 0) = T_{ign}, \quad Y(x, 0) = 0, \quad (8)$$

$$v(x, 0) = 0, \quad p(0) = p_0, \quad \rho_2(x, 0) = \frac{p_0 \mu}{RT_{ign}}.$$

Здесь  $t$  — время,  $x$  — координата,  $\rho$  — плотность,  $c$  — удельная теплоемкость,  $\lambda$  — коэффициент теплопроводности,  $u$  — скорость движения конденсированного вещества,  $v$  — скорость газа,  $T_1$  — температура конденсированной фазы,  $T$  — температура газовой фазы,  $T_{ign}$  — начальная температура газовой фазы,  $Q$  — тепловой эффект реакции,  $k$  — предэкспоненциальный множитель в законе Аррениуса,  $\eta$  — глубина превращения вещества конденсированной фазы,  $R$  — универсальная газовая постоянная,  $E$  — энергия активации химической реакции,  $p$  — давление в газовой фазе,  $Y$  — концентрация окислителя в газовой фазе,  $D$  — коэффициент диффузии,  $\mu$  — средняя молярная масса газовой фазы,  $x_s$  — координата

положения поверхности конденсированной фазы. Индексом 1 обозначены величины, относящиеся к конденсированной фазе, 2 — к газовой фазе, 0 — к начальным условиям.

Теплофизические и формально-кинетические параметры, принятые для расчета, взяты из [10]:  $c_1 = 1465$  Дж/(кг·К),  $\rho_1 = 1600$  кг/м<sup>3</sup>,  $\lambda_1 = 0.25$  Дж/(м·с·К),  $Q_1 = 556800$  Дж/кг,  $k_1 = 5 \cdot 10^8$  с<sup>-1</sup>,  $E_1 = 80000$  Дж/моль,  $c_2 = 1465$  Дж/(кг·К),  $\lambda_2 = 0.066$  Дж/(м·с·К),  $Q_2 = 2435300$  Дж/кг,  $k_2 = 2.96 \cdot 10^{12}$  с<sup>-1</sup>,  $E_2 = 220000$  Дж/моль,  $\mu = 0.03143$  кг/моль,  $R = 8.31$  Дж/(моль·К),  $T_{1,0} = 293$  К.

Спад давления будем моделировать линейным во времени изменением давления от значения  $p_{start}$  в заданный момент начала спада давления ( $t_{start}$ ) до величины  $p_k$  в заданный момент окончания спада давления ( $t_{end}$ ):

$$p(t) = \begin{cases} p_{start}, & t < t_{start}, \\ p_{start} - A_p(t - t_{start}), & t_{start} < t < t_{end}, \\ p_k, & t \geq t_{end}, \end{cases} \quad (9)$$

где  $A_p = \frac{p_{start} - p_k}{t_{end} - t_{start}}$ . Тогда  $\frac{dp}{dt}$  в уравнении (3) определяется выражением

$$\frac{dp}{dt} = \begin{cases} 0, & t < t_{start}, \\ -A_p, & t_{start} < t < t_{end}, \\ 0, & t \geq t_{end}. \end{cases} \quad (10)$$

Система уравнений (1)–(8) решалась численно. Уравнения (1), (3), (4) аппроксимируются неявной разностной схемой. Конвективные слагаемые аппроксимировались разностями против потока. Полученная система линейных уравнений относительно сеточных неизвестных функций решается методом прогонки. Уравнение (2) аппроксимируется неявным методом с использованием разностей против потока для аппроксимации конвективного слагаемого. После определения температуры в газовой фазе на  $n + 1$ -м временном слое из уравнения состояния газа (6) при известном давлении определяется плотность газа. Уравнение (5) аппроксимируется неявной разностной схемой. Из уравнения сохранения массы (5) при известной плотности на  $n$ -м и  $n + 1$ -м временных слоях

бегущим счетом определяется скорость движения газовой фазы.

Скорость движения конденсированной фазы  $u$ , являющаяся линейной скоростью горения газифицирующегося конденсированного вещества, определялась из уравнения (2) следующим образом. В качестве линейной скорости  $u$  принимается скорость движения изолинии глубины превращения  $\eta = 0.99$  (по достижении такой глубины превращения конденсированная фаза полностью газифицируется). При решении уравнения (2) скорость  $u$  определяется итерационным путем. Выбирается «пробное» значение  $u$  (обычно это скорость на  $n$ -м временном слое). Вычисляется поле значений глубины превращения  $\eta_k^{n+1}$ . Затем полученное значение  $\eta$  в точке разностной сетки  $m$ , которая находится на поверхности конденсированного вещества,  $\eta_m^{n+1} = \eta(x_s, t)$ , сравнивается со значением  $\eta = 0.99$ . Если  $\eta_m^{n+1} > 0.99$ , то значение  $u$  увеличивается на заданную долю от ее первоначальной величины, если  $\eta_m^{n+1} < 0.99$  — уменьшается. При выполнении равенства  $\eta_m^{n+1} = 0.99$  с заданной точностью скорость  $u$  найдена, и она используется при решении уравнений (1), (7).

Для проверки разработанной методики решения системы уравнений (1)–(8) и программы ЭВМ проводилось тестирование. Определяли скорость горения конденсированного вещества без учета влияния потока тепла из газовой фазы. Для этого в (7) принималось  $\lambda_1 \frac{\partial T_1(x_s, t)}{\partial x} = 0$ . Отличие полученного результата от расчета по аналитической формуле Новожилова, выведенной для скорости фронта химической реакции в конденсированной фазе [6], составило 5.2 %. Далее, из решения системы уравнений (1)–(8) при выбранных значениях параметров и давлении 100 атм получена линейная скорость горения пороха Н  $u = 10.35$  мм/с. В [10] для того же пороха Н при том же давлении 100 атм приведено значение  $u = 10.47$  мм/с, полученное на основе модели, учитывающей процессы горения в газовой фазе. В экспериментах [5] скорость горения пороха Н при давлении 100 атм составляла  $u = 10.6$  мм/с. Отличие не превышает 3 %.

На рис. 1 представлены результаты расчета скорости горения пороха Н по модели (1)–(8) в сравнении с данными экспериментов [16]. Видно удовлетворительное согласие.

Нестационарная скорость горения пороха

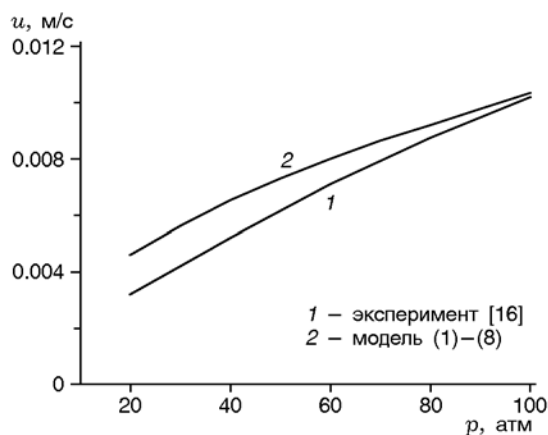


Рис. 1. Зависимость скорости горения пороха Н от давления

Н при резком изменении давления рассчитывалась следующим образом. Период зажигания пороха не рассматривается. В качестве начального распределения температуры в порохе задается профиль Михельсона [5]. После некоторого времени установления горение пороха Н выходит на стационарный режим, соответствующий заданному давлению  $p_{start}$ . После этого давление изменяется от  $p_{start}$  до  $p_k$  за время  $\Delta t = t_{start} - t_{end}$ . Скорость изменения давления во времени вычисляется по формуле (10). После достижения времени  $t_{end}$  изменение давления прекращается, вычисление скорости горения продолжается до установления ее стационарного значения при новом уровне давления.

На рис. 2 представлены зависимости скорости горения от времени при изменении давления от 60 до 18 атм и при разных значениях  $\frac{dp}{dt} = A_p$ . Вблизи предельного значения  $A_p$ , ниже него, выход на режим горения осуществляется со значительной депрессией скорости горения (рис. 2, кривая 1). При увеличении  $A_p$  выход на горение при новом значении давления сопровождается несколькими колебаниями скорости (рис. 2, кривая 2). При дальнейшем увеличении  $A_p$  происходит погасание пороха следующим образом: глубокая депрессия скорости, затем вспышка, всплеск скорости горения, прекращение горения (кривая 3). При дальнейшем увеличении  $A_p$  после сброса давления скорость плавно уменьшается до нуля, происходит погасание пороха (кривая 4).

Такое поведение скорости горения на качественном уровне объяснено в [5, 6]. При высо-

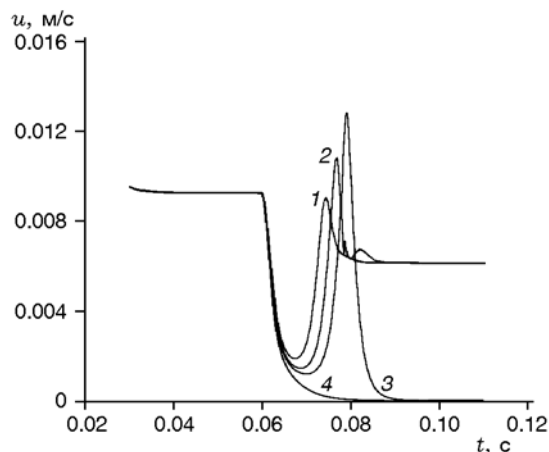


Рис. 2. Зависимость скорости горения пороха Н от времени при спаде давления:

$p_0 = 60$  атм,  $p_k = 18$  атм, 1 —  $A_p = 13 \cdot 10^8$  Па/с, 2 —  $14 \cdot 10^8$ , 3 —  $14.45 \cdot 10^8$ , 4 —  $16 \cdot 10^8$  Па/с

ких давлении и скорости горения формируется тонкий прогретый слой перед зоной реакции в твердой фазе, который при сбросе давления достаточно быстро выгорает. В случае стационарного режима при меньшем давлении скорость горения меньше, запас тепла в прогретом слое пороха больше. Для создания необходимого прогретого слоя в нестационарных условиях сброса давления требуется относительно большой период времени. При сбросе давления горение протекает с дефицитом тепла в конденсированной фазе, восполнить его можно при скорости горения, меньшей стационарной, соответствующей текущему давлению. Аналитически это показано в работе [17] в рамках феноменологической теории Зельдовича — Новожилова. Стадия депрессии скорости горения обусловлена формированием более глубокого прогретого слоя, соответствующего меньшим давлению и скорости горения. Формирование его замедлено из-за того, что уменьшается поток тепла из газовой фазы за счет снижения скорости химической реакции в газовой фазе при ее расширении, в результате чего уменьшается температура. Граничное значение  $A_p$ , разделяющее процессы погасания пороха и продолжения его горения, в расчетах получено равным  $A_p = 14.5 \cdot 10^8$  Па/с при изменении давления от 60 до 18 атм. В экспериментах [7] погасание пороха в указанном диапазоне давления происходило при скорости изменения давления  $\frac{dp}{dt} = 10.6 \cdot 10^8$  Па/с. Как видно, результаты

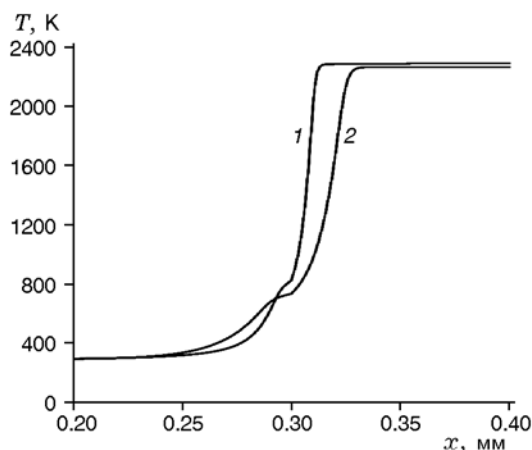


Рис. 3. Распределение температуры в твердом веществе ( $x < 0.3$  мм) и в газовой фазе в фиксированные моменты времени:

1 — установившееся распределение температуры перед началом сброса давления,  $p_0 = 60$  атм, 2 — после сброса и установления стационарного режима,  $p_k = 18$  атм,  $A_p = 13 \cdot 10^8$  Па/с

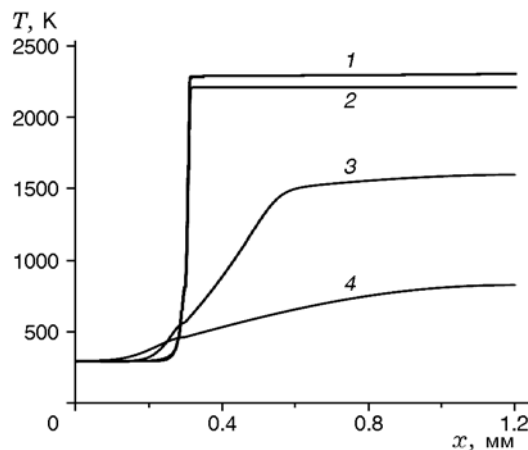


Рис. 4. Распределение температуры в твердом веществе ( $x < 0.3$  мм) и в газовой фазе в последовательные моменты времени:

1 —  $t_{start}$ , 2 —  $t_{start} + 0.025$  с, 3 —  $t_{start} + 0.05$  с, 4 —  $t_{start} + 0.075$  с;  $p_0 = 60$  атм,  $p_k = 18$  атм,  $A_p = 16 \cdot 10^8$  Па/с

расчетов и экспериментов удовлетворительно согласуются.

На рис. 3 представлены распределения температуры в твердой фазе пороха и в газовой фазе до и после сброса давления, когда порох продолжает гореть. Видно, что после выхода горения на стационарный режим при новом значении давления зона химической реакции в газовой фазе отодвигается от поверхности горения. Температура поверхности горения (координата поверхности  $x_s = 0.3$  мм) после сброса давления и установления уменьшается. На рис. 4 представлены распределения температуры в твердой фазе пороха и в газовой фазе до, в процессе и после сброса давления, когда порох гаснет. При сбросе давления реакции в газовой фазе замедляются, прогретый слой в конденсированной фазе сгорает. В твердой фазе пороха температура уменьшается, скорость реакции также уменьшается, горение останавливается.

Аналогичные расчеты прекращения или продолжения горения для определения граничных значений  $A_p$  были проведены при  $p_0 = 30, 40, 60, 80, 100$  атм и соответствующих им различных значениях  $p_k$ . Области значений параметров, при которых происходит погасание пороха при сбросе давления либо продолжается его горение, в [3, 6] было предложено определять в безразмерном виде: относительного конечного давления при спаде давления  $H =$

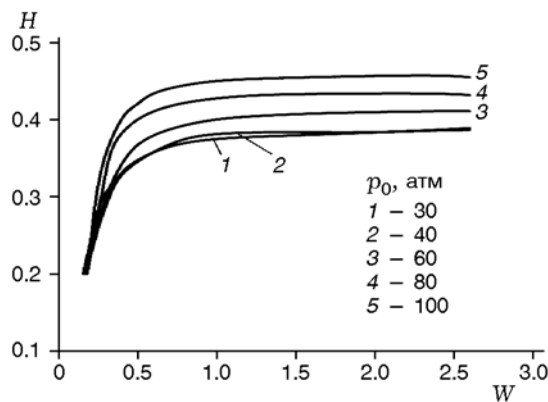


Рис. 5. Граничные линии погасания (ниже кривых) и продолжения горения (выше кривых)

$p_k/p_0$  и безразмерной скорости спада давления

$$W = \frac{\lambda_1}{c_1 \rho_1} \left( \frac{dp}{dt} / u_0^2 p_0 \right) \quad (u_0 \text{ — скорость горения пороха при давлении } p_0, \frac{dp}{dt} = A_p).$$

Результаты расчета граничных значений  $A_p$ , обработанные в координатах  $H-W$ , представлены на рис. 5. Выше соответствующих кривых порох после спада давления продолжает гореть, ниже — гаснет. Зависимости на рис. 5 качественно соответствуют экспериментальным зависимостям, приведенным на рис. 1 и 2 в статье [3]. Однако сравнить их количественно не представляется возможным, так как в статье [3] от-

сутствуют значения констант в эмпирическом законе скорости горения.

Таким образом, на основе сопряженной модели горения пороха Н проведено моделирование его погасания при резком сбросе давления. Результаты расчета по модели стационарной скорости горения пороха Н, а также параметров его погасания при резком сбросе давления удовлетворительно согласуются с данными экспериментов.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Зельдович Я. Б. К теории горения порохов и взрывчатых веществ // Журн. эксперим. и теорет. физики. — 1942. — Т. 12. — С. 498–524.
2. Зельдович Я. Б. Теория горения пороха и приложение ее к реактивным снарядам // Теория горения порохов и взрывчатых веществ. — М.: Наука, 1982. — С. 186–225.
3. Маршаков В. Н., Лейпунский О. И. Горение и потухание пороха при быстром спаде давления // Физика горения и взрыва. — 1967. — Т. 3, № 2. — С. 231–235.
4. Маршаков В. Н., Лейпунский О. И. К вопросу о механизме горения пороха при спаде давления // Физика горения и взрыва. — 1969. — Т. 5, № 1. — С. 3–7.
5. Зельдович Я. Б., Лейпунский О. И., Либрович В. Б. Теория нестационарного горения пороха. — М.: Наука, 1975.
6. Новожилов Б. В. Нестационарное горение твердых ракетных топлив. — М.: Наука, 1973.
7. Лидский Б. В., Новожилов Б. В., Попов А. Г. Теоретическое исследование нестационарного горения газифицирующегося твердого топлива при спаде давления // Физика горения и взрыва. — 1983. — Т. 19, № 4. — С. 20–24.
8. Архипов В. А., Бондарчук С. С., Березиков А. П., Коротких А. Г. К расчету нестационарной скорости горения в рамках феноменологической теории // Изв. вузов. Физика. — 2009. — Т. 52, № 7/2. — С. 7–10.
9. Архипов В. А., Бондарчук С. С., Жуков А. С., Певченко Б. В. Сравнительный анализ моделей нестационарного горения конденсированных веществ // Изв. вузов. Физика. — 2013. — Т. 56, № 9/3. — С. 117–119.
10. Булгаков В. К., Липанов А. М. Теория эрозивного горения твердых ракетных топлив. — М.: Наука, 2001.
11. Дик И. Г., Селиховкин А. М. Модель зажигания и перехода к горению конденсированного газифицирующегося вещества // Мат. моделирование. — 1991. — Т. 3, № 4. — С. 3–11.
12. Беляев А. А., Каганова З. И., Новожилов Б. В. Горение летучих конденсированных систем за границей устойчивости стационарного режима // Физика горения и взрыва. — 2004. — Т. 40, № 4. — С. 60–66.
13. Гусаченко Л. К., Зарко В. Е., Ивания С. П., Рычков А. Д. Расчет отклика газифицирующегося энергетического материала на действие монохроматического излучения // Физика горения и взрыва. — 2011. — Т. 47, № 1. — С. 30–41.
14. Гусаченко Л. К., Зарко В. Е., Рычков А. Д. Зажигание и гашение гомогенных энергетических материалов световым импульсом // Физика горения и взрыва. — 2012. — Т. 48, № 1. — С. 80–88.
15. Иваницкий М. Ю., Крайнов А. Ю. Моделирование горения высокоэнергетического конденсированного вещества с учетом реакций в газовой фазе // Материалы VI Всерос. науч. конф. «Фундаментальные и прикладные проблемы современной механики». — Томск: Изд-во Том. ун-та, 2008. — С. 115–116.
16. Похил П. Ф., Беляев А. Ф., Фролов Ю. В., Логачев В. С., Коротков А. И. Горение порошкообразных металлов в активных средах. — М.: Наука, 1972.
17. Зарко В. Е., Кискин А. Б. Численное моделирование нестационарного горения пороха при действии светового потока // Физика горения и взрыва. — 1980. — Т. 16, № 6. — С. 54–59.

Поступила в редакцию 23/VI 2014 г.