УДК 536.468

ЗАЖИГАНИЕ МЕТАЛЛИЗИРОВАННОГО КОНДЕНСИРОВАННОГО ВЕЩЕСТВА ВНЕДРЕННЫМ В ПРИПОВЕРХНОСТНЫЙ СЛОЙ ЛОКАЛЬНЫМ ИСТОЧНИКОМ ЭНЕРГИИ

Глушков Д.О., Стрижак П.А.

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента Российской Федерации (МК-620.2012.8).

АННОТАЦИЯ

Выполнено численное моделирование процесса зажигания структурно-неоднородного конденсированного вещества типичным источником ограниченного теплосодержания – одиночной разогретой до высоких температур частицей малых размеров в рамках твердофазной модели зажигания. Проведен анализ влияния глубины внедрения разогретой частицы в приповерхностный слой металлизированного вещества на интегральные характеристики зажигания.

ВВЕДЕНИЕ

По результатам теоретических и экспериментальных исследований [1–4] выделены основные макроскопические закономерности зажигания представительной группы твердых конденсированных веществ (КВ) источниками ограниченного теплосодержания. Основное внимание при исследовании твердых КВ уделяется анализу процессов зажигания при положении источника энергии на поверхности вещества (без учета возможного внедрения в приповерхностный слой). В то же время авторы [1] показали высокую вероятность такого внедрения в условиях размягчения материала приповерхностного слоя КВ при его нагреве.

Процесс размягчения при относительно низких температурах полимерных композиционных материалов, к которым можно условно отнести и смесевые твердые ракетные топлива, был установлен не только авторами [1] в выполненных ими исследованиях. Позднее экспериментально этот эффект был выделен также и для широкой группы теплозащитных полимерных материалов [5] на фенолформальдегидных, эпоксидных и эпоксифенольных связующих. Размягчение всех полимерных связующих (в том числе бутилкаучуков) начинается при относительно низких температурах (T≈420÷500 K) много меньших температур поверхности смесевых металлизированных твердых топлив [6], при которых достигаются условия зажигания последних. По этим причинам представляет интерес анализ влияния процесса внедрения нагретой до высоких температур частицы (источника нагрева) в приповерхностный слой топлива на характеристики и условия его зажигания.

В последнее время достаточно интенсивно развиваются модели горения и зажигания топливных композиций, учитывающие реальную структурную неоднородность топлив (присутствие частиц металла). В этой связи целесообразно моделирование процессов теплопереноса в КВ при зажигании проводить с учетом реальной гетерогенной структуры топлива. Результаты [3] показывают, что такие подходы достаточно перспективны – учет неоднородности теплофизических характеристик прогреваемого при зажигании тонкого приповерхностного слоя КВ приводит к изменениям численных значений времен задержки зажигания.

Цель работы – исследование макроскопических закономерностей зажигания металлизированного конденсированного вещества нагретой до высоких температур частицей металла в рамках модели, учитывающей ее внедрение в приповерхностный слой структурно-неоднородного вещества.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Математическое моделирование физико-химических процессов, протекающих при твердофазном зажигании, проводилось на примере системы «стальная частица – конденсированное вещество – газ», условная схема которой приведена на рис.1. Рассмотрены три наиболее характерные варианта взаимного расположения локального источника энергии и реагирующего вещества: «горячая» частица находится на поверхности КВ, частично (рис.1) или полностью внедрена в приповерхностный слой вещества.

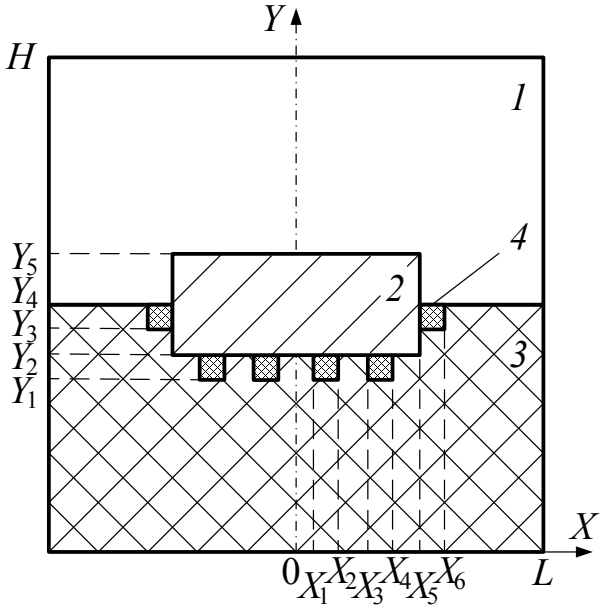

Рис.1 Схема области решения задачи зажигания металлизированного КВ при частичном внедрении источника энергии в приповерхностный слой: 1 – газ, 2 – «горячая» стальная частица, 3 – КВ, 4 – частица алюминия.

Исследования выполнены на примере типичного смесевого топлива, структурная неоднородность которого обусловлена включениями частиц алюминия. В качестве источника зажигания рассматривалась стальная частица в форме параллелепипеда.

Возможны [3] несколько вариантов моделирования гетерогенной структуры металлизированного вещества. В данной работе использован подход, заключающийся в учете реальной неоднородной («гетерогенной») структуры КВ (рис.1). При этом в области решения выделялись участки, соответствующие частицам металла, а также смеси веществ, способных к экзотермическому реагированию (например, бутилкаучука и перхлората аммония). Применение «гетерогенной» модели металлизированного КВ позволяет более детально [3] описать процесс прогрева реакционноспособного слоя вещества вблизи поверхности нагрева.

Одной из задач исследования было сравнение интегральных характеристик процессов зажигания, полученных при численном анализе с использованием «гетерогенной» модели, «гомогенной» модели неметаллизированного КВ и математической модели, в основе которой лежит предположение о возможности интерпретации металлизированного КВ как среды с некими «эффективными» теплофизическими характеристиками.

Принята следующая схема исследуемого процесса. Предполагалось, что в начальный момент времени (τ=0) «горячая» частица – источник нагрева расположена на поверхности КВ или внедрена в приповерхностный слой (рис.1). Металлизированное КВ нагревается за счет энергии, аккумулированной в стальной частице. При прогреве вещества скорость экзотермической реакции в приповерхностном слое экспоненциально возрастает по закону Аррениуса. Считалось, что твердофазное зажигание КВ происходит при выполнении следующих условий [6]:

1. Тепловой поток ведущей экзотермической реакции в приповерхностном слое КВ превышает поток, передаваемый от источника нагрева.

2. Температура КВ превышает начальную температуру «горячей» частицы.

Исследования выполнены для источника нагрева размерами L_p и H_p, частиц алюминия размерами L_g и H_g. В веществе и газе выделялись области с характерными размерами L и H, существенно большими, чем L_p, H_p, L_g, H_g (рис.1).

Задача зажигания металлизированного КВ локальным источником энергии решена в декартовой системе координат в осесимметричной постановке (рис.1). Система координат принималась неподвижной. Считалось, что частица не перемещается в веществе, границы контакта частицы и КВ не деформируются. Не учитывались возможные тепловые эффекты фазового перехода (плавления) в КВ, потому что типичные твердые топлива представляют собой термореактивные поли-

меры, которые при нагревании не плавятся [7], а размягчаются в определенном диапазоне температур.

Следует отметить, что в реальных топливных композициях частицы металла распределяются по объему КВ достаточно равномерно [7], хотя возможны и некоторые локальные отклонения от однородного пространственного распределения. Принятые при постановке задачи схемы расположения частиц алюминия относительно источника нагрева (рис.1) с одной стороны достаточно условны, с другой стороны наиболее вероятны. При неизменной концентрации частиц алюминия в топливной массе изменение положения отдельных частиц относительно контура источника нагрева не может существенно повлиять на условия теплоотвода. Исходя из общей теории [6] и частных решений [2,3] можно обоснованно предполагать, что условия зажигания должны выполняться в сечении, соответствующем максимальной плотности теплового потока по нормали к поверхности КВ при минимальной теплопроводности вещества. Поэтому смещение по направлениям X или Y одной или двух частиц из рассматриваемой (рис.1) совокупности не должно кардинально менять условия зажигания.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И МЕТОД РЕШЕНИЯ

Процессы теплопереноса с учетом экзотермического реагирования в приповерхностном слое КВ для наиболее общего случая (рис.1) при $0<\tau<\tau_d$ описывает математическая модель, представленная системой нестационарных нелинейных дифференциальных уравнений, записанных в безразмерных переменных [8,9].

Уравнение теплопроводности для газа ($X_4<X<L$, $Y_4<Y<Y_5$; $0<X<L$, $Y_5<Y<H$):

$$\frac{1}{\mathrm{Fo}_1}\frac{\partial\Theta_1}{\partial\tau}=\frac{\partial^2\Theta_1}{\partial X^2}+\frac{\partial^2\Theta_1}{\partial Y^2}. \quad (1)$$

Уравнение теплопроводности для «горячей» стальной частицы ($0<X<X_4$, $Y_2<Y<Y_5$):

$$\frac{1}{\mathrm{Fo}_2}\frac{\partial\Theta_2}{\partial\tau}=\frac{\partial^2\Theta_2}{\partial X^2}+\frac{\partial^2\Theta_2}{\partial Y^2}. \quad (2)$$

Уравнение энергии для неметаллизированной части КВ ($0<X<L$, $0<Y<Y_1$; $0<X<X_1$, $X_2<X<X_3$, $X_4<X<L$, $Y_1<Y<Y_2$; $X_5<X<L$, $Y_2<Y<Y_3$; $X_6<X<L$, $Y_3<Y<Y_4$):

$$\frac{1}{\mathrm{Fo}_3}\frac{\partial\Theta_3}{\partial\tau}=\frac{\partial^2\Theta_3}{\partial X^2}+\frac{\partial^2\Theta_3}{\partial Y^2}+Q_3W_3\frac{l^2}{\lambda_3T_\mathrm{m}}. \quad (3)$$

Уравнение теплопроводности для частиц алюминия ($X_1<X<X_2$, $X_3<X<X_4$, $Y_1<Y<Y_2$; $X_5<X<X_6$, $Y_3<Y<Y_4$):

$$\frac{1}{\mathrm{Fo}_4}\frac{\partial\Theta_4}{\partial\tau}=\frac{\partial^2\Theta_4}{\partial X^2}+\frac{\partial^2\Theta_4}{\partial Y^2}. \quad (4)$$

Здесь: τ – безразмерное время ($\tau=t/t_m$); τ_d – безразмерное время задержки зажигания ($\tau_d=t_d/t_m$); t_d – время задержки зажигания, с; t_m – масштаб времени, с; h, l – характерные размеры области решения в проекции на ось x, y, м; H, L – безразмерные аналоги h, l; X, Y – безразмерные координаты, соответствующие размерным величинам x, y ($X=x/l$, $Y=y/l$); Fo – число Фурье ($\mathrm{Fo}=\lambda t_m/(\rho Cl^2)$); Q_3 – тепловой эффект экзотермической реакции, протекающей в приповерхностном слое КВ, Дж/кг; W_3 – массовая скорость экзотермической реакции, кг/(м^3•с); Θ – безразмерная температура ($\Theta=T/T_m$); T_m – масштаб температуры, К; T_0 – начальная температура КВ и газа, К; T_p – начальная температура «горячей» частицы, К; λ – теплопроводность, Вт/(мК); ρ – плотность, кг/м^3; C – удельная теплоёмкость, Дж/(кгК); индексы «1», «2», «3», «4» соответствуют инертному газу, «горячей» стальной частице, КВ, частицам алюминия.

Эффективные теплофизические характеристики металлизированного КВ, при замене неоднородной структуры однородной средой, рассчитывались по формулам [10]:

$$1/\lambda_3=\varphi_{31}/\lambda_{31}+\varphi_4/\lambda_4, \quad (5)$$

$$1/C_3=\varphi_{31}/C_{31}+\varphi_4/C_4, \quad (6)$$

$$1/\rho_3=\varphi_{31}/\rho_{31}+\varphi_4/\rho_4, \quad (7)$$

где φ_{31}, φ_4 – объемные доли компонентов КВ и частиц алюминия соответственно ($\varphi_{31}+\varphi_4=1$, $\varphi_4=0.05$).

Краевые условия для рассматриваемой задачи зажигания записывались аналогично [3]. Для модели, представленной на рис.1, краевые условия имеют следующий вид.

Начальные ($\tau=0$) условия:

$\Theta_1=\Theta_3=\Theta_4=\Theta 0$, $0<X<L$, $0<Y<Y_2$; $X_5<X<L$, $Y_2<Y<Y_5$; $0<X<L$, $Y_5<Y<H$; $\Theta_2=\Theta p$, $0<X<X_5$, $Y_2<Y<Y_5$.

Граничные условия при $0<\tau<\tau_d$:

1. На оси симметрии и внешних границах области решения для всех уравнений принимается условие равенства нулю градиентов соответствующих функций.

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

При переходе к безразмерным переменным использовались следующие масштабные величины: l – характерный размер области решения (l=0.01 м); t_m – масштаб времени (t_m=1 с); T_m – масштаб температуры (T_m=1000 К).

Массовая скорость экзотермической реакции определялась уравнением Аррениуса [8]:

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

где k_3^0 и E_3 соответственно предэкспоненциальный множитель (c^{-1}) и энергия активации (Дж/моль) экзотермической реакции, протекающей в приповерхностном слое КВ; R – универсальная газовая постоянная, Дж/(мольК).

Алгоритм решения задачи зажигания в рассматриваемой постановке аналогичен [3]. При этом система уравнений (1)–(4) решалась методом конечных разностей. Разностные аналоги дифференциальных уравнений решались локально-одномерным методом. Метод итераций и метод прогонки применялись для решения одномерных разностных уравнений. Достоверность полученных результатов определялась проверкой консервативности разностной схемы.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Численное моделирование выполнено при следующих достаточно типичных для практики [4] значениях параметров процесса зажигания КВ: начальная температура области решения Θ_0=0.3; начальная температура «горячей» стальной частицы Θ_p=1÷1.5; размеры источника энергии L_p=0.2, H_p=0.2; размеры частиц алюминия L_g=0.01, H_g=0.01; расстояние между частицами алюминия вдоль оси X (рис.1) ΔL_g=0.01; характерные размеры области решения L=1, H=1.

Теплофизические характеристики материалов и веществ [10–12] следующие:

λ_1=0.026 Вт/(мК); ρ_1=1.161 кг/м^3; C_1=1190 Дж/(кгК);

λ_2=36 Вт/(мК); ρ_2=8100 кг/м^3; C_2=545 Дж/(кгК);

λ_3=0.472 Вт/(мК); ρ_3=1776 кг/м^3; C_3=1500 Дж/(кгК);

λ_4=343 Вт/(мК); ρ_4=2700 кг/м^3; C_4=930 Дж/(кгК).

Кинетические параметры зажигания КВ определялись аналогично [3] по известным экспериментальным зависимостям $\tau_d=f(\Theta_p)$ [4]. Установлены следующие параметры экзотермической реакции, протекающей в приповерхностном слое неметаллизированного КВ, $E_3=49.812\cdot10^3$ Дж/моль, $Q_3k_3^0=1.857\cdot10^9$ Дж/(кг·с). Аналогичные кинетические параметры для металлизированного состава с эффективными теплофизическими характеристиками составили $E_3=55.914\cdot10^3$ Дж/моль, $Q_3k_3^0=3.112\cdot10^9$ Дж/(кг·с).

Задача численного анализа исследуемого процесса (рис.1) состояла в установлении масштабов влияния глубины внедрения источника энергии в приповерхностный слой структурно-неоднородного КВ на интенсивность теплопереноса и интегральные характеристики зажигания.

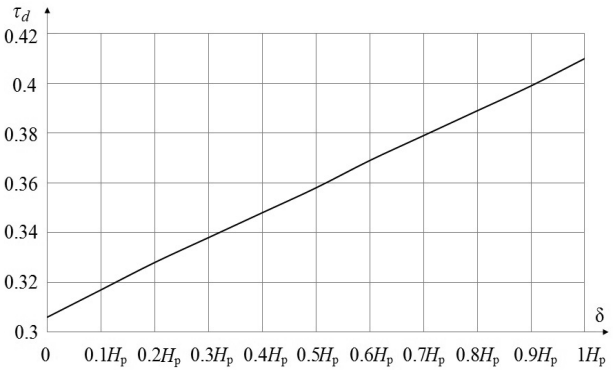

Рис.2 Зависимость времени задержки зажигания в системе «стальная частица – металлизированное КВ – газ» от глубины внедрения источника зажигания в приповерхностный слой при Θ_p=1.2.

При сравнении наиболее характерных вариантов взаимного расположения локального источника энергии и реагирующего вещества (рис.1) в качестве анализируемой характеристики выбрано время задержки зажигания τ_d. Основным фактором, определяющим τ_d, является энергетический запас источника нагрева [6], который в большей степени [3] характеризуется его начальной температурой. Поэтому численные исследования выполнены при ва-

рьировании температуры источника в достаточно широком диапазоне.

На рис.2 приведена зависимость времени задержки зажигания от глубины внедрения (δ) источника энергии в приповерхностный слой металлизированного КВ при учете его гетерогенной структуры.

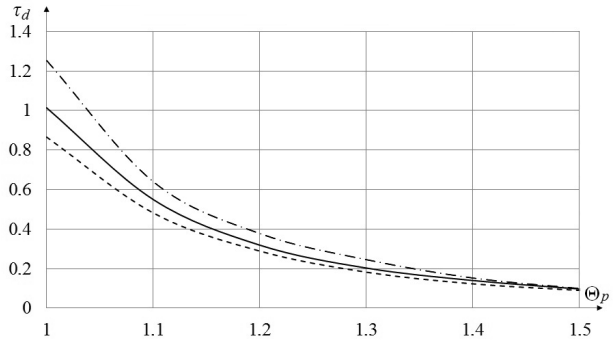

Рис.3 Зависимость времени задержки зажигания от начальной температуры стальной частицы: ---- – при δ=0, —— – при $\delta=0.5H_p$, –·– – при $\delta=H_p$.

Установлено, что увеличение δ приводит к росту времени задержки зажигания. Полученный результат можно объяснить тем, что при увеличении глубины внедрения частицы в вещество ($\delta=0.1H_p \div H_p$) значительно возрастает площадь поверхности источника, с которой осуществляется теплоотвод в КВ. Как следствие, снижается плотность теплового потока в зону максимальных температур на оси симметрии X=0, где выполняются условия зажигания. Последнее приводит к увеличению длительности стадии прогрева вещества в общем комплексе процессов теплопереноса в малой окрестности источника нагрева (при увеличении δ частица быстрее остывает и её теплосодержание уменьшается). В результате интенсивность процесса зажигания снижается.

На рис.3 приведены зависимости времени задержки зажигания КВ от начальной температуры частицы при разных глубинах внедрения последней в приповерхностный слой вещества.

Видно, что увеличение глубины внедрения одиночной частицы в слой КВ приводит к росту времени задержки зажигания при прочих равных условиях. Кроме того, можно отметить, что установленные закономерности проявляются более масштабно при уменьшении температуры источника нагрева. При достаточно высоких начальных температурах (Θ_p>1.3) частиц величина δ оказывает слабое влияние на условия и характеристики зажигания.

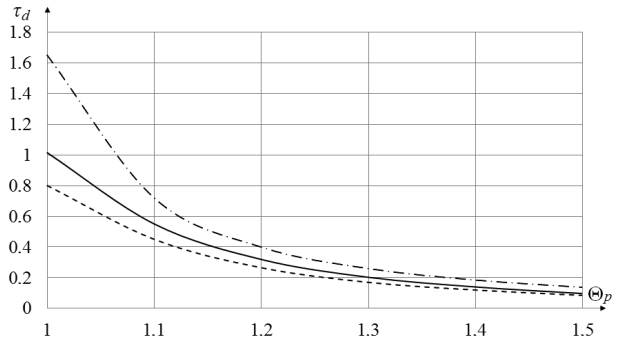

Рис.4 Зависимость времени задержки зажигания от начальной температуры стальной частицы ($\delta=0.5H_p$): ---- – неметаллизированное КВ, —— – структурно-неоднородное металлизированное КВ, –·– – металлизированное КВ с эффективными теплофизическими характеристиками.

Зависимости времени задержки зажигания от начальной температуры локального источника нагрева при его частичном внедрении ($\delta=0.5H_p$) в приповерхностный слой КВ (три разные модели теплопередачи) представлены на рис.4. Сравнение полученных зависимостей позволяет сделать вывод о том, что усреднение по объему КВ теплофизических характеристик всех компонентов приводит к значительному росту времен задержки зажигания в области относительно низких Θ_p. Это объясняется увеличением теплопроводности приповерхностного слоя условно «гомогенизированного» вещества. Соответственно возрастает скорость отвода энергии от поверхности нагрева вглубь топлива. В результате теплота через приповерхностный слой КВ проходит быстрее и температура поверхности нагрева в идентичные моменты времени будет существенно меньше достигаемых в двух других случаях («гетерогенная» модель металлизированного КВ и «гомогенная» модель неметаллизированного КВ).

Также установлено, что гетерогенная структура КВ оказывает слабое влияние на условия и характеристики зажигания при достаточно высоких начальных температурах частиц (Θ_p>1.3). Очевидно, что при очень высоких тепловых потоках в зону экзотермической реакции изменение эффективных теплофизических характеристик

приповерхностного слоя при расчете по формулам (5–7) оказывает слабое влияние на интенсивность разогрева поверхности КВ.

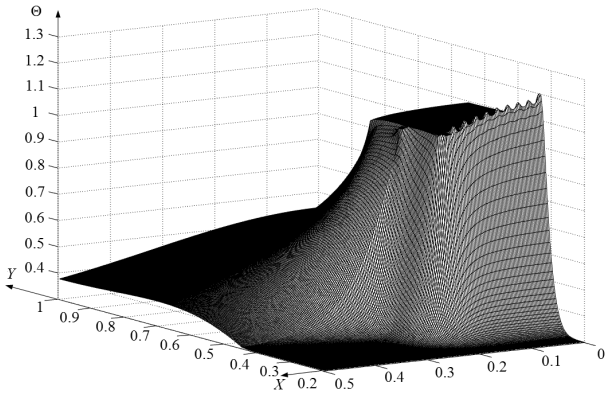

Рис.5 Температурное поле системы «стальная частица – металлизированное КВ – газ» в момент зажигания (τ_d=0.358) при Θ_p=1.2, δ=0.5H_p.

На рис.5 приведено температурное поле в системе «стальная частица – металлизированное КВ – газ» при частичном погружении источника зажигания и параметрах Θ_p=1.2, δ=0.5H_p.

Положение характерных изотерм представлено на рис.6.

Графические иллюстрации (рис.5,6) показывают, что зона локализации ведущей экзотермической реакции расположена в непосредственной близости от границы контакта металлизированного КВ с «горячей» частицей в районе оси симметрии. Также видно, что максимальные градиенты температур на нижней границе контакта источника зажигания с КВ характерны для участков $0<X<X_1$ (см. рис.1), соответствующих «связке» горючего и окислителя. Минимальные градиенты характерны для участков $X_1<X<X_2$ (см. рис.1), соответствующих расположению частиц алюминия в приповерхностном слое КВ. 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 значительного теплоотвода от боковой поверхности «горячей» частицы в КВ.

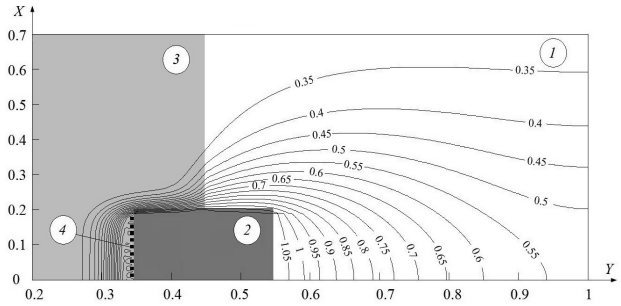

Рис.6 Изотермы (Θ) системы «стальная частица – металлизированное КВ – газ» в момент зажигания (τ_d=0.358) при Θ_p=1.2, δ=0.5H_p: 1 – газ, 2 – «горячая» стальная частица, 3 – КВ, 4 – частица алюминия.

Следует отметить, что за время τ_d приповерхностный слой КВ ввиду относительно малой теплопроводности вещества прогревается до уровня интенсивного развития экзотермической реакции на глубину, соизмеримую с размерами частиц алюминия. Последние в свою очередь несколько увеличивают эффективную теплопроводность приповерхностного слоя КВ, что с одной стороны приводит к росту времени задержки зажигания по сравнению с неметаллизированным составом, с другой стороны способствует последующей реализации устойчивого процесса горения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате численных исследований процесса зажигания структурно-неоднородного металлизированного конденсированного вещества одиночной нагретой до высоких температур стальной частицей установлены зависимости времен задержки зажигания от начальной температуры и глубины внедрения локального источника энергии в приповерхностный слой вещества. Показано, что условия взаимодействия локальных источников нагрева с твердыми металлизированными КВ (особенно в области относительно низких температур ис-

точников) достаточно существенно влияют на интегральные характеристики зажигания.

Разработанную модель и полученные результаты теоретических исследований можно применять для оптимизации процессов зажигания и обеспечения последующего стационарного горения структурно-неоднородных конденсированных веществ в специальных установках.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гольдшлегер У.И. О механизме и закономерностях зажигания конденсированных систем дисперсным потоком / У.И. Гольдшлегер, В.В. Барзыкин, А.Г. Мержанов // Физика горения и взрыва.– 1971.– № 3.– С. 318 – 332.
2. Кузнецов Г.В. Зажигание конденсированного вещества частицей / Г.В. Кузнецов, Г.Я. Мамонтов, Г.В. Таратушкина // Химическая физика.– 2004.– № 3.– С. 67 – 72.
3. Глушков Д.О. Численное моделирование твердофазного зажигания металлизированного конденсированного вещества нагретой до высоких температур частицей / Д.О. Глушков, Г.В. Кузнецов, П.А. Стрижак // Химическая физика.– 2011.– Т. 30.– № 12.– С. 35 – 41.
4. Захаревич А.В. Зажигание модельных смесевых топливных композиций одиночной, нагретой до высоких температур частицей / А.В. Захаревич, В.Т. Кузнецов, Г.В. Кузнецов, В.И. Максимов // Физика горения и взрыва.– 2008.– Т. 44.– № 5.– С. 54 – 57.
5. Страхов В.Л. Математическое моделирование теплофизических и термохимических процессов при горении вспучивающихся огнезащитных покрытий / В.Л. Страхов, А.Н. Гаращенко, Г.В. Кузнецов, В.П. Рудзинский // Физика горения и взрыва. 2001.– Т. 37.– № 2.– С. 63 – 73.
6. Vilyunov V.N. Ignition of Solids / V.N. Vilyunov, V.E. Zarko. – Amsterdam: Elsevier Science Publishers, 1989.– 442 p.
7. Современная химия ракетного топлива / Под ред. И.И. Моисеева.– М.: Атомиздат, 1972.– 296 с.
8. Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике / Д.А. Франк-Каменецкий.– М.: Наука, 1987.– 502 с.
9. Зельдович Я.Б. К теории горения порохов и взрывчатых веществ. В кн.: Теория горения порохов и взрывчатых веществ / Я.Б. Зельдович.– М.: Наука, 1982.– 49 с.
10. Чиркин В.С. Теплофизические свойства материалов. Справочное руководство / В.С. Чиркин.– М.: Гос. изд-во физ.-матем. лит-ры, 1959.– 356 с.
11. Цуцуран В.И. Военно-технический анализ состояния и перспективы развития ракетных топлив / В.И. Цуцуран, Н.В. Петрухин, С.А. Гусев. – М.: МО РФ, 1999.– 332 с.