

## МОДЕЛИРОВАНИЕ УПРАВЛЯЕМОГО ПРОЦЕССА ГОРЕНИЯ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ НА СТРУКТУРИРОВАННЫХ КАТАЛИЗАТОРАХ

В. М. Ханаев, Е. С. Борисова, Н. Н. Кундо

Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН, 630090 Новосибирск, khan@catalysis.ru

Разработана математическая модель процесса горения высокоэнергетических материалов с использованием структурированных катализаторов. Численные исследования проведены для случая горения типичного материала — нитрата аминоканидина. Установлено, что повышение каталитической активности, так же как и рост теплопроводности катализатора, увеличивает диапазон оперативного регулирования скорости горения конденсированного вещества.

Ключевые слова: математическое моделирование, оперативное регулирование скорости горения, контактный катализ.

### ВВЕДЕНИЕ

Использование продуктов горения твердотопливных композиций перспективно для создания газогенераторов, которые могут применяться в различных областях техники, заменяя при этом компрессоры и тяжелые баллоны [1]. В частности, на основе подобных газогенераторов возможно создание различных пусковых устройств, систем вытеснения жидкостей и наддува спасательных средств. Необходимость широкого варьирования скоростей горения и обеспечения заданной зависимости скорости горения от давления требует применения катализаторов, которые вводятся в состав топлива (в количестве до 1 %) [2], позволяя увеличить скорость горения в два и более раза. Новый подход для управляемого горения твердых топлив на основе структурированных катализаторов (пористые материалы и сотовые блоки) был предложен в Институте катализа СО РАН [3]. Такие катализаторы активно используются для каталитического окисления (беспламенного горения) жидкостных и газовых потоков в реакциях дожигания органических веществ, при разложении и восстановлении оксидов азота, в реакциях автотермической воздушной конверсии метана, для нейтрализации выхлопных газов автотранспорта. Физико-химические процессы, протекающие при горении конденсированных высокоэнергетических материалов и при горении жидкостных и газовых потоков на структурированных катализаторах, существенно отличаются. Авторам не известны какие-либо описания данных процес-

сов, поэтому целью данной работы является разработка физической и математической модели горения высокоэнергетических материалов с использованием структурированных катализаторов, а также теоретический анализ закономерностей такого горения. Проведено сравнение результатов моделирования исследуемого процесса с экспериментальными данными работы [3].

### ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

При подводе теплопроводящего (разогретого в камере сгорания) материала к горячей поверхности конденсированных материалов в месте его контакта с топливом происходит увеличение скорости горения твердого топлива, вызванное ростом интенсивности теплообмена. Этот эффект используется при создании ракетного двигателя на твердом топливе, регулируемого при помощи теплового ножа [4]. Элементы решетки, соприкасающиеся с поверхностью заряда, в месте контакта провоцируют повышение местной скорости горения по сравнению с исходной скоростью горения топлива. Аналогичное увеличение скорости горения происходит и при использовании структурированных катализаторов вместо решетки теплового ножа. Однако, как показано в работе [3], при использовании структурированных катализаторов резко увеличивается диапазон скоростей регулирования процессов газогенерации (более чем на порядок), появляется возможность реализовывать режимы оперативного управления с многократными остановками и возобновлени-

ем газогенерации. Каталитическое окисление начинает существенно сказываться при температурах выше  $300\text{ }^{\circ}\text{C}$ . В то же время горение топлива без добавления каких-либо катализаторов происходит эффективно лишь при температурах выше  $1000\text{ }^{\circ}\text{C}$ . Эти особенности горения создают предпосылки для размещения катализаторов в низкотемпературной зоне горения твердых топлив, в которой образуются промежуточные продукты, чувствительные к действию катализаторов. В результате каталитически активные структурированные материалы, в отличие от, например, теплового ножа, могут использоваться при горении высокоэнергетических композиций, которые неспособны к самостоятельному горению. Горение твердых энергетических компонентов при контакте с блочным катализатором характеризуется иными особенностями. В работе [3] на примере горения нитрата аминокванидина показано, что существует несколько характерных зон превращения. В зоне контакта наблюдаются испарение и первичное разложение компонентов твердого топлива. Поэтому на этой стадии процессы протекают за счет поступления тепла от последующих реакций глубокого превращения продуктов первичного разложения топлива. Характерные размеры этой области весьма малы. Первичные продукты разложения твердого топлива могут содержать оксиды азота, образующиеся при разложении эфиров азотной кислоты, нитросоединений, нитроаминов. Эти полупродукты чувствительны к действию катализаторов, которые вызывают их полное сгорание. Следующая зона — область непосредственного контакта блочного катализатора с топливом — охлаждается продуктами испарения и газификации топлива. Далее расположена ярко светящаяся зона экзотермических реакций, которая является источником тепла, определяющим параметры контактного каталитического горения. В конце блока возможно снижение температуры вследствие потерь тепла за счет теплопередачи в окружающую среду.

При описании процесса горения высокоэнергетических материалов с использованием структурированных катализаторов важно выяснить, какая его стадия является лимитирующей. Ответ на этот вопрос можно получить из анализа экспериментальных результатов работы [3] при оперативном управлении горением твердых топлив каталитическим способом.

Было показано, что при изменении скорости перемещения блока катализатора относительно заряда практически сразу изменяется скорость горения и фронт горения следует за перемещением катализатора. При отводе катализатора от горячей поверхности происходит остановка горения. Таким образом, лимитирующей стадией, когда возможно оперативное управление движением каталитического блока, является относительная скорость его перемещения.

### МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Рассмотрим в самом общем виде математическую модель процесса горения твердого топлива на каталитическом блоке, схематично представленную на рис. 1. Модель может быть различной сложности, но в любом случае должна включать описание течения реагентов через каталитический слой или блок, кинетическую модель химической реакции и процессы тепло- и массопереноса. Учитывая лимитирующий характер процесса перемещения блока, а также низкое гидравлическое сопротивление блока в диапазоне практически реализуемых скоростей газогенерации, можно предполагать, что гидродинамика существенной роли не играет и в модели ее можно не рассматривать.

Очевидно, что математическая модель горения конденсированных высокоэнергетических материалов должна описывать процессы в различных зонах. Один из вариантов, который был взят за основу, — это трехзонная модель: топливо, зона разложения, зона каталитического горения продуктов разложения. По экспериментальным данным зона разложения весьма мала, поэтому естественно предположить, что размерами области контакта блока катализатора и топлива можно пренебречь, т. е. в од-

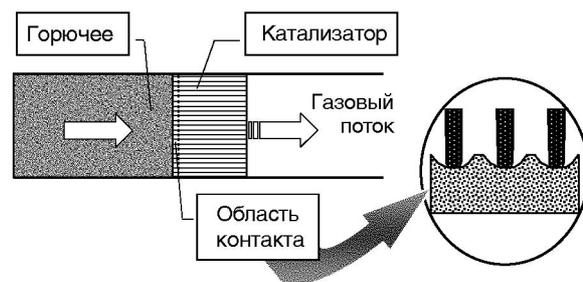


Рис. 1. Схема управляемого процесса горения высокоэнергетических материалов на блочных катализаторах

номерной модели эта зона стягивается в одну точку. Естественно, что эта точка также будет границей фазового перехода твердого топлива в газовый поток (продукты разложения).

Приняты следующие допущения, не накладывающие серьезных ограничений на общность постановки задачи. Рассматривается одномерная стационарная двухфазная (газ — твердая фаза) модель. Эффектами, обусловленными теплопроводностью газа и диффузией вещества по длине реактора, можно пренебречь. Теплофизические свойства материалов и газовой смеси предполагаются постоянными, не зависящими от температуры и изменения состава газовой смеси [5]. Воспламенение типичных конденсированных веществ, являющихся пожароопасными или горючими материалами, происходит, как правило, при температурах  $500 \div 900$  °С. В этом диапазоне теплофизические свойства обычных металлов, сплавов, углеродоподобных материалов изменяются незначительно (не более чем на  $10 \div 15$  %), и этим изменением можно обоснованно пренебречь. Подобные допущения общеприняты и используются при построении аналогичных моделей, как, например, сделано в работе [6].

В соответствии с указанными предположениями уравнения теплового и массового баланса и граничные условия можно записать следующим образом.

Зона конденсированного энергетического материала:

тепловой баланс

$$\begin{aligned} c_{p,f} G_f \frac{\partial}{\partial z} T_f - \lambda_f \frac{\partial^2}{\partial z^2} T_f &= 0, \\ z = -\infty: \quad T_f &= T_{in}, \\ z = 0: \quad T_f &= T_0, \end{aligned} \quad (1)$$

массовый баланс

$$G_f = \text{const.}$$

Зона каталитического блока:

уравнение для массовой доли  $C_g$  ключевого реагента в газовом потоке

$$G_g \frac{dC_g}{dz} = \beta \rho_g S (C_s - C_g), \quad C_g(0) = C_0, \quad (2)$$

уравнение для массовой доли  $C_s$  ключевого реагента на каталитической поверхности

$$\beta \rho_g S (C_g - C_s) = S \Omega_2 (\rho_g C_s, T_s). \quad (3)$$

Уравнение (3) подразумевает кинетический контроль на каталитической поверхности и диффузионные ограничения для химической реакции. Концентрации остальных веществ рассчитываются из массового баланса в соответствии со стехиометрическим уравнением реакции.

Уравнения теплового баланса:

для газовой фазы

$$c_p G_g \frac{dT_g}{dz} = \alpha S (T_s - T_g), \quad T_g(0) = T_0, \quad (4)$$

для катализатора

$$\begin{aligned} (1 - \varepsilon) \lambda_s \frac{d^2 T_s}{dz^2} &= \\ &= -Q_2 S \Omega_2 (\rho_g C_s, T_s) + \alpha S (T_s - T_g), \end{aligned} \quad (5)$$

$$\left. \frac{dT_s}{dz} \right|_{z=L} = 0.$$

Граничное условие на правом конце ( $z = L$ ) является обычным для модели адиабатического реактора.

Условия сопряжения блока и топлива (зона разложения конденсированного энергетического материала и фазового перехода в точке  $z = 0$ ):

массовый баланс

$$G_f = G_g = \Omega_1 (T_0),$$

тепловой баланс

$$\begin{aligned} c_{p,f} G_f T_f - \lambda_f \frac{\partial}{\partial z} T_f &= \\ &= c_{p,g} G_g T_g - Q_1 G_g - (1 - \varepsilon) \lambda_s \frac{\partial}{\partial z} T_s, \end{aligned} \quad (6)$$

$$T_f = T_g.$$

В вышеприведенных уравнениях использовались следующие обозначения:  $T$  — температура, К;  $\lambda$  — теплопроводность, Вт/(м·К);  $C$  — массовая доля реагента;  $c_p$  — теплоемкость, Дж/(кг·К);  $G$  — удельный массовый расход реагента, кг/(м<sup>2</sup>·с);  $Q$  — тепловой эффект реакции, Дж/кг;  $S$  — удельная поверхность катализатора, м<sup>-1</sup>;  $z$  — координата по длине реактора, м;  $\alpha$  — коэффициент теплообмена, Дж/(К·м<sup>2</sup>);  $\beta$  — коэффициент массообмена, м/с;  $\varepsilon$  — порозность блока;  $\rho$  — плотность, кг/м<sup>3</sup>;  $\Omega$  — скорость химической реакции, кг/(м<sup>2</sup>·с). Индекс 0 соответствует условиям на границе топливо — каталитический

блок,  $f$  — топливу,  $g$  — газу,  $s$  — условиям на поверхности катализатора.

Выражение (6) фактически следует из описанной выше физической модели и имеет следующий физический смысл: тепло, подводимое с конденсированной фазой (за счет конвекции и теплопроводности), идет на компенсацию эндотермического эффекта  $Q_1$  реакции разложения топлива и отводится конвекцией с газовым потоком и теплопроводностью по блоку. Теплопроводность по газовой фазе, как это принято при расчетах каталитических блоков, входит в эффективный коэффициент теплопроводности блока. Стоит заметить, что данное выражение не предполагает отсутствия термического сопротивления между конденсированной фазой и каталитическим блоком или наличия контакта между ними. Поэтому допускается скачок температур между конденсированной фазой и каталитическим блоком.

### МЕТОД РЕШЕНИЯ

Прежде всего, нетрудно заметить, что уравнение (1) имеет аналитическое решение

$$T_f = T_{in} + (T_0 - T_{in}) \exp\left(\frac{c_{p,f} G}{\lambda_f} z\right). \quad (7)$$

Тогда можно в явном виде задать поток тепла, поступающий на каталитический блок во входной точке, и записать уравнение (6) как дополнительное граничное условие для уравнения (5):

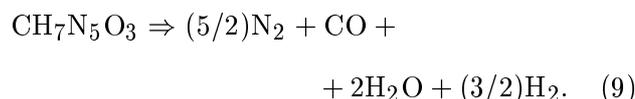
$$\lambda_s(1 - \varepsilon) \frac{\partial}{\partial z} T_s = (c_{p,g} - c_{p,f}) G_g T_0 - Q_1 G_g + c_{p,f} G_g (T_0 - T_{in}). \quad (8)$$

Таким образом, остается решить систему уравнений (2)–(5), (8), описывающую процессы на катализаторе: уравнения для температуры катализатора (с граничными условиями второго рода), температуры газа и концентраций. Для численного решения нелинейной системы обыкновенных дифференциальных уравнений (2)–(5) разработан и реализован эффективный алгоритм, основанный на использовании метода конечных разностей. Особенностью данной задачи являются очень большие градиенты температур катализатора на входе в каталитический блок, что требует построения неравномерной сетки по пространственной переменной (сгущающейся на входном участке

блока). После перехода к безразмерной переменной  $\xi = z/L$  безразмерный шаг сетки на входном участке не превышал  $10^{-6}$ , а общее число точек сетки не превышало  $10^4$ . Для уравнения (5) построена разностная схема с использованием разностной аппроксимации второй производной на неравномерной сетке со вторым порядком точности, полученная система алгебраических уравнений решалась методом прогонки [7]. Для численного решения системы остальных дифференциальных уравнений 1-го порядка использовался метод Рунге — Кутты 2-го порядка [8]. Для уточнения решения системы в целом проводились итерации, при этом точность определения профилей температур была не ниже  $0.01^\circ\text{C}$ , а профилей концентраций — не ниже  $10^{-5}$ .

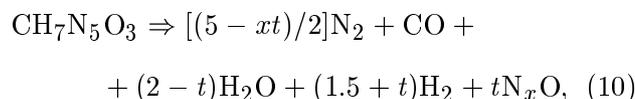
### РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Горение высокоэнергетических материалов с использованием структурированных катализаторов изучалось применительно к горению НАГА, структурная формула этого вещества  $[\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{NH})-\text{NH}-\text{NH}_2] \cdot \text{HNO}_3$ . Полное сгорание данного вещества описывается стехиометрическим брутто-уравнением

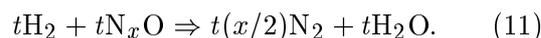


Самостоятельно, без катализатора, НАГА не горит. Это можно объяснить тем, что при его горении промежуточные продукты реакции образуются с разной скоростью: можно выделить быстрые и медленные реакции. К быстрым относятся реакции образования водорода, воды и оксидов азота. Суммарный тепловой эффект этих реакций отрицательный, что препятствует самостоятельному горению НАГА. Наиболее медленными являются реакции восстановления оксидов азота [9]. Эти реакции являются экзотермическими. Брутто-схему горения НАГА можно представить в виде двух стадий:

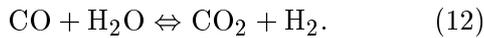
стадия разложения



стадия горения продуктов разложения



Сумма реакций (10) и (11) дает брутто-уравнение (9). Обе вышеприведенные реакции сопровождаются обратимой реакцией паровой конверсии СО



В записи реакций (10) и (11) использовалось обозначение



Предполагается, что параметры  $t$  и  $x$  лежат в диапазоне  $t = 2 \div 0$ ,  $x = 1 \div 2$ . По физическому смыслу параметр  $x$  определяет селективность реакции, а параметр  $t$  связан с полнотой превращения. При  $t = 0$  горение протекает только на поверхности топлива, значение  $t = 2$  соответствует эндотермической реакции на поверхности твердого топлива с наибольшим поглощением тепла. Влияние параметра  $x$  на тепловые эффекты реакций несущественно, поэтому в расчетах принималось среднее значение  $x = 1.5$ .

Реакция (12) имеет весьма малый тепловой эффект по сравнению с другими реакциями и практически не влияет на тепловые балансы. Поэтому расчет процесса проведен без учета данной реакции в предположении, что определяющим (ключевым) веществом является  $\text{N}_x\text{O}$ , которое реагирует на каталитическом блоке (реакция (11)).

При записи кинетического уравнения учитывалось, что скорость горения на поверхности определяется температурой поверхности [4]. Для реакций (10) и (11) использовалась аррениусовская зависимость скорости горения от температуры. Считалось, что реакция (9) нулевого порядка:

$$\Omega_1(T) = k_1 \exp\left(-\frac{E_1}{RT}\right), \quad (13)$$

а скорость реакции (11) имеет первый порядок по  $\text{N}_x\text{O}$ :

$$\Omega_2(C_{\text{N}_x\text{O}}, T) = k_2 \exp\left(-\frac{E_2}{RT}\right) C_{\text{N}_x\text{O}} \quad (14)$$

( $R$  — универсальная газовая постоянная, Дж/(моль·К)). Расчет проводился при постоянных теплофизических свойствах веществ, значения которых взяты при средних значениях температур и составов соответствующих зон. Значения параметров, используемых при

Условия расчета каталитического горения для сотового блока

Параметр	Значения
Давление $p$ , атм	1
Селективность реакции $x$	1.5
Входная температура топлива $T_f$ , °С	25
Длина блока $L$ , м	0.05
Удельная поверхность $S$ , м <sup>-1</sup>	2 267
Гидравлический диаметр канала $d_h$ , мм	1.2
Толщина стенки канала блока, мм	0.255
Порозность $\varepsilon$	0.68
Теплопроводность газа, Вт/(м·К)	0.148
Динамическая вязкость газа, кг/(м·с)	$3.945 \cdot 10^{-5}$
Коэффициент диффузии, м <sup>2</sup> /с	$2.275 \cdot 10^{-4}$
Теплоемкость газа и топлива, Дж/(кг·К)	1 930
Плотность топлива, кг/м <sup>3</sup>	1 000
Re	89.465
Pr	0.515
Sc	0.913
Константы скоростей реакций и тепловые эффекты	Значения
$k_1$ , кг/(м <sup>2</sup> ·с)	$5.47 \cdot 10^6$
$E_1/R$ , К	8 290
$k_2$ , кг/(м <sup>2</sup> ·с)	$2.11 \cdot 10^4$
$E_2/R$ , К	10 847
$Q_2$ , Дж/кг	$8.865 \cdot 10^6$
$Q$ , Дж/кг	$2.37 \cdot 10^6$

расчетах, приведены в таблице. При моделировании каталитических процессов на блочных катализаторах обычно предполагается, что коэффициенты тепло- и массообмена зависят от геометрических размеров и формы канала блока и изменяются по длине канала. В данной работе для расчета этих зависимостей использовалась формула [10]:

$$\alpha = \frac{\text{Nu}\lambda_g}{d_h},$$

$d_h$  — гидравлический диаметр канала блока,

м;  $Nu$  — число Нуссельта, определяемое из соотношения

$$\frac{Nu - Nu_h}{Nu_T - Nu_h} = \frac{DaNu}{(Da + Nu)Nu_T}.$$

Числа Нуссельта  $Nu_T$  и  $Nu_h$ , полученные при решении задач теплообмена в квадратном канале с граничными условиями первого и второго рода (постоянная температура и постоянный тепловой поток на стенке), рассчитывались по приближенным формулам:

$$Nu_T = 2.977 + 6.854(1000\bar{z})^{-0.517} \exp(-42.49\bar{z}),$$

$$Nu_h = 3.095 + 8.933(1000\bar{z})^{-0.539} \exp(-6.727\bar{z}),$$

где  $\bar{z} = \frac{z}{d_h Re Pr}$ ,  $Re$  и  $Pr$  — числа Рейнольдса и Прандтля соответственно. Число Дамкеллера  $Da$  для реакции 1-го порядка определяется

соотношением  $Da = \frac{\bar{K} d_h}{DS}$ , где  $D$  — коэффициент диффузии,  $m^2/c$ ;  $\bar{K} = k_2 \exp\left(-\frac{E_2}{RT}\right)$  —

константа скорости реакции (14). Аналогичные формулы используются для расчета коэффициента массообмена.

Задачи численного анализа состояли, в первую очередь, в сопоставлении результатов математического моделирования процессов горения топлива с экспериментальными данными работы [3], которое показало, что предложенная математическая модель предсказывает максимальную скорость горения топлива и качественно описывает экспериментальные данные по влиянию каталитической активности блока, его теплопроводности на скорость горения топлива.

Для стационарного случая (при фиксированных скоростях горения) топлива были определены температуры горячей поверхности и распределение температуры по каталитическому блоку. На рис. 2 для блоков с различной каталитической активностью показаны температуры их поверхностей со стороны топлива и температуры поверхностей горения, совпадающие с температурой газа на входе в блок. Как видно из рис. 2, при достижении местной скорости горения, равной некоторому предельному значению, наступает такая ситуация, когда температура поверхности блока становится меньше температуры поверхности горения топлива. Аналогичные результаты получены

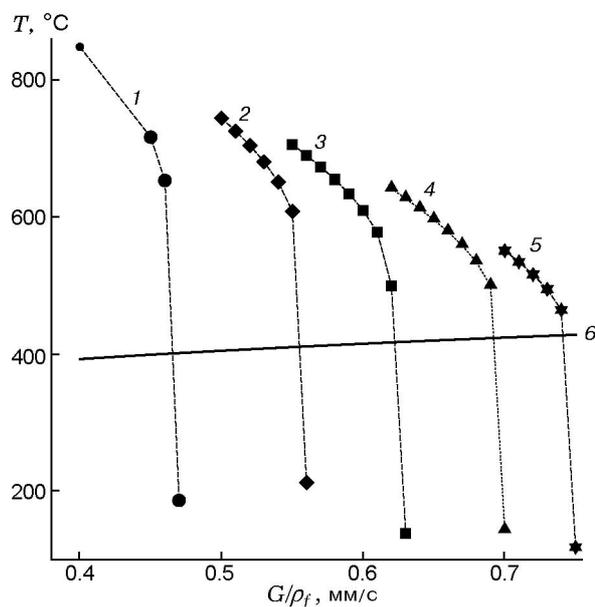


Рис. 2. Зависимость температуры входной точки блока от скорости горения топлива при различных значениях предэкспонента константы скорости реакции:

$k_2$ ,  $кг/(м^2 \cdot с)$ : 1 —  $2.11 \cdot 10^4$ , 2 —  $7.83 \cdot 10^4$ , 3 —  $2.11 \cdot 10^5$ , 4 —  $7.83 \cdot 10^5$ , 5 —  $2.11 \cdot 10^6$ ; 6 — температура газового потока на входе в блок; теплопроводность блока  $10 \text{ Вт}/(м \cdot К)$ ;  $t = 2$

при использовании теплового ножа [4]. Однако, если горение непосредственно под пластиной (или иглой) теплового ножа прекращается и наступает режим активного «врезания» металла в заряд, то для каталитического блока такой режим не реализуется и предлагаемая модель становится физически некорректной.

Анализируя результаты вычислений для блоков с различной каталитической активностью (см. рис. 2), необходимо отметить, что для каждого значения  $k_2$  имеется максимальная скорость горения топлива, которая растет с увеличением каталитической активности.

Аналогичные зависимости наблюдаются при изменении теплопроводности блока (рис. 3). Стоит заметить, что теплопроводность блока реально можно изменить не более чем в 10 раз, а каталитическая активность может изменяться на несколько порядков. Предельные значения коэффициента теплопроводности, при которых проводились расчеты, соответствуют известным из литературы значениям теплопроводности кордиеритового блока ( $2 \text{ Вт}/(м \cdot К)$ ) и металлического блока ( $25 \text{ Вт}/(м \cdot К)$ ) [11, 12].

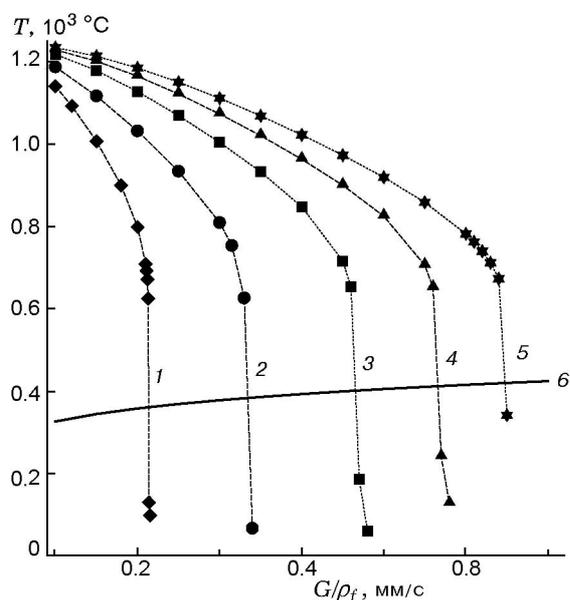


Рис. 3. Зависимость температуры входной точки блока от скорости горения топлива при различной теплопроводности блока:

$\lambda$ , Вт/(м·К): 1 — 2, 2 — 5, 3 — 10, 4 — 15, 5 — 20; 6 — температура газового потока на входе в блок;  $t = 2$

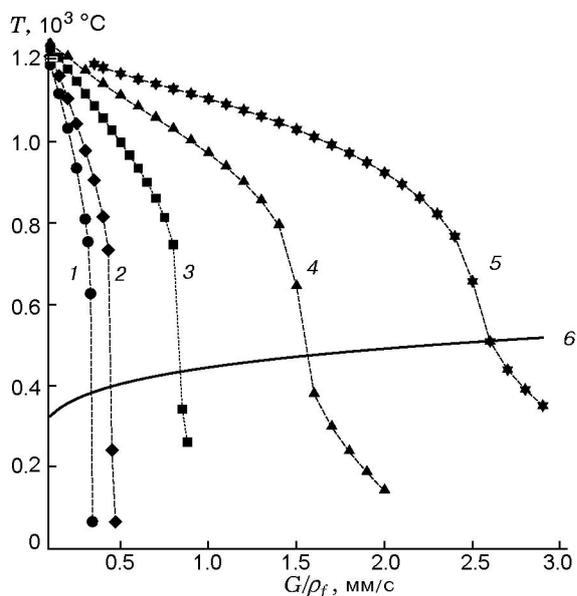


Рис. 4. Влияние гомогенного горения на температуру входа в блок. Зависимость температуры входной точки блока от скорости горения топлива при различных значениях параметра  $t$ :

1 —  $t = 2$ , 2 — 1.5, 3 — 1, 4 — 0.8, 5 — 0.7, 6 — температура газового потока на входе в блок

Специально исследовался вопрос о влиянии гомогенного горения на входе в блок (рис. 4). Гомогенное горение в соответствии со стехиометрическим уравнением (10) учитывается параметром  $t$ . От этого параметра зависит тепловой эффект реакций (10) и (11), но не зависит суммарный тепловой эффект реакции (9). Реакция (11) всегда идет с выделением тепла, а реакция (10) является эндотермической при  $t = 2$  и экзотермической при  $t = 0$ . Результаты, представленные на рис. 4, показывают, что меньшие значения параметра  $t$  соответствуют большей максимальной скорости горения. В предельном случае ( $t = 0$ ) происходит полное сгорание топлива на поверхности по стехиометрическому уравнению (9), в расчетах это соответствует максимальной скорости горения. В последнем случае, ввиду полного превращения вещества по реакции (10), реакция (11) не идет, поэтому здесь находится область не управляемого с помощью каталитического блока горения.

Следовательно, при уменьшении параметра  $t$  до нуля пределы изменения регулирования скорости горения за счет каталитического блока уменьшаются. Это можно видеть на рис. 4, где для кривой 5 допустимые значения скоростей начинаются с 0.35 мм/с, тогда как для зависимостей 1–4 — с нуля. Попробуем с помощью представленной математической модели оценить диапазон возможного регулирования скоростей горения. При экзотермической гетерогенной реакции на поверхности каталитического блока в адиабатических условиях температура каталитической поверхности всегда выше температуры газового потока. Поэтому тепло всегда передается от блока к газовому потоку. Однако, если брутто-реакция разложения (10) становится реакцией с положительным тепловым эффектом, то при малых скоростях горения, в соответствии с уравнением баланса (6), возможно возникновение ситуации, при которой  $\frac{\partial}{\partial z} T_s < 0$ , т. е. тепловой поток направлен на каталитический блок со стороны топлива. При этом температура поверхности горения топлива должна быть ниже температуры входного участка блока. Такие решения соответствуют физически некорректным решениям, противоречащим закону термодинамики (тепло не может передаваться от холодного тела к горячему). Можно показать, что все решения, корректные с точки зрения физики, огра-

ничены минимальным и максимально возможным тепловым потоком с каталитического блока к поверхности топлива.

Минимальный тепловой поток соответствует условию

$$\frac{\partial}{\partial z} T_s = 0, \quad z = 0.$$

Максимальный тепловой поток реализуется, когда все тепло, выделяющееся при реакции (11), возвращается к поверхности топлива:

$$(1 - \varepsilon)\lambda_s \frac{\partial}{\partial z} T_s = (Q - Q_1)G, \quad z = 0.$$

Этот случай также соответствует варианту, когда на поверхности топлива происходит полное сгорание по стехиометрическому уравнению (9) с тепловым эффектом  $Q$ .

Для этих предельных случаев из уравнения (8) можно оценить минимально возможную температуру поверхности торца топлива (зоны разложения)

$$T_{0,\min} = \frac{Q_1 + c_{p,f}T_{in}}{c_{p,g}}$$

и максимально возможную температуру поверхности торца топлива

$$T_{0,\max} = \frac{Q + c_{p,f}T_{in}}{c_{p,g}},$$

которые ограничивают регулируемую скорость горения топлива в пределах от  $\Omega_1(T_{0,\min})$  до  $\Omega_1(T_{0,\max})$ . На рис. 5 приведены максимальная скорость горения, рассчитанная для реального блока, и минимальная, рассчитанная по скорости  $\Omega_1(T_{0,\min})$  при варьировании параметра  $t$ . Диапазон регулирования скорости горения с помощью каталитического блока лежит между этими зависимостями. Важно отметить, что в области  $Q_1/Q > 0.2$  с помощью относительного перемещения каталитического блока нельзя остановить горение. Верхняя оценка максимальной скорости  $\Omega_1(T_{0,\max})$  (на рисунке не приведена) не достигается прежде всего из-за ограниченной теплопроводности блока, а также из-за затрат тепла на нагрев газового потока. При малой длине каталитического блока возможна также неполная степень превращения газообразных продуктов.

На рис. 6 приведены стационарные профили температуры на начальной части блока. Соответствующее тепловыделение по длине блока за счет реакции показано на рис. 7. Кривая 1 относится к блоку с высокой теплопроводностью (металлическому), кривая 2 построена для каталитического блока с низкой теплопроводностью (керамического). Можно отме-

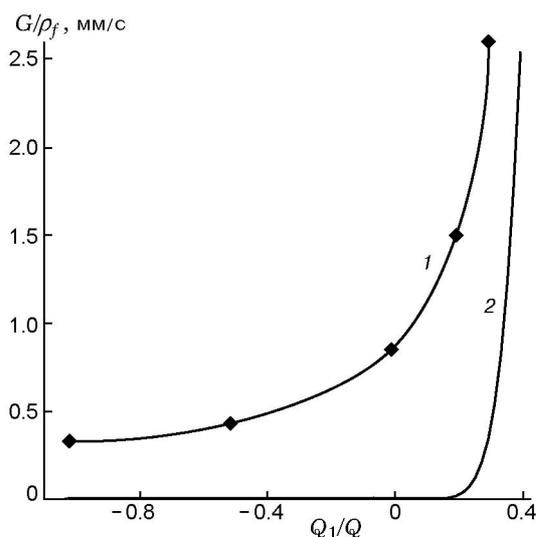


Рис. 5. Зависимость скорости горения топлива от относительного теплового эффекта первой реакции:

1 — максимальная скорость горения топлива для блока, имеющего теплопроводность 10 Вт/(м·К), 2 — минимально возможная скорость горения топлива

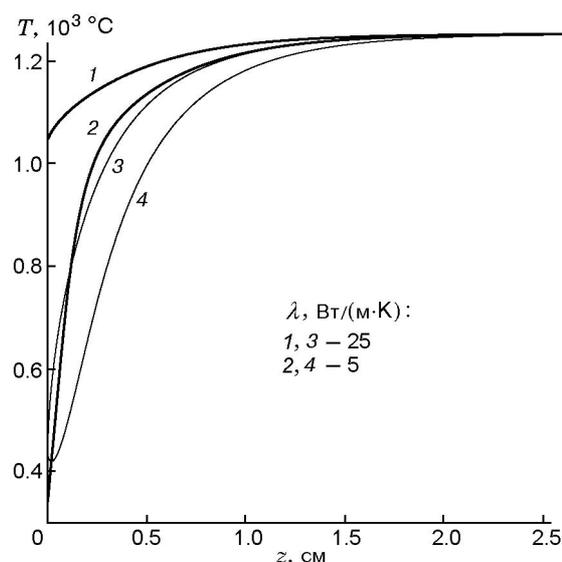


Рис. 6. Стационарные температурные профили на начальной части блока:

1, 2 — температура блока, 3, 4 — температура газа; условия расчета:  $t = 1$ , длина блока 5 см, скорость топлива 0.84 мм/с

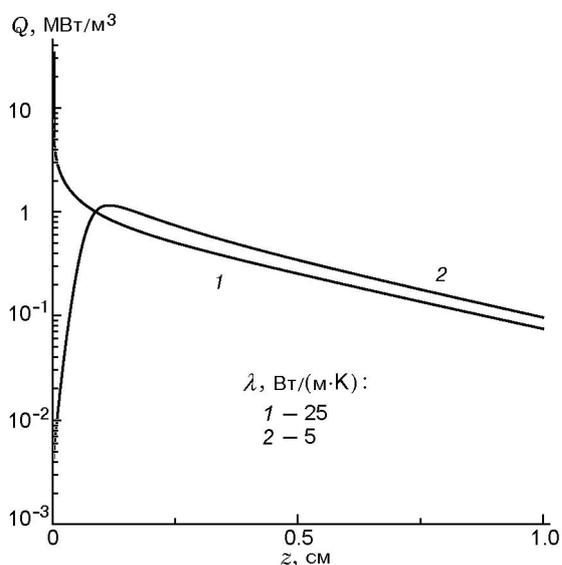


Рис. 7. Объемное тепловыделение на начальной части блока:

условия расчета — см. рис. 6

титель резкое снижение начальной температуры блока на входном участке из-за охлаждения со стороны твердого топлива для блоков с низкой теплопроводностью. Следствием этого является наличие максимума по тепловыделению (см. рис. 7).

Установленные закономерности позволяют сделать вывод о том, что определяющую роль в реализации рассматриваемого механизма управления скоростью газогенерации с помощью структурированных катализаторов, очевидно, играют каталитическая активность блока и его теплопроводность. Важным, вероятно, является и то, что активность можно варьировать в более широком диапазоне, тем теплопроводность.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе проведено математическое моделирование процесса горения типичного конденсированного вещества нагретым до высоких температур каталитическим блоком. Показано, что предложенная математическая модель правильно описывает влияние параметров и предельные скорости горения при использовании структурированных катализато-

ров для управления скоростью горения высокоэнергетических материалов. Установлено, что рост каталитической активности, так же как и повышение теплопроводности катализатора, увеличивает диапазон оперативного регулирования скоростью горения конденсированного вещества.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Шандаков В. А., Пузанов В. Н., Комаров В. Ф., Борочкин В. П. Способ генерации холодных газов в твердо топливных газогенераторах // Физика горения и взрыва. 1999. Т. 35, № 4. С. 75–78.
2. Штехер М. С. Топлива и рабочие тела ракетных двигателей. М.: Машиностроение, 1976. С. 167.
3. Кундо Н. Н., Романьков В. В., Симагина В. И., Ерошкина И. В. Оперативное управление горением твердых топлив каталитическим способом // Физика горения и взрыва. 2007. Т. 43, № 1. С. 86–91.
4. РДТТ с регулируемым модулем тяги / Петренко В. И., Попов В. Л., Русак А. М., Теофилактов В. И. Миасс: Изд-во ГРЦ «КБ им. акад. В. П. Макеева», 1994.
5. Groppi G., Belloli A., Tronconi E., Forzatti P. Analysis of multidimensional models of monolith catalysts for hybrid combustors // AIChE Journal. 1995. V. 41, N 10. P. 2250–2260.
6. Groppi G., Tronconi E., Forzatti P. Mathematical models of catalytic combustors // Catalys. Rev. — Sci. and Eng. 1999. V. 41, N 2. P. 227–254.
7. Самарский А. А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1989.
8. Бахвалов Н. С., Жидков Н. П., Кобельков Г. М. Численные методы. М.: Наука, 1987.
9. Мальцев В. М., Мальцев М. И., Кашпоров Л. Я. Основные характеристики горения. М.: Химия, 1977. С. 283–284.
10. Groppi G., Belloli A., Tronconi E., Forzatti P. A comparison of lumped and distributed models of monolith catalytic combustors // Chem. Eng. Sci. 1995. V. 50, N 17. P. 2705–2715.
11. Cybulski A., Moulijn J. A. Monoliths in heterogeneous catalysis // Catalys. Rev. — Sci. and Eng. 1994. V. 36. P. 179–270.
12. Kolaczowski S. T., Crumpton P., Spence A. Modelling of heat transfer in non-adiabatic monolithic reactors // Chem. Eng. Sci. 1988. V. 43, N 2. P. 227–231.

Поступила в редакцию 1/IX 2007 г.