
**ГОРЕНИЕ, ВЗРЫВ
И УДАРНЫЕ ВОЛНЫ**

УДК 536.46

**ОЧАГОВОЕ ЗАЖИГАНИЕ ГОМОГЕННОГО
ПОРОХА НАКАЛЕННОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ**

© 2021 г. В. Г. Крупкин^{1*}, Г. Н. Мохин¹

¹*Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова
Российской академии наук, Москва, Россия*

**E-mail: krupkin49@mail.ru*

Поступила в редакцию 12.11.2020;
после доработки 14.12.2020;
принята в печать 21.12.2020

Горение гомогенных энергетических материалов, таких как баллистические пороха и взрывчатые вещества, как правило, начинается с образования очага воспламенения. В данной работе проанализированы условия возникновения такого очага в случае нагрева вещества накаленной поверхностью постоянной температуры. Показано, что очаг образуется на определенной глубине от поверхности, а конкретное место его возникновения определяется геометрией поверхности. Приведены безразмерные критерии, позволяющие оценить эту глубину и предсказать расположение очага воспламенения. В ряде предельных случаев найден вид функции для времени зажигания шероховатой поверхности с выступами разной высоты и разными углами при вершине, а также приведены зависимости от этих параметров времени зажигания в характерных геометрических конфигурациях поверхности.

Ключевые слова: горение порохов, неустойчивость горения, очаги воспламенения, критические явления, теория горения.

DOI: 10.31857/S0207401X21080082

ВВЕДЕНИЕ

Горение энергетических материалов, таких как гомогенные пороха и взрывчатые вещества, является многостадийным процессом, сложным для моделирования и экспериментального изучения [1, 2]. Основные химические превращения в зоне горения осуществляются за очень короткое время; особую сложность представляет изучение процессов вблизи границы раздела фаз, где в узком приповерхностном слое наиболее интенсивно протекают химические реакции. При этом накопленные к настоящему времени экспериментальные данные [3, 4] указывают, что многие существенные особенности горения конденсированных веществ обусловлены явлениями в так называемых очагах: небольших по сравнению с пространственным масштабом образца участках вещества, где химическая реакция протекает в данный момент наиболее интенсивно.

Воспламенение как начальная стадия горения начинается с образования небольшого очага там, где возникает локальный максимум тепловыделения вследствие неоднородности внешнего нагрева и самого вещества, а также наличия трещин и шероховатости поверхности и других факторов [5]. Изучение воспламенения в очагах чрезвычайно важно для безопасности обращения с энергетиче-

скими материалами. На практике требуется обеспечить контролируемое зажигание с минимальными затратами энергии или, наоборот, исключить самопроизвольное воспламенение вещества с переходом в горение или взрыв. Несмотря на более чем вековой опыт исследований и практики, такая задача по-прежнему остается актуальной, а промышленные катастрофы большого масштаба происходят регулярно в разных странах.

Важную роль очаги воспламенения играют и в некоторых режимах горения. Так, при низких давлениях горение пороха становится нестационарным, а структура волны горения – существенно неоднородной. Такие режимы получили название очагово-пульсирующих; при этом на поверхности пороха возникает совокупность потухающих и повторно воспламеняющихся очагов и поперечных волн горения, распространяющихся вдоль поверхности образца [3, 4].

Качественный анализ влияния неоднородности поверхности на процессы воспламенения был выполнен в классическом обзоре Мержанова [6]. Если глубина прогрева вещества сравнима с характерной высотой неоднородностей поверхности, то равномерность прогрева вещества нарушается и в нем могут возникать локальные горячие очаги. Вследствие самоускорения химической реакции

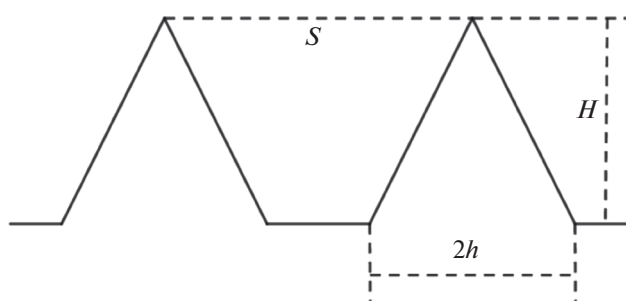


Рис. 1. Модельная конфигурация шероховатой поверхности.

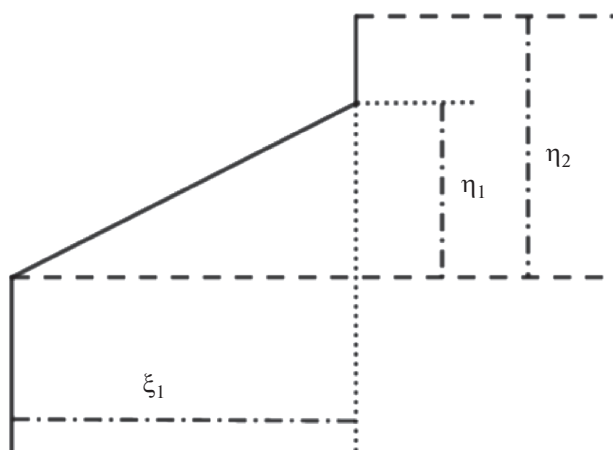


Рис. 2. Единичный выступ и оси симметрии для расчетной области.

в горячих очагах возникает положительная обратная связь и они дополнительно разогреваются уже за счет химической энергии. В результате время зажигания заметно уменьшается и энергия, необходимая для инициирования устойчивого горения всего вещества, также снижается. Однако выражения, количественно описывающие время зажигания в очагах в общем случае неоднородной поверхности в различных условиях нагрева, остаются неизвестными.

Задача о зажигании полубесконечной пластины накаливаемой поверхностью рассматривалась многими авторами с помощью различных приближенных аналитических и численных методов. Рассматривалось также зажигание симметричных тел — цилиндра и шара, а также простых двумерных конфигураций, например прямого угла. Обзор этих работ представлен в монографиях Вилюнова [7] и Ассовского [8].

В данной работе анализируются условия возникновения очага в конденсированном веществе сложной геометрической формы, нагреваемом накаливаемой поверхностью постоянной температуры.

Предложена геометрическая конфигурация, которая позволяет предсказать место и время возникновения очага. Тем самым в модели удастся выделить специфику влияния геометрической формы вещества на зажигание и определить безразмерные параметры, отвечающие за образование очага.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Далее в работе рассматривается геометрическая конфигурация неоднородной поверхности, показанная на рис. 1. Эта конфигурация моделирует шероховатую поверхность, составленную идентичными клиновидными выступами конечной высоты и с конечным углом при вершине. Обозначим высоту выступов как H , полуширину при основании выступов — как h , расстояние между выступами — как S . Угол при вершине выступа в этих обозначениях выражается как $2\psi = 2\arctg(h/H)$.

Пусть в момент времени $t = 0$ на поверхности вещества с начальной температурой T_0 задается температура T_s , которая в дальнейшем поддерживается постоянной. Область вблизи вершины выступа прогревается быстрее, чем области, удаленные от вершины, и химическая реакция начинается именно вблизи вершины.

В данной работе основное внимание уделяется определению зависимости характеристик воспламенения от геометрических параметров, а именно: от угла при вершине клина, высоты выступа и расстояния между выступами. Поэтому для моделирования химической реакции в веществе применяется простая кинетическая схема тепловой теории зажигания с нулевым порядком реакции [6].

В обычных предположениях твердофазной теории зажигания запишем уравнение теплопроводности с объемным источником тепла — гомогенной химической реакцией. Из симметрии задачи следует, что расчеты можно проводить для половины единичного выступа. Безразмерные обозначения в расчетной области показаны на рис. 2.

В декартовой системе координат с началом в вершине клина и осью x , направленной вдоль его оси, грань клина описывается уравнением $y = x \operatorname{tg} \psi$ ($0 < x < H$). Запишем уравнение для распределения температуры в веществе при наличии химической реакции в виде

$$c_p \frac{\partial T}{\partial t} = k \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + Q_z \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (1)$$

со следующими начальными и граничными условиями:

$$t = 0: T = T_0; \quad (2)$$

$$\begin{aligned}
 0 < x < H: T(y = x \operatorname{tg} \psi) &= T_s; \\
 h < y < S/2: T(x = H) &= T_s; \\
 x &= +\infty: T = T_0; \\
 y = 0: \partial T / \partial y &= 0; \quad y = S/2, \\
 H < x < +\infty: \partial T / \partial y &= 0.
 \end{aligned}
 \tag{3}$$

Здесь T – температура, t – время, c – теплоемкость, ρ – плотность, k – коэффициент теплопроводности, Q – тепловой эффект химической реакции, z – предэкспонент, E – энергия активации, R – универсальная газовая постоянная.

Поскольку в задаче есть характерная температура T_s , то, используя разложение температуры по Франк-Каменецкому в окрестности T_s , запишем уравнения в безразмерном виде:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial \eta^2} + \exp\left(\frac{\theta}{1 + \beta \theta}\right)
 \tag{4}$$

с начальными и граничными условиями –

$$\tau = 0: \theta = \theta_0;
 \tag{5}$$

$$\begin{aligned}
 0 < \xi < \xi_1: \theta(\eta = \xi \operatorname{tg} \psi) &= 0; \\
 \eta_1 < \eta < \eta_2: \theta(\xi_1) &= 0; \quad \xi = +\infty: \theta = \theta_0; \\
 \eta = 0: \partial \theta / \partial \eta &= 0; \quad \eta = \eta_2, \\
 \xi_1 < \xi < +\infty: \partial \theta / \partial \eta &= 0.
 \end{aligned}
 \tag{6}$$

Введены следующие безразмерные переменные и параметры: $\theta = E(T - T_s) / RT_s^2$ – безразмерная температура; $\tau = t / t_{ad}(T_s)$ – безразмерное время, где $t_{ad}(T_s) = c\rho RT_s^2 \exp(E/RT_s) / EQz$ – период индукции теплового взрыва при температуре T_s ; $\xi = x/x_0$ и $\eta = y/x_0$ – безразмерные координаты, где $x_0 = (kRT_s^2 \exp(E/RT_s) / EQz)^{0.5}$; $\theta_0 = E(T_0 - T_s) / RT_s^2$ – безразмерная начальная температура; $\xi_1 = H/x_0$ – безразмерная высота выступов; $\eta_1 = h/x_0$ – безразмерная полуширина выступа; $\eta_2 = S/2x_0$ – безразмерное расстояние между соседними выступами; $\beta = RT_s/E$ – малый параметр.

Решением системы (4)–(6) является функция от времени и координат, зависящая от пяти безразмерных параметров:

$$\theta = \theta(\tau, \xi, \eta, \theta_0, \xi_1, \eta_1, \eta_2, \beta).
 \tag{7}$$

В дальнейшем считается, что зависимостью от β можно пренебречь.

Система (4)–(6) решалась численными методами с использованием явной разностной схемы. С учетом сделанных допущений о нулевом порядке реакции и в пренебрежении зависимостью от β время воспламенения τ_i и координаты очага воспламенения (ξ_i, η_i) будут функциями от соответствующих безразмерных параметров:

$$\begin{aligned}
 \tau_i &= \tau_i(\theta_0, \xi_1, \eta_1, \eta_2), \\
 \xi_i &= \xi_i(\theta_0, \xi_1, \eta_1, \eta_2).
 \end{aligned}
 \tag{8}$$

Из симметрии следует, что очаг воспламенения расположен на оси клина, т.е. $\eta_i = 0$. Задача состоит в нахождении данных функций. В расчетах удалось установить зависимости, описывающие вид функции (8) в некоторых предельных случаях.

ВОСПЛАМЕНЕНИЕ КЛИНА БЕСКОНЕЧНОЙ ДЛИНЫ

Длинный выступ является важным предельным случаем, когда характерная высота шероховатостей заметно превышает глубину прогрева основной массы вещества за время воспламенения. Вследствие воздействия горячих стенок вещество внутри выступа быстро прогревается. Через какое-то время вблизи вершины возникает горячий очаг, в котором температура начинает быстро возрастать и за конечное время уходит в бесконечность. В силу того, что температура стенок постоянная, этот очаг развивается в глубине вещества на определенном расстоянии от поверхности. Как только максимальная температура в очаге превысит температуру поверхности, возникает поток тепла в стенки, которые из источника тепла превращаются в сток, и очаг начинает мигрировать в глубь вещества. В силу симметрии центр очага все время располагается на оси клиновидного выступа, но дрейфует в направлении от вершины вглубь. Для выступа достаточно большой длины (т.е. в безразмерном виде: $\xi_1 \gg 1$ и $\eta_1 \gg 1$) наличие холодного основания не сказывается на распределении температуры, и функции (8) могут быть записаны как $\tau_i = \tau_i(\theta_0, \psi)$ и $\xi_i = \xi_i(\theta_0, \psi)$, где $\operatorname{tg} \psi = \eta_1 / \xi_1$.

В численных расчетах была обнаружена экспоненциальная зависимость времени воспламенения от угла при вершине выступа в широком диапазоне его значений, $10^\circ < 2\psi < 150^\circ$. Эта зависимость может быть аппроксимирована следующей формулой:

$$\tau_i = f(|\theta_0|) \exp[g(|\theta_0|)\psi],
 \tag{9}$$

где угол ψ выражен в градусах, а функции $f(x)$ и $g(x)$ имеют вид

$$\begin{aligned}
 f(x) &= 2.6 + 0.14x - 0.0076x^2 - 0.001x^3, \\
 g(x) &= 0.0056 + 0.0028x - 5 \cdot 10^{-6}x^2.
 \end{aligned}$$

В оценках можно считать, что время воспламенения $\tau_i \sim |\theta_0|^{4\psi/\pi}$. Отметим, что эта формула дает правильную квадратичную зависимость времени воспламенения от начальной температуры и для плоской поверхности ($2\psi = \pi$): $\tau_i \sim |\theta_0|^2$. Резкая экспоненциальная зависимость времени воспламенения от угла ψ связана с тем, что прогрев выступа происходит намного быстрее, чем в одно-

мерном случае. Для плоской поверхности в одномерном режиме воспламенение требует создания прогретого слоя достаточной глубины, и время инертного прогрева сильно зависит от начальной температуры. В выступе химическая реакция инициируется сразу же при воздействии горячих стенок, и возникает очаг, где безразмерная температура больше нуля. При этом время воспламенения очага определяется тем, как быстро его размер достигает величины порядка единицы (в наших безразмерных параметрах), после чего происходит тепловой взрыв очага.

В расчетах обнаружено, что центр очага располагается на примерно постоянном расстоянии от стенки в момент воспламенения независимо от угла и начальной температуры. Таким образом, место расположения очага можно предсказать с хорошей точностью, определив на оси выступа точку, для которой расстояние от стенки выступа ≈ 1.5 . Отметим, что значение очень близко к определенному ранее в нашей работе по тепловому взрыву тел произвольной формы [9].

Для очень малых углов ($2\psi < 10^\circ$) время воспламенения стремится к постоянной величине: $\tau_i = 3-4$, и фактически не зависит от начальной температуры вещества. Этот режим соответствует воспламенению слоя вещества, нагреваемого с двух сторон горячими пластинами.

ВОСПЛАМЕНЕНИЕ МАЛЫХ ШЕРОХОВАТОСТЕЙ

В другом важном предельном случае характерная высота шероховатостей мала по сравнению с глубиной прогрева основной массы вещества за время воспламенения. При этом время воспламенения стремится к значению времени воспламенения плоской поверхности. Однако присутствие шероховатостей нарушает однородность распределения температуры вдоль оси вещества и играет роль возмущающего фактора для решения уравнения теплопроводности при наличии химического источника. Член уравнения, относящийся к химическому источнику, зависит от температуры экспоненциально, в то время как характерные параметры диффузионного члена в уравнении теплопроводности зависят от температуры степенным образом.

Поэтому даже при наличии малых шероховатостей поверхности воспламенение вещества происходит в отдельных горячих точках. Если и высота выступов, и характерное расстояние между ними много меньше характерного размера очага (т.е. много меньше единицы в наших безразмерных параметрах), то эти горячие точки в дальнейшем сливаются и образуют единую волну горения. На практике, как правило, неоднородность поверхности сочетается с неравномерностью нагрева, и до-

биться равномерного воспламенения вещества по всей поверхности крайне сложно. В случае нагрева внешним тепловым потоком наличие шероховатостей поверхности приводит к тому, что увеличивается эффективная поверхность взаимодействия с внешним источником и тепловой поток в вещество также возрастает.

ПРОНИКНОВЕНИЕ ОЧАГА ПОД ПОВЕРХНОСТЬ ВЕЩЕСТВА

Когда характерная высота выступов по порядку величины равна единице, очаги проникают в глубь вещества. На рис. 3 показаны результаты численного расчета для следующих типичных для задач зажигания значений параметров: начальная температура $\theta_0 = -10$, прямой угол при вершине выступа высотой $\xi_1 = \eta_1 = 2$.

В расчетах обнаружено, что очаги проникают в глубь вещества, но не сливаются между собой. В ходе развития очага можно выделить следующие этапы. На стадии инертного прогрева (рис. 3а) тепловые пограничные слои от стенок выступа смыкаются в области вершины, где образуется зародышевый очаг — небольшая область с превышением температуры в центре над температурой стенок. На рис. 3а эта область практически незаметна, однако она постепенно продвигается по оси выступа в направлении основной массы вещества, увеличиваясь в размерах (рис. 3б, в). Максимальная температура в очаге также растет, однако из-за близости стенок воспламенение в зародыше очага невозможно, пока он находится на расстоянии меньше критического от стенок.

Когда центр очага отдалется от стенок на расстояние более единицы, температура в центре очага быстро растет и происходит воспламенение (рис. 3г, д). Расстояние от центра воспламенившегося очага до ближайшей точки стенки практически не зависит от начальной температуры и геометрических параметров и всегда составляет ≈ 1.5 в наших безразмерных переменных.

Эксперименты показывают, что после воспламенения в очаге режимы развитой волны горения существенным образом зависят от внешних условий. При больших давлениях существенная роль принадлежит реакциям в газовой фазе: зона интенсивной химической реакции расположена близко к поверхности и дает существенный вклад в баланс тепла у поверхности. Тем самым волна горения поддерживается внешним источником тепла и распространяется в виде однородного фронта. При малых давлениях относительная роль тепловыделения в конденсированной фазе возрастает, одномерный фронт теряет устойчивость и распадается на совокупность потухающих и воспламеняющихся очагов и поперечных волн горения.

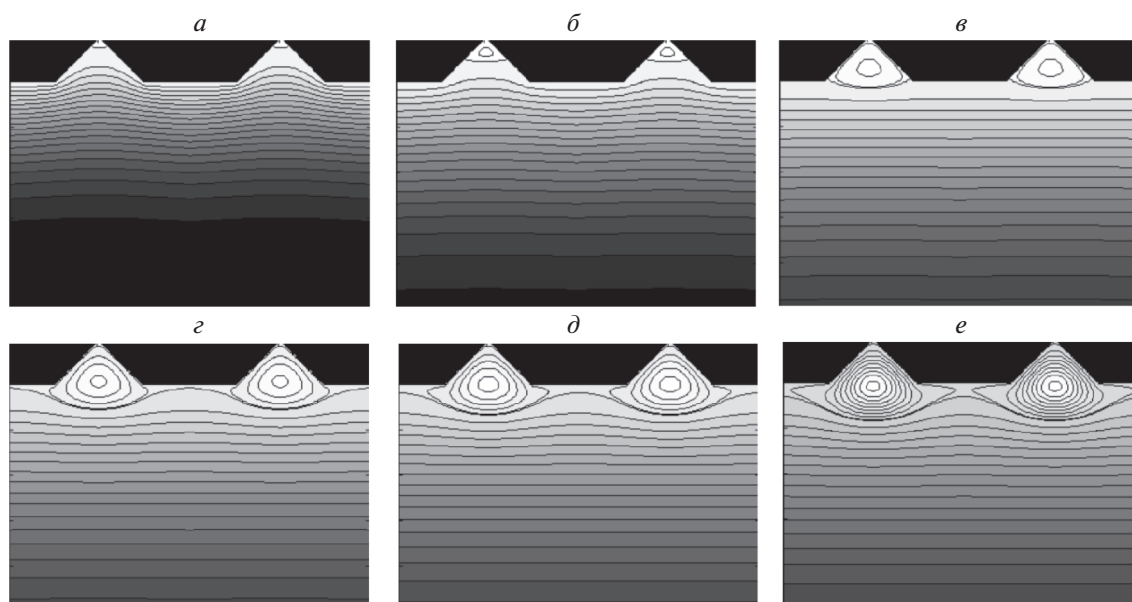


Рис. 3. Проникновение очага в глубь вещества: *a* – инертный прогрев; *б* – возникновение очага вблизи вершины; *в–г* – миграция очага в глубь вещества; *е* – конечное положение очага.

ОБСУЖДЕНИЕ И ВЫВОДЫ

Как было отмечено ранее в нашей работе по изучению теплового взрыва в телах произвольной формы [9], при зажигании вещества накаленной поверхностью постоянной температуры сама поверхность из источника тепла превращается в сток, как только температура внутри вещества становится выше, чем температура поверхности. Образующийся под поверхностью вещества очаг “отодвигается” от поверхности до тех пор, пока параметры очага не станут достаточными для самовоспламенения (в терминологии и по механизму Мержанова с соавт. [10]).

Обращает на себя внимание тот факт, что при зажигании вещества накаленной поверхностью даже небольшие неоднородности последней нарушают одномерное распределение температуры и приводят к образованию очагов. Определяющим фактором для такого поведения реакционноспособного вещества является сильная экспоненциальная зависимость скорости реакции от температуры. Несмотря на то, что для возникшего в глубине вещества очага поверхность является стоком тепла, она не способна предотвратить воспламенение, если очаг мигрирует в глубь вещества на расстояние порядка единицы в наших безразмерных координатах. Такой очаг развивается в режиме теплового взрыва, его воспламенение происходит за время порядка одного периода теплового взрыва вещества при данной температуре, так как реакционный член в уравнении баланса тепла явным образом доминирует над диффузионным.

Этот механизм может играть важную роль и в так называемых очагово-пульсирующих режимах горения пороха [11]. В нашей работе [12] показано, что при наличии теплопотерь с поверхности вещества может возникать пульсирующий режим горения пороха вследствие неустойчивости горения подповерхностного слоя по механизму теплового взрыва. Фронт горения распространяется с непостоянной скоростью, а характерный размер пульсаций фронта определяется шириной реагирующего слоя в конденсированной фазе и увеличивается с уменьшением температуры поверхности. Частота пульсаций обратно пропорциональна времени адиабатического теплового взрыва очага, возникающего под поверхностью вещества. Описание такого нестационарного режима горения выходит за рамки данной статьи, требует накопления экспериментальных данных и развития соответствующих многомерных моделей.

Таким образом, в работе показано, что наличие выступов и шероховатостей поверхности может служить причиной образования очагов воспламенения. Найдены безразмерные параметры, характеризующие время воспламенения очага и место возникновения очага в веществе.

Работа выполнена за счет субсидии, выделенной ФИЦ ХФ РАН на выполнение государственного задания по теме 44.8 “Фундаментальные исследования процессов превращения энергоемких материалов и разработка научных основ управления этими процессам” (регистрационный номер АААА-А17-117040610346-5).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Новожилов Б.В.* Нестационарное горение твердых ракетных топлив. М.: Наука, 1973.
2. *Зельдович Я.Б., Лейпунский О.И., Либрович В.Б.* Теория нестационарного горения пороха. М.: Наука, 1975.
3. *Marshakov V.N., Krupkin V.G., Mokhin G.N.* // Zel'dovich Memorial: Accomplishments in the combustion science in the last decade / Eds. Borisov A.A., Frolov S.M. V. 2. М.: Torus Press, 2014. P. 127.
4. *Крупкин В.Г., Мохин Г.Н.* // Хим. физика. 2019. Т. 38. № 1. С. 62; <https://doi.org/10.1134/S0207401X19010096>
5. *Крупкин В.Г., Маршаков В.Н., Рашковский С.А.* // Горение и взрыв. 2019. Т. 12. № 1. С. 90; <https://doi.org/10.30826/CE19120111>
6. *Merzhanov A.G., Averson A.E.* // Combust. and Flame. 1971. V. 16. P. 89.
7. *Вилунов В.Н.* Теория зажигания конденсированных веществ. Новосибирск: Наука, Сибирское отделение, 1984.
8. *Ассовский И.Г.* Физика горения и внутренняя баллистика. М.: Наука, 2005.
9. *Крупкин В.Г., Мохин Г.Н.* // Хим. физика. 2015. Т. 34. № 2. С. 43.
10. *Мержанов А.Г., Абрамов В.Г., Гонтковская В.Т.* // Докл. АН СССР. 1963. Т. 148. № 1. С. 156.
11. *Маршаков В.Н., Финяков С.В.* // Хим. физика. 2017. Т. 36. № 6. С. 24; <https://doi.org/10.7868/S0207401X17060103>
12. *Крупкин В.Г., Мохин Г.Н.* // Горение и взрыв / Под ред. Фролова С.М. Вып. 7. М.: Торус Пресс, 2014. С. 293.