

УДК 629.735.33.016

# ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ И ОЦЕНКА ФОРМАЛЬНОГО КИНЕТИЧЕСКОГО ЗАКОНА ПРИ АНАЛИЗЕ ПРОЦЕССА ГОРЕНИЯ В ТВЕРДОТОПЛИВНОМ ГАЗОГЕНЕРАТОРЕ

Л. Л. Картовицкий<sup>1</sup>, В. М. Левин<sup>1</sup>, Л. С. Яновский<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), 125993 Москва  
levka\_58@mail.ru, vadimlevin@yahoo.com

<sup>2</sup>Центральный институт авиационного моторостроения им. П. И. Баранова, 111116 Москва

<sup>3</sup>Институт проблем химической физики РАН, 142432 Черноголовка

Рассматривается подход, позволяющий обобщать закономерности горения твердотопливных зарядов в газогенераторах двигательных установок на основе одномерной дифференциальной модели. Путем решения обратной задачи теории горения и использования данных измерения параметров газа в газогенераторе выполняется идентификация входящей в дифференциальную модель функции скорости тепловыделения, представленной взаимно ортогональными полиномами Лаггера. Это позволяет установить связь особенностей процесса горения твердого топлива с режимами работы газогенератора и сформулировать граничные условия для численного исследования при проектировании твердотопливного газогенератора.

Ключевые слова: твердотопливный газогенератор, конденсированная система, дифференциальная модель, теория горения, обратная задача, функция скорости тепловыделения, ортогональные полиномы.

DOI 10.15372/FGV20180206

## 1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Решение задач проектирования твердотопливного газогенератора основано на численном исследовании тепломассообменных процессов. Преобразование твердого топлива в газообразные продукты проходит следующие стадии [1]: прогрев твердого топлива; газификация твердого топлива; горение продуктов газификации твердого топлива в пламенной зоне. Моделирование процессов на перечисленных стадиях характеризуется существенной неопределенностью. Поэтому определение количественных характеристик процесса преобразования химической энергии твердого топлива в энергию генераторного газа является актуальной задачей, и ее решение приведено в данной статье.

В настоящее время существует множество математических моделей, описывающих физико-химические процессы в газогенераторе. Эти модели, решающие прямую задачу теории горения гетерогенных конденсированных

систем, перегружены детализацией, что не способствует повышению адекватности моделирования [2]. Сложность процессов преобразования твердого топлива в продукты сгорания приводит в предложенных моделях лишь к качественным результатам, которые, конечно, важны для понимания физики процесса, но при решении практических задач не обеспечивают прогнозирования скорости горения в зависимости от теплофизических параметров, структуры топлива и условий работы газогенератора [3–5].

При моделировании процесса горения в газогенераторе традиционно используемый подход, учитывающий кинетику химических реакций, сводится к поиску кинетических параметров, входящих в приближении реакции нулевого порядка в функцию источника тепловыделения  $\Phi = Qk_0 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$  или в более сложные выражения, из условия наиболее полного их соответствия массовому составу продуктов газификации. (Здесь  $Q$  — теплота реакции,  $k_0$  — предэкспоненциальный множитель,  $E$  — энергия активации,  $T$  — температура,  $R$  — универсальная газовая постоянная.) Для принима-

Работа выполнена при частичной поддержке Российского научного фонда (проект № 15-11-30012).

© Картовицкий Л. Л., Левин В. М., Яновский Л. С., 2018.

емых в расчет ведущих (или совокупности) вероятных химических реакций температура поверхности конденсированной фазы (к-фазы) является характерной величиной, связанной с газодинамическими процессами в газогенераторе. Массовая скорость горения твердого топлива, связанная с температурой поверхности, зависит от кинетических факторов и определяется на основе выражений, полученных при упрощающих предположениях [6–8]. Характер протекающих химических реакций формирует распределение температуры в зависимости от режима работы газогенератора. Поэтому при решении задач, где важен учет кинетики химических реакций, целесообразным представляется подход, основанный на такой интегральной характеристике, как формальный кинетический закон скорости тепловыделения [9] в реакционном слое — конденсированной и газовой фазах, без подробного рассмотрения совокупности химических реакций.

Формальный кинетический закон, вводимый в структуру дифференциальной модели, является функцией распределения температуры и определяется при построении интегральной кривой, удовлетворяющей заданным граничным условиям. Найденное распределение функции скорости тепловыделения позволяет оценить тепловые потоки, а также скорость горения твердого топлива из решения задачи о собственном значении при любых условиях в свободном объеме газогенератора. При решении прямых задач теории горения из-за отсутствия требуемой информации о физико-химических превращениях существует, как было отмечено, неопределенность в наборе последовательно-параллельных химических реакций. Необходима дополнительная информация, которая может быть получена из других источников:

— из экспериментальных значений температуры, давления, состава продуктов сгорания в газогенераторе;

— при формировании граничных условий на поверхности раздела твердая — газовая фаза в виде теплового потока через границу. Этот поток в уравнении теплового баланса представлен функцией источника, определяемой интегральным тепловым эффектом как результатом проявления кинетики химических реакций, а фактически — функцией скорости тепловыделения при заданных давлении и температу-

ре в газогенераторе, которые рассматриваются в качестве управляющих параметров процесса горения;

— из закона горения твердого топлива под воздействием тех же управляющих параметров в свободном объеме газогенератора и при начальной температуре твердого топлива, рассматриваемой в качестве одного из граничных условий.

Если в структуре модели отсутствует функция скорости тепловыделения, идентифицированная на основе подробного описания совокупности химических реакций либо определяемая по экспериментальным данным, то невозможно при численном моделировании построить распределения параметров и сформировать соответствующие граничные условия. Из этого следует, что на основе решения прямой задачи теории горения из-за отсутствия требуемых экспериментальных данных неопределенность информации о развитии совокупности химических реакций [10] не позволяет моделировать механизм выгорания различных по составу твердых топлив даже при рассмотрении детальной кинетики. Особенно высока степень неопределенности в предсказании характеристик горения вновь разрабатываемых топливных составов [5]. Поэтому при решении задач проектирования твердотопливных газогенераторов целесообразно детальную кинетику заменить формальным кинетическим законом и решать обратную задачу теории горения, для которой граничные условия формируются на основе экспериментальных измерений. Такой подход позволит обобщать закономерности выгорания твердотопливных зарядов в газогенераторах, получая оценки температуры поверхности топливного заряда, тепловых потоков, скорости выгорания, газодинамических параметров, и поставить в соответствие определенному составу и структуре топливного заряда математическую модель, описывающую стадии физико-химических процессов преобразования твердого топлива в газообразные продукты. Для решения задач численного моделирования и обобщения закономерностей выгорания различных по составу гетерогенных конденсированных систем целесообразно создание банка одномерных дифференциальных моделей, верифицированных на основе экспериментальных измерений.

## 2. ФОРМАЛИЗАЦИЯ ЗАДАЧИ О ВЛИЯНИИ ФОРМАЛЬНОЙ КИНЕТИКИ НА РЕЖИМ РАБОТЫ ГАЗОГЕНЕРАТОРА

Постановка в математических моделях граничных условий на основе дополнительных данных, полученных из экспериментальных измерений, или соотношений (например, на разрыве) приводит к понятию «обратная задача» [11]. Ввиду отмеченной выше неопределенности моделирования химических реакций, их порядков и кинетических факторов при горении твердого топлива, функция скорости тепловыделения [9, 12] в структуре одномерной дифференциальной модели должна быть идентифицирована путем построения численного решения при удовлетворении заданным граничным условиям.

Правомерность применения одномерной дифференциальной модели обоснована тем, что несмотря на многообразие процессов в общем механизме химических реакций интегральный тепловой эффект (закон Гесса) в итоге оказывается не зависящим от промежуточных стадий. Соответствующая этому эффекту совокупность теплофизических, термодинамических и газодинамических параметров гетерогенных конденсированных смесей, включая и собственно тепловой эффект реакций, может быть измерена экспериментально. Измерения дают дополнительную информацию для анализа поведения решений дифференциальной модели, связывающей формальную кинетику с газодинамикой процессов в газогенераторе.

Следуя [13], для формализации обратной задачи теории горения необходимо схематично выделить зоны преобразования твердого топлива в продукты сгорания. Это позволяет обосновать выбор структуры модели и процессов, сопровождающих преобразование твердого топлива в продукты сгорания.

Процесс преобразования твердого топлива условно делится на шесть характерных зон (рис. 1), что согласуется с экспериментальными данными [14, 15]. В качестве объекта рассматривается газогенератор твердого топлива [16]. Для решения обратной задачи требуются следующие экспериментальные данные:

- закон выгорания топлива как функция давления в газогенераторе, позволяющий оценить массовую скорость выгорания топлива;
- экспериментально измеренная температура газа при изменении давления в газогенераторе;
- теплоемкость, плотность, молярная масса

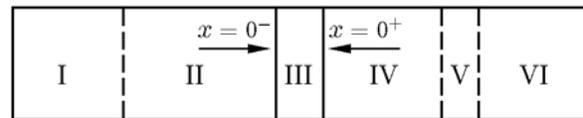


Рис. 1. Характерные зоны при горении твердотопливного заряда:

I — слой холодного топлива, II — зона активации твердой фазы (зона ее прогрева), III — поверхность раздела твердой и газовой зон (к-фаза), IV — зона активации газовой фазы, V — зона реакций в газовой фазе, поверхность разрыва (пламенная зона), VI — продукты сгорания (свободный объем газогенератора)

- продуктов сгорания, определенные в эксперименте по результатам химического анализа;
- теплоемкость, плотность и теплопроводность продуктов газификации в конденсированной зоне;
- суммарный тепловой эффект горения твердого топлива;
- граничные условия слева для твердого топлива — температура и плотность топлива.

## 3. ОСНОВНЫЕ ДОПУЩЕНИЯ, СТРУКТУРА МОДЕЛИ И ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ТЕОРИИ ГОРЕНИЯ

Рассматривается одномерная дифференциальная модель стационарного горения твердого топлива, которая, согласно [17, 18], при использовании экспериментальных данных позволяет количественно объяснить основные закономерности описываемых процессов. При не слишком упрощающих предположениях шесть обозначенных на рис. 1 зон моделируются единой дифференциальной моделью. Следует указать, что во многих исследованиях отказ от рассмотрения влияния газодинамических факторов в зоне активации газовой фазы на уровень тепловых потоков, введение предположения о независимости скорости горения от скорости отвода продуктов газификации и т. д. приводят к «укорачиванию» моделей [6]. Это снижает достоверность результатов при оценке температуры поверхности ( $T_s$ ) раздела газовой и конденсированной фаз (III на рис. 1), которая рассматривается как граничное условие и определяется именно скоростью выгорания, зависящей от числа Дамкёлера для пламенной зоны.

При разработке структуры модели принимались следующие допущения.

1. Химические реакции, изменяющие значения теплофизических характеристик, протекают только в узкой пламенной зоне V (см. рис. 1).

2. В зоне активации газовой фазы IV отсутствуют химические реакции.

3. Теплофизические характеристики конденсированной фазы практически неизменны.

4. В зоне активации газовой фазы IV не меняется концентрация компонентов (последние равны концентрациям компонентов в твердой фазе). Это позволяет не учитывать диффузию в зоне IV.

5. Для продуктов разложения горючего и окислителя принимается осредненная температура в пределах ячейки слоевой структуры. Поэтому, согласно [18], неоднородность течения моделируется слоевым приближением.

6. Поглощение излучения и химические реакции в твердой фазе I и в зоне активации твердой фазы II не учитываются, а все процессы, важные для формирования температуры поверхности границы раздела III, вызваны только тепловым потоком из пламенной зоны V.

7. На границе раздела III твердой и газовой фаз идет процесс газификации и формируется конденсированная фаза продуктов под действием теплового потока из пламенной зоны.

Модель включает в себя уравнение стационарного теплового баланса в дифференциальной форме [6] для зоны активации твердой фазы с учетом теплообмена в слоевой структуре твердого топлива [19]. Для зоны активации газовой фазы используется дифференциальное уравнение теплового баланса с учетом работы сил давления газа [20]. В этом уравнении нестационарное слагаемое сил давления заменено производной по продольной координате, поскольку в газовой фазе волновой процесс смещается вместе с основным потоком отходящих с поверхности горения газов. Уравнения теплового баланса дополнены дифференциальными законами сохранения, состояния газа и соотношениями для процесса дефлаграции, в которых пламенная зона рассматривается как граница разрыва в зоне реакций газовой фазы.

Оценить влияние формальной кинетики химических реакций на характеристики рабочего процесса в газогенераторе можно путем сопряжения балансных уравнений для конденсированной и газовой фаз на поверхности к-фазы, удовлетворяя поставленным граничным условиям. Выражаемая в классическом

представлении через теплоту реакции  $Q$  и скорость изменения концентрации  $W$  функция скорости тепловыделения  $\Phi = QW$  в модели представлена распределением  $\Phi[x, T, p]$  по продольной координате и формально описывает кинетику химических реакций в зависимости от режимных параметров газогенератора (температуры и давления).

Зона активации твердой фазы для слоевой структуры:

$$\lambda_c \frac{d^2 T_1}{dx^2} - c_c u_m \frac{dT_1}{dx} - \frac{\text{Nu} \lambda_c}{\varphi L^2} (T_1 - T_2) = \Phi_c[x, T_1, p] \text{ — компонент 1,}$$

$$\lambda_c \frac{d^2 T_2}{dx^2} - c_c u_m \frac{dT_2}{dx} + \frac{\text{Nu} \lambda_c}{(1 - \varphi) L^2} (T_1 - T_2) = \Phi_c[x, T_2, p] \text{ — компонент 2.}$$

Здесь  $\lambda$  — коэффициент теплопроводности,  $u_m$  — массовая скорость горения,  $c$  — теплоемкость,  $L$  — характерный размер слоевой структуры,  $\text{Nu}$  — число Нуссельта,  $\varphi$  — доля компонента в слоевой системе; индексы: 1 — первого компонента топливного заряда, 2 — второго компонента,  $c$  — конденсированной фазы. В структуре модели используются осредненные расчетные значения числа Нуссельта [18, 19]. Ввиду неопределенности теплового потока  $\frac{\text{Nu} \lambda_c}{\varphi L^2} (T_1 - T_2)$ , данное слагаемое можно рассматривать как варьируемую величину для различных топливных структур, задаваемых параметрами ( $\varphi$ ,  $L$ ). При моделировании рассмотрен случай равных долей компонентов в слоевой структуре ( $\varphi = 0.5$ ) и одинаковых для них граничных условий, что дает одинаковую правую часть и продольное распределение  $T_1(x) = T_2(x)$ .

Зона активации газовой фазы:

$$\lambda_g \frac{d^2 T_1}{dx^2} - c_p u_g \rho_g \frac{dT_1}{dx} + c_p \rho_g T_1 \frac{du}{dx} - u \frac{dp}{dx} - p \frac{du}{dx} = \Phi_g[x, T_1, p],$$

$$\lambda_g \frac{d^2 T_2}{dx^2} - c_p u_g \rho_g \frac{dT_2}{dx} + c_p \rho_g T_2 \frac{du}{dx} - u \frac{dp}{dx} - p \frac{du}{dx} = \Phi_g[x, T_2, p],$$

$$\frac{dp}{dx} = -\rho u \frac{du}{dx},$$

$$\frac{du}{dx} = -\frac{u}{\rho} \frac{d\rho}{dx},$$

$$\frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dx} = \frac{1}{p} \frac{dp}{dx} - \frac{1}{T} \frac{dT}{dx} + \frac{1}{\mu} \frac{d\mu}{dT} \frac{dT}{dx}.$$

Здесь  $x$  — продольная координата,  $\rho$  — плотность,  $c_p$  — изобарная теплоемкость,  $p$  — давление,  $\mu$  — молярная масса, индекс  $g$  относится к газовой фазе. В предпламенной зоне активное перемешивание газового потока в малой по протяженности газовой зоне формирует осредненные газодинамические параметры и, далее, пламенную зону.

Решение обратной задачи на основе представленной модели предполагает постановку граничных условий следующего вида.

*Граничные условия слева* (твердое топливо):

$$T_1 = T_2 = 300 \text{ К}; \quad \left. \frac{dT}{dx} \right|_{x=-\infty} = 0.$$

*Поверхность разрыва* (пламенная зона). Основные соотношения, выраженные через массовую скорость горения, давление в газогенераторе и суммарный тепловой эффект реакции, имеют вид:

$$\rho_g u_g - u_m = 0,$$

$$\rho_c u_{gg} - u_m = 0,$$

$$u_m = \rho_c a p^n,$$

$$u_m^2 = \frac{(p_{gg} - p_g) \rho_{gg} \rho_g}{\rho_{gg} - \rho_g}$$

$$\left[ \frac{k_g + 1}{2(k_g - 1)} \right] u_g^2 - \left[ \frac{k_g}{k_g - 1} \left( \frac{p_{gg}}{u_m} + u_{gg} \right) \right] u_g + \left[ \frac{u_{gg}}{2} \left( u_{gg} + \frac{2k_{gg} p_{gg}}{k_{gg} - 1} \frac{1}{u_m} \right) - q \right] = 0.$$

Здесь  $a$  — коэффициент в законе горения твердого топлива,  $n$  — показатель степени в законе горения твердого топлива,  $k_g$ ,  $k_{gg}$  — показатели адиабаты продуктов газификации и горения,  $q$  — теплотворная способность, индекс  $gg$  относится к продуктам горения. Получаемое решение в предпламенной зоне соответствует одной из точек Чепмена — Жуге, как

Параметры модели

Зона	$p$ , Па	$T$ , К	$\rho$ , кг/м <sup>3</sup>	$k_g$	$u$ , м/с
Активация газовой фазы	2 030 068.32	765	9.35	1.157	2.53
Продукты сгорания	2 030 000	1 477	3.71	1.26	5.52

случай дозвукового горения (слабая дефлаграция) [21] для однозначно заданных условий со стороны продуктов горения в газогенераторе. Однако следует указать на необходимость знания термодинамических свойств в газовой фазе. Из уравнения энергии системы уравнений на разрыве можно оценить только комплекс  $R_\mu T_g$  (где  $R_\mu$  — газовая постоянная смеси), но не температуру  $T_g$ . В этом случае для оценки температуры газа в зоне активации газовой фазы можно принять допущение о незначительном изменении молярной массы газа при переходе через поверхность разрыва. При выборе возможных решений, допускаемых соотношениями на разрыве, задается условие роста энтропии на разрыве при дозвуковом фронте реакции, и показатель адиабаты в системе уравнений для разрыва принимается как варьируемый параметр, который должен удовлетворять указанному условию. Для экспериментальных параметров  $T_{gg} = 1 477 \text{ К}$  и  $p_{gg} = 2.03 \text{ МПа}$  в газогенераторе оценки параметров на разрыве представлены в таблице.

*Граничные условия справа в зоне активации газовых реакций.* В рамках одномерного стационарного приближения в газовой зоне следует учитывать влияние вязкости и теплопроводности в процессе необратимого термодинамического перехода (изменение энтропии  $\Delta S$  [22]), задающего изменение состояние продуктов газификации перед границей разрыва (условия справа):

$$\Delta S = \int \frac{\eta}{T} \left( \frac{du}{dx} \right)^2 dx + \int \frac{\lambda}{T^2} \left( \frac{dT}{dx} \right)^2 dx$$

( $\eta$  — динамическая вязкость).

Для стационарного потока это выражение определяет минимальное производство энтропии при заданных граничных условиях для газовой зоны [23, 24]. Ввиду неактивных химических реакций в предпламенной зоне рассматривается газодинамическое приближение про-

изводства энтропии. Данное соотношение для энтропии ограничивает область выбора параметров, исключая их нефизичность и повышая устойчивость численных алгоритмов. С применением условия изменения энтропии вариационную задачу минимизации функционала следует решать при выполнении условий сопряжения слева для газовой зоны при стремлении температуры поверхности к значению на разрыве, оцениваемому по точке перегиба экспериментально измеренного распределения температуры [12]. Однако понятно, что при неактивных химических реакциях [1, 2, 15, 18] ( $T_{gg} = \text{const}$ ) в рассматриваемой зоне выражения под знаком интеграла стремятся к некоторому минимальному значению, что подтверждается экспериментальными данными, полученными при исследовании распределения температуры в слоевых системах. Следуя работе [25], в которой допускается газодинамическое приближение к разрывам, дифференциальная модель определяет продольный градиент температуры в предпламенной и пламенной зонах, который по порядку величины должен соответствовать экспериментальному тепловому потоку  $qu_m$  в газовой фазе.

*Граница раздела конденсированной и газовой зон.* В [26] отмечается, что, поскольку массовая скорость  $u_m$  не равна нулю, условия сопряжения на поверхности твердого топлива из теплового баланса имеют вид

$$\lambda_c \left. \frac{dT}{dx} \right|_{x=0^-} = \lambda_g \left. \frac{dT}{dx} \right|_{x=0^+} + qu_m.$$

Однако особенности кинетики химических реакций в зонах активации твердой и газовой фаз указывают на стремительный рост градиента температуры в узких областях слева в каждой из указанных зон и на наличие плато  $T_g \approx \text{const}$  с меньшим градиентом температуры (производство энтропии) между первичным пламенем к-фазы и вторичным пламенем на поверхности разрыва. Данный экспериментальный факт свидетельствует о неактивности химических реакций и работе сил давления по выталкиванию продуктов газификации с поверхности твердой фазы, что связано с «определяющей ролью процессов разложения» [12]. В этой связи формальная кинетика в структуре уравнений баланса для конденсированной и газовой фаз должна быть идентифицирована из условия сопряжения граничных температур

путем выбора функций скорости тепловыделения  $\Phi_c[x, T_1, p]$  для зоны активации твердой фазы и  $\Phi_g[x, T_1, p]$  для зоны активации газовой фазы.

#### 4. МОДЕЛЬ ФУНКЦИИ СКОРОСТИ ТЕПЛОТЫДЕЛЕНИЯ

В ряде экспериментальных исследований [6–9, 27] предложены основанные на экспоненциальной аппроксимации различные зависимости, содержащие кинетические факторы в качестве согласующих параметров. При неопределенности информации о процессах в обозначенных на рис. 1 зонах и недостаточной «гибкости» экспоненциальной аппроксимации для описания экспериментальных данных целесообразно функцию скорости тепловыделения представить разложением по базису ортогональных функций. При решении практических задач проектирования твердотопливных газогенераторов, функционирующих в широком диапазоне режимов работы, аппроксимация функции скорости тепловыделения на основе ортогонального разложения представляется оправданной ввиду гибкости такого представления:

- для удовлетворения решений дифференциальной модели при граничных условиях данным, полученным из эксперимента (аналог метода пристрелки);
- для замены неопределенной совокупности химических реакций формальным законом кинетики;
- для выражения весовых коэффициентов ортогонального разложения в виде гладких функций режимных параметров газогенератора, что не удастся обеспечить при использовании обычных регрессионных моделей. Сведения о свойствах ортогонального приближения можно найти в [28].

Таким образом, без рассмотрения кинетических факторов химических реакций в структуру дифференциальной модели вводится модель формального кинетического закона, обеспечивающего удовлетворение интегрального решения следующим граничным условиям:

- заданным для зоны I (слой холодного топлива) и для зоны IV (экспериментально измеренные параметры в газогенераторе);
- получаемым из решения системы уравнений на разрыве V и условиям сопряжения на границе раздела III конденсированной и газовой зон.

Для реализации численного решения задачи функция формального кинетического закона была аппроксимирована в виде ортогональных полиномов Лаггера. Это позволило получить продольное распределение функции скорости тепловыделения  $\Phi[x, T, p]$  вдоль зон активации твердой и газовой фаз при сформированных граничных условиях. Взаимно ортогональные полиномы на интервале  $[0, \infty)$  функций Лаггера генерируются выражением

$$l_j(T) = \sum_{j=0}^N (-1)^j \binom{c_N^j}{j!} T(x)^j,$$

где  $c_N^j$  — число сочетаний,  $N$  — порядок старшего полинома. Аппроксимация функции скорости тепловыделения определяется выражением

$$\Phi[x, T, p] = \sum_{j=0}^k b_j(p_{gg}, T_{gg}) l_j(T(x)),$$

в котором весовые коэффициенты  $b_j(p_{gg}, T_{gg})$  ортогонального разложения целесообразно представить функциями режима работы газогенератора и определить как результат решения задачи оптимизации из следующих условий:

— удовлетворения интегральной кривой распределения температуры при численном интегрировании дифференциальной модели заданным граничным условиям и условиям сопряжения;

—  $\Phi[x, T, p] > 0$ , которое можно использовать для получения функции скорости тепловыделения при реализации алгоритма оптимизации.

Зависимость  $\Phi[x, T, p]$  удобна для использования в практических расчетах и при обработке экспериментальных данных, и согласно [9] она представляет собой кинетический закон, который в данной задаче должен соответствовать интегральному, не зависящему от промежуточных стадий химических реакций тепловому потоку, измеренному в эксперименте. Анализ поведения функций скорости тепловыделения для различных режимов работы газогенератора позволит оценить полноту преобразования химической энергии в функции рабочего давления. При этом остается проблема выбора оптимальной степени полинома ортогонального разложения.

## 5. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ СХЕМА ОЦЕНКИ КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ

*Твердое топливо.* Условия слева для заряда топлива:  $\frac{dT}{dx} \Big|_{x=-\infty} = 0$ ,  $T = T_0$  — начальная температура топлива. Распределение температуры в зоне прогрева определяется исходя из экспериментально установленной толщины прогрева горящего заряда по уравнению стационарной теплопроводности.

*Конденсированная зона.* При заданных выше граничных значениях слева в результате интегрирования системы уравнений получается температура поверхности со стороны конденсированной фазы  $T_{s,c}$ .

*Газовая зона.* Интегрирование системы уравнений газовой зоны при заданных граничных условиях дает распределение температуры и функции скорости тепловыделения при стремлении температуры поверхности твердой фазы  $T_{s,c}$  к значению температуры на разрыве [12] слева (неактивные химические реакции) при приближении энтропии к некоторому минимальному уровню.

*Проверка условий сопряжения* при положительной скорости тепловыделения:

$$T_{s,c} = T_{s,g}; \quad \lambda_c \frac{dT}{dx} \Big|_{x=0^-} = \lambda_g \frac{dT}{dx} \Big|_{x=0^+} + q_{um}$$

$$\text{и } \Phi[x, T, p] > 0.$$

В случае, когда условия сопряжения удовлетворяются путем выбора весовых коэффициентов ортогонального аппроксимации функции скорости тепловыделения  $\Phi[x, T, p]$ , получаем решение, которое стремится к температуре поверхности  $T_s$  согласно балансным уравнениям распространения тепла в газовой и конденсированной зонах.

## 6. РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ГОРЕНИЯ ПРИ ЗАДАНЫХ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЯХ

Решение системы дифференциальных уравнений (рис. 2), полученное путем варьирования коэффициентов ортогонального разложения и удовлетворяющее рассмотренным выше граничным условиям и условиям сопряжения, дает распределения температуры и функции скорости тепловыделения для твердого топлива и газовой фазы вдоль каждой из зон, протяженность которых оценивается

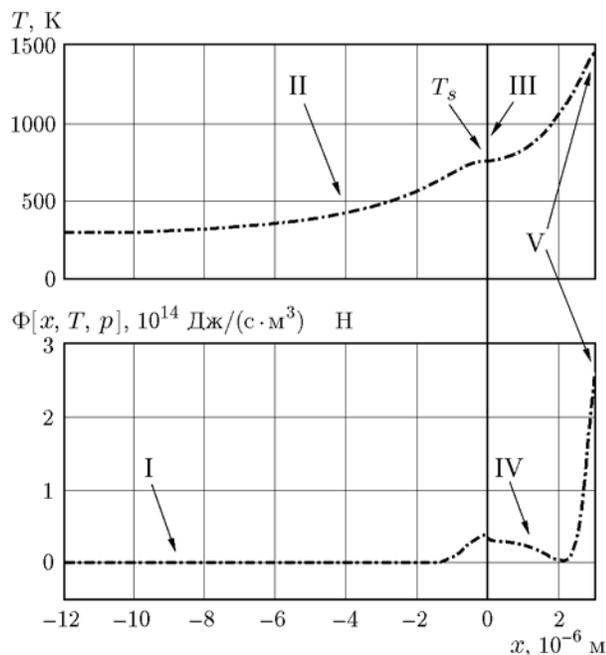


Рис. 2. Распределение температуры и функции скорости тепловыделения вдоль заряда твердого топлива и газовой зоны:

обозначения зон соответствуют нумерации зон на рис. 1

отношением  $x = \lambda / (c_p u_m)$ . Этот параметр в общем виде может быть представлен как переменная величина вдоль интервала интегрирования в процессе газификации твердого заряда. Из рис. 2 видно, что на поверхности горения твердого топлива (к-фаза) и в зоне пламени происходит резкое увеличение функции скорости тепловыделения за счет химических реакций.

Функции скорости тепловыделения в соответствии с уравнениями теплового баланса имеют следующие значения: для поверхности твердого топлива  $\Phi_c[x, T, p] \approx 0.5 \times 10^{14}$  Дж/см<sup>3</sup> при  $T_s \approx 760$  К, для пламенной зоны  $\Phi_g[x, T, p] \approx 2.6 \cdot 10^{14}$  Дж/см<sup>3</sup> при  $T_{gg} = 1477$  К,  $\left. \frac{dT_{gg}}{dx} \right|_{x=+\infty} \approx 10^7 \div 10^8$ . Тепловой поток в газовой фазе оценивается величиной  $q_g \approx 23 \cdot 10^4$  Дж/см<sup>3</sup>. Полученные результаты как количественно, так и по характеру поведения функции скорости тепловыделения соответствуют экспериментальным данным, представленным в [12, 29]. Это позволяет говорить о работоспособности предлагаемого подхода при решении практических задач на ос-

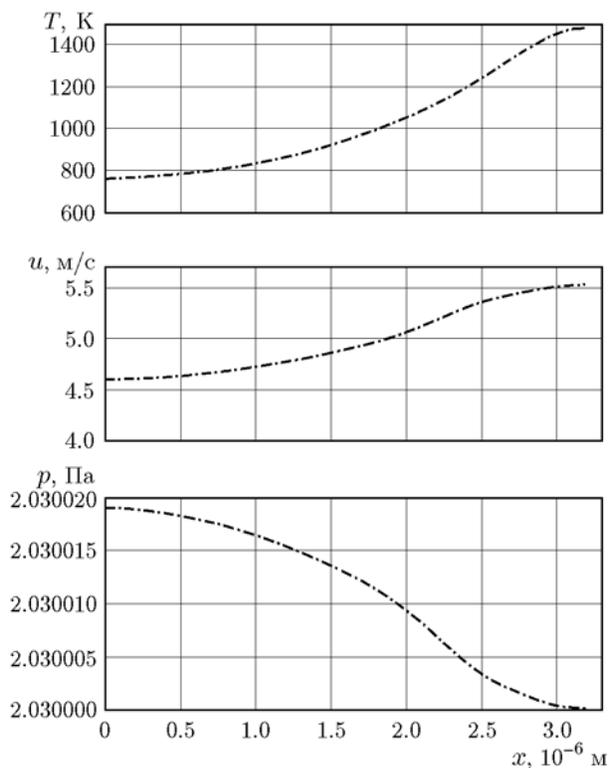


Рис. 3. Изменение газодинамических параметров вдоль зоны активации газовой фазы

нове дифференциальной модели, адекватность которой достигается обоснованностью вводимых критериев оптимизации, ограничениями, обеспечивающими физическую реализуемость процесса, и корректностью граничных условий, формируемых по экспериментальным данным при постановке обратной задачи теории горения. Рис. 3 демонстрирует изменение температуры, скорости и давления в зоне активации газовой фазы за счет тепла химических реакций из пламенной зоны при интегрировании представленной выше дифференциальной модели.

## ВЫВОДЫ

1. Предложена дифференциальная модель, позволяющая связать газодинамику в твердо-топливном газогенераторе с кинетическими характеристиками горения с помощью аппроксимации формального кинетического закона скорости тепловыделения по результатам экспериментального измерения режимных параметров в газогенераторе.

2. Использование ортогонального разложения функции тепловыделения позволяет решать практические задачи теории горения, заменяя описание кинетики химических реакций функцией скорости тепловыделения и функциональной зависимостью весовых коэффициентов взаимно ортогональных функций Лаггера от режима работы газогенератора.

3. Появление пиков функции скорости тепловыделения в узких областях поверхности горения и пламенной зоны при численном интегрировании свидетельствует об адекватности предлагаемой дифференциальной модели и возможности ее применения при решении практических задач.

4. Оцениваемое распределение функции скорости тепловыделения позволяет установить тепловые потоки и скорость горения твердого топлива как результат решения задачи о собственном значении, а также температуру поверхности горения твердого топлива и сформулировать в результате более адекватные граничные условия при последующем численном моделировании процессов в газогенераторе.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Гусаченко Л. К., Зарко В. Е. Анализ нестационарных моделей горения твердых топлив (обзор) // Физика горения и взрыва. — 2008. — Т. 44, № 1. — С. 35–48.
2. Гусаченко Л. К., Зарко В. Е., Зырянов В. Я., Бобрышев В. И. Моделирование процессов горения твердых топлив. — М.: Наука, 1985.
3. Внутренняя баллистика РДТГ/РАРАН / Алиев А. В., Амарантов Г. Н., Ахмадеев В. Ф. и др. / под ред. А. М. Липанова, Ю. М. Милехина. — М.: Машиностроение, 2007.
4. Гусаченко Л. К. Об использовании решения Бурке — Шумана для диффузионного пламени при описании горения конденсированных веществ // Физика горения и взрыва. — 1985. — Т. 21, № 2. — С. 41–45.
5. Фитцджеральд Р. П., Брюстер М. К. Горение слоевых топлив (обзор). 1. Экспериментальные исследования // Физика горения и взрыва. — 2005. — Т. 41, № 6. — С. 95–115.
6. Зельдович Я. Б., Баренблатт Г. И., Либрович В. Б., Махвиладзе Г. М. Математическая теория горения и взрыва. — М.: Наука, 1980.
7. Щетинков Е. С. Физика горения газов. — М.: Наука, 1965.
8. Манелис Г. Б., Назин Г. М., Рубцов Ю. И., Струнин В. А. Термическое разложение и горение взрывчатых веществ и порохов. — М.: Наука, 1996.
9. Зенин А. А. Универсальная зависимость для тепловыделения в к-фазе и макрокинетика газа при горении баллиститных порохов // Физика горения и взрыва. — 1983. — Т. 19, № 4. — С. 78–81.
10. Струнин В. А., Федорычев А. В., Гунин С. В., Ключников А. Н., Милехин Ю. М., Манелис Г. Б. Двухзонная модель горения смесового твердого топлива с охладителем // Физика горения и взрыва. — 2010. — Т. 46, № 3. — С. 84–94.
11. Самарский А. А., Вабищевич П. Н. Численные методы решения обратных задач математической физики: учеб. пособие. — Изд. 3-е. — М.: Изд-во ЛКИ, 2009.
12. Фролов Ю. В., Зенин А. А., Яковлев В. Я. Горение перхлората аммония в слоевой системе // Физика горения и взрыва. — 1969. — Т. 5, № 4. — С. 544–549.
13. Мак-Клур Ф. Т., Харт Р. В., Берд Дж. Ф. Ракетные двигатели твердого топлива как источники акустических колебаний // Исследование ракетных двигателей на твердом топливе / под ред. М. Саммерфильда. — М.: Изд-во иностр. лит., 1963.
14. Ермолаев Б. С., Коротков А. И., Фролов Ю. В. Закономерности горения слоевых конденсированных систем // Физика горения и взрыва. — 1970. — Т. 6, № 3. — С. 277–285.
15. Коробейничев О. П., Зенин А. А., Терещенко А. Г., Пучков В. М. Исследование структуры волны горения смесевых систем на основе ПХА, ПММА и катализатора с помощью масс-спектрометрической и термодинамической // Физика горения и взрыва. — 1977. — Т. 13, № 3. — С. 335–342.
16. Сорокин В. А., Яновский Л. С., Козлов Е. В. и др. Ракетно-прямоточные двигатели на твердых и пастообразных топливах // Основы проектирования и экспериментальной отработки / под ред. Ю. М. Милехина, В. А. Сорокина. — М.: Физматлит, 2010.
17. Крокко Л. Одномерное рассмотрение газовой динамики установившихся течений // Основы газовой динамики / под ред. Г. Эммонс. — М.: Изд-во иностр. лит., 1963.
18. Фитцджеральд Р. П., Брюстер М. К. Горение слоевых топлив (обзор). 2. Теоретические исследования // Физика горения и взрыва. — 2006. — Т. 42, № 1. — С. 3–25.
19. Струнин В. А., Фирсов А. Н., Шкадинский К. Г., Манелис Г. Б. Закономерности гетерогенного горения слоевой системы // Физика горения и взрыва. — 1989. — Т. 25, № 5. — С. 25–32.

20. **Timnat Y. M.** Advanced Chemical Rocket Propulsion (Combustion Treatise). — Academic Press, USA, 1987.
21. **Бартальме Ф.** Газодинамика горения: пер. с нем. / под ред. М. Е. Дейч. — М.: Энергоатомиздат, 1981.
22. **Liermann H. W., Roshko A.** Elements of Gasdynamics. — New York: John Wiley & Sons, 1957.
23. **Пригожин И., Кондепуди Д.** Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур: пер. с англ. / под ред. Е. П. Агеева. — М.: Мир, 2002.
24. **Фокин Б. С.** Основы неравновесной термодинамики: учеб. пособие. — СПб.: С.-Петербург. гос. политехнический ун-т, 2013.
25. **Лойцянский Л. Г.** Механика жидкости и газа. — М.: Наука, 1973.
26. **Липанов А. М.** Граничные условия на подвижной границе при решении задач внутренней баллистики (феноменологический подход) // Физика горения и взрыва. — 1993. — Т. 29, № 6. — С. 93–99.
27. **Франк-Каменецкий Д. А.** Диффузия и теплопередача в химической кинетике. — М.: Наука, 1987.
28. **Дейч А. М.** Методы идентификации динамических объектов. — М.: Энергия, 1979.
29. **Зенин А. А.** Формальные кинетические характеристики реакций, происходящих при горении пороха // Физика горения и взрыва. — 1966. — Т. 2, № 2. — С. 28–32.

*Поступила в редакцию 19/І 2017 г.,  
в окончательном варианте — 12/Х 2017 г.*

---