

6. Коробейников О. П., Чернов А. А., Емельянов И. Д. Исследование кинетики и механизма химических реакций в пламени смесевого состава на основе ПХА и полибутадиенового каучука // ФГВ.—1990.—26, № 3.—С. 46.
 7. Коробейников О. П. Динамическая зондовая масс-спектрометрия пламен и процессов разложения конденсированных систем // Там же.—1987.—23, № 5.—С. 64.

г. Новосибирск

Поступила в редакцию 31/І 1991

УДК 662.612.2

*H. E. Ермолин, O. P. Коробейников, B. M. Фомин,
A. A. Черное*

**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ПЛАМЕН
СМЕСЕВЫХ ТВЕРДЫХ ТОПЛИВ
НА ОСНОВЕ ПЕРХЛОРАТА АММОНИЯ
И ПОЛИБУТАДИЕНОВОГО КАУЧУКА**

В работе представлены результаты численного исследования структуры пламен СТТ на основе ПХА и ПХА + ПБК. Процесс горения моделируется с помощью формальной кинетики, детализированной на основе экспериментальных данных по горению слоевой системы при давлениях ~ 0.26 атм. Для построения решения используется упрощенная система уравнений, получаемая из полной системы Навье — Стокса предельным переходом $M \rightarrow 0$. Для давлений ~ 40 атм исследована структура пламен, получены величины тепловых потоков в к-фазу.

Важную роль в процессе горения СТТ играют микропламена, обусловленные гетерогенным распределением окислителя в горючем-связке. Зависимость скорости горения от дисперсности частиц, влияние микропламен на формирование локальных тепловых и диффузионных потоков указывают на необходимость исследования локальной структуры пламен. В силу физической и химической неоднородности СТТ и нестационарности горения прямое экспериментальное исследование пламен СТТ затруднено. Поэтому важным для понимания процесса горения гетерогенного СТТ и получения количественных характеристик для построения моделей горения является исследование горения слоевых систем.

Теоретическому и экспериментальному изучению горения слоевых систем посвящено значительное число работ [1—6]. Однако теоретические модели не учитывают сложное взаимодействие реакционных зон и теплопередачи, влияние геометрии поверхности, реальной кинетики и газодинамики на процесс горения. В последнее время масс-спектрометрическим методом получены экспериментальные данные по химической структуре пламен гомогенного смесевого топлива (77 % ПХА + 23 % ПБК), (84 % ПХА + 16 % ПБК) и слоевой системы, состоящей из пластин ПХА и связующего (57 % ПХА + 43 % ПБК) с шириной слоев 1,3 и 1,1 мм соответственно [7,8]. Стационарная скорость горения и давление в экспериментах составляли $u = 1,1, 0,33, 0,3$ мм/с, $p = 0,6, 0,08, 0,26$ атм. На основе экспериментальных данных и проведенных расчетов [8] выделен кинетический механизм, включающий 58 элементарных стадий и 35 компонентов, удовлетворительно описывающий экспериментальные данные.

В настоящей работе приводятся результаты численного моделирования структуры течения в пламени СТТ на основе ПХА и ПБК.

Система уравнений. Метод решения

Течение у поверхности горения СТТ характеризуется числами Маха $\leq 0,003$, числами Рейнольдса $\approx 10—200$ (если нет эффектов обдува горящей поверхности). Система уравнений Навье — Стокса, описывающая течение реагирующего газа, в безразмерном виде приведена ниже:

$$\frac{dp}{dt} = -\rho \nabla \cdot v,$$

$$\begin{aligned}
\rho \frac{d\bar{v}}{dt} &= -\nabla p_c + \frac{1}{Re} \nabla \cdot \tau, \\
\rho \frac{dt}{dt} &= (\gamma - 1) M^2 \frac{dp_c}{dt} + \frac{\gamma - 1}{Re} M^2 \nabla \cdot (\bar{v}) + \frac{1}{Re Pr} \nabla \cdot \bar{q}, \\
\gamma M^2 p_c &= \rho T / (m - 1), \quad H = h + (\gamma - 1) M^2 \frac{1}{2} \bar{v}^2, \\
\rho \frac{dy_i}{dt} &= -\frac{1}{Re Sc} \nabla \bar{J}_i + Da_i \chi_i, \quad \dot{u} = \sum h_i y_i, \\
p &= p_0 (1 + \gamma M^2 p_c), \quad \gamma = (c_p/c_v)_0.
\end{aligned} \tag{1}$$

Здесь $\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \bar{v} \nabla$; ρ , \bar{v} , p , T — соответственно плотность, скорость, давление и температура газа; τ — тензор вязких напряжений; \bar{q} — поток энергии, обусловленный теплопроводностью и диффузией; m — молекулярная масса смеси; $y_i = \rho_i / \rho m_i$; \bar{J}_i — мольно-массовая доля и диффузионный поток i -го компонента; χ_i — источниковые члены, обусловленные химической неравновесностью; h_i — мольная энтальпия i -го компонента; Re , M , Pr , Sc , Da — соответственно числа Рейнольдса, Маха, Прандтля, Шмидта, Дамкеллера; p_c — избыточное давление; c_p , c_v — удельные теплоемкости. Индекс нуль означает характерное значение. Тепловой и диффузионные потоки конкретизируются в соответствии с [9].

Для рассматриваемого процесса система содержит два различных типа малых параметров при старших производных: малые параметры, связанные с неравновесными химическими процессами, и параметр, связанный с малыми числами Маха. Наличие двух разномасштабных характерных времен распространения конвективных и акустических возмущений делает газодинамическую часть системы уравнений жесткой (малый параметр при старшей производной возникает при определении плотности из уравнения состояния $\rho = (1 + \gamma M^2 p_c) \cdot m/T$ и исключении ее из левой части уравнения неразрывности). Границные условия для системы (1) на горячей поверхности — разрывные вследствие разрыва физических и химических свойств конденсированной фазы, а само течение содержит пограничные слои, обусловленные микропламенами.

Известны вычислительные трудности расчета течений с малыми числами Маха на основе полной системы уравнений (1) с помощью явных, а также неявных разностных методов. В [10] для описания медленных течений предложен общий подход вывода приближенных систем уравнений, формально получаемых из полных систем заданием $M = 0$. В настоящей работе используется приближенная система уравнений, аналогичная [11], получаемая из (1) заданием $M = 0$. Жесткость, связанная с малыми числами Маха, снимается. Как показывают расчеты структуры одномерных пламен ПХА и гексогена, решение предельной системы мало отличается от решения системы (1) до $M \leq 0,3$. Приближенная система уравнений имеет неформальное сходство с системой Навье — Стокса для несжимаемой жидкости. Эффективными для стационарного решения являются схемы, основанные на методе искусственной сжимаемости [12]. В настоящем исследовании для построения решения используется метод расщепления [13] в сочетании с методом искусственной сжимаемости. Неявная разностная схема (1-го или 2-го порядка точности по пространственным переменным) в сочетании со стабилизирующим оператором четвертого порядка малости позволяет эффективно получать стационарное решение приближенной системы и для разрывных граничных условий.

Модель горения

Процесс горения СТТ характеризуется наличием трех типов пламен: у поверхности зерен окислителя, у поверхности связующего, являющегося по существу мелкодисперсным СТТ, и пламя, обусловленное диффузией

фузией реагентов из приповерхностных пламен в слой смешения. Последнее химически неоднородно по своей структуре. Согласно [14], первичное диффузионное пламя обусловлено диффузией продуктов разложения окислителя и связующего в слой смешения в окрестности точки раздела связующее — окислитель; «конечное» диффузионное пламя — диффузией активных продуктов горения из приповерхностных пламен в слой смешения. Модель, позволяющая учесть локальное взаимодействие трех различных пламен и рассчитывать необходимые для прогнозирования скорости горения тепловые потоки из газовой фазы в конденсированную, состоит в общем случае из четырех необратимых стадий:

1. $\eta_{11}A_1 + \eta_{12}B_1 \rightarrow \eta_{13}A_3 + \eta_{14}P_1$,
2. $\eta_{21}A_2 + \eta_{22}B_2 \rightarrow \eta_{23}B_3 + \eta_{24}P_2$,
3. $\eta_{31}A_3 + \eta_{32}B_3 \rightarrow \eta_{33}P_3$,
4. $\eta_{41}A_4 + \eta_{42}B_4 \rightarrow \eta_{43}C_3 + \eta_{44}P_4$.

Здесь записаны основные реакции соответственно в пламени у поверхности зерен окислителя, в пламени у поверхности связующего, в «конечном» и «первичном» пламени слоя смешения. A_i , B_i , C_i — реагенты; P_i — продукты реакций; η_{ji} — матрица стехиометрических коэффициентов. Реакции считаются необратимыми, скорости реакций имеют вид

$$k_i(T) (\rho_{A_i}/m_{A_i})^{\eta_{i5}} (\rho_{B_i}/m_{B_i})^{\eta_{i6}}, \quad i = 1 \div 4,$$

где η_{i5} , η_{i6} — порядки реакций по соответствующим реагентам. Стхиометрические коэффициенты, кинетические параметры, теплофизические свойства реагентов и продуктов реакций отражают химию процесса и могут быть получены на основе экспериментальных и теоретических данных по горению конкретных СТТ. Для топлив, состоящих из частиц ПХА и связующего ПХА + ПБК, указанные параметры получены на основе расчета структуры гомогенных пламен по дотальной кинетике [8, 9]. Первичное пламя в слое смешения грубо учитывается заданием $B_1 = B_2$ и стадиями 1, 2, протекающими в нем. Запишем термокинетические параметры реакций 1—3 для интервала давлений 0,26—100 атм:

1. $A_1 + 0,562B_1 \rightarrow 0,787A_3 + 1,68P_1$,
2. $A_2 + 0,36B_1 \rightarrow 1,75B_3 + 1,66P_2$,
3. $B_3 + 1,92A_3 \rightarrow 3,05P_3$,

и константы скоростей ($k_i = a_i \exp(-c_i/RT)$):

$$\begin{aligned} k_1 &= 5,5 \cdot 10^{11} \exp(-15236/RT), \quad \eta_{15} = \eta_{16} = 0,9885; \\ k_2 &= 7,6 \cdot 10^{10} \exp(-14955/RT), \quad \eta_{25} = \eta_{26} = 0,8901; \\ k_3 &= 2,7 \cdot 10^{10} \exp(-24200/RT), \quad \eta_{35} = \eta_{36} = 0,965. \end{aligned}$$

Термодинамические параметры рассматриваемых восьми компонент соответствуют указанным ниже:

1	2	3	4	5	6	7	8
A_1	B_1	A_3	P_1	A_2	B_3	P_2	P_3
NH_3	$HClO_4$	O_2	—	C_4H_6	CO	—	—

Термодинамические параметры компонентов P_i :

$$\begin{aligned} m_{P1} &= 28,41, \quad AI_{P1} = -60054, \quad A1_{P1} = 10,262; \\ m_{P2} &= 24,69, \quad AI_{P2} = -40000, \quad A1_{P2} = 12,232; \\ m_{P3} &= 29,3 \quad AI_{P3} = -78857, \quad A1_{P3} = 12,610. \end{aligned}$$

Здесь m и $h = AI + A1T$ — молекулярная масса и энтальпия соответствующего компонента. Кинетические параметры получены опосредованно, путем экстраполяции экспериментальных и расчетных данных и применительно к горению гетерогенных СТТ нуждаются в уточнении.

Результаты расчетов

Расчеты проведены для плоскопараллельных и осесимметричных течений на криволинейных сетках с числом узлов 20×20 , сгущающихся в областях больших градиентов. Вдув реагирующей смеси с поверхности горения принят направленным по нормали к поверхности. На поверхности горения в зависимости от величины давления задаются значения температуры, скорости и мольных долей компонентов $\alpha_i = p_i/p$ (табл. 1). При низких давлениях α_i соответствуют эксперименту [7], при высоких — грубой экстраполяции данных по горению ПХА и слоевой системы. На нижней и верхней границе расчетной области задаются условия симметрии, на выходной — условия экстраполяционного типа.

Таблица 1

p , атм	α_i окислителя		α_i связующего	
0,26	0,085 0,054		0,047 0,0214	
20—100	0,08 0,054		0,08 0,0214	

Таблица 2

Вариант	$a_1 \cdot 10^{-11}$	$a_2 \cdot 10^{-11}$	$a_3 \cdot 10^{-10}$
1	1,5	1,6	5,4
2	1,5	1,6	2,7
3	1,5	1,6	1,35

Горение слоевой системы. Условия на поверхности горения соответствуют экспериментальным [7]. Форма поверхности горения между срединой слоя окислителя ($z=0$) и срединой слоя связующего ($z=1,2$) [7] вместе с полем изотерм $T/673 = \text{const}$ приведена на рис. 1. Здесь и на рис. 3, 4 области I и II соответствуют связующему и ПХА. Линейные размеры нормированы на 10^{-3} м. Температура поверхности горения в расчетах задается зависимостью

$$T = 673 + 30(1 + \cos \pi z/z_2), \quad z_2 = 1,2$$

и равна экспериментальной при $z = 0$ и 1, 2. Скорость движения поверхности горения постоянна и равна 0,3 мм/с [7].

Представление о взаимном влиянии пламен дают расчетные значения температуры, приведенные на рис. 2, полученные при вариации констант скоростей. Экспериментальные данные проведены штриховой линией. Здесь x — расстояние до поверхности горения; нумерация кривых соответствует приведенным в табл. 2 вариантам. Хорошее согласие расчета с экспериментом получается для варианта 1, который используется в дальнейшем. Как в расчетах, так и в эксперименте наблюдается широкий слой смешения, омывающий поверхность горения, однако полного перемешивания в области с правой границей

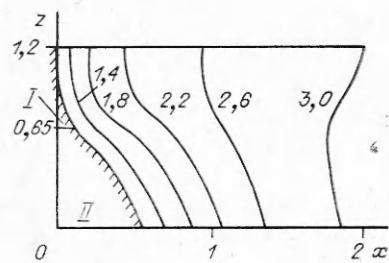


Рис. 1.

$x = 3$ нет. Реакция протекает в кинетической области, температурное поле в сечениях $x = \text{const}$ (см. рис. 1) выравнивается интенсивнее концентрационных полей. Величина теплового потока по нормали к поверхности горения приведена ниже:

z	0	0,65	1,2
$\lambda \frac{\partial T}{\partial n}$, Вт/м ²	$1,07 \cdot 10^5$	$2,09 \cdot 10^5$	$3,05 \cdot 10^5$

Отношение указанного потока к аналогичному для плоской поверхности горения достигает максимальной величины 2,4 в точке $z = 0$.

Горение активного связующего, содержащего зерна окислителя. Геометрия поверхности горения в окрестности средины зерна ПХА ($z = 0$) вместе с полем скоростей \bar{v} , нормированным на 1,5 м/с, приведена на

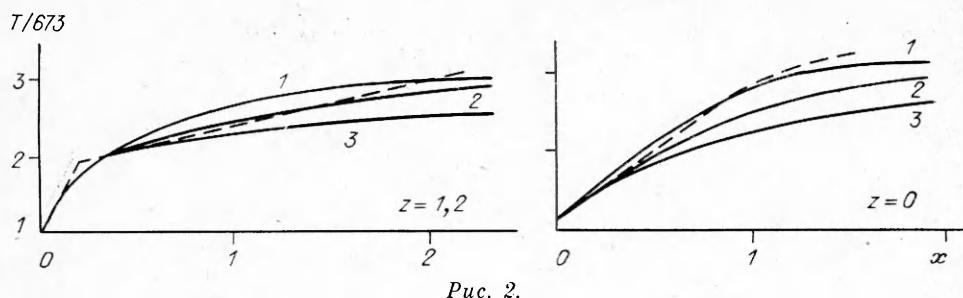


Рис. 2.

рис. 3. Линейные размеры нормированы на 10^{-4} м. Распределение температуры по поверхности горения:

$$z \in [0, z_1], \quad T = 873 \text{ K},$$

$$z \in [z_1, z_2], \quad T = 673 + 100 \left(1 - \cos \frac{\pi(z - z_2)}{z_2 - z_1} \right).$$

Скорость движения осесимметричной поверхности горения:

$$z \in [0, z_*], \quad u = \left(6 - 2 \cos \frac{\pi z}{z_*} \right) \cdot 10^{-3} \text{ м/с},$$

$$z \in [z_*, z_2], \quad u = \left(5 - 3 \cos \frac{\pi(z - z_*)}{z_2 - z_*} \right) \cdot 10^{-3} \text{ м/с},$$

$$z_* = 1,9, \quad z_1 = 2, \quad z_2 = 3, \quad p = 40 \text{ атм.}$$

Форма, а также скорость движения поверхности приближенно соответствуют мгновенной картине процесса горения. Температура поверхности горения для зерна ПХА берется из [15]. Данные о температуре поверхности активного связующего при высоких давлениях отсутствуют, принятые значения соответствуют низким давлениям [7]. Формирование поля скорости (см. рис. 3) определяет сжимаемость среды, обусловленная в основном неизотермичностью процесса, а также геометрия поверхности с распределением скорости на ней. Видно ускоренное ядро потока. Линии постоянных значений $T/673$ приведены на рис. 4. По сравнению с горением слоевой системы при низких давлениях здесь четко выражены приповерхностные пламена и пламя в слое смешения. Распределение температуры при разных z приведено на рис. 5, где x — расстояние до поверхности горения. Ширина пламен ~ 2 мкм согласуется с известными

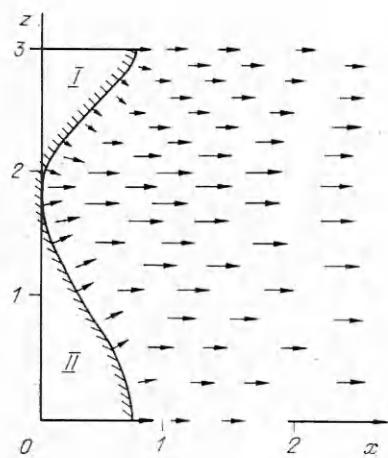


Рис. 3.

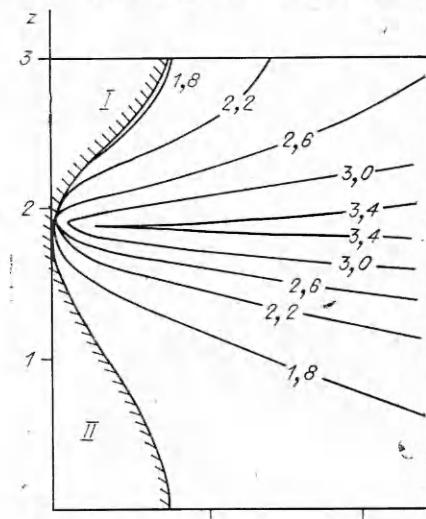


Рис. 4.

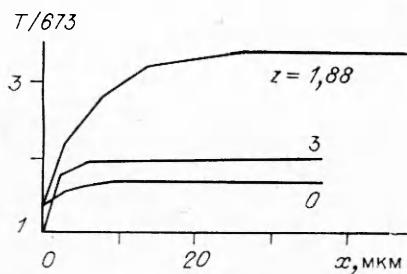


Рис. 5.

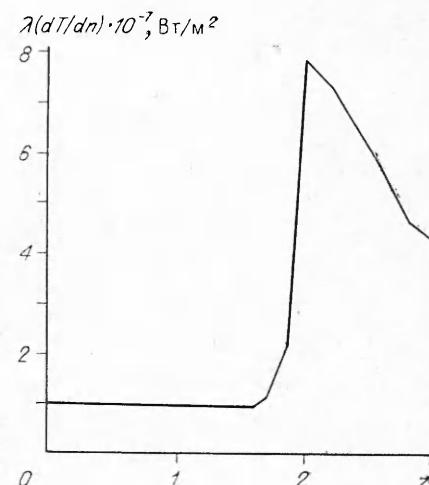


Рис. 6.

литературными данными. Градиенты искомых величин в обоих направлениях сравнимы, что говорит о существенно двумерном характере течения.

Величина теплового потока по нормали к поверхности горения для плоскопараллельного течения приведена на рис. 6. Отличие тепловых потоков на поверхности горения для плоскопараллельного и осесимметричного течения не превышает 2,7 %. Положение точки с максимальным тепловым потоком на поверхности горения зависит, как показывают расчеты, как от геометрии поверхности, так и от интенсивности реакции в слое смешения. Для достаточно сильного протекания реакции в слое смешения точка с максимальной величиной теплового потока сдвинута от границы раздела $z = 2$ в сторону окислителя. Величина теплового потока слабо зависит от формы поверхности, что позволяет, по-видимому, для высоких давлений переходить в моделях от криволинейной к плоским поверхностям горения. Зависимость величины теплового потока от константы скорости реакции 3 локальна в случае высоких давлений и проявляется в окрестности раздела связующее — окислитель. Слабое взаимное влияние приповерхностных пламен при высоких давлениях позволяет получить для них кинетические параметры из экспериментальных данных по горению монотоплив, однако затрудняет прямое экспериментальное исследование процесса горения СТТ вследствие образования локальных зон больших градиентов. Характер процесса в слое смешения в зависимости от констант скоростей может меняться от кинетического до близкого к диффузионному; в окрестности точки раздела связующее — окислитель процесс протекает в кинетической области.

ЛИТЕРАТУРА

1. Нахбар В. Теоретическое исследование горения многослойных топлив // Исследование ракетных двигателей на твердом топливе.— М.: ИЛ, 1963.— С. 145—157.
2. Бахман Н. Н., Беляев А. Ф. Горение гетерогенных конденсированных систем.— М.: Наука, 1967.
3. Ермолаев Б. С., Коротков А. И., Фролов Ю. В. Закономерности горения слоевых конденсированных систем // ФГВ.— 1970.— 6, № 3.— С. 277—285.
4. Прайс Э. В., Хэндли Дж. К., Паниам Р. Р. и др. Горение слоевых систем перхлората аммония — полимер // РТК.— 1981.— 19, № 4.— С. 112—120.
5. Price E. W., Sambamurthi J. K., Sigman R. K. et al. Combustion of ammonium perchlorate — polymer sandwiches // Combust. Flame.— 1986.— 63, N 3.— P. 381—413.
6. Струнин В. А., Фирсов А. Н., Шкадинский К. Г. и др. // Закономерности гетерогенного горения слоевой системы // ФГВ.— 1989.— 25, № 5.— С. 25—32.
7. Коробейничев О. П., Терещенко А. Г., Шварцберг В. М. и др. Исследование структуры пламени слоевых систем на основе ИХА // Там же.— 1990.— 26, № 2.— С. 53—58.
8. Коробейничев О. П., Чернов А. А., Емельянов И. Д. и др. Исследование кинетики и механизма химических реакций в пламени смесевого состава на основе ПХА и полибутидаценового каучука // Там же.— № 3.— С. 46—55.

9. Ермолин Н. Е., Коробейничев О. П., Терещенко А. Г. и др. Моделирование кинетики и механизма химических реакций в пламени перхлората аммония // Хим. физика.— 1982.— № 12.— С. 1711—1717.
10. Ramshaw J. D., Trapp J. A. Numerical technique for low-speed homogeneous two-phase flow with sharp interfaces // J. Comp. Phys.— 1976.— 21, N 4.— P. 438—453.
11. Кузнецов А. Е., Нехамкина О. А., Стрелец М. Х. Расчет стационарных дозвуковых течений химически неравновесных газовых смесей в каналах переменного сечения при наличии произвольных конечных изменений плотности // ТВТ.— 1984.— 22, № 6.— С. 1125—1133.
12. Владимирова Н. Н., Кузнецов Б. Г., Яненко Н. Н. Численные расчеты симметричного обтекания пластиинки потоком вязкой несжимаемой жидкости // Некоторые вопросы вычислительной и прикладной математики.— Новосибирск: Наука, 1966.— С. 186—192.
13. Ковеня В. М., Яненко Н. Н. Метод расщепления в задачах газовой динамики.— Новосибирск: Наука, 1981.
14. Бекстед М. В., Дэрр Р. Л., Прайс С. Ф. Модель горения смесевого ТРТ, базирующаяся на нескольких типах пламени // РТК.— 1970.— 8, № 12.— С. 107—117.
15. Коэн Н. С., Стрэнд Л. Д. Уточненная модель горения смесевых твердых топлив на основе перхлората аммония // Аэрокосмическая техника.— 1983.— 1, № 7.— С. 100—112.

г. Новосибирск

Поступила в редакцию 30/XI 1990

УДК 536.46 : 662.61

A. M. Липанов, A. B. Алиев

РАСПРОСТРАНЕНИЕ ПЛАМЕНИ В НЕСИММЕТРИЧНЫХ КОЛЬЦЕВЫХ КАНАЛАХ

Приводится вывод уравнений газовой динамики, описывающих течение продуктов сгорания топлива в несимметричном кольцевом канале в двумерной нестационарной постановке. Уравнения газовой динамики решаются совместно с формулами, описывающими тепловые процессы. Численным анализом установлены основные закономерности процессов зажигания топливной шашки, размещенной несимметрично в корпусе газогенератора. Анализ выполнен для случаев вложения шашки с эксцентрикитетом или с перекосом.

1. Исследование процессов распространения пламени вдоль по цилиндрической поверхности твердого топлива, расположенного в круглом канале, посвящено много работ (например, [1, 2]). Ниже исследуются те же процессы, но в случаях, когда цилиндрическая поверхность топлива размещена в несимметричном кольцевом канале. При этом несимметрия канала может быть обусловлена вложением шашки твердого топлива в корпус газогенератора с эксцентрикитетом (рис. 1, а) либо с перекосом (рис. 1, б). Возможны случаи провисания шашки (рис. 1, в).

Решение задачи о воспламенении топливной шашки и структуре газодинамического потока в канале будем выполнять при следующих допущениях и предположениях:

топливо, размещенное в проточном кольцевом канале, прогревается и зажигается продуктами горения, поступающими в расчетную область через левую границу канала;

толщина зазора между поверхностью топлива и корпусом газогенератора является функцией всех пространственных координат ($h = h(x, r, \theta)$) и не изменяется с течением времени;

толщина зазора существенно меньше протяженности кольцевого канала ($h/L \ll 1$) и радиуса кривизны цилиндрической поверхности шашки ($h/R \ll 1$);

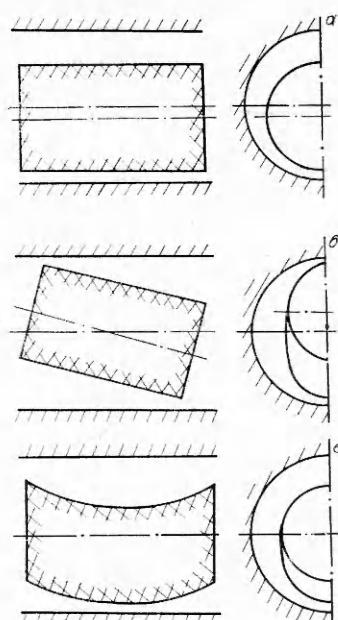


Рис. 1.