

СОВРЕМЕННЫЙ ПРОГРЕСС В МОДЕЛИРОВАНИИ ГОРЕНИЯ ТВЕРДОГО ТОПЛИВА

М. В. Бекстед

Университет им. Бригама Янга, 84602 Прово, Юта, США, mwb@caedm.byu.edu

В последнее десятилетие в моделировании горения твердых топлив достигнут колоссальный прогресс. Значительное увеличение производительности компьютеров позволило использовать вычислительные подходы, которые прежде рассматривались лишь как концептуальные. В работе обсуждаются следующие три направления: численное моделирование пламен предварительно перемешанных газов с привлечением детальных кинетических механизмов; разработка моделей для расчетов геометрических распределений частиц, моделирующих структуру гетерогенного твердого топлива; расчеты эффектов диффузионных пламен, которые играют решающую роль при горении AP/углеводородных твердых топлив.

Накопленный опыт моделирования пламен предварительно перемешанных газов с привлечением детальных кинетических механизмов был успешно применен для исследования горения компонентов твердого топлива в одномерном подходе. Множество ранних работ было выполнено в Новосибирске. Названный подход позволяет рассчитывать скорость горения в зависимости от давления, а также температурную чувствительность скорости горения и пространственные распределения температуры и концентраций реагентов. Разработаны обобщенные механизмы, которые были применены ко многим компонентам твердых топлив, таким как HMX, GAP, RDX, NG, AP и др. Газофазные кинетические механизмы, по-видимому, хорошо моделируют химию горения таких монотоплив и псевдотоплив. Значения скоростей горения этих монотоплив различаются почти на порядок, но практически не зависят от температуры пламени. Различные модельные расчеты находятся в разумном согласии между собой и с имеющимися экспериментальными данными.

Последние работы, выполненные в США, представляют существенное продвижение по пути описания геометрической упаковки твердого топлива. Однако объединение моделей упаковки с реалистическими моделями пламен по-прежнему остается сложной задачей, хотя предварительные результаты обнадеживают. Также достигнут значительный прогресс в двумерных расчетах диффузионных пламен, включающих реальную кинетику химических реакций. Последние опубликованные результаты вселяют надежду на успех в детальном моделировании скорости горения топлив, содержащих перхлорат аммония.

Ключевые слова: моделирование, горение, твердое топливо, химическая кинетика.

Список сокращений

ADN — ammonium dinitramide = динитрамид аммония

АММО — 3-azidomethyl-3-methyl oxetane = 3-азидометил-3-метилоксетан

AP — ammonium perchlorate = перхлорат аммония

ВАМО — 3,3'-bis(azidomethyl)oxetane = поли-3,3'-бис(диазидометилоксетан)

БДП — Beckstead, Derr, and Price combustion model = модель горения Бекстеда, Дерра, Прайса

ВТТН — 1,2,4-butanetriol trinitrate = 1,2,4-бутантриолтринитрат

СТРВ — carboxyl-terminated polybutadiene = полибутадиен с концевыми карбоксильными группами

GAP — glycidyl azide polymer = глицидил-азидный полимер

GRI — Gas Research Institute = Институт исследования газа

HTPB — hydroxyl-terminated polybutadiene = полибутадиен с концевыми гидроксильными группами

HMX — cyclotetramethylene tetranitramine = циклотетраметилентетранитрамин (октоген)

NC — nitrocellulose = нитроцеллюлоза

NG — nitroglycerine = нитроглицерин

NMMO — 3-nitratomethyl-3-methyl oxetane = 3-нитратометил-3-метилоксетан

M. W. Beckstead.

Brigham Young University, 84602 Provo, Utah, USA.

PETN — pentaerythritol tetranitrate = пентаэритритолтетранитрат

PGN — polyglycidyl nitrate = полиглицидилнитрат

PVN — polyvinyl nitrate = поливинилнитрат

RDX — cyclotrimethylene trinitramine = циклотриметилентринитрамин (гексоген)

TEGDN — triethylene glycol dinitrate = триэтиленгликольдинитрат

TMETN — trimethylolethane trinitrate = триметилолэтантринитрат

ВВЕДЕНИЕ

Горение твердого топлива характеризуется протеканием множества процессов, обусловленных спецификой различных компонентов, из которых состоит топливо. Эти компоненты разлагаются, испаряются и/или пиролизуются, выделяют газы, которые затем реагируют, что приводит к образованию богатых энергией пламен, ведущих процесс горения топлива. В последние два десятилетия достигнут огромный прогресс в разработке механизмов реакций, в методологии получения соответствующих кинетических данных и в создании моделей, описывающих различные аспекты процесса горения. Наибольший успех достигнут в развитии полного описания пламен предварительно перемешанных газов, учитывающего совместное действие всех компонентов, составляющих типичное твердое топливо. Большинство индивидуальных компонентов, которые используются в твердых топливах, горят как монотоплива [1]. В данной работе обобщены современные исследования, направленные на разработку кинетических моделей, описывающих горение ряда таких компонентов.

При горении монотоплива можно выделить три пространственные области — конденсированную, двухфазную (газ/жидкость) и газовую [2, 3]. Монотоплива могут сублимировать и/или разлагаться, находясь в твердом состоянии, но скорости этих процессов обычно малы по сравнению со скоростями разложения и испарения после того, как топливо расплавится. Двухфазная область (расплав) состоит из жидких и газофазных компонентов, образовавшихся в результате плавления и/или разложения твердой фазы. Например, у НМХ и RDX эта область имеет вид четко различимого жидкого слоя [4], и, вероятно, вряд ли существуют эффективные реакции, которые могут

протекать при температуре ниже температуры плавления и влиять на процесс горения. В случае АР такой определенности нет. Расплавленный слой непосредственно не наблюдается, температура плавления определена лишь гипотетически.

Точную границу между двухфазной и газофазной областями (т. е. «поверхность горения») также трудно установить из-за наличия химических реакций, пузырей и конвективного движения конденсированного вещества от поверхности. В газофазной области пламя монотоплива является предварительно перемешанным. Вещества, исходящие с поверхности, реагируют друг с другом и/или разлагаются, образуя другие вещества. Различные реакции, включающие множество индивидуальных веществ, проходят в газовом пламени [5] до тех пор, пока в конечной зоне пламени не достигается термодинамическое равновесие.

В случае многокомпонентных гетерогенных топлив все происходит еще сложнее. В некоторых случаях возможно потребуется сформулировать заново полный набор протекающих реакций. В других случаях реакции, по существу, будут теми же, как если бы монотоплива горели по отдельности. Некоторые компоненты, например, RDX, горят с образованием толстого жидкого слоя на поверхности, тогда как при горении других, например, GAP, расплавленный слой очень тонкий или вообще отсутствует. Таким образом, характеристики горящей поверхности и теплопередачи от пламени к поверхности смесового топлива могут существенно отличаться от таковых в случае монотоплива. Поэтому важно знать геометрическую структуру топлива и ее влияние на горение. Для предсказания геометрических эффектов в случае смесовых топлив были разработаны различные численные модели (см. следующий параграф). Эти модели постепенно развивались: уровень сложности возрастал от одномерных до многомерных; описание химических реакций прогрессировало от глобальной кинетики до детальных кинетических механизмов.

Одна из требуемых характеристик смесовых топлив на основе АР — зависимость скорости горения от гранулометрического состава АР. В модели БДП [6] предполагается наличие пламен трех типов: первичное диффузионное пламя взаимодействия продуктов разложения АР с продуктами разложения связующего; монотопливное пламя АР; финальное диффузион-

ное пламя взаимодействия продуктов горения АР как монотоплива и продуктов разложения связующего (смешанных с продуктами горения первичного диффузионного пламени). Предполагается, что первичное диффузионное пламя играет ведущую роль при горении смесового топлива на основе АР.

Для детального исследования взаимодействия монотопливных и диффузионных пламен в последнее время создана неоднородная модель с детальной химической кинетикой. Эта двумерная модель служит основой для разработки детального кинетического механизма, который может быть применен для описания предварительно перемешанных и диффузионных пламен над поверхностью идеализированного топлива.

ИТОГИ ПРЕДШЕСТВУЮЩИХ РАБОТ ПО МОДЕЛИРОВАНИЮ

Модели стационарного горения топлив можно разделить на три категории: (1) модели, основанные на глобальной кинетике; (2) модели, основанные на расширенной глобальной кинетике, рассматривающие механизм с конечными скоростями реакций в газовой или конденсированной фазе либо в обеих фазах; (3) многофазные модели с детальными кинетическими механизмами.

В действительности, некоторые модели могут выходить за рамки этих категорий. В моделях с глобальной кинетикой обычно решается только уравнение сохранения энергии с использованием понятий тонкой зоны пламени или конечной высоты пламени. Большинство подобных моделей было разработано в 1960–1970-е годы. В моделях с расширенной глобальной кинетикой, использующих те или иные механизмы с конечной скоростью реакций, обычно (но не всегда) отказываются от допущения тонкой зоны пламени, вводя предположение о распределенном выделении энергии. Выделение энергии описывается на основе совместного решения уравнений энергии и концентраций реагентов. Модели этой категории развивались в 1970–1980-е годы. В действительности практически все модели позволяли с разумной точностью описывать экспериментальные данные по скорости горения, несмотря на разное допущение относительно моделируемой физической картины. Основываясь на согласии с экспериментом, большинство исследователей затем претендовали на то, что их физи-

ческие модели «верны». Однако во всех моделях имелись параметры, обычно относящиеся к кинетическим уравнениям, численные значения которых не определены экспериментально и поэтому должны быть заданы, чтобы обеспечить приемлемое согласие с экспериментальными данными. Эта процедура «подгонки» параметров гарантирует разумное согласие между результатами моделирования и экспериментом. Критическая оценка таких моделей дана в [1, 7–9], где было отмечено, что согласие с экспериментальными данными не является доказательством «корректности» модели. Полностью определенная модель должна позволять исследовать поведение не только скорости горения, но и других характеристик, таких как пространственное распределение энерговыделения, температурная чувствительность, показатель степени при давлении в законе скорости горения и т. д.

В работах [10–16] представлена методология двух- и трехмерного описания геометрической структуры твердого топлива. Авторы моделировали сложные процессы нестационарного переноса тепла и выгорания поверхности смесового топлива, рассматривая его в виде системы сэндвичей окислитель/горючее либо двумерных или трехмерных случайных упаковок частиц. Для описания тепловыделения в газовой фазе использовали двух- и трехстадийные глобальные реакционные механизмы. Результаты [10–16] будут обсуждены ниже.

В случае топлив АР/НТРВ для описания диффузионной структуры пламени, связанной с АР, необходимы двумерные модели [17–19]. В недавней работе [20] моделирование диффузионных пламен было проведено для топлива со сложной упаковкой частиц. Соответствующие физические модели весьма громоздкие, что зачастую вынуждает применять упрощенную расширенную глобальную кинетику.

МОДЕЛИ МОНОТОПЛИВ, ОСНОВАННЫЕ НА ДЕТАЛЬНОЙ КИНЕТИКЕ

Большинство современных моделей включает детальные кинетические механизмы реакций в газовой фазе в сочетании с индивидуальным описанием конденсированной фазы. Модели такого типа впервые были разработаны в 1980-х годах для НМХ и АР, их краткий обзор имеется в [1]. В 1995 г. был опубликован обзор [21] нескольких моделей этого типа. Особое внимание авторы обзора уделили моделям,