

АНАЛИЗ СОВРЕМЕННЫХ МОДЕЛЕЙ СТАЦИОНАРНОГО ГОРЕНИЯ
СМЕСЕВЫХ ТВЕРДЫХ ТОПЛИВ

Л. К. Гусаченко, В. Е. Зарко

(Новосибирск)

Практические потребности использования смесевых твердых топлив (СТТ) выдвигают задачи совершенствования моделей горения, которые должны точно описывать закономерности горения при вариации состава топлива и внешних условий. Об активности такой работы за рубежом свидетельствует большое число (более сотни) оригинальных статей, опубликованных на эту тему за последние 10 лет, а также обзоры (см. [1, 2]) и специальные издания в серии «Прогресс в астронавтике и аэронавтике» (США). В этих публикациях подробно обсуждаются математические постановки, по недостаточно представлена критика как формулировок моделей, так и неверного их использования. В Советском Союзе также активно ведутся исследования по моделированию процессов горения, о чем свидетельствуют многочисленные публикации в отечественных журналах. Частично эти результаты обобщены в работах [3—5].

Основой современных теоретических представлений о горении твердых топлив послужили работы Я. Б. Зельдовича 40-х годов [6], в которых учтены взаимодействие зон горения в газовой и конденсированной фазах, а также важная роль химической кинетики в определении величины скорости горения. Впоследствии эти идеи развивались в экспериментальных и теоретических работах многих советских (см., например, [7]) и зарубежных авторов. Значительным итогом развития теории горения гомогенных ТТ послужила представленная в [8] классификация элементарных моделей горения. Смесевые ТТ имеют более сложную гетерогенную структуру и состоят из компонентов с резко отличными физико-химическими характеристиками. Режимы их горения сложны и разнообразны и описать их в рамках какой-либо универсальной модели трудно. Естественный подход заключается в создании идеализированных, учитывающих влияние ограниченного числа факторов, моделей с последующим составлением интерполяционных соотношений, которые описывают наложение различных влияний. При этом должна быть разработана также система диагностических экспериментов, позволяющих для заданного топлива и конкретных условий его сжигания обоснованно выбрать соответствующую модель.

Пока теория горения СТТ далека от реализации сформулированного подхода. Существуют отдельные модели, которые в условиях дефицита достоверных экспериментальных данных о процессах в зонах горения неизбежно связаны с умозрительными предположениями и зачастую содержат серьезные недостатки и даже противоречия. Отсутствие серьезной критики со стороны «пользователей» обусловлено во многих случаях неверным толкованием результатов совпадения (в ограниченном диапазоне изменения условий) теоретических и экспериментальных данных. В действительности, однако, удовлетворительное согласие эксперимента с теорией служит лишь доводом в пользу работоспособности данной модели, но никак не доказывает истинности ее исходных предположений,

поскольку остаются возможности альтернативных объяснений тех же самых закономерностей.

В настоящем обзоре основное внимание уделено классификации существующих моделей горения по физическим признакам, анализу типичных ошибок физического и математического описания горения СТТ и обсуждению перспективных задач в данной области. Вопросы сопоставления расчетных и экспериментальных результатов здесь практически не затрагиваются, так как это выходит за рамки поставленной задачи и, кроме того, затруднено отсутствием в ряде случаев полной информации о деталях экспериментов. По этим вопросам мы отсылаем читателей к оригинальным работам.

Обзор современных моделей

Приступая к изложению моделей, разработанных за последние 10—15 лет, разделим их на группы в соответствии с использованным способом осреднения в к-фазе. Статистический подход и связанное с ним осреднение незбежны при рассмотрении таких систем, как СТТ, где случайный характер распределения всех параметров в зонах горения связан с технологией изготовления составов, которая обуславливает случайные распределения и ориентацию частиц компонентов.

Осреднение по объему. Любая наука, использующая понятие сплошной среды, фактически оперирует результатами локального осреднения дискретно распределенных по объему величин. Такие результаты не вызывают сомнений, пока минимальный используемый в осредненной задаче размер многое больше размера, характеризующего дискретность микроструктуры. Применительно к условиям горения, если порошкообразный компонент топлива химически реагирует уже в к-фазе, то скорость тепловыделения в ней обычно изменяется от максимального значения вблизи границы с газовой фазой практически до нуля на некотором расстоянии Δx_p в глубь к-фазы, составляющем малую долю (типичное значение $\sim 20\%$) всей толщины прогретого слоя. В квазигомогенной модели (например, [9]) используется в соответствии с принятым подходом интегрирование по локально осредненной температуре в пределах зоны реакций в к-фазе, поэтому $\delta T \ll \Delta T_p$ и, следовательно, $\delta x \ll \Delta x_p$. Здесь ΔT_p — температурный перепад в зоне реакций; δT , δx — минимальные рассматриваемые в задаче изменения температуры и расстояния. Размер неоднородностей скорости тепловыделения (которая тоже используется в локально осредненном виде) имеет порядок размера d частиц порошкообразного компонента в к-фазе.

Таким образом, квазигомогенная модель, учитывающая одномерное распределение температуры в зоне реакций к-фазы, применима для $d \ll \delta x \ll \Delta x_p$. Математическая процедура осреднения соответствует реальному физическому процессу выравнивания на расстояниях порядка d тепловых потоков от неоднородностей тепловыделения. Неоднородности тепло- и массоприхода в газовой фазе, тоже имеющие масштаб d и созданные частицами окислителя, вышедшиими на поверхность или вылетевшими с нее, не проявляются в пространственных распределениях температуры и концентраций компонентов. Причиной служит диффузационное и тепловое их «размывание», эффективное при $vd/D \ll 1$, $vd/\zeta_r \ll 1$ (v , d , ζ_r — характерная скорость оттока и коэффициенты диффузии и температуропроводности газовой фазы). В условиях, типичных для сжигания СТТ, $\zeta_r/v \gg \Delta x_p$, приведенные неравенства заведомо выполняются при $d \ll \Delta x_p$. Локальное осреднение по слоям к-фазы позволяет строить квазигомогенные модели горения типа [9], математически отличающиеся от соответствующих моделей для гомогенных порохов лишь с учетом того, что объемная скорость тепловыделения и расходования компонентов в зоне реакций к-фазы пропорциональна удельной поверхности контакта компонентов (зависит от d).

Осреднение по поверхности. При $\Delta x_p \ll d \ll \kappa_r/u$ (κ_r , u — температуропроводность и линейная скорость горения к-фазы) квазигомогенность по тепловому потоку нарушается в зоне реакций, но еще выполняется в прогретом слое вне этой зоны. При этом имеет место «квазиодномерный» тепловой баланс к-фазы $q = mc(T_p - T_0)$, где T_0 , T_p — температуры начальная и на границе зоны реакций; c — теплоемкость; m — массовая скорость горения; q — тепловой поток с холодной границы зоны реакций в глубь к-фазы. Величину q приходится находить с учетом неоднородностей тепловыделения (в зоне реакций и в газовой фазе) осреднением по поверхности — холодной границе зоны реакций. Это осреднение соответствует реальному выравниванию на расстояниях d неоднородного на поверхности теплового потока. При этом и массовую скорость mS горения образца естественно находить суммированием потоков массы через элементы общей поверхности S в фиксированный момент времени. Заметим, что неоднородность тепловыделения в газовой фазе может оказаться несущественной: обычно коэффициенты теплопроводности в газовой и к-фазах отличаются не более чем на порядок, так что из неравенства $d \ll \kappa_r/u$ может последовать $d \ll \kappa_r/v$ и (при $D \approx \kappa_r$) $d \ll D/v$. При этих условиях, как отмечалось выше, неоднородности в газовой фазе размыкаются.

Впервые подход с осреднением по поверхности использован в модели Германса [10], где предполагалось, что вокруг зерна окислителя в связке образуется выемка, на поверхности которой происходит гетерогенная реакция горючего связующего и газообразных продуктов разложения окислителя. Предполагалось также, что температуру во всей зоне гетерогенных реакций (выемке) можно считать одинаковой, а средний удельный тепловой поток можно взять в виде $\Delta q/\Delta S$. Здесь Δq — тепловой поток в к-фазу через элемент ΔS , который содержит среднюю (арифметическую среди всех представленных на поверхности частиц) площадь плоского сечения частицы и площадь окаймляющей ее полоски связки. Задано, что на элементе ΔS окислитель и горючее представлены в том же соотношении, что и в сечении образца, а здесь при случайному пространственном распределении частиц, согласно стереологическому принципу Кавальери — Акера — Глаголева [11], они представлены в том же соотношении, что и во всем объеме образца. При этом диаметр среднего сечения частицы равен $d\sqrt{2/3}$. Общая скорость горения определяется суммарной скоростью реакции в выемке.

Подход Германса послужил основой для создания многих современных моделей горения СТТ. В частности, на его основе развита широко распространенная модель нескольких пламен [12], которая описывает горение топлива на основе ПХА. Последний, как показывает опыт, для не слишком крупных частиц не образует выемки вокруг себя в типичных связках [13]. Вместо гетерогенных модель [12] учитывает в различных локальных областях гомогенные реакции: в оболочке расположенного над кристаллом ПХА «колпачка» диффузионного пламени продуктов газификации ПХА и связки; в плоском собственном пламени продуктов газификации ПХА, которое изнутри делит колпачок на две части; в к-фазе ПХА и реакции в связке. Температура T_s поверхности связки и окислителя считается одинаковой. За неимением достоверных данных о газификации связки предполагается, что этот процесс подстраивается к выгоранию окислителя, для которого принят эмпирический закон пиролиза. В [12] учитывается также неплоская форма поверхности частиц ПХА на поверхности горения, но этот фактор слабо влияет на результаты расчетов. В [14] отмечено, что поверхность погашенных частиц ПХА близка к плоской.

В «модели малых групп» [15] при вычислении размера среднего на поверхности горения топлива сечения частиц дополнительно учитывается, что часть их еще не зажглась, а часть уже сгорела или вылетела с поверхности. В «улучшенной модели» [16] снято использованное в [12] предположение о ведущей роли ПХА. Считается, что горючее и окисли-

тель имеют различные величины T_s на поверхности и подчиняются каждый своему тепловому балансу в к-фазе. Горючее, как и окислитель, имеет свой закон пиролиза $u(T_s)$ и получает часть тепла от колпачка диффузионного пламени. Наконец, в [17] изложена модель «обобщенного пламени», согласно которой над всей поверхностью горения топлива реализуется единое пламя заранее перемешанной газовой смеси, так что тепловой поток из газовой фазы всюду одинаков.

Осреднение по пути распространения фронта горения. При $d > \kappa/u$ тепловые потоки, имеющие пространственный масштаб неоднородности d , не успевают выравниваться вдоль прогретого слоя толщиной κ/u . Осреднение теплового потока по поверхности горения становится бесполезным, как и аналогичное осреднение скорости горения. Наоборот, требуется учитывать ее неоднородность вдоль поверхности СТГ. В частности, если окислитель не способен к самостоятельному горению ($KClO_4$, ПХА при $p < 21$ атм и нормальной начальной температуре), горение распространяется по «носикам» вдоль поверхностей контакта окислителя и горючего [3]. Если окислитель горит самостоятельно и достаточно быстро, то роль носика выполняет сама частица окислителя. В обоих случаях горение имеет прерывистый характер (быстрое распространение пламени по частице или вдоль ее поверхности, затем медленное выгорание прослойки связки и т. д.) и для его описания пригодны «эстафетные» модели [3, 14, 18, 19] с осреднением скорости $u_{cp} = \Delta x / \Delta t$ распространения границы раздела к-фаза — газ по времени на избранном пути в глубь топлива. В качестве такого пути используется нормаль к средней поверхности горения. При этом, согласно упоминавшемуся стереологическому принципу, связка и окислитель (при случайном его распределении) представлены вдоль нормали в том же соотношении, что и во всем объеме.

В [3] рассмотрен случай, когда окислитель и связка горят самостоятельно и без взаимодействия, в [18] взаимодействие учитывается предположением, что прилегающий к частице окислителя шаровой слой связки с некоторой, определяемой из опыта, конечной толщиной горит с той же скоростью, что и окислитель. Наконец, в [14, 19] учтена возможность того, что связка необязательно способна к самостояльному горению, на ее пиролиз тратится часть тепла из колпачка пламени над окислителем. При этом для окислителя и связки используются, как в [16], раздельные балансы тепла, а при вычислении времени Δt учитывается, согласно [20], время воспламенения частиц окислителя $t_b(p, d)$.

Учет полидисперсности окислителя. Для полидисперсных составов последние годы за рубежом широко применялась псевдотопливная модель [15]. Основная идея состоит в замене реального полидисперсного топлива некоторым условным, составленным из большого числа узких фракций окислителя с б-образной функцией распределения. Каждая такая фракция вместе с приходящимся на ее долю горючим образует «псевдотопливо», скорость горения которого рассчитывается по модели малых групп [15] совершенно независимо от остальных псевдотоплив. Приставка «псевдо» означает, что в зависимости от принятого закона распределения связки по фракциям окислителя некоторым фракциям (наиболее крупным) достается слишком мало связки. Взяв одну такую фракцию и принадлежащую ей связку, мы не сможем изготовить реальное сплошное топливо — обязательно образуются пустоты.

Типична ситуация, когда СТГ содержит узкие фракции окислителя, сильно различающиеся по размеру частиц. Для такого случая в [3] предлагается считать, что мелкая фракция вместе со связкой представляет собой некое топливо, которое горит независимо от крупной фракции. В [16] этот подход распространен на СТГ с несколькими узкими фракциями, различающимися по размерам частиц окислителя, и введен термин «вложенные псевдотоплива». Каждое такое псевдотопливо, связанное с определенной фракцией окислителя, представляет собой активную (самогорящую) связку для следующего по рангу псевдотоплива, связан-

ного с более крупной фракцией. Учитывается взаимодействие фракций: активная связка, т. е. псевдотопливо, связанное с данной фракцией, получает некоторое количество тепла от пламени над частицами более крупной фракции. Вложенные псевдотоплива могут быть реально изготовлены, для чего достаточно из компонентов, приготовленных для смешения, убрать фракции порошков более крупные, чем та, с которой связано данное псевдотопливо.

В эстафетной модели [14, 19] полидисперсность учитывается естественным образом: при вычислении времени в выражении $u_{cp} = \Delta x / \Delta t$ учитываются вклады разных фракций. Последние представлены вдоль прямой (на которой проводится осреднение) в том же соотношении, что и во всем объеме СТТ.

Учет свойств индивидуальных компонентов. *Свойства связки существенно влияют на характер горения.* Если связка и порошкообразный компонент легко плавятся или образуют легкоплавкую эвтектику, они могут частично или полностью (в зависимости от размера частиц) перемещиваться на поверхности [18, 21, 22]. Это дает возможность использовать модель горения гомогенного твердого топлива, например, для некоторых СТТ на основе октогена [18]. Если связка термостойкая по сравнению с порошкообразным компонентом, последний начинает разлагаться еще до выхода на поверхность горения, и клочки связки могут выбрасываться в газовую fazу. В [14] сообщается, что такой эффект наблюдался для СТТ на нитраминах и на полибутадиеновой связке. Для учета этого явления в модели горения [14] из теплового баланса связки исключено тепло, соответствующее газификации выброшенной части. В противоположном случае, когда связка легко газифицируется по сравнению с порошкообразным компонентом, последний будет выбрасываться в газовую fazу. Этот факт учитывается при построении модели горения черного пороха [23], описывающей, в частности, диффузионное горение и ускоренное движение частиц угля в среде газообразных продуктов горения.

Если легко газифицирующаяся связка способна к самостоятельному горению и горит быстрее порошкообразного компонента, догорание выброшенных в газовую fazу зерен последнего во многих случаях практически не влияет на общую скорость горения. Порошкообразный компонент (окислитель, металл, катализатор) при этом играет роль инертной добавки и только уменьшает общую скорость горения, отнимая часть тепла у собственного пламени связки. Это явление изучено экспериментально и теоретически в широких пределах (от прекращения собственного горения связки из-за теплопотерь при достаточно большом количестве порошкообразного компонента до полного исчезновения влияния теплопотерь при достаточно крупных его частицах) и отражено в модели [24].

Поведение металлических частиц в волне горения СТТ (агломерация, зажигание, горение) изучалось экспериментально и теоретически в [25—29], однако использованию этих результатов препятствует ограниченность информации о состоянии поверхности горения. В существующих моделях влияние металла учтено лишь для простейших случаев.

В [30] предполагается отсутствие агломерации и задержки частиц металла на поверхности. Учитываются плавление частиц алюминия, ускорение их в потоке газа, воспламенение в момент времени, зависящий, согласно [25], от размера частицы и температуры газа около нее, горение и теплопередача (кондуктивная) из зоны горения металла в к-фазу. В качестве базовой использовалась псевдотопливная безметалльная модель [15]. При проведении расчетов выяснилось [30], что во многих случаях можно пренебречь поступлением тепла в к-фазу из зоны горения металла, играющего, таким образом, роль инертной добавки (влияние металла на процессы в газовой fazе не учитывалось).

При увеличении в топливе доли металла, например, при переходе к пиросоставам или к составам для СВС, возрастает роль агломерации металла и увеличиваются трудности моделирования. Однако наиболее вы-

сокометаллизированные системы благодаря большой толщине прогретого слоя могут быть описаны квазигомогенными моделями (см. [31, 32]).

В состав СТТ могут входить добавки взрывчатых веществ, чаще всего *нитраминов*: октогена, гексогена. Эти вещества отличаются от ПХА слабыми окислительными свойствами продуктов их газификации, горячим собственным пламенем и низкой температурой плавления. При моделировании горения СТТ с добавками нитраминов возникает необходимость описать наблюдаемый в опытах аномальный характер закона горения $u(p)$, а именно: резкое увеличение (на узком интервале Δp) скорости горения с ростом давления практически до скорости горения сплошного нитрамина. Требует объяснения и появление кратеров на погашенной поверхности горения, имеющей гладкий профиль при меньших давлениях. По аналогии с работой [33], где подобные эффекты для пористых образцов из чистого нитрамина убедительно объяснялись переходом на режим конвективного горения, в [1, 34] предложены модели, описывающие прорыв пламени в глубь к-фазы по поверхности контакта нитрамин — связка. Принято, что прорыв происходит, если хотя бы часть этой поверхности сухая (толщина расплавленного слоя нитрамина меньше размера зерна).

Влияние внешних воздействий. Из внешних факторов после давления и начальной температуры, влияние которых учитывается и анализируется во всех моделях, важнейшим для стационарного горения следует считать *обдув* горящей поверхности продуктами сгорания. Влияние обдува на скорость горения отражено (см. обзор [35]) во многих моделях горения гомогенных ТТ, учитывалась и шероховатость. В [36, 37] рассмотрено также взаимодействие обдувающего потока с неоднородностями тепловыделения: пламенами около отдельных кристаллов на поверхности горения. В [36] сделана попытка ввести в модель изменение формы отдельного пламени под действием газового потока. К сожалению, при этом использованы умозрительные предположения относительно схемы пламен и ее реакции на обдув (принято, что язычок пламени наклоняется, при этом сохраняет свою длину и не изгибается). В [37] (как и в [38] для гомогенных составов) входящие в модель без обдува ламинарные коэффициенты диффузии и теплопроводности заменяются турбулентными, взятыми в соответствующих местах одномерного распределения характеристик турбулентности. Для СТТ, по-видимому, это сделано впервые.

Следующий внешний фактор — *перегрузка* — наибольшее действие оказывает на горение металлизированных СТТ. В моделях горения она представлена в условии отрыва частиц от поверхности и в законе движения их в газовой фазе [39—41]. При достаточно больших перегрузках приходится принимать во внимание отсутствие стационарного режима (накопление металла).

Излучение при сжигании достаточно большого заряда металлизированного СТТ может давать, согласно [42], до 30 % всего тепла, поступающего на поверхность горения из газовой фазы, по данным [43] — до 10 % тепла, потребного для прогрева к-фазы. Если лучистый поток удается вычислить, его просто включают в тепловой баланс к-фазы соответствующей модели горения. Заметим, что в отдельных ситуациях излучение продуктов сгорания может радикально изменить некоторые параметры волны горения. Например, согласно [44], толщина прогретого слоя к-фазы тетрила в 20 раз больше михельсоновской, а в [45] сообщается, что некоторые хлорсодержащие газовые смеси при горении в обычных условиях дают нетепловое излучение, в котором высвечивается до 50 % всего теплового эффекта. При горении ТТ излучение может изменить температурный профиль к-фазы, от которого существенным образом зависит выполнение условия устойчивости горения и даже применимость той или иной модели горения.

Скорость горения в общем случае зависит от напряженного состояния топлива вблизи горящей поверхности. Это можно отразить в модели

горения, если известны физико-механические характеристики СТТ, которые в зависимости от типа связующего весьма разнообразны. В [46] построена модель горения, основанная на представлениях о появлении трещин при растяжении образца вдоль горящей поверхности. Если скорость горения линейно зависит от газопроницаемости, то ее относительное увеличение, согласно модели, пропорционально относительному растяжению, что соответствует результатам опытов. Коэффициент пропорциональности предполагается находить из опытов без горения с использованием методик, разработанных для исследования стенок нефтяных скважин. В [47] изложены представления о влиянии механического напряжения, которое испытывают зерна ПХА в полимерной матрице СТТ, на характеристики термического разложения окислителя. Предполагается, что этот эффект может проявляться также при горении СТТ.

Анализ ошибок при моделировании горения СТТ

Работу по моделированию горения можно условно разбить на следующие этапы: 1) построение идеализированной картины физико-химических явлений в волне горения с определением области параметров, где такая картина справедлива; 2) формулировка математической модели и разработка алгоритма решения задачи. Наряду с этим требуется проводить обоснование границ применимости конкретных моделей, после чего возникает вопрос о построении решений в промежуточных областях изменения параметров задачи. На каждом из перечисленных этапов возможны ошибки, которые анализируются ниже.

Источником ошибок при построении физического механизма может стать *противоречивость экспериментальных данных*. Например, в [48] на основе результатов изучения скоростей пиролиза типичных связующих в инертной среде сделан вывод, что на горящей поверхности СТТ температура связующего для всех реальных условий горения превышает таковую для ПХА. Противоположный вывод следует из результатов работы [49], где те же горючие связующие сжигались в слоевой системе с ПХА и после гашения (бросом давления либо за счет теплоотвода) оказывались в канавке, т. е. выгорали при низкой сравнительно с ПХА температуре. Расчет температуры горящей поверхности связующего [16] для составов без металла при $p = 120$ атм с использованием данных [48] показал, что она лишь на 340 К ниже температуры пламени. Такой результат, как отмечают авторы [16], представляется неправдоподобным.

Другой источник ошибок связан с неучетом возможностей альтернативного объяснения данных опыта. Приведем примеры.

При изучении методом ДТА термолиза двухосновных топлив с варьируемым содержанием NO_2 в [50] найдено, что содержание NO_2 не влияет на энергию активации реакций E в к-фазе. Отсюда сделан вывод, что от нее не зависит также скорость разложения к-фазы. А поскольку на скорость горения существенно влияет содержание NO_2 , последовало заключение о ведущей роли газофазных реакций. Однако в [51] для аналогичных по составу топлив по данным термопарных измерений сделан вывод о ведущей роли реакций в к-фазе и в то же время отмечена независимость E от содержания NO_2 . Изменение скорости реакции в к-фазе связывается с переменностью предэкспоненциального множителя.

При обсуждении аномалии в законе скорости горения СТТ с нитраминами в [1, 34] было введено представление о прорыве пламени в месте контакта частиц нитрамина со связующим, как о причине «скачкообразного» увеличения скорости горения. Экспериментальных подтверждений эта гипотеза до настоящего времени не получила. Между тем возможно другое правдоподобное объяснение упомянутой аномалии. При сравнительно низких давлениях и соответственно малых величинах комплекса $md/\rho D$ (ρ — плотность газа) пламя октогена не реализуется из-за теплового и диффузационного «размывания» (см. [5]). По мере роста p и $md/\rho D$ может произойти быстрый рост скорости горения СТТ в связи с

появлением над частицами октогена горячего собственного пламени. Высокая скорость выгорания частиц может стать вероятной причиной появления кратеров на погашенных поверхностях СТТ.

В [1, 36] сравнением экспериментальных и расчетных значений скоростей горения СТТ сделано заключение о существенной зависимости теплового эффекта в к-фазе ПХА от давления. Специальными физическими обоснованиями этот вывод не подкреплен, в то же время ранее на основе тщательного анализа опытных данных по сжиганию чистого ПХА в [52] сформулирован вывод о постоянстве тепловыделения в к-фазе ПХА при различных давлениях. Очевидно, что для опровержения такого вывода необходима более убедительная аргументация.

Еще один источник ошибок связан с использованием представлений, вносящих *качественное отличие* модели от реального процесса. Так, в [36] реализована попытка описания горения СТТ на основе геометрически упорядоченной смесевой системы, в которой одинаковые сферические частицы окислителя помещены в связку таким образом, что их центры образуют правильную кубическую решетку. В соответствии с этой симметричной картиной оказывается достаточным ограничиться описанием горения одной ячейки с частицей. Однако столь простое описание приводит к анизотропии свойств и невозможности распространения горения по нормалям к границам ячейки. Модельное топливо с такой структурой должно погаснуть после выгорания первого слоя частиц.

Неточности при построении физического механизма могут возникать из-за принятия *противоречащих* друг другу *предположений*. Так, в псевдотопливной модели [15] горения с полидисперсным окислителем основное предположение о независимом характере горения находится в противоречии с предположением о квазипланарности поверхности горящего СТТ и с одномерной формой записи уравнения теплового баланса, справедливой при $d \ll x/u$, когда в приповерхностном слое толщиной $\sim d$ частицы обмениваются теплом и, значит, взаимодействуют.

Близкое по смыслу противоречие содержится в улучшенной модели [16]: для окислителя и связки на поверхности горения записаны раздельные балансы тепла, но межкомпонентный теплообмен в модели не учитывается.

Ошибки математического описания. В процессе математического описания физического механизма и построения алгоритма решения задачи возможны ошибки за счет неоправданных упрощений и некорректных способов осреднения. Проиллюстрируем сказанное примерами.

В [53] показано, что широко используемые приближенные аналитические способы вычисления функций тепловыделения и тепловых потоков в к-фазу при вариации определяющих параметров задачи зачастую дают результаты, существенно отличающиеся от полученных численным решением исходных дифференциальных уравнений. Очевидно, аналогичное утверждение справедливо применительно к моделям горения СТТ. Для оценки ошибок требуется проводить пробные численные расчеты по полной математической модели процесса.

Важным элементом многих моделей, в том числе моделей нескольких пламен [12], эстафетной [14] и малых групп [15], служит аналитическое решение задачи Бурке — Шумана для формы диффузационного пламени. Как показано в [5], в перечисленных работах решение этой задачи получено без учета диффузационного члена в граничном условии на поверхности. Поэтому оно не описывает возможность съеживания и полного исчезновения колпачка диффузационного пламени над кристаллом окислителя при уменьшении параметра $md/\rho D$ и коэффициента избытка окислителя, т. е. с ростом отношения горючего к окислителю. Между тем именно таким эффектом можно правдоподобно объяснить некоторые результаты опытов со слоевыми образцами [49] и аномалию в законе горения СТТ с нитраминами. Добавим, что представления о локализации пламени у центра поверхности частицы согласуются с данными о наличии ямок в центральной области частиц ПХА на погашенной поверхно-

сти СТТ [14]. «Размывание» (исчезновение) достаточно мелких отдельных пламен наблюдалось в опытах [54] на трубчато-пористой газовой горелке. Установлено, что отдельные пламена над узкими трубками при определенных условиях сливаются в единое плоское пламя, охватывающее и расположенные между подающими воздух трубками участки пористой (подающей горючий газ) поверхности, образуя в итоге пламя заранее перемешанного газа.

В модели Германса [10] и в развитых на ее основе известных моделях [12, 15, 16] использован недостаточно корректный способ осреднения теплового потока в к-фазу. В монодисперсном варианте вместо среднего по площади S теплового потока q вычислен тепловой поток через «эффективную» поверхность, на которой все сечения частиц приняты одинаковыми и с суммарной площадью, равной общей площади сечения частиц на поверхности топлива. Ошибка такой замены в названных работах не оценивается. Верный алгоритм осреднения использован в полидисперсном варианте [10] модели Германса: $q_{cp} = \sum \Delta q / \sum \Delta S$, где Δq , ΔS соответствуют различным фракциям окислителя.

Выражение для скорости горения в эстафетной модели [14] также содержит неточность за счет механического перенесения выражения для среднестатистического диаметра сечения частицы $d\sqrt{2/3}$, полученного в [10] путем осреднения по поверхности, на случай осреднения по нормали к горящей поверхности, которое должно дать $2d/3$.

Недостаточное обоснование границ применимости. Формулировка большинства моделей горения СТТ такого обоснования попросту не содержит. Авторы подбирают значения входящих в модели «плавающих» параметров, добиваясь согласия с экспериментом по скорости горения во всем достижимом диапазоне изменения размеров частиц гетерогенной системы — от долей до сотен микрометров. На самом же деле, как указывалось выше, модели, в которых существенным элементом служит одномерный баланс тепла в к-фазе [12, 15, 16], не должны применяться для описания горения топлива с относительно крупными частицами окислителя, т. е. при $d > \chi_k/u$. Модель эстафетного типа [14], напротив, неприменима для описания горения СТТ с относительно мелкими частицами, т. е. при $d \leq \chi_k/u$. Квазигомогенная модель [9] может использоваться лишь в случае горения СТТ с предельно мелкодисперсным окислителем, т. е. при $d \leq \Delta x_p$.

Эксперименты, требуемые для построения физического механизма

Эксперимент был и остается основой для построения физического механизма процессов горения. Это связано с уникальной сложностью физико-химических превращений в волне горения, а также с резким увеличением числа индивидуальных веществ, используемых для изготовления современных СТТ. Последнее означает, что нужны отлаженные комплексы экспериментальных методик для быстрого и надежного определения свойств новых компонентов. В дополнение к данным о горении индивидуальных веществ требуется иметь сведения о характеристиках их горения в совокупности, возникает также необходимость получать информацию о поведении вещества на микромасштабном уровне, о нестационарном характере движения фронта и т. п. Методические вопросы изучения горения твердых топлив освещены в [55, 56] и многочисленных журнальных публикациях. Ниже кратко рассмотрены физические постановки экспериментов, важных для установления механизма горения СТТ.

Закономерности горения отдельных компонентов. Большую ценность для теории представляют подробные сведения о поведении частиц порошкообразного окислителя на поверхности горения СТТ. Принятие тех или иных допущений об изменении геометрической формы частиц в процессе пиролиза, физическом состоянии частиц окислителя в различных температурных зонах, об условиях зажигания в волне горения и харак-

тере последующего процесса превращения — все эти детали существенным образом определяют физическую картину процесса и его математическое описание. В настоящее время такая информация на требуемом уровне полноты и надежности отсутствует как по классическому окислителю ПХА, так и по витраминам и другим перспективным компонентам.

Нельзя, в частности, считать достоверными используемые во многих моделях закономерности зажигания частиц ПХА в волне горения, полученные обработкой результатов измерений скорости горения прессованных образцов ПХА [20]. Такая обработка, справедливая лишь при безусловном выполнении априорных допущений об эстафетном выгорании частиц прессованного образца, не подтверждена дополнительными физическими наблюдениями, а перенос найденных закономерностей на условия горения СТТ ничем не обоснован. Попытка более детального изучения поведения частиц ПХА на горящей поверхности СТТ с двухосновным топливом в качестве связующего сделана в [18] путем измерения времени свечения индивидуальных частиц ПХА. Следует продолжить начатую работу с привлечением методов скоростной киносъемки, оптической спектроскопии и других современных методик.

Роль связующего в процессе горения СТТ выяснена в недостаточной степени. Имеющиеся данные по низкотемпературному и низкоскоростному разложению связующих недостаточны для описания их поведения в условиях волны горения, не хватает также данных по температурам кипения полимеров и активных связующих при высокоскоростном нагреве и повышенных давлениях. Здесь предстоит большая работа по созданию новых методик исследований.

Горение порошкообразных металлов интенсивно изучается на протяжении более 30 лет, однако с точки зрения моделирования процессов горения СТТ возможности использования имеющихся данных весьма ограничены. До настоящего времени не изучен вопрос о количественном влиянии процессов агломерации, воспламенения и отрыва частиц металлов от поверхности СТТ на величину эффективной скорости горения. Не выяснены до конца картина теплового взаимодействия частиц металла с температурным профилем в к-фазе, условия реагирования металла в приповерхностном слое СТТ, нет надежных данных по вкладу металла в тепловыделение на поверхности горения и в тепловой поток из дымогазовой зоны в к-фазу СТТ. Необходимо целенаправленно вести эксперимент для получения требуемой информации, используя в полной мере методы киносъемки, пирометрии и анализа химического состава частиц, отобранных из различных зон волны горения.

Детализация пространственной структуры волны горения. Для выяснения характера горения газов над поверхностью СТТ (диффузионное либо пламя перемешанных газов) большую роль должны сыграть опыты на слоевых образцах с имитацией реальных геометрических размеров (см., например, [49]) зерен окислителя и вариацией условий сжигания и состава СТТ. Сохраняют важное значение также визуальные наблюдения в процессе горения и после гашения. Кроме того, полезны систематические измерения расстояний отхода пламени при горении модельных смесевых композиций со строго охарактеризованной дисперсностью компонентов.

Правильное описание распространения фронта горения требует знания геометрических параметров структуры СТТ. Из работ по стереометрии известно, что при объемной доле частиц порошкообразного наполнителя более 15% в непрерывной среде образуется система цепочек из частиц гетерогенной фазы [57]. В то же время существует возможность проявления противоположного эффекта: зонального обособления порошковых компонентов [58]. Для СТТ с полидисперсным окислителем можно предполагать наличие большого разнообразия пространственных структур порошкообразных компонентов и необходимо использовать различные экспериментальные методы для их определения. Например, в

работе [59] кондуктометрическим способом найдено, что при 20%-ном содержании (по массе) частиц Al в прессованных смесях с ПХА резко увеличивается суммарная проводимость, свидетельствуя о возникновении проводящих металлических цепочек в образце. Представляется целесообразным провести аналогичные исследования для установления факта существования цепочек ПХА в СТТ с полимерным связующим. В этом случае можно ожидать (для медленногорящих связующих) ускоренного распространения фронта по непрерывным цепочкам из частиц ПХА. Тогда при вычислении скорости горения СТТ по формулам эстафетной модели необходимо исключить из рассмотрения время выгорания прослойки связующего и учесть кривизну предполагаемых цепочек.

Для уточнения и обоснования моделей горения реальных СТТ с набором фракций окислителя необходимы опыты по изучению закономерностей горения специально изготовленных составов, соответствующих последовательности псевдотоплив различных рангов, согласно представлениям модели вложенных псевдотоплив [16, 24].

Заключение

Анализ существующих моделей горения СТТ показывает, что в целом они еще далеки от совершенства. Общая проблема для большинства этих моделей — недостаточность обоснования исходных положений и границ применимости. Необходимо особо подчеркнуть важность прямого экспериментального обоснования основных посылок разрабатываемых моделей и вместе с тем ненадежность выводов о ненаблюдаемых деталях механизма явления, которые делаются на основе сопоставления опытных и расчетных глобальных характеристик процесса, особенно в тех случаях, когда расчетные характеристики получены по сравнительно сложным алгоритмам в рамках дополнительных предположений и с неизвестной заранее погрешностью.

Формулировки рассмотренных моделей горения СТТ базируются на рассмотрении сугубо стационарных явлений. Тем не менее известно, что горение СТТ в микромасштабе представляет совокупность *нестационарных* элементарных стадий, поэтому было бы полезно провести оценку влияния нестационарности на суммарные закономерности горения. Действительно, из опыта [60] и физических соображений следует, что горение ТТ сразу после воспламенения может протекать с повышенной скоростью. Легко представить ситуацию, когда роль этого эффекта будет неодинакова для частиц различных размеров: это произойдет в случае, когда толщина прогретого при зажигании слоя будет соизмерима с минимальным размером частиц (для крупных частиц соответственно будет составлять малую долю размера).

Другим источником нестационарности служат локальные изменения на поверхности СТТ геометрии частицы и окружающей ее связки. При этом меняется во времени отношение горящих поверхностей и массовых расходов компонентов, а значит, и состав продуктов.

Необходимо отметить, что в последние годы стала заметной тенденция включения в модели горения, в первую очередь для монотоплив, сведений по *детальной химической кинетике* реакций в газовой и к-фазах [61—63]. Эта тенденция отражает стремление к максимальной достоверности описания химических превращений в волне горения и получению расчетным путем рекомендаций по управлению закономерностями горения. Несмотря на очевидные потенциальные выгоды такого метода исследования, необходимо указать на серьезные препятствия на пути его внедрения. В связи со сложным составом (большой молярной массой) исходных молекул реальных СТТ и сложным взаимодействием физических и химических превращений, происходящих в волне горения, всегда существует громадный набор, по крайней мере из сотен, возможных элементарных химических актов, и до настоящего времени нет достаточных

оснований для выбора представительного числа (даже нескольких десятков) определяющих реакций. Проблема усугубляется отсутствием надежной информации по кинетике многих элементарных актов. Фактически в численном счете осуществляется подбор коэффициентов, позволяющий согласовать результаты опытов с расчетными данными. В том же случае, когда волевым образом в качестве определяющих назначаются избранные или просто известные реакции, возникает принципиальный вопрос о связи глобальной брутто-кинетики тепловыделения с кинетическими параметрами отдельных элементарных актов. Из сказанного следует, что задача детального химического описания процесса горения СТТ в настоящее время не имеет достаточного обоснования и к ней целесообразно подходить путем постепенного накопления методического опыта и апробаций теоретических и экспериментальных подходов на простейших к-системах.

Завершая обсуждение вопросов математического моделирования процессов горения СТТ, хотелось бы подчеркнуть насущную потребность использования для их решения *системного подхода*. Суть его в изложении М. А. Лаврентьева такова [64]: «...нужно посредством экспериментов и наблюдений постараться понять ведущие факторы, следует абстрагироваться от других, менее существенных, и для данного участка и данного отрезка времени построить возможно более простую математическую схему (модель процесса)... Для получения общей картины процесса остается только склеить решения отдельных локальных задач. Эта склейка производится при помощи достаточно общих соображений, таких как непрерывность... и др.». Представляется, что реализация системного подхода в нашем случае должна состоять из нескольких этапов. В первую очередь требуется установить области применимости имеющихся или разрабатываемых моделей горения. Далее необходимо предложить постановку тестовых экспериментов, позволяющих для данного типа СТТ подобрать соответствующую модель. Наконец, на завершающем этапе требуется разработать способы построения алгоритмов решений для промежуточных областей изменения параметров.

ЛИТЕРАТУРА

1. Н. С. Коэн. РТК, 1980, 4, 186.
2. K. N. R. Ramohalli.—In.: Progress in Astronautics and Aeronautics. Vol. 90, 1984.
3. П. Н. Бахман, А. Ф. Беляев. Горение гетерогенных конденсированных систем. М.: Наука, 1967.
4. С. С. Новиков, П. Ф. Похил, Ю. С. Рязанцев. ФГВ, 1968, 4, 4, 469.
5. Л. К. Гусаченко, В. Е. Зарко, В. Я. Зырянов и др. Моделирование процессов горения твердых топлив. Новосибирск: Наука, 1985.
6. Я. Б. Зельдович. Избранные труды. Химическая физика и гидродинамика. М.: Наука, 1984.
7. Теория горения порохов и взрывчатых веществ/Под ред. О. И. Лейпунского, Ю. В. Фролова. М.: Наука, 1982.
8. А. Г. Мержанов. Теория стационарного гомогенного горения конденсированных веществ. Препринт, Черноголовка, 1968. См. также: Comb. Flame, 1969, 13, 2, 143.
9. В. А. Струнин, Г. Б. Манелис. ФГВ, 1979, 15, 5, 24.
10. К. Е. Германис. РТК, 1966, 9, 160.
11. К. С. Чернявский. Стереология в металловедении. М.: Металлургия, 1977.
12. М. В. Бекстед, Р. Л. Дэрр, Е. В. Прайс. РТК, 1970, 12, 107.
13. Н. Н. Бахман.—В кн.: Ракетные топлива. М.: Мир, 1975.
14. М. В. Бекстед, К. П. Маккарти. РТК, 1982, 2, 115.
15. B. L. Glick, I. A. Condon.—In.: Proc. of 13-th JANNAF Comb. Meet. CPIA 281, Vol. 11, 1976.
16. Н. С. Коэн, Л. Д. Стрэнд. Аэрокосмическая техника, 1983, 7, 100.
17. J. M. Deur, R. L. Glick. AIAA Paper, 1983, 0477.
18. N. Kubota, T. Masamoto. 16-th Symp. (Intern.) on Combustion. Pittsburgh, 1976.
19. M. W. Beckstead. 18-th Symp. (Intern.) on Combustion. Pittsburgh, 1981.
20. Л. И. Шенон, Е. Е. Питерсен. РТК, 1964, 1, 214.
21. E. Cohen-Nir. 18-th Symp. (Intern.) on Combustion. Pittsburgh, 1981.
22. N. Kubota. 19-th Symp. (Intern.) on Combustion. Pittsburgh, 1982.
23. Б. В. Новожилов. Докл. АН СССР, 1960, 131, 6, 1400.
24. С. С. Новиков, В. Ю. Потулов, С. В. Чуйко.—В кн.: Горение конденсированных систем. Черноголовка, 1977.

25. П. Ф. Похил, А. Ф. Беляев, Ю. В. Фролов и др. Горение порошкообразных металлов в активных средах. М.: Наука, 1972.
26. В. Д. Гладун, Ю. В. Фролов, Л. Я. Кашиоров. Природа алгомерации металла при горении металлизированных конденсированных систем. Препринт ОИХФ АН СССР, Черноголовка, 1977.
27. В. Г. Григорьев, В. Е. Зарко, К. П. Куценогий и др. Докл. АН СССР, 1981, 259, 4, 884.
28. В. А. Бабук, В. П. Белов, В. В. Ходосов, Г. Г. Шелухин. ФГВ, 1985, 21, 3, 20.
29. Н. С. Коэн. Аэрокосмическая техника, 1984, 2.
30. J. P. Renie, J. B. Osborn. AIAA Paper, 1979, 1131.
31. СВС. Библиографический указатель. Вып. 1 (Н. А. Белкина, В. М. Мартыненко, ред. В. В. Барзыкин). Черноголовка, 1982.
32. СВС. Библиографический указатель. Вып. 2. (Н. А. Белкина, В. М. Мартыненко, ред. В. В. Барзыкин). Черноголовка, 1984.
33. J. W. Taylor. Comb. Flame, 1962, 6, 2, 103.
34. Р. Циммер-Галлер. РТК, 1968, 6, 75.
35. М. К. Раздан, К. К. Кюо. РТК, 1979, 11, 91.
36. М. К. King. AIAA Paper, 1978, 216.
37. Дж. П. Рени, Дж. Р. Осборн. Аэрокосмическая техника, 1984, 8.
38. А. А. Беляев, А. А. Зенин, В. В. Кулешов и др. Хим. физика, 1982, 1, 10, 1421.
39. В. И. Брандидж, Л. Кавени. Аэрокосмическая техника, 1985, 1, 47.
40. М. Д. Фуке, А. Перетц, И. М. Тимнет. Аэрокосмическая техника, 1983, 1, 105.
41. М. К. Кинг. РТК, 1976, 1, 21.
42. Д. В. Блейф, В. Лейк. РТК, 1969, 9, 179.
43. А. А. Зенин, А. П. Глазкова, В. К. Боболев и др. Докл. АН СССР, 1968, 181, 3, 637.
44. А. Д. Марголин, А. Е. Фогельзанг. ФГВ, 1966, 2, 2, 10.
45. А. И. Розловский. ФГВ, 1982, 18, 1, 8.
46. В. Б. Либрович, А. Л. Ярин. ФГВ, 1982, 18, 5, 58.
47. V. R. Pai Verneker, K. Kishore, G. Prased. Propellants and Explosives, 1978, 3, 127.
48. Н. С. Коэн, Р. В. Флеминг, Р. Дэрр. РТК, 1974, 2, 108.
49. Е. В. Прайс, Дж. К. Хендли, Р. Р. Паниам и др. РТК, 1981, 4, 112.
50. I. Aoki, N. Kubota. AIAA Paper, 1980, 1165; см. также ЭИ: Астронавтика и ракетодинамика, 1981, 38, реф. 123.
51. А. А. Зенин.— В кн.: Физические процессы при горении и взрыве. М.: Атомиздат, 1980.
52. К. Гайрао, Ф. А. Вильямс. РТК, 1971, 7, 164.
53. M. S. Miller, T. P. Coffee. Comb. Flame, 1983, 50, 1, 75.
54. Л. Д. Стрэнд, Н. С. Коэн. РТК, 1982, 5.
55. П. Ф. Похил, В. М. Мальцев, В. М. Зайцев. Методы исследования процессов горения и детонации. М.: Наука, 1969.
56. Progress in Astronautics and Aeronautics. Vol. 63. 1978.
57. J. Gurland.— In: Planes Proc. (Ed. by F. Benesovsky). Vienna, 1962.
58. А. Н. Николенко, М. С. Ковальченко. Порошковая металлургия, 1986, 2, 22.
59. D. Seetharamacharyulu, V. R. Pai Verneker, K. M. Mallya e. a. Comb. Sci. Techn., 1981, 25, 147.
60. В. Е. Зарко, В. Н. Симоненко, К. П. Куценогий. ФГВ, 1975, 11, 4, 541.
61. N. S. Cohen, G. A. Lo. AIAA Paper, 1983, 1195.
62. Н. Е. Ермолин, О. П. Коробейничев, А. Г. Терещенко и др. ФГВ, 1982, 18, 1, 46.
63. Н. К. Нарахари, Н. С. Mukunda, V. K. Jain. 20-th Symp. (Intern.) on Combustion. Pittsburgh, 1984.
64. М. А. Лаврентьев, Б. В. Шабат. Проблемы гидродинамики и их математические модели. М.: Наука, 1977.

Поступила в редакцию 26/V 1986

**ФИЗИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССОВ,
ПРЕДШЕСТВУЮЩИХ ВОСПЛАМЕНЕНИЮ КАПЕЛЬ
ВОДОТОПЛИВНОЙ ЭМУЛЬСИИ**

А. Я. Исаков, В. И. Деминов

(Владивосток)

Экспериментально установлено [1, 2], что капли водотопливной эмульсии при прочих равных условиях воспламеняются быстрее обычного безводного топлива. Основная причина этого эффекта — дополнительное дробление исходных капель эмульсии вследствие микровзрывов. Как показано в [3], для достаточно крупных капель с диаметром $d_k > 10^{-4}$ м механизм образования конкурентной фазы при перегреве носит гетерогенный характер, т. е. зародышами кипения являются парога-