

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ СМЕСЕВОГО ТВЕРДОГО РАКЕТНОГО ТОПЛИВА

В. А. Бабук, В. А. Васильев, В. В. Свиридов

Балтийский государственный технический университет, 198005 Санкт-Петербург

Изложены результаты работы по созданию модели структуры смесового твердого ракетного топлива, которая описывается с помощью таких понятий, как «карман» и «межкарманный мостик». Показаны соответствие результатов моделирования и экспериментальных данных, а также возможность использования модели для прогнозирования характеристик процесса горения.

Структура смесового твердого ракетного топлива (СТРТ), под которой понимается его пространственное строение, обусловленное наличием частиц окислителя различного размера, оказывает значительное влияние на разные проявления процесса горения. К их числу относится агломерация металлического горючего, входящего в состав топлива. Вся практика работ по исследованию данного явления подтверждает, что изменение содержания окислителя и дисперсности его частиц является мощным инструментом воздействия на характеристики агломерации.

Для описания структуры СТРТ и ее влияния на параметры агломерационного процесса оказалось плодотворным введение понятий «карман» и «межкарманный мостик». Появление понятия «карман» (pocket) восходит к работам Дж. Крумпа и Е. Прайса середины шестидесятых годов. Впервые «карман» как фактор, обеспечивающий определение характеристик агломерации, был введен в работе [1]. «Карманом» принято называть объем композиции связующее — металл, ограниченный со всех сторон частицами дисперсного окислителя и «межкарманными мостиками» (МКМ). МКМ представляет собой часть композиции связующее — металл, заключенную между двумя соседними частицами окислителя, формирующими один и тот же «карман».

Результаты экспериментальных исследований [2] свидетельствуют, что образование каркасного слоя [3, 4] — специфической структуры в поверхностном слое горящего топлива, ответственной за осуществление агломерационного процесса, происходит только в пределах «карманов». Для МКМ подобная структура нехарактерна. При реализации различных механизмов агломерации («карманного», «межкар-

манного» и «докарманного») [3] размер агломератов в той или иной мере связан с дисперсностью «карманов». Свойства «кармана» и частиц окислителя, формирующих его, определяют локальные характеристики среды, которые оказывают влияние на особенности горения металлического горючего в каркасном слое, а следовательно, на химический состав и структуру агломератов [2, 4]. Таким образом, параметры структуры СТРТ, связанные со свойствами «карманов» и МКМ, в существенной мере определяют характеристики конденсированных продуктов сгорания у поверхности горящего топлива. Поэтому при разработке модели горения СТРТ необходимо моделирование структуры топлива, которое сводится к созданию аппарата отыскания данных параметров (массовых долей «карманов» и МКМ в топливе и распределения «карманов» по размерам).

Ранее предпринимались попытки решить задачу моделирования структуры топлива. Наиболее известны две модели, представленные в работах [5, 6]. Однако в них не учитываются современные представления о структуре реальных СТРТ, связанные с наличием МКМ, ограничениями по формированию «карманов» частицами окислителя различного размера, существованием достаточно плотных упаковок частиц окислителя. Эти обстоятельства стимулировали появление настоящей работы, посвященной созданию модели структуры СТРТ.

МОДЕЛЬ СТРУКТУРЫ ТОПЛИВА

В основе моделирования лежат следующие положения:

— «карман» формируется частицами окислителя, соизмеримыми по своим размерам, а характерный размер «кармана», в свою очередь, соизмерим с размерами этих частиц;

— пространственное распределение частиц окислителя в топливной массе определяется реализацией случайного процесса.

Для воспроизводства структуры СТРТ используется метод статистических испытаний. В общем случае расстояния между частицами окислителя и их центрами являются случайными функциями. Для их моделирования необходима некоторая первичная информация (функции математического ожидания, корреляционные функции). Получение подобной информации для реальных топливных композиций представляет существенную проблему. Для устранения этого затруднения сделаны упрощающие предположения, сводящиеся к следующему.

Центры частиц окислителя распределены в топливной массе в соответствии с трансформированным законом Пуассона, для которого характерно следующее:

- закон Пуассона реализуется при абсолютно неплотной упаковке окислителя (частицы не касаются друг друга);
- в случае, когда все частицы контактируют между собой, закон определяется распределением частиц окислителя по размерам;
- в промежуточной ситуации закон определяется взаимодействием двух указанных выше распределений.

Закон Пуассона вследствие его универсальности достаточно широко применяется при моделировании распределений дисперсной фазы [6, 7]. В рамках принятого допущения о распределении центров частиц окружающие каждую частицу окислителя объемы, в которых находятся центры ближайших частиц, являются реализациями случайной величины, распределенной по экспоненциальному закону. Если межцентровые (между центрами данной частицы и соседних) расстояния, соответствующие указанному закону, не обеспечивают размещения соседних частиц, их корректируют, исходя из условия взаимного непроникновения объемов соседних частиц. В случае сферической формы частиц упомянутые объемы приобретают форму полых сфер, а условие размещения соседней частицы относительно данной сводится к следующему: если $D_{ji}/2 \geq d_j/2 + d_i/2$, то $r_{ji} = D_{ji}/2$, в противном случае $r_{ji} = d_j/2 + d_i/2$ (рис. 1). Здесь D_{ji} , d_j , d_i — диаметры i -й поллой сферы, данной и i -й частиц; r_{ji} — межцентровое расстояние между данной частицей и i -й соседней; $D_{ji} = 2R_{ji}$.

Для моделирования структуры топлива в

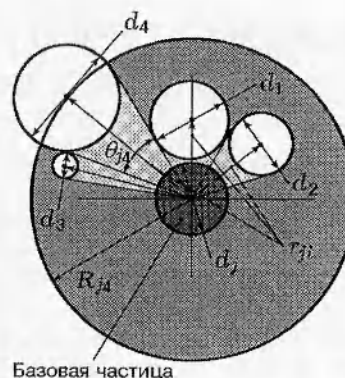


Рис. 1. Схема локальной структуры в окрестности базовой частицы:

d_i — диаметры соседних частиц; r_{ji} — межцентровое расстояние между базовой и i -й соседней частицами; θ_{j4} — телесный угол, образованный 4-й соседней частицей с центром базовой частицы; R_{j4} — радиус 4-й поллой сферы

целом анализируется локальная структура вокруг совокупности так называемых «базовых» частиц. Анализ включает определение межцентровых расстояний между базовой частицей и ближайшими соседними, а также размеров этих частиц. Он завершается (прекращается моделирование характеристик соседних частиц), когда сумма телесных углов, образуемых соседними частицами с центром базовой, достигает значения полного телесного угла (см. рис. 1). Геометрические размеры моделируемых частиц позволяют сделать вывод о возможности образования «карманов» или МКМ между базовой частицей и соседними и определить, в свою очередь, их геометрические размеры. Взаимное положение соседних частиц не имеет значения для решения данной задачи, поэтому есть основания полагать, что основное допущение выполняется для всей совокупности частиц.

Точность моделирования структуры СТРТ существенно зависит от количества базовых частиц, вокруг которых определяются параметры локальной структуры. Эту величину находят из оценок с заданной погрешностью дисперсности базовых частиц и исходного порошка окислителя.

Для анализа «карманов» и МКМ необходимо определить их форму. Принято, что МКМ представляет собой тело, формируемое конической поверхностью, касательной к двум частицам окислителя, которые его образуют, и

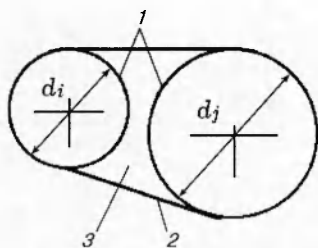


Рис. 2. Схема, иллюстрирующая форму МКМ:

1 — поверхности частиц дисперсного наполнителя, формирующие МКМ; 2 — коническая поверхность; 3 — МКМ

поверхностями собственно частиц окислителя (рис. 2). Ограничивающей поверхностью «кармана» являются поверхности частиц МКМ и частиц окислителя. При определении функции распределения «карманов» по размерам в качестве эквивалентного размера «кармана» выступает диаметр вписанной сферы, касающейся частиц окислителя, которые участвуют в образовании «кармана».

После получения достаточного статистического материала о характеристиках структуры появляется возможность оценки функции распределения «карманов» по размерам и оценки их объемной доли в топливной массе. Поскольку считается, что композиция связующее — металлическое горючее состоит только из «карманов» и МКМ, после определения объема всех МКМ автоматически найдется объемная доля «карманов». Весь объем композиции, не включенный в состав МКМ, относится к «карманам». При определении функции распределения «карманов» по размерам используется допущение, в соответствии с которым в формировании «карманов» различного размера участвует одинаковое количество частиц окислителя. Это число фактически выступает в качестве параметра модели, характеризующего связь между объемными долями «карманов» в топливе и их размером.

Существует очевидное несоответствие между описаниями формы «карманов» при определении их объемной доли и дисперсности. Однако, учитывая саму условность при введении понятия «карман», предполагается, что использование предложенных приемов не должно существенно исказить характеристики структуры топлива.

Совершенно естественно, что при моделировании должны быть формализованы усло-

вия образования «карманов». Данные условия имеют эвристическую природу, и корректность их введения обосновывается только результатами исследования процесса агломерации. (Сами понятия «кармана» и МКМ являются условностями, приобретающими физический смысл применительно, прежде всего, к агломерации). Процедура формализации условий осуществляется введением коэффициентов k_1, k_2, k_3, k_4 . Их использование позволяет идентифицировать «карман» при следующих условиях ($d_j, d_i > d^*$):

$$k_1 d_i \leq d_j \leq k_2 d_i, \quad (1)$$

$$k_3 d_j \leq l_{ji} \leq k_4 d_j. \quad (2)$$

Здесь d^* — предельный размер частиц дисперсного окислителя, ниже которого можно пренебречь гетерогенной природой топлива; l_{ji} — расстояние между поверхностями базовой (j -й) и i -й соседней частиц.

Невыполнение условия (1) означает, что базовая и i -я соседняя частицы не способны образовать «карман» или МКМ. При $l_{ji} < k_3 d_j$ и выполнении условия (1) формируется МКМ. При $l_{ji} > k_4 d_j$ в топливе не образуется структура, состоящая исключительно из «карманов» и МКМ. Подобная ситуация возможна либо при уменьшении содержания окислителя в топливе, либо при увеличении его дисперсности (уменьшении содержания крупной фракции окислителя).

Принятые подходы к идентификации структурных образований позволяют фиксировать разнообразные ситуации, которые характерны для реальных топливных композиций:

- наличие малых «карманов» внутри больших;
- наличие частиц окислителя внутри «карманов»;
- присутствие областей, где не происходит образования ни «карманов», ни МКМ.

АНАЛИЗ МОДЕЛИ

Результаты моделирования анализировали при использовании экспериментальных данных по исследованию структуры топлива и процесса агломерации.

Структуру СТРТ исследовали посредством изучения шлифов топлив с привлечением методов стереологии; методика исследования описана в работе [3]. В результате получена функция распределения «карманов» по размерам. Сопоставление характеристик этой

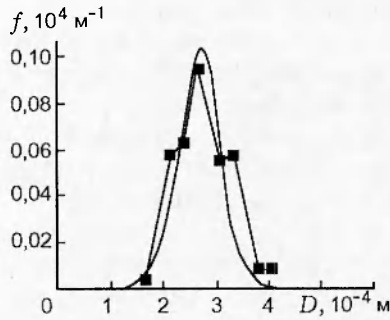


Рис. 3. Функция плотности распределения «карманов» по размерам:

сплошная линия — результаты моделирования, точки — эксперимент

функции с расчетными значениями обеспечило определение численных значений коэффициентов k_1, k_2, k_3, k_4 и позволило оценивать качество моделирования. Значения коэффициентов находили с помощью оптимизационной процедуры, в рамках которой коэффициенты выступали в качестве варьируемых параметров, а целевой функцией являлось рассогласование между характерными размерами «карманов», определенными при анализе шлифов и при моделировании структуры топлива. С использованием информации о четырех топливных композициях относительная величина рассогласования в точке экстремума не превышает 15%, что дает основание говорить о достаточно хорошем воспроизведении функции распределения «карманов» по размерам (рис. 3). Получены следующие значения коэффициентов: $k_1 = 0,5$; $k_2 = 2,0$; $k_3 = 0,27$; $k_4 = 4,7$.

Для оценки точности определения количества «карманов» уместно сопоставить расчетные значения объемной доли «карманов» g_k и параметра Z_m^a для топлив с различной дисперсностью окислителя. Параметр Z_m^a определяет массовую долю исходного металлического горючего, входящего в агломераты у поверхности горящего топлива, в составе как металла, так и оксида, т. е. характеризует степень вовлеченности этого горючего в агломерационный процесс [2]. Для проведения анализа были использованы экспериментальные данные, полученные при исследовании горения топлив на основе перхлората аммония (ПХА) различной дисперсности. Параметры, характеризующие состав топлив, представлены в табл. 1–4.

В табл. 5 приведены экспериментально определенные характеристики процесса агло-

Таблица 1
Химический состав модельных топливных композиций

Компонент	Массовая доля
Алюминий	0,24
ПХА	0,64
Связующее	0,116
Добавки	0,004

Таблица 2
Распределение частиц порошка алюминия по фракциям

Фракция, мкм	Массовая доля
0–10	0,67
10–20	0,16
20–30	0,09
30–50	0,08

Таблица 3
Фракции ПХА

Фракция	Размер частиц, мкм
1	< 1
2	< 50
3	160–315
4	400–600

Таблица 4
Соотношение фракций окислителя в модельных топливных композициях

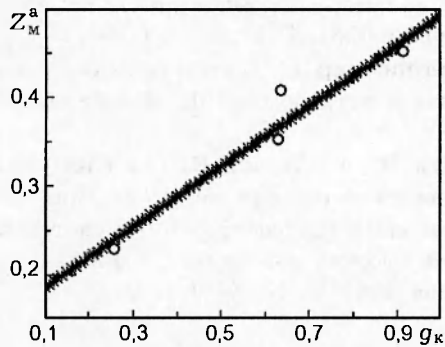
Состав	Фракция ПХА	Соотношение фракций
1	1, 2	50/50
2	2	100
3	2, 3	40/60
4	3	100
5	4	100

Таблица 5
Характеристики процесса агломерации и результаты моделирования структуры

Состав	Z_m^a	d_{43} , мкм	g_k	d_{43}^k , мкм
1	0,335	107	*	*
2	0,230	68	0,26	145
3	0,350	98	0,63	427
4	0,409	141	0,64	434
5	0,452	504	0,92	632

Примечание. * — в топливе фиксируются области, в которых отсутствуют «карманы» и МКМ.

мерации: Z_m^a и d_{43} (среднемассовый размер агломератов) при горении различных составов

Рис. 4. Зависимость Z_m^a от g_k

топлива при низком давлении $p = 1,0$ МПа (область низких давлений по терминологии работы [8]), при котором процессы в газовой фазе горящего топлива меньше влияют на величину Z_m^a , а также g_k и d_{13}^k (среднемассовый размер «карманов»), найденные из анализа модели структуры. Экспериментальные данные о процессе агломерации получены при исследовании по методике [2, 4] конденсированных продуктов сгорания, отбираемых у поверхности горящего топлива.

Для составов 2–5 значение Z_m^a монотонно возрастает при увеличении g_k , при этом зависимость $Z_m^a(g_k)$ близка к линейной (рис. 4). Если учесть, что образование агломератов происходит только в пределах «карманов», значения Z_m^a и g_k должны быть равными. Полученное превышение g_k в сравнении с Z_m^a достаточно естественно, если учесть, что на значение Z_m^a влияет газофазное горение агломерирующего металлического горючего в поверхностном слое топлива, в результате которого образуются частицы высокодисперсного оксида. Данное явление отражает реальность пребывания металла в каркасном слое [2, 4, 8]. Можно предположить, что по мере укрупнения частиц (увеличении времени пребывания частиц в каркасном слое) возрастает и доля металла, сгорающего в газофазном режиме, а следовательно, и различие между Z_m^a и g_k (см. табл. 5, рис. 4). В целом следует признать, что для указанных составов разработанная модель обеспечивает достаточно корректное прогнозирование количества «карманов».

Сопоставление параметров дисперсности «карманов» и агломератов позволяет считать «карманный» и «докарманный» механизмы агломерации наиболее вероятными при рассматриваемом давлении.

Применительно к составу 1 можно говорить о ситуации, когда выполняется условие $l_{ji} > k_4 d_j$, что обусловлено сравнительно высокой дисперсностью частиц окислителя (размер большинства этих частиц меньше d^*). В результате этого нарушаются закономерности формирования структуры, а следовательно, и вовлеченности металлического горючего в агломерационный процесс при изменении размера частиц окислителя. Эта ситуация может служить иллюстрацией предельного случая, когда не образуется ни одного «кармана», и смешевое топливо приобретает свойства гомогенного, а величина Z_m^a приобретает некоторое значение, не связанное со структурой топлива.

Таким образом, созданная модель обеспечивает удовлетворительное прогнозирование некоторых характеристик смесевых топлив, отличающихся ярко выраженной гетерогенностью. Очевидна целесообразность использования данной модели при моделировании агломерационного процесса. Она позволяет определять степень участия металлического горючего в агломерации (параметр g_k), а также получить информацию для оценки дисперсности агломератов (данные о функции распределения «карманов» по размерам). Кроме того, ее применение возможно при решении задачи моделирования скорости горения топлива.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Разработана математическая модель структуры СТРТ, обеспечивающая определение параметров структурных образований — «карманов» и «межкарманных мостиков».
2. Показана возможность использования модели для прогнозирования характеристик агломерационного процесса.

ЛИТЕРАТУРА

1. Григорьев В. Г., Зарко В. Е., Карасев В. В. Агломерация алюминия при горении модельных смесей на основе ПХА // Тез. докл. 13-й Всесоюз. конф. по вопросам испарения, горения и газовой динамики дисперсных систем. Одесса: ОГУ им. И. И. Мечникова, 1979. С. 42.
2. Бабук В. А. Горение металлического горючего в составе ракетных топлив // Внутрикамерные процессы, горение и газовая динамика дисперсных систем. Междунар. школа-семинар: Сб. лекций. СПб, 1996. С. 74–84.
3. Бабук В. А., Белов В. П., Ходосов В. В. и др. Исследование агломерации частиц алюми-

- ния при горении в составе смесевых конденсированных систем // Физика горения и взрыва. 1985. Т. 21, № 3. С. 20–25.
4. **Бабук В. А., Белов В. П., Ходосов В. В. и др.** Исследование структуры агломератов при горении алюминизированных смесевых конденсированных систем // Физика горения и взрыва. 1988. Т. 24, № 5. С. 52–57.
 5. **Cohen N. S.** A pocket model for aluminum agglomeration in composite propellants // AIAA Paper. N 81-1585. 1981.
 6. **Григорьев В. Г., Куценогий К. П., Зарко В. Е.** Модель агломерации алюминия при горении смесевых композиций // Физика горения и взрыва. 1981. Т. 17, № 4. С. 9–17.
 7. **Чандрасекар С.** Стохастические проблемы в физике и астрономии. М.: Изд-во иностр. лит., 1959.
 8. **Бабук В. А., Белов В. П., Шелухин Г. Г.** Особенности горения частиц алюминия в составе смесевых конденсированных систем при низких и высоких давлениях // Физика горения и взрыва. 1981. Т. 17, № 3. С. 2–31.

*Поступила в редакцию 10/II 1998 г.,
в окончательном варианте — 21/VII 1998 г.*
