

УДК 544.452:544.427

ПОДЖИГАНИЕ МАССИВА БЕЗГАЗОВОЙ СМЕСИ ВОЛНОЙ ГОРЕНИЯ

© 2024 г. А. П. Алдушин¹, П. М. Кришеник^{1*}, С. А. Рогачев¹

¹Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения им. А.Г. Мержанова,
Российской академии наук, Черноголовка, Россия

*E-mail: petr@ism.ac.ru

Поступила в редакцию 13.04.2023;
после доработки 15.11.2023;
принята в печать 20.12.2023

Методами математического моделирования исследовано инициирование горения большой массы конденсированной смеси при локальном контакте с торцом горящего слоя. Показано, что минимальная ширина поджигающего слоя пропорциональна ширине теплового фронта волны горения. Коэффициент пропорциональности определяется начальной температурой, теплотой и энергией активации реакции. Результаты расчетов могут быть использованы для оценки эффективной энергии активации реакции, контролирующей процесс горения конкретной безгазовой системы.

Ключевые слова: безгазовое горение, очаговое зажигание, критические условия, устойчивость горения.

DOI: 10.31857/S0207401X24050044

1. ВВЕДЕНИЕ

Поджигание конденсированных систем локальным источником относится к группе задач очагового инициирования, составляющих отдельное направление тепловой теории воспламенения. Изначально интерес к этой теме возник в связи с проблемами обеспечения безопасности производства и хранения взрывчатых веществ. Дальнейший импульс исследований связан с развитием технологического горения, оперирующего большими объемами реакционных смесей и необходимостью локального инициирования процесса.

Основополагающей для теории очагового воспламенения принято считать работу А.Г. Мержанова [1], в которой путем математического моделирования были определены критические условия воспламенения нагретого очага внутри большого объема горючего. Показано, что распространение экзотермической реакции происходит после сгорания очага, а критические условия зажигания зависят не только от кинетических параметров горения, но и от масштабных характеристик как очага, так и поджигаемой среды. В работах [2–4] с помощью численного анализа изучено влияние конфигурации очага на инициирование горения в массиве горючей смеси. В работе [5] численно и экспериментально исследована устойчивость

перехода волны горения в безгазовых системах через клинообразную инертную преграду. Установлено, что растяжение и сжатие фронта в переходной зоне оказывают влияние на критические условия инициирования горения за преградой. В работе [6] показано, что аналитического решения задачи по определению критических условий зажигания бесконечного “объема” локальным высокотемпературным очагом не существует. В классической теории очагового воспламенения не рассматривается вопрос о способе создания локального очага разогрева внутри реакционного объема, что создает определенные проблемы для экспериментальной проверки математической модели. Рассматриваемая в данной работе схема локального инициирования горения, напротив, выглядит вполне реалистичной для сравнения расчетов с экспериментом.

В качестве объекта исследования рассмотрена модель “твердого пламени”, т.е. предполагается, что за фронтом экзотермической реакции, распространяющейся по твердому веществу, остаются продукты реакции в конденсированном состоянии [7]. Волновому превращению таких систем предшествует существенно нестационарный процесс, который охватывает промежуток времени от начала взаимодействия внешнего источника тепла,

до установления стационарной волны горения. Исследование условий выхода на установившийся режим горения большой массы смеси при локальном поджигании волной горения, распространяющейся по слою конечной ширины, было предметом настоящего исследования.

2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Рассматривается горение системы, состоящей из двух слоев конденсированной реакционной смеси одинаковой толщины и различной ширины, имеющих тепловой контакт, как показано на рис. 1. Для моделирования взята достаточно большая прямоугольная область шириной D_2 и длиной L_2 (рис. 1, область 2), имитирующая массив безгазовой смеси. Одним из основных параметров задачи является ширина поджигающего слоя D_1 . В зависимости от величины D_1 волна горения, инициированная в поджигающем слое 1, могла проникнуть в массив 2, либо затухнуть. Чтобы подчеркнуть, что затухание не связано с теплотериями во внешнюю среду, рассматривается адиабатический вариант процесса, исключающий потери тепла из системы. Физически это отвечает тому, что слои теплоизолированы. Падение температуры при инициировании горения в большом объеме связано с “растяжением” зоны реакции в процессе выхода горения на установившийся режим [6, 8].

В размерной форме система уравнений, описывающая горение конденсированных слоев, имеет вид

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + qK(T)f(\eta), \quad (1)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = K(T)f(\eta), \quad K(T) = K_0 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right). \quad (2)$$

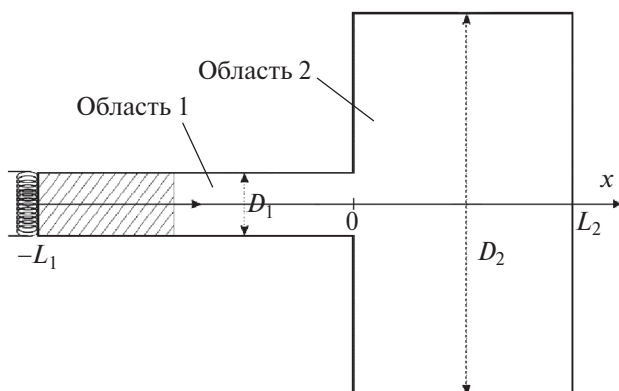


Рис. 1. Схема горения: прямоугольная область 2 инициируется поджигающей областью 1.

Начальные условия ($t = 0$) в области 1

$$(-L_1 < x \leq 0, -D_1/2 \leq y \leq D_1/2)$$

и в области 2 ($0 < x \leq L_2, -D_2/2 \leq y \leq D_2/2$):

$$\eta = 0, T = T_0.$$

Условия инициирования волны горения в поджигающем слое —

$$t < t_{ign}: T_{x=-L_1} = T_{ign} = T_{ad}, \quad t > t_{ign}: \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=-L_1} = 0.$$

Здесь T — температура среды, T_0 — начальная температура, $T_r = T_0 + q$ — адиабатическая температура горения, E — энергия активации химической реакции, K_0 — предэкспоненциальный множитель, R — газовая постоянная, $q = Q/c$, Q — тепловой эффект реакции, c — теплоемкость среды, η — глубина превращения реакционной смеси, t , x и y — время и пространственные координаты, κ — температуропроводность среды. Теплотериями через боковые стороны пренебрегаем:

$$x = L_2, \quad -\frac{D_2}{2} \leq y \leq \frac{D_2}{2};$$

$$x = 0, y \in \left[-\frac{D_2}{2}, -\frac{D_1}{2}\right] \cup \left[\frac{D_1}{2}, \frac{D_2}{2}\right]: \quad \frac{\partial T}{\partial x} = 0;$$

$$-L_1 \leq x \leq 0, \quad y = \frac{-D_1}{2} \text{ и } y = \frac{D_1}{2}; \quad 0 \leq x \leq L_1,$$

$$y = \frac{-D_2}{2} \text{ и } y = \frac{D_2}{2}: \quad \frac{\partial T}{\partial y} = 0.$$

Анализ задачи проводился в безразмерных переменных. Безразмерная форма системы уравнений (1), (2) имеет вид

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial \psi^2} + Ze \exp\left(\frac{\theta}{1 + \theta/Ar}\right) f(\eta), \quad (3)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial \tau} = \exp\left(\frac{\theta}{1 + \theta/Ar}\right) f(\eta), \quad f(\eta) = 1 - \eta. \quad (4)$$

Здесь использованы следующие безразмерные переменные и параметры:

$$\theta = \frac{(T - T_r)E}{RT_r^2}, \quad \theta_0 = Ar(T_{0r} - 1),$$

$$Ar = E/RT_r - \text{число Аррениуса}, \quad \xi = x/x_*,$$

$$\psi = \frac{y}{x_*}, \quad \tau = \frac{t}{t_*}, \quad t_* = \frac{1}{K(T_r)}, \quad x_* = \sqrt{\kappa t_*}, \quad d_1 = \frac{D_1}{x_*},$$

$$T_{0r} = T_0 / T_r, \quad d_2 = \frac{D_2}{x_*}, \quad l_1 = \frac{L_1}{x_*}, \quad l_2 = \frac{L_2}{x_*},$$

$$Ze = (T_r - T_0)E / RT_r^2 = Ar(1 - T_{0r})$$

— число Зельдовича.

Основными параметрами, определяющими решение задачи, являются безразмерная ширина поджигающего слоя d_1 , число Аррениуса Ar , T_{0r} — отношение начальной температуры T_0 к адиабатической температуре горения T_r . Величины d_2 , l_2 выбирались достаточно большими во избежание влияния на значение критической ширины поджигающего слоя. При формулировке задачи в качестве модельной зависимости $f(\eta)$ принята кинетическая функция первого порядка. Проведенные тесты показали, что конкретный вид функции $f(\eta)$ слабо влияет на критические условия поджигания массива.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Волновое зажигание

При волновом зажигании после инициирования реакции в поджигающем слое шириной d_1 формируется волна, которая распространяется в направлении области 2 (рис. 1). В зависимости от значения параметров Ar и T_{0r} скорость продвижения зоны реакции в поджигающем слое может оставаться постоянной или периодически изменяться во времени. В качестве маркера положения фронта волны удобно выбрать изолинию постоянной температуры $T = T_m$, где T_m — близкое к начальной температуре T_0 значение. Особенность низкотемпературного участка температурного профиля, являющегося предвестником зоны горения, заключается в том, что при установившемся режиме распространения все его точки движутся с постоянной скоростью U [9]. В случае стационарного горения эта скорость совпадает с мгновенной скоростью продвижения фронта реакции. При автоколебательном, спиновом и других периодических режимах горения величина U совпадает со средней скоростью распространения фронта.

В данной работе в качестве T_m выбиралось значение $T_m = T_0 + T_0/Ar$, что соответствует безразмерной температуре $\theta_m = \theta_0 + T_{0r}$. Безразмерная скорость волны горения ω определяется по ско-

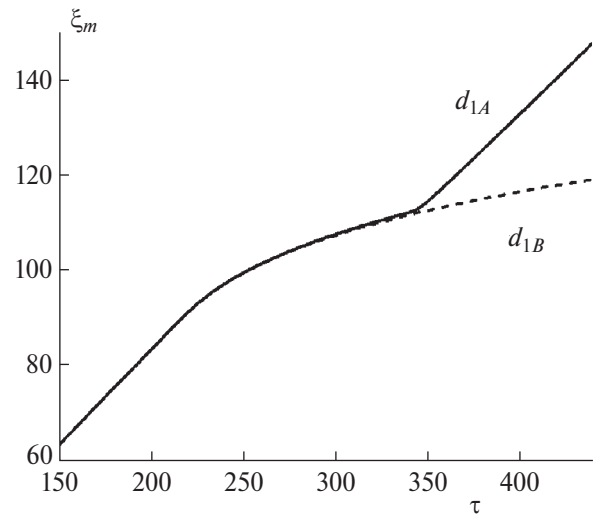


Рис. 2. Траектория распространения волны горения при сверхкритической ($d_{1A} = 24.1$) и докритической ($d_{1A} = 24.0$) ширине поджигающего слоя при $Ar = 6$, $T_{0r} = 0.1$, $Ze = Ar(1 - T_{0r})$.

рости распространения точки с координатой ξ_m , отвечающей температуре θ_m :

$$\omega = d\xi_m/d\tau, \quad \xi_m = \xi(\theta_m).$$

Размерная скорость горения U связана с безразмерным значением ω соотношением

$$U = dx_m/dt = (x_*/t_*)\omega, \quad x_m = x(T_m).$$

Динамику проникновения горения в слой 2 можно проследить по траектории движения маркера волны, $\xi_m(\tau)$. Поведение этой кривой зависит как от физико-химических характеристик системы, Ar , T_{0r} , так и от выбранной ширины d_1 поджигающего слоя. На рис. 2 показаны траектории движения волны горения $\xi_m(\tau)$ при разных значениях d_1 . Линейный участок кривых в начале процесса отвечает установившемуся режиму горения поджигающего слоя с постоянной скоростью. Далее следует замедление фронта при подходе к границе контакта поджигающего слоя с воспламеняемым слоем шириной d_2 , которое заканчивается либо затуханием горения ($d_1 = d_{1B}$), либо установившимся распространением волны реакции в большом объеме ($d_1 = d_{1A}$). При численном счете разница между поджигающим и неподжигающим значениями d_1 составляла менее 1%. Это позволяет говорить о пороговом явлении, характерном для процессов воспламенения.

Расчет критической ширины d_1 поджигающего слоя в модельной задаче позволяет подойти к оценке данной величины для реальных безгазовых

систем. Размерное значение критической ширины определяется как $D_1^{cr} = d_1^{cr} \cdot x_* = d_1^{cr} \cdot \omega \cdot \kappa / U$, где U и ω — размерная и безразмерная скорости горения поджигающего слоя. Располагая экспериментальными значениями κ , U и рассчитанными значениями безразмерных критических величин d_1^{cr} , ω , можно оценить значение ширины в размерном виде, D_1^{cr} , для конкретных безгазовых систем.

Для анализа процесса инициирования горения в большом объеме с помощью системы уравнений (3), (4) использовали метод переменных направлений [10] с применением двумерной прямоугольной регулярной сетки. Решение разностных уравнений осуществляли методом прогонки. Неявная трехточечная аппроксимация вторых производных позволяла регулировать шаг по времени с учетом точности расчета и обеспечения устойчивости разностной схемы. Погрешность локальной аппроксимации $O(\Delta\tau^2 + h_\xi^2 + h_\psi^2)$, где h_ξ и h_ψ — пространственные шаги, $\Delta\tau$ — шаг по времени.

Для сопоставления с экспериментом результаты расчетов критических условий зажигания удобно представить в виде зависимости безразмерной критической ширины инициирующего слоя $D_1^{cr}U/\kappa$ от числа Аррениуса Ag . При определении критических условий зажигания длина l_1 выбиралась достаточно большой, чтобы обеспечить формирование установившегося режима распространения волны горения в поджигающем слое.

На рис. 3 представлены результаты по исследованию критических условий поджигания области 2. Установлена зависимость критической ширины поджигающего слоя $D_1^{cr} \cdot U/\kappa$ от числа Аррениуса Ag . Кривые 1 и 2 разделяют плоскость параметров на три области. Область над кривой 1 соответствует гарантированному поджиганию массива волной горения. В области под кривой 2 переход горения в массив не происходит. В заштрихованной области вероятность поджигания определяется не только шириной слоя d_1 и физико-химическими параметрами горючего Ag , T_{0r} , но и тем, в какой стадии (“вспышка” или “депрессия”) очаговый фронт горения подходит к контакту областей. Появление такой зависимости связано с тем, что при значениях $Ag > 7$ стационарный режим горения с постоянной скоростью меняется на колебательный с пульсациями температуры и скорости распространения фронта

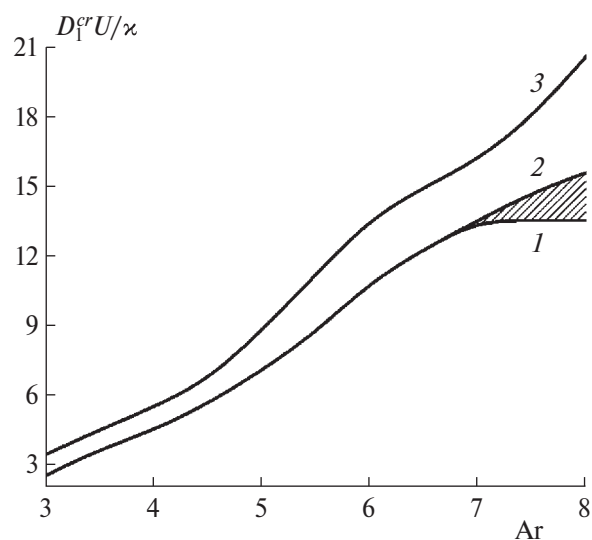


Рис. 3. Зависимость критической ширины поджигающего слоя волной горения $D_1^{cr}U/\kappa$ от числа Аррениуса Ag (кривые 1 и 2). Длина поджигающего слоя $L_1U/\kappa \sim 100$, $T_{0r}=0.1$, $Ze=Ag(1-T_{0r})$. Кривая 3 — критическое значение $D_1^{cr}U/\kappa$ при зажигании инертным слоем с адиабатической температурой горения в роли начального значения.

реакции. Фаза колебания определяется условиями инициирования процесса и временем достижения фронтом границы контакта, т.е. длиной поджигающего слоя. Численный анализ показал, что в области пульсирующего горения (заштрихована на рис. 3) при одних и тех же значениях Ag , T_{0r} может происходить как потухание, так и проникновение горения в область 2 при изменении длины поджигающего слоя l_1 .

Определение границ заштрихованной области (кривые 1 и 2) проводили по следующей процедуре. Для фиксированных значений параметров Ag , T_{0r} , l_1 рассчитывали минимальную ширину слоя d_1 , при которой воспламеняется большой объем. В качестве l_1 принималась длина поджигающего слоя l_{10} , использовавшаяся при расчете критических условий при стационарном режиме горения ($Ag < 7$). Далее исследовалась зависимость полученного результата от изменения длины l_1 . Для этого проведена серия расчетов с фиксированным значением d_1 и различными значениями

$$l_1^n = l_{10} + n \frac{\Delta l}{12}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, 12.$$

Максимальное изменение длины Δl соответствовало длине волны колебаний фронта реакции. Если среди результатов серии расчетов оказывались как случаи поджигания, так и потухания,

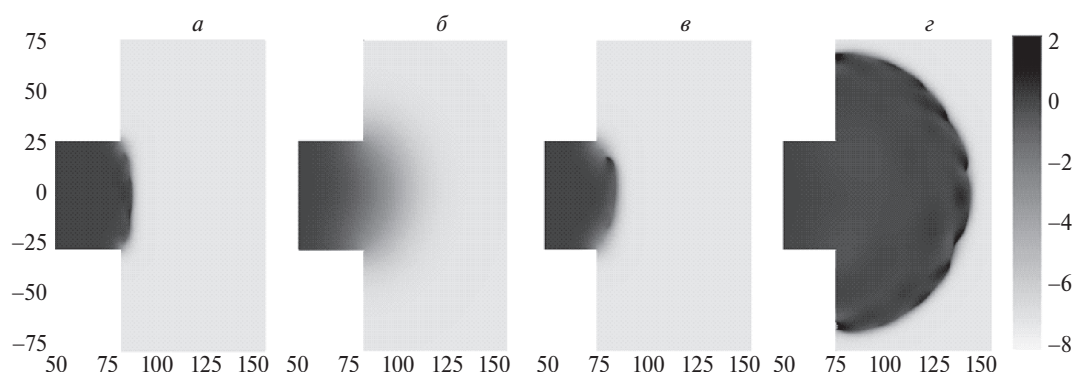


Рис. 4. Температурные поля, формирующиеся в переходном процессе. Физико-химические параметры слоев: $Ag = 8.0$, $T_{0r} = 0.1$, $Ze = Ag(1 - T_{0r})$, ширина поджигающего слоя $D_1^{cr}U/\kappa = 13.64$, *a, б* – поля температур при $L_1U/\kappa = 20.8$; *в, з* – $L_1U/\kappa = 19.3$.

принималось, что данное значение ширины слоя d_1 отвечает области неединственности, заштрихованной на рис. 3. Далее эту процедуру повторяли для других значений $d_{1i} = d_1 \pm i \Delta d_1$, $i = 1, 2, 3$, до тех пор, пока серия расчетов для всех значений l_1^n не давала одинаковый результат. В случае поджигания это будет соответствовать точке на кривой 2, в случае потухания – на кривой 1.

На рис. 4 представлены поля температур при одних и тех же энергетических, кинетических и теплофизических параметрах слоев и разных длинах поджигающего слоя. При длине слоя $L_1U/\kappa = 20.8$ горение в области 2 не реализуется (рис. 4 *a, б*). При более коротком слое $L_1U/\kappa = 19.3$ тепловые потоки в поджигаемую область обеспечили инициирование горения массива и формирование установившегося фронта (рис. 4 *в, з*). Из-за неустойчивости горения ($Ag = 8$) в зоне реакции в области 2 формировались высокотемпературные очаги, которые перемещались вдоль прогретого слоя. Средняя скорость ω распространения волны, вычисленная по движению точки $\xi(\tau)$ с температурой $\theta_m = \theta_0 + T_{0r}$, в дальнейшем сохраняла постоянное значение.

В устойчивой области горения ($Ag < 7$, $T_{0r} = 0.1$) существует единственное значение ширины слоя D_1^{cr} : при $D_1 \leq D_1^{cr}$ инициирование горения “большого” объема не реализуется (рис. 3), при $D_1 > D_1^{cr}$ происходит инициирование горения в области 2.

В работах [11, 12] из анализа горения прессованных образцов октогена и баллиститного пороха марки НБ получена связь локальных тепловых взрывов в прогретом слое с устойчивостью горения и дальнейшим распространением поперечных волн.

Инициирование горения высокотемпературным инертным очагом

С помощью численного анализа получена зависимость критических условий инициирования горения большого объема высокотемпературным инертным очагом прямоугольной формы от ширины слоя D_1U/κ при разных значениях числа Ag (рис. 3, кривая 3). В начальный момент времени $\tau = 0$ температура очага равнялась температуре сгорания химически активного слоя $\theta = 0$, глубина превращения состава η при этом равна единице. Устойчивая область инициирования соответствует параметрам над кривой 3. С увеличением числа Ag критическая ширина воспламеняющего слоя $D_1^{cr}U/\kappa$ растет. Численный анализ проведен при “больших” значениях L_1U/κ , когда длина слоя не могла влиять на критическую ширину $D_1^{cr}U/\kappa$ инертного слоя.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Анализ задачи показал, что критическая ширина воспламенительного слоя D_1 является физико-химической характеристикой волны горения. Существует критическое значение D_1^{cr} , которое разделяет возможность инициирования большого объема ограниченным очагом: при $D_1 > D_1^{cr}$ происходит проникновение горения, а при $D_1 \leq D_1^{cr}$ – его погасание. Критический размер очага является функцией числа Аррениуса и отношения начальной температуры к адиабатической температуре горения: $D_1^{cr} = f(Ag, T_{0r})$. Сопоставление экспериментальных и теоретических величин критической ширины слоя D_1^{cr} позволяет получить дополнительные знания о физико-химических характеристиках и механизме горения безгазовых систем.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Merzhanov A.G.* // Combust. and Flame. 1966. V. 10. № 4. P. 341.
[https://doi.org/10.1016/0010-2180\(66\)90041-1](https://doi.org/10.1016/0010-2180(66)90041-1)
2. *Melguizo-Gavilanes J., Boettcher P.A. Mével R., Shepherd J.E.* // Combust. and Flame. 2019. V. 204. P. 116.
<https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2018.12.036>
3. *Кришеник П.М., Костин С.В., Рогачев С.А.* // Физика горения и взрыва. 2021. Т. 57. № 2. С. 182.
<https://doi.org/10.15372/FGV20210206>
4. *Krishenik P.M. Kostin S.V., Rogachev S.A.* // Intern. J. Self-Propag. High-Temp. Syns. 2020. V. 29. № 4. P. 191.
<https://doi.org/10.3103/S1061386220040056>
5. *Кришеник П.М., Костин С.В., Рогачев А.С.* // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 1. С. 24.
<https://doi.org/10.31857/S0207401X21010076>
6. *Aldushin, A.P., Matkowsky B. J.* // Intern. J. Self-Propag. High-Temp. Syns. 1995, V. 4. № 1. P. 5.
7. *Merzhanov A.G.* // Combust. Sci. and Tech. 1994. V. 98. P. 307.
[https://doi.org/10.1016/0010-2180\(66\)90041-1](https://doi.org/10.1016/0010-2180(66)90041-1)
8. *Кришеник П.М., Костин С.В., Рогачев А.С.* // Хим. физика. 2023. Т. 42. № 9. С. 39.
<https://doi.org/10.31857/S0207401X23090042>
9. *Aldushin A.P., Bayliss A., Matkowsky B.J.* // Intern. J. Self-Propag. High-Temp. Syns. 2002. V. 11. № 1. P. 131.
10. *Самарский А.А.* Введение в теорию разностных схем. М.: Наука, 1971.
11. *Маршаков В.Н., Крупкин В.Г.* // Хим. физика. 2023. Т. 42. № 3. С. 36.
<https://doi.org/10.31857/S0207401X2303010X>
12. *Маршаков В.Н., Крупкин В.Г.* // Хим. физика. 2023. Т. 42. № 3. С. 42.
<https://doi.org/10.31857/S0207401X23030111>

IGNITION OF A GASLESS MIXTURE ARRAY BY A COMBUSTION WAVE

A. P. Aldushin¹, P. M. Krishenik^{1*}, S. A. Rogachev¹¹*Merzhanov Institute of Structural Macrokinetics and Material Science, Russian Academy of Sciences,
Chenogolovka, Russia***E-mail: petr@ism.ac.ru*

The methods of mathematical modeling have been used to explore the initiation of combustion of a large mass of a condensed mixture in local contact with the end face of the burning layer. It is shown that the minimum width of the igniting layer is proportional to the width of the thermal front of the combustion wave. The coefficient of proportionality is determined by the initial temperature, heat and activation energy of the reaction. The calculation results can be used to estimate the effective activation energy of the reaction that controls the combustion mechanism of gasless system.

Keywords: gas-free combustion, focal ignition, critical conditions, combustion stability.

REFERENCES

1. Merzhanov A.G. // Combust. and Flame. 1966. V. 10. № 4. P. 341.
[https://doi.org/10.1016/0010-2180\(66\)90041-1](https://doi.org/10.1016/0010-2180(66)90041-1)
2. Melguizo-Gavilanes J., Boettcher P.A., Mével R., Shepherd J.E. // Combust. and Flame. 2019. V. 204. P. 116.
<https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2018.12.036>
3. Krishenik P.M., Kostin S.V., Rogachev S.A. // Combust. Explos., Shock Waves. 2021. V. 57(2). P. 182.
<https://doi.org/10.1134/S0010508221020064>
4. Krishenik P.M., Kostin S.V., Rogachev S.A. // Intern. J. Self-Propag. High-Temp. Syn. 2020. V. 29. № 4. P. 191.
<https://doi.org/10.3103/S1061386220040056>
5. Krishenik P.M., Kostin S.V., Rogachev S.A. // Russ. J. Phys. Chem. B. 2021. V. 15(1). P. 68.
<https://doi.org/10.1134/S1990793121010073>
6. Aldushin A.P., Matkowsky B.J. // Intern. J. Self-Propag. High-Temp. Syn. 1995. V. 4. № 1. P. 5.
7. Merzhanov A.G. // Combust. Sci. and Tech. 1994. V. 98. P. 307.
[https://doi.org/10.1016/0010-2180\(94\)90041-1](https://doi.org/10.1016/0010-2180(94)90041-1)
8. Krishenik P.M., Kostin S.V., Rogachev S.A. // Russ. J. Phys. Chem. B. 2023. V. 17(5). P. 1123.
<https://doi.org/10.1134/S1990793123050044>
9. Aldushin A.P., Bayliss A., Matkowsky B.J. // Intern. J. Self-Propag. High-Temp. Syn. 2002. V. 11. № 1. P. 131.
10. Samarskii A.A. The Theory of Difference Schemes. NY: CRC Press, 2001.
<https://doi.org/10.1201/9780203908518>
11. Marshakov V.N., Krupkin V.G. // Russ. J. Phys. Chem. B. 2023. V. 17(3). P. 394.
<https://doi.org/10.1134/S1990793123020100>
12. Marshakov V.N., Krupkin V.G. // Russ. J. Phys. Chem. B. 2023. V. 17(3). P. 399.
<https://doi.org/10.1134/S1990793123020112>