

УДК 662.612.12

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАЖИГАНИЯ МЕТАЛЛИЗИРОВАННОГО СМЕСЕВОГО ТОПЛИВА «ГОРЯЧЕЙ» ЧАСТИЦЕЙ ПРИ УЧЕТЕ ЗАВИСИМОСТИ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК МАТЕРИАЛОВ И ВЕЩЕСТВ ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ**

*Глушков Д.О.*

*Национальный исследовательский  
Томский политехнический университет, г. Томск*

Процессы зажигания как твердых, так и жидких конденсированных веществ различными источниками нагрева представляют большой интерес в связи с широким распространением в природе [1], промышленном производстве [2] и специальной технике [3]. В последние годы в результате теоретических [4–7] и экспериментальных исследований [8] выявлены основные макроскопические закономерности зажигания представительной группы твердых [6–8] и жидких [4, 5] высокоэнергетических материалов источниками ограниченного теплосодержания. Установлены [4–8] зависимости интегральных характеристик зажигания от большой группы факторов (теплосодержание «горячей» частицы, диффузионный и конвективный теплоперенос в окружающей среде, условия контакта источника зажигания с поверхностью вещества, внедрение в приповерхностный слой и кристаллизация материала источника нагрева), определяющих условия прогрева топлива и последующего стабильного зажигания. Следует отметить, что при численном исследовании [6, 7] процессов зажигания твердых конденсированных веществ использовались несколько идеализированные математические модели реальных физических процессов, в частности, принималось допущение о постоянстве теплофизических характеристик материалов и веществ в течение всего индукционного периода. В то же время автор [4] показал высокую вероятность влияния данного фактора на результаты численного исследования процесса зажигания, особенно в широком диапазоне изменения начальных температур локального источника энергии. По этим причинам представляет интерес анализ влияния учета в математической модели зависимости теплофизических характеристик материалов и веществ от температуры в процессе нагрева смесового твердого топлива (СТТ) на характеристики его зажигания.

Целью данной работы является численное исследование макроскопических закономерностей процесса зажигания структурно-неоднородного металлизированного смесового твердого топлива нагретой до высоких температур частицей металла при учете зависимости теплофизических характеристик материалов и веществ от температуры.

Моделирование исследуемых физико-химических процессов проводилось в системе «смесовое твердое топливо – источник ограниченного теплосодержания – воздух», условная схема которой изображена на рис. 1.

В качестве источника нагрева рассматривалась разогретая до высоких температур стальная частица малых размеров в форме параллелепипеда. Численные исследования выполнены на примере типичного смесового топлива [8] с известными теплофизическими и термохимическими характеристиками.

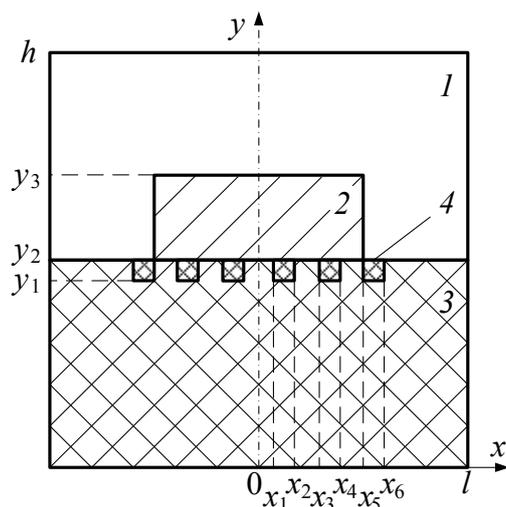


Рис. 1. Схема области решения задачи зажигания металлизированного смесового твердого топлива: 1 – воздух, 2 – «горячая» стальная частица, 3 – «связка» горючего и окислителя, 4 – частица алюминия

Возможны несколько подходов к моделированию гетерогенной структуры реального металлизированного СТТ. Самой простой в реализации является модель, в основе которой лежит предположение о возможности интерпретации металлизированного топлива как среды с некими «эффективными» теплофизическими характеристиками. Значения этих характеристик могут быть определены из расчетных выражений [6].

Второй подход заключается в учете реальной неоднородной («гетерогенной») структуры СТТ. При этом в области решения выделяются участки, соответствующие частицам металла (алюминия), а также «связке» вещества, способного к экзотермическому реагированию (например, бутилкаучука), с окислителем (например, перхлоратом аммония).

В рамках сформулированных выше моделей предполагалась реализация следующей схемы исследуемого процесса. В начальный момент времени ( $t=0$ ) разогретая до высоких температур металлическая частица инерционно осаждается на поверхность металлизированного топлива (рис. 1). Последнее нагревается за счет кондуктивного отвода энергии, аккумулированной в «горячей» частице. При прогреве топлива скорость экзотермической реакции в приповерхностном слое экспоненциально возрастает по закону Аррениуса и приобретает необратимый характер – происходит зажигание.

Численный анализ исследуемого процесса выполнен при следующих допущениях:

1. Форма частицы после осаждения на поверхность топлива не изменяется. Для частиц, находящихся в момент осаждения в твердом состоянии и имеющих относительно невысокие скорости движения, такое допущение является обоснованным.

2. Прилегающий к поверхности слой топлива находится в недеформированном состоянии, и после выпадения частицы не происходит деформации этой поверхности (частица не углубляется в приповерхностный слой). Размягчение многих конденсированных веществ при высоких температурах (800÷1500 К) не сопровождается деформацией приповерхностного слоя, т.к. глубина размягчения

в течение непродолжительного индукционного периода очень мала по сравнению с размерами частицы и не превышает сотой доли миллиметра.

3. Не учитывается возможное выгорание топлива. Оценка масштабности этого процесса проведена автором [5]. Установлено, что в большинстве случаев при локальном нагреве в течение достаточно малых времен (менее 0.5 с) процесс выгорания приповерхностного слоя топлива несущественно влияет на интегральные характеристики зажигания.

4. Кинетические параметры экзотермической реакции, протекающей в приповерхностном слое СТТ, постоянны. Предполагается реализация одной «эффективной» реакции, в которой участвует одно способное к экзотермическому реагированию вещество.

Анализ [4–7] процессов зажигания высокоэнергетических материалов типичными источниками ограниченного теплосодержания показал, что использование при численном моделировании только одного из известных [9, 10] критериев зажигания (В.Н. Вилюнова, Я.Б. Зельдовича, А.А. Ковальского, Д.А. Франк-Каменецкого) не позволяет учесть специфические особенности процессов теплопереноса в системе (рис. 1), связанные с остыванием локального источника энергии.

Поэтому при численном моделировании использовалась следующая совокупность критериев зажигания:

1. Тепло, выделяемое в результате экзотермической реакции в приповерхностном слое топлива, больше тепла, передаваемого от источника нагрева в зону реакции.

2. Температура топлива в зоне локализации ведущей экзотермической реакции выше начальной температуры «горячей» частицы.

Задача зажигания металлизированного СТТ решена в осесимметричной постановке в декартовой системе координат, начало которой совпадает с осью симметрии «горячей» частицы. Комплекс процессов теплопереноса с экзотермическим реагированием в приповерхностном слое топлива при  $0 < t < t_d$  (рис. 1) описывает следующая система нестационарных нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных, удовлетворяющих основным положениям общей теории теплопередачи в химической кинетике [10].

Уравнение теплопроводности для воздуха ( $x_5 < x < l$ ,  $y_2 < y < y_3$ ;  $0 < x < l$ ,  $y_3 < y < h$ ):

$$\rho_1(T)C_1(T)\frac{\partial T_1}{\partial t} = \lambda_1(T)\left(\frac{\partial^2 T_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T_1}{\partial y^2}\right). \quad (1)$$

Уравнение теплопроводности для «горячей» частицы ( $0 < x < x_5$ ,  $y_2 < y < y_3$ ):

$$\rho_2(T)C_2(T)\frac{\partial T_2}{\partial t} = \lambda_2(T)\left(\frac{\partial^2 T_2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T_2}{\partial y^2}\right). \quad (2)$$

Уравнение энергии для «связки» горючего и окислителя ( $0 < x < l$ ,  $0 < y < y_1$ ;  $0 < x < x_1$ ,  $x_2 < x < x_3$ ,  $x_4 < x < x_5$ ,  $x_6 < x < l$ ,  $y_1 < y < y_2$ ):

$$\rho_3(T)C_3(T)\frac{\partial T_3}{\partial t} = \lambda_3(T)\left(\frac{\partial^2 T_3}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T_3}{\partial y^2}\right) + Q_3W_3. \quad (3)$$

Уравнение теплопроводности для частиц алюминия ( $x_1 < x < x_2$ ,  $x_3 < x < x_4$ ,  $x_5 < x < x_6$ ,  $y_1 < y < y_2$ ):

$$\rho_4(T)C_4(T)\frac{\partial T_4}{\partial t} = \lambda_4(T)\left(\frac{\partial^2 T_4}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T_4}{\partial y^2}\right). \quad (4)$$

Массовая скорость экзотермической реакции в приповерхностном слое СТТ определялась уравнением Аррениуса [10]:

$$W_3 = \rho_3 k_3^0 \exp\left(-\frac{E_3}{RT_3}\right).$$

Приняты обозначения:  $t_d$  – время задержки зажигания, с;  $x, y$  – координаты декартовой системы, м;  $l, h$  – размеры области решения, м;  $T_0$  – начальная температура воздуха, частиц алюминия, «связки» горючего и окислителя, К;  $T_p$  – начальная температура «горячей» частицы, К;  $\lambda$  – теплопроводность, Вт/(м·К);  $\rho$  – плотность, кг/м<sup>3</sup>;  $C$  – удельная теплоёмкость, Дж/(кг·К);  $Q_3$  – тепловой эффект экзотермической реакции в приповерхностном слое топлива, Дж/кг;  $W_3$  – массовая скорость экзотермического реагирования «связки» горючего и окислителя, кг/(м<sup>3</sup>·с);  $k_3^0$  – предэкспоненциальный множитель, с<sup>-1</sup>;  $E_3$  – энергия активации экзотермической реакции, Дж/моль;  $R$  – универсальная газовая постоянная, Дж/(моль·К); индексы «1», «2», «3», «4» соответствуют воздуху, «горячей» стальной частице, «связке» горючего и окислителя, частице алюминия.

Краевые условия для рассматриваемой задачи зажигания СТТ (рис. 1) имеют следующий вид.

Начальные ( $t=0$ ) условия:

$$T_1=T_3=T_4=T_0, \quad 0 < x < l, \quad 0 < y < y_2; \quad x_5 < x < l, \quad y_2 < y < y_3; \quad 0 < x < l, \quad y_3 < y < h.$$

$$T_2=T_p, \quad 0 < x < x_5, \quad y_2 < y < y_3.$$

Граничные условия при  $0 < t < t_d$ :

1. На оси симметрии и внешних границах для всех уравнений принимается условие равенства нулю градиентов температуры:

$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0, \quad x=0, \quad 0 < y < h; \quad x=l, \quad 0 < y < h;$$

$$\frac{\partial T}{\partial y} = 0, \quad y=0, \quad 0 < x < l; \quad y=h, \quad 0 < x < l.$$

2. Тепловое взаимодействие между компонентами рассматриваемой системы описывается граничными условиями четвертого рода:

$$x=x_1, \quad x=x_3, \quad x=x_5, \quad y_1 < y < y_2: \quad T_3=T_4, \quad -\lambda_3 \frac{\partial T_3}{\partial x} = -\lambda_4 \frac{\partial T_4}{\partial x};$$

$$x=x_2, \quad x=x_4, \quad x=x_6, \quad y_1 < y < y_2: \quad T_4=T_3, \quad -\lambda_4 \frac{\partial T_4}{\partial x} = -\lambda_3 \frac{\partial T_3}{\partial x};$$

$$x=x_5, \quad y_2 < y < y_3: \quad T_2=T_1, \quad -\lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial x} = -\lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial x};$$

$$y=y_1, \quad x_1 < x < x_2, \quad x_3 < x < x_4, \quad x_5 < x < x_6: \quad T_3=T_4, \quad -\lambda_3 \frac{\partial T_3}{\partial y} = -\lambda_4 \frac{\partial T_4}{\partial y};$$

$$y=y_2, 0 < x < x_1, x_2 < x < x_3, x_4 < x < x_5: T_3=T_2, -\lambda_3 \frac{\partial T_3}{\partial y} = -\lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial y};$$

$$y=y_2, x_5 < x < x_6: T_4=T_1, -\lambda_4 \frac{\partial T_4}{\partial y} = -\lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial y};$$

$$y=y_2, x_6 < x < l: T_3=T_1, -\lambda_3 \frac{\partial T_3}{\partial y} = -\lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial y};$$

$$y=y_3, 0 < x < x_5: T_2=T_1, -\lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial y} = -\lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial y}.$$

Система нелинейных нестационарных дифференциальных уравнений в частных производных (1)–(4), описывающая процесс зажигания металлизированного СТТ разогретой частицей в рамках рассматриваемой модели (рис. 1), с соответствующими начальными и граничными условиями решалась методом конечных разностей [11]. Разностные аналоги дифференциальных уравнений решались локально-одномерным методом [11]. Для решения одномерных разностных уравнений применялся метод прогонки при использовании неявной четырехточечной разностной схемы [11]. Нелинейные уравнения решались методом итераций [12].

Верификация математической модели и оценка достоверности результатов численного исследования предусматривала их сравнение с известными результатами экспериментов [8], а также проверку консервативности используемых разностных схем. Кроме того, выполнено тестирование примененных численных методов и разработанного алгоритма решения систем нелинейных нестационарных дифференциальных уравнений в частных производных с соответствующими начальными и граничными условиями на примере группы менее сложных задач теплопроводности и экзотермического реагирования.

Численное исследование процессов зажигания выполнено при следующих значениях параметров [3, 13, 14]: начальные температуры воздуха, частиц алюминия, «связки» горючего и окислителя  $T_0=300$  К, стальной частицы  $T_p=900 \div 1500$  К; тепловой эффект экзотермической реакции  $Q_3=3.298 \cdot 10^3$  кДж/кг; энергия активации  $E_3=49.812$  кДж/моль; предэкспонент  $k_3^0=10^6$  с<sup>-1</sup>; размеры области решения  $l=10 \cdot 10^{-3}$  м,  $h=20 \cdot 10^{-3}$  м; размеры «горячей» стальной частицы  $l_p=2.5 \cdot 10^{-3}$  м,  $h_p=2 \cdot 10^{-3}$  м; размеры частиц алюминия  $l_g=h_g=0.1 \cdot 10^{-3}$  м. Для определения текущего значения теплофизических характеристик материалов и веществ в системе «смесевое твердое топливо – источник ограниченного теплосодержания – воздух» использовались аппроксимационные выражения, вычисленные по табличным [3, 13, 14] значениям соответствующих характеристик в диапазоне изменения температур  $300 \text{ К} < T < 1500 \text{ К}$ .

В результате проведенных численных исследований с использованием двух вышеописанных подходов к моделированию неоднородной структуры вещества установлены (рис. 2) зависимости времени задержки зажигания  $t_d$  металлизированного смесевое твердого топлива от начальной температуры локального источника энергии.

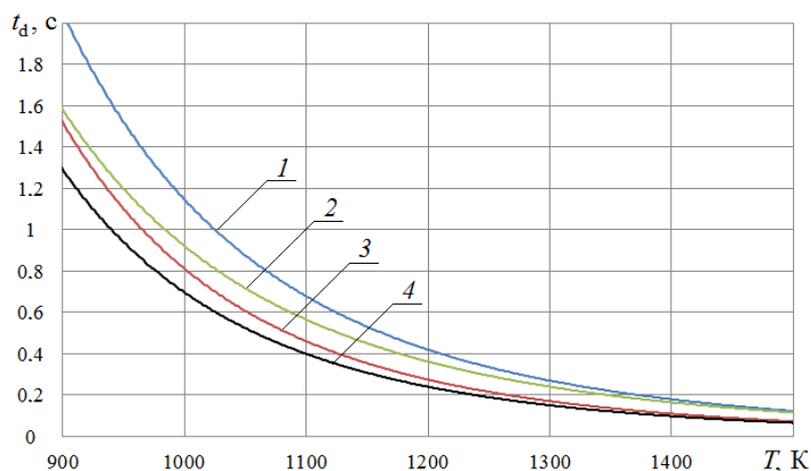


Рис. 2. Зависимость времени задержки зажигания в системе «смесевое твердое топливо – источник ограниченного теплосодержания – воздух» от начальной температуры «горячей» частицы: 1 – при усреднении теплофизических характеристик СТТ ( $\rho=\text{const}$ ,  $C=\text{const}$ ,  $\lambda=\text{const}$ ); 2 – при усреднении теплофизических характеристик СТТ ( $\rho=f(T)$ ,  $C=f(T)$ ,  $\lambda=f(T)$ ); 3 – при учете структурной неоднородности СТТ ( $\rho=\text{const}$ ,  $C=\text{const}$ ,  $\lambda=\text{const}$ ); 4 – при учете структурной неоднородности СТТ ( $\rho=f(T)$ ,  $C=f(T)$ ,  $\lambda=f(T)$ )

Выявлено, что при учете неоднородной структуры СТТ (кривые 3, 4 на рис. 2), интенсивность процесса зажигания превышает аналогичные показатели для гомогенной структуры вещества с усредненными теплофизическими характеристиками (кривые 1, 2 на рис. 2) как для варианта  $\rho=\text{const}$ ,  $C=\text{const}$ ,  $\lambda=\text{const}$ , так и для случая  $\rho=f(T)$ ,  $C=f(T)$ ,  $\lambda=f(T)$ . Это обусловлено тем, что хотя через частицу алюминия, внедренную в приповерхностный слой СТТ (рис. 1), тепло локального источника энергии отводится вглубь топлива значительно быстрее, чем через «связку» горючего и окислителя, в зоне «связки» теплопроводность вещества низкая и температура приповерхностного слоя СТТ растет гораздо быстрее по сравнению с моделью для гомогенного вещества с эффективными теплофизическими характеристиками.

При относительно невысоких начальных температурах источника нагрева ( $T_p < 1300$  К) значения  $t_d$  для вариантов  $\rho=\text{const}$ ,  $C=\text{const}$ ,  $\lambda=\text{const}$  и  $\rho=f(T)$ ,  $C=f(T)$ ,  $\lambda=f(T)$  отличаются существенно (рис. 2) и составляют более 12 %. Это вызвано тем, что стадия прогрева вещества при  $T_p < 1300$  К играет важную роль в общем комплексе процессов теплопереноса в малой окрестности источника нагрева. Относительный масштаб изменения теплофизических характеристик материалов и веществ при  $900 \text{ К} < T_p < 1300 \text{ К}$  превышает аналогичный показатель в диапазоне изменения температур  $1300 < T_p < 1500 \text{ К}$ . Однако при увеличении  $T_p$  возрастает энергетический запас источника нагрева. В таких условиях прогрев СТТ реализуется быстрее и уменьшается влияние этой стадии, а соответственно и зависимости теплофизических характеристик от температуры, на  $t_d$ .

В таблице приведены значения времени задержки зажигания в зависимости от начальной температуры стальной частицы при учете структурной неоднородности СТТ (для варианта  $\rho=f(T)$ ,  $C=f(T)$ ,  $\lambda=f(T)$ ) в сравнении с результатами решения задачи для случая постоянных теплофизических характеристик веществ и материалов.

Таблица. Времена задержки зажигания в системе «смесевое твердое топливо – источник ограниченного теплосодержания – воздух» при  $\rho=f(T)$ ,  $C=f(T)$ ,  $\lambda=f(T)$

$T_p$ , К	1500	1400	1300	1200	1100	1000	900	800
$t_d^*$ , с	0.074	0.111	0.173	0.278	0.467	0.822	1.538	нет зажигания
$t_d^{**}$ , с	0.066	0.098	0.151	0.241	0.401	0.699	1.295	нет зажигания
$\varepsilon$ , %	11.4	12.1	12.7	13.4	14.1	14.9	15.8	–

$t_d^*$  – время задержки зажигания при постоянных значениях теплофизических характеристик материалов и веществ, с;  $t_d^{**}$  – время задержки зажигания с учетом зависимости теплофизических характеристик от температуры

Максимальное отклонение значений времен задержки зажигания с учетом зависимостей теплофизических характеристик веществ и материалов от температуры по сравнению с вариантом  $\rho=\text{const}$ ,  $C=\text{const}$ ,  $\lambda=\text{const}$  составляет 15.8 %. Существенные отклонения  $\varepsilon$  объясняются значительным изменением теплофизических характеристик в достаточно широком диапазоне варьирования температур в системе «смесевое твердое топливо – источник ограниченного теплосодержания – воздух» в течение индукционного периода.

На рис. 3 приведено температурное поле в момент зажигания ( $t_d=0.338$  с) при  $T_p=1300$  К.

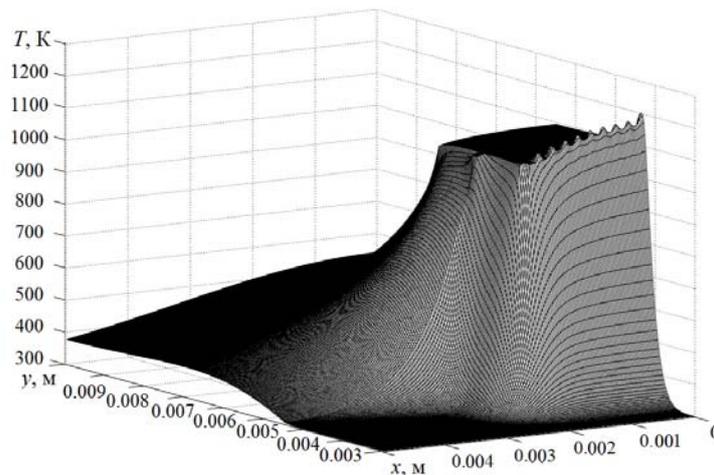


Рис. 3. Температурное поле системы «смесевое твердое топливо – источник ограниченного теплосодержания – воздух» в момент зажигания ( $t_d=0.338$  с) при  $T_p=1300$  К

Графическая иллюстрация (рис. 3) показывает, что зона локализации ведущей экзотермической реакции расположена в непосредственной близости от границы контакта металлизированного СТТ с «горячей» стальной частицей в районе оси симметрии. Также видно, что максимальные градиенты температур на нижней границе контакта источника зажигания с топливом характерны для участков  $0 < x < x_1$ ,  $x_2 < x < x_3$  и т.д. (см. рис. 1), соответствующих «связке» горючего и окислителя. Минимальные градиенты характерны для участков  $x_1 < x < x_2$ ,  $x_3 < x < x_4$  (см. рис. 1), соответствующих расположению частиц алюминия в приповерхностном слое СТТ. Данный результат обусловлен тем, что хотя через частицу алюминия тепло отводится вглубь КВ значительно быстрее, чем через «связку» горючего и окислителя, в зоне «связки» теплопроводность вещества низкая и температура приповерхностного слоя КВ растет достаточно интенсивно. При

дальнейшем смещении в направлении роста  $x$  снижается температура вещества в зоне контакта с источником нагрева за счет дополнительного теплоотвода от боковой поверхности «горячей» частицы.

В результате численного исследования процесса зажигания металлизированного смесового твердого топлива разогретой до высоких температур частицей установлено, что при учете зависимости теплофизических характеристик материалов и веществ от температуры максимальное отклонение значений времен задержки зажигания в сравнении с результатами решения задачи для случая постоянных теплофизических характеристик составляет 15.8 % (при изменении начальной температуры источника зажигания в диапазоне  $900 \text{ K} < T_p < 1500 \text{ K}$ ).

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (госконтракт 2.80.2012).

### Литература

1. Кузнецов Г.В., Барановский Н.В. Прогноз возникновения лесных пожаров и их экологических последствий. Новосибирск: Издательство СО РАН, 2009. – 301 с.
2. Акинин Н.И., Булхов Н.Н., Гериш В.А. Статистический анализ причин аварий и травматизма на опасных производственных объектах // Пожаровзрывобезопасность. – 2010. – № 10. – С. 53–55.
3. Цуцуран В.И., Петрухин Н.В., Гусев С.А. Военно-технический анализ состояния и перспективы развития ракетных топлив. – М.: МО РФ, 1999. – 332 с.
4. Стрижак П.А. Физико-химические аспекты газофазного зажигания жидких топлив источника нагрева малых размеров // Сборник трудов XV международной научно-практической конференции «Современные техника и технологии». – Томск: Изд-во ТПУ, 2009. – С. 334–336.
5. Стрижак П.А. Численный анализ влияния выгорания жидкого топлива на характеристики его зажигания источником ограниченной энергоемкости // Пожаровзрывобезопасность. – 2010. – № 12. – С. 4–8.
6. Глушков Д.О., Кузнецов Г.В., Стрижак П.А. Численное моделирование твердофазного зажигания металлизированного конденсированного вещества нагретой до высоких температур частицей // Химическая физика. – 2011. – Т. 30. – № 12. – С. 35–41.
7. Глушков Д.О., Стрижак П.А. Конвективный тепломассоперенос при зажигании полимерного материала локальным источником нагрева // Бутлеровские сообщения. – 2012. – Т. 29. – № 1. – С. 99–111.
8. Захаревич А.В., Кузнецов Г.В., Максимов В.И. Зажигание модельных смесовых топливных композиций одиночной, нагретой до высоких температур частицей // Физика горения и взрыва. – 2008. – № 5. – С. 54–57.
9. Vilyunov V.N., Zarko V.E. Ignition of solids. – Amsterdam: Elsevier Science Publishers, 1989. – 442 p.
10. Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. – М.: Наука, 1987. – 490 с.
11. Самарский А.А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1983. – 616 с.
12. Коздоба Л.А. Методы решения нелинейных задач теплопроводности. М.: Наука, 1975. – 227 с.
13. Теплотехнический справочник / Под ред. В.Н. Юренева, П.Д. Лебедева. – М.: Энергия, 1975. – Т. 1. – 743 с.
14. Варгафтик Н.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. – М.: ООО «Старс», 2006. – 720 с.