

УДК 544.452

РАСЧЕТ ХАРАКТЕРИСТИК АГЛОМЕРАТОВ ПРИ ГОРЕНИИ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ СМЕСЕВЫХ ТВЕРДЫХ ТОПЛИВ

В. А. Бабук, А. Н. Ивоненко, А. А. Низяев

Балтийский государственный технический университет «ВОЕНМЕХ» им. Д. Ф. Устинова
190005 Санкт-Петербург, babuk@peterlink.ru

Рассмотрена проблема расчета характеристик агломератов, образующихся при горении высокоэнергетических смесевых твердых топлив. Показано, что разработанные авторами математические модели обеспечивают для топлив различного состава оценку не только дисперсности агломератов, но и их количества, химического состава и структуры. Определены правила (алгоритм) использования разработанных моделей применительно к широкому кругу топливных составов. Проведен анализ результатов моделирования для ряда рецептов топлива на базе различных компонентов.

Ключевые слова: агломерация, горение, топливо, конденсированные продукты, моделирование.

DOI 10.15372/FGV20150505

ВВЕДЕНИЕ

Агломерация — явление, при котором в поверхностном слое горящего твердого топлива формируются агломераты конденсированных продуктов, превосходящие по размерам исходные частицы металлического горючего. Применительно к высокоэнергетическим алюминизированным смесевым топливам агломераты состоят из капель металла и оксида, а также могут включать газовые полости.

Для описания процесса агломерации при горении металлизированных топлив, как правило, используются параметры дисперсности. Однако очевидно, что количество агломератов (массовая доля в составе потока продуктов сгорания), их структура (форма и взаимное расположение капель металла, оксида и газовых полостей), а также химический состав не менее важны для реализации внутрикамерных процессов, связанных с наличием конденсированных продуктов горения, которые оказывают значимое влияние на функционирование энергетической установки. К ним относятся шлакообразование, воздействие конденсированных продуктов сгорания на элементы конструкции, потери удельного импульса.

Агломерация является частью общего процесса горения, включающего в себя множество разнообразных физико-химических превращений. Адекватное моделирование этого процес-

са с учетом особенностей горения различных типов топлива является чрезвычайно сложной задачей.

Настоящая работа посвящена проблеме расчета характеристик агломератов, формирующихся при горении алюминизированных смесевых топлив с полимерным связующим. Рассмотрим в сжатой форме современные подходы к моделированию процесса агломерации. Условно их можно разделить на три группы.

Во-первых, это подходы, которые базируются на использовании «карманной» модели [1]. В рамках этой модели исходное металлическое горючее в пределах некоторого структурного образования — «кармана» образует одну частицу. Если в работах [2–4] «карманы» формируются частицами окислителя (традиционный подход), то в работе [5] «карманами» называют скопления исходных частиц металла в топливе. В работах [6, 7] авторы отказались от понятия «карман» и использовали при моделировании агломерации критерий близости исходных частиц металла. В рамках данного подхода дисперсность агломератов определяется только структурой топлива.

Во-вторых, это подходы, которые базируются на рассмотрении условий отрыва агломерирующих частиц от поверхности горящего топлива [8–12].

В-третьих, это подходы, которые сочетают в себе две первые группы. В их рамках рассматривается влияние на агломерацию как

структуры топлива, так и условий его горения [13–19].

Упомянутые модели обеспечивают определение характерных размеров агломератов, некоторые из них позволяют отыскивать и функции распределения агломератов по размерам. Модели из работ [5, 16] дают, кроме того, возможность определить такую важную характеристику агломерации, как доля металла, участвующего в этом процессе.

В рассмотренных работах сравнение расчетных и экспериментальных данных проводилось, как правило, для узкого круга топлив на основе ПХА/НТРВ/Al либо не проводилось совсем. В целом вопрос адекватности существующих моделей остается открытым.

В работе [19] представлены принципы моделирования, согласно которым определение совокупности характеристик агломератов возможно в результате синтеза моделей различных явлений, имеющих место при агломерации. На основе разработанного алгоритма для одного из классов топлива (в зависимости от условий горения) получены следующие характеристики агломератов: функция распределения по размерам; доля металлического горючего, формирующая агломераты; параметры химического состава и структуры агломератов.

Проблема использования разработанных к настоящему времени моделей для определения характеристик агломератов применительно к топливам различного состава обусловлена разнообразием проявлений процессов горения и агломерации в зависимости от типа, дисперсности компонентов топлива и условий его горения. Решению данной проблемы и посвящена настоящая работа. В настоящей работе решаются следующие задачи: разработка правил (алгоритма) использования моделей отдельных явлений в зависимости от рецептуры топлива; синтез моделей согласно разработанным правилам применительно к ряду ситуаций, связанных с использованием топлив различного состава, горящих в различных условиях; сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными.

Для анализа разработанных моделей на основе классификации топлив, выполненной в работе [20], выбран ряд топливных композиций, отличающихся свойствами поверхностного слоя и характеристиками формирующихся агломератов.

1. ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ОПИСАНИЯ АГЛОМЕРАЦИИ

Характеристики формирующихся агломератов связаны со свойствами поверхностного слоя [20]. Принципиальное значение здесь имеют следующие явления:

- образование каркасного слоя (КС);
- сохранение индивидуальности частиц окислителя в поверхностном слое (под потерей индивидуальности понимается образование сплошного слоя, обусловленное плавлением вещества частиц, его растеканием и контактом веществ отдельных частиц);
- воспламенение частиц металла и разложение углеродистых элементов.

Наличие КС является неременным условием агломерационного процесса при горении алюминизированных твердых топлив. Доля композиции связующее — металлическое горючее, формирующая КС, определяет и долю металлического горючего, участвующего в агломерации. Показано [20–22], что формирование КС происходит только в случае образования углеродистого каркаса. Формирование этой структуры, в свою очередь, связано с условиями разложения и свойствами полимерного связующего, например с термостойкостью. Полнота превращений при разложении возрастает, т. е. уменьшается вероятность образования углеродистого каркаса по мере увеличения концентрации окисляющих веществ в области разложения. Эти вещества могут как содержаться в связующем (активное связующее), так и диффундировать из области разложения частиц крупной фракции окислителя. Итак, можно назвать факторы, значительно уменьшающие вероятность появления углеродистого каркаса, а следовательно, и каркасного слоя: использование активного связующего (на базе пластификаторов с большим содержанием кислорода, например нитроэфиров) [23, 24]; разложение связующего в узких прослойках между двумя крупными частицами окислителя. Такие прослойки получили название «межкарманных мостиков» (МКМ) [21]. МКМ — это часть композиции связующее — металл, которая находится между двумя частицами окислителя, формирующими «карман». Таким образом, МКМ ограничен поверхностями частиц окислителя и условными поверхностями «карманов». Введение понятия МКМ обусловлено стремлением выделить структурные образования, в пределах которых не обра-

зуется КС, а следовательно, и агломераты.

При горении топлива частицы окислителя могут утрачивать свою индивидуальность в поверхностном слое. Например, это имеет место при использовании нитрата аммония, температура плавления (443 К) которого ниже температуры начала разложения в твердой фазе перхлората аммония (>620 К) [25]. Аналогичная ситуация наблюдается и для фазостабилизированного нитрата аммония (ФСНА), полученного кинетическим методом фазостабилизации [26]. В этом случае в нижней части каркасного слоя образуется расплавленный слой окислителя, т. е. исчезает дисперсный окислитель в поверхностном слое [26, 27]. Реализация подобной ситуации приводит к тому, что разложение связующего в различных структурных образованиях топлива происходит примерно в одинаковых условиях и прослойки между частицами окислителя утрачивают свойства МКМ, т. е. в пределах МКМ становится возможным появление КС.

Отличие в условиях воспламенения металлического горючего и разложения углеродистых элементов приводит к вариации свойств КС и реализации различных механизмов агломерации. Различия определяются соотношением между температурой воспламенения металлического горючего (T_{ign}^M) и температурой разложения углеродистых элементов (T_d^C). Если $T_{ign}^M < T_d^C$, то топливо относят к классу А, в противном случае — к классу В. Особенности горения этих топлив, включая процесс агломерации, рассмотрены в ряде работ [20, 21 и др.].

При использовании понятия «карман» в работах [21, 22] были определены следующие механизмы формирования агломератов: карманный, межкарманный и докарманный. В случае карманного механизма агломерат формируется в результате слияния конденсированных продуктов в пределах одного «кармана». При реализации межкарманного механизма агломерат является результатом накопления конденсированных продуктов нескольких «карманов». При реализации докарманного механизма в «кармане» формируется более одного агломерата.

Неотъемлемой частью агломерации выступает процесс эволюции агломерирующих частиц в подповерхностном слое и на поверхности горящего топлива. Последний процесс осуществляется на завершающем этапе формиро-

вания агломератов и изучен наиболее полно.

Эволюция конденсированных продуктов в подповерхностном слое обусловлена прежде всего процессом гетерогенного горения металла, который распределен в порах КС (топливо класса А). Благодаря этому процессу в составе формирующихся агломерирующих частиц накапливается жидкий оксид [28].

Процесс эволюции на поверхности горящего топлива характеризуется появлением индивидуальных агломерирующих частиц, форма которых близка к сферической, и включает в себя совокупность следующих физико-химических превращений [19]: горение металла в газофазном режиме с образованием частиц высокодисперсного оксида; химическое взаимодействие конденсированных металла и оксида с образованием газообразных продуктов; изменение структуры частиц (изменение взаимного расположения капель металла и оксида, слияние этих капель, рост и схлопывание газовых полостей); слияние соседних частиц и их подпитка металлом и оксидом, содержащимися в КС.

Таким образом, за время пребывания агломерирующей частицы на поверхности и в подповерхностном слое горящего топлива происходит изменение масс металла и оксида, входящих в состав частицы. В описании данного явления лежит ключ к определению параметров химического состава и структуры формирующихся агломератов.

Обобщение значительного объема экспериментального материала, накопленного в БГТУ «Военмех», позволяет выделить по крайней мере четыре типа смесевых твердых топлив, отличающихся свойствами поверхностного слоя и закономерностями формирования агломератов [20]:

- 1) топлива на основе инертного связующего, микродисперсного алюминия и окислителей перхлорат аммония (ПХА), нитрамина;
- 2) топлива на основе активного связующего, микродисперсного алюминия и окислителей ПХА, нитрамина;
- 3) топлива на основе инертного связующего, микродисперсного алюминия и смеси окислителей ПХА и нитрат аммония;
- 4) топлива на основе инертного связующего и нанодисперсного алюминия и окислителей различного вида или микродисперсного алюминия и динитрамида аммония (АДНА).

В табл. 1 приведены индивидуальные осо-

Таблица 1

Механизмы агломерации при горении топлив различных типов

Топлива класса В 1-го типа	Область низкого давления ($p \lesssim 1.0$ МПа) Карманный механизм агломерации ²
	Область высокого давления Докарманный или межкарманный механизм агломерации ²
Топлива класса В 2-го типа	Область низкого давления ($p \lesssim 1.0$ МПа) Докарманный механизм агломерации ²
	Область высокого давления ($p \gtrsim 4.0$ МПа) Агломерация практически отсутствует
Топлива класса А 3-го типа ¹	Область низкого давления ($p \lesssim 4.0$ МПа) Межкарманный механизм агломерации ²
	Область высокого давления ($p \gtrsim 4.0$ МПа) Карманный механизм агломерации ²
Топлива класса А 4-го типа	Область низкого давления ³ Межкарманный механизм агломерации ²
	Область высокого давления ³ Карманный механизм агломерации ²

¹В формировании «карманов» участвуют только частицы ПХА и нитрата аммония, модифицированного при использовании термодинамического метода; ²превалирующий механизм агломерации; ³граница областей высокого и низкого давления зависит от скорости горения топлива.

бенности агломерации для указанных типов топлива.

Подчеркнем, что под активным связующим понимается полимер, полностью пластифицированный активным растворителем. Снижение активности пластификатора может привести к изменению закономерностей агломерации. В этой связи показательны результаты работ [24, 29]. Если в [29] зафиксирован сценарий сильной агломерации, то в [24] в области высокого давления — сценарий слабой агломерации (терминология авторов). Последний результат близок к результатам нашей работы [23].

Для рассмотренных в настоящей статье типов топлива определена принадлежность к тому или иному классу, выделен превалирующий механизм образования агломератов, указан тип частиц окислителя, формирующих «карманы» и МКМ.

2. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И РАСЧЕТНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК АГЛОМЕРАТОВ

В общем случае в результате моделирования процесса агломерации должны быть определены следующие характеристики: $f_m(D)$ —

массовая функция плотности распределения агломератов по размерам; D_{43} — среднемассовый размер агломератов, мкм; Z_m^a — массовая доля исходного металлического горючего, формирующего агломераты; η — массовая доля оксида в агломератах; параметры структуры агломератов (ПСА), которые полностью описывают размеры, форму и взаимное расположение частиц металла и оксида в составе агломерата, а также газовых пузырей в случае их наличия.

Ниже представлено краткое описание ранее разработанных авторами моделей, которые в дальнейшем используются для определения характеристик агломератов.

2.1. Модель структуры смесового твердого топлива

В зависимости от содержания, дисперсности и плотности компонентов модель структуры топлива [30] позволяет определять характеристики «карманов» и МКМ, такие как функция распределения «карманов» по размерам и их характерные размеры; массовая доля «карманов» в составе композиции связующее — металл; условные функции распределения частиц окислителя по размерам, формирующих «кар-

маны» определенного размера (диапазона размеров).

Для определения характеристик «карманов» и МКМ данная модель подразумевает анализ локального окружения большого числа частиц окислителя без необходимости воспроизведения трехмерной структуры топлива. Используется метод Монте-Карло для моделирования размеров частиц окислителя в соответствии с заданным законом распределения этих частиц по размерам, а также расстояний между ними при использовании модифицированного закона Пуассона. По этому закону распределяется количество центров частиц в топливе. Модификация закона заключается в перемещении центров частиц в случае пересечения их поверхностей. Идентификация «карманов» и МКМ осуществляется согласно эмпирическим выражениям, полученным на основе анализа шлифов топлив.

Следует отметить, что используемые при моделировании подходы (они описаны в работе [30]) позволяют учесть особенности плотных и неплотных упаковок частиц окислителя, а также наличие мелких «карманов» и МКМ в составе более крупных.

Данная модель является базовой при моделировании процесса агломерации. При реализации карманного механизма она может быть использована для определения функции распределения агломератов по размерам. Кроме того, значение доли «карманов» в составе топлива с учетом поправки на эволюцию агломерирующих частиц обеспечивает в ряде случаев оценку содержания агломератов в составе потока продуктов сгорания.

2.2. Модель среды, окружающей агломерирующую частицу

Для среды, в которой находятся агломерирующие частицы, характерно неравновесное состояние, следствием чего является наличие полей потенциалов взаимодействия (температуры, концентрации компонентов и т. д.).

Для оценки параметров данной среды (окислительного потенциала, температуры, теплоемкости, вязкости, теплопроводности) используется схематизация, описанная в [19]. В ее основе лежит решение задачи Бурке — Шумана [31]. Рассматриваются три зоны химического взаимодействия (пламени): одна из них связана с горением окислителя, другая — связующего (совместно с мелкой фракцией окисли-

теля), третья — с взаимодействием продуктов превращений окислителя и связующего. Для каждого пламени из геометрических соображений (используются данные анализа структуры топлива) находится состав условного топлива с учетом расходования части окислителя на сгорание металла в пределах КС. В рамках равновесной термодинамики определяются состав продуктов химического взаимодействия и температура в этих зонах. Задается пространственное распределение потенциалов взаимодействия, и отыскиваются коэффициенты переноса газовой среды в соответствии с данными работы [32]. Использование модели предполагает наличие информации о размерах расчетной области («карманов», МКМ, частиц окислителя), типе окислителя и связующего, законе скорости горения топлива, а также о доле металла, сгорающего в КС в гетерогенном режиме.

Получаемые в результате моделирования параметры среды (окислительный потенциал, температура, параметры вязкости и теплопроводности, теплоемкость, скорость потока) используются в модели эволюции агломерирующих частиц на поверхности горящего топлива.

2.3. Модель эволюции агломерирующих частиц на поверхности горящего топлива

Основные положения модели изложены в работе [19]. Модель описывает изменение состава и структуры индивидуальных агломерирующих частиц за время их пребывания на поверхности горящего топлива. Модель включает в себя физическое и математическое описание ряда явлений, реализуемых в ходе эволюции: газофазное горение металла, химическое взаимодействие между металлом и оксидом с образованием газообразных продуктов, рост и схлопывание газовых полостей, изменение структуры агломерирующих частиц.

Установлено, что указанные явления слабо влияют на дисперсность агломератов. При этом изменяются преимущественно массово-химические характеристики частиц (параметров Z_m^a и η), а также их структура.

Время эволюции определяется временем пребывания агломерирующих частиц на поверхности топлива. При карманном механизме агломерации по окончании выработки «кармана» конденсированные продукты формируют на поверхности горения топлива индивидуальные агломерирующие частицы, форма которых

близка к сферической. Определить время пребывания агломерирующих частиц в таком состоянии расчетным путем проблематично. Для его определения (оценки) были использованы результаты экспериментального исследования горения топлив различных типов в условиях действия отрывающих перегрузок [33]. С ростом перегрузки сокращается время пребывания агломерирующих частиц на поверхности горящего топлива, следовательно, уменьшается роль их эволюции. При превышении некоторого значения перегрузки (>30) дальнейшее ее увеличение перестает оказывать влияние на величину Z_m^a , что считается следствием быстрого отрыва агломерирующих частиц от поверхности топлива и, следовательно, незначительного влияния их эволюции на характеристики формирующихся агломератов. Наличие информации об изменении массово-химических характеристик агломерирующих частиц и их дисперсности позволило в рамках рассматриваемой модели оценить время эволюции частиц различного размера.

2.4. Алгоритм использования моделей

Совокупность описанных выше моделей обеспечивает оценку характеристик агломератов. Рассмотрим правила (алгоритм) использования математических моделей (рис. 1).

I. Использование разработанных моделей возможно, когда наличие «карманов» и МКМ в составе исходного топлива обеспечивает формирование КС в пределах только «карманов». Этому условию не соответствуют топлива второй группы при высоком давлении (подавление формирования КС в пределах «карманов»), а

также топлива на основе «чистого» нитрата аммония.

II. При моделировании структуры топлива учитываются только частицы окислителя, которые не утрачивают своей индивидуальности в поверхностном слое топлива. В противном случае их нельзя рассматривать как частицы, формирующие «карманы» и МКМ. Наличие функции распределения «карманов» по размерам позволяет определять дисперсность агломератов, образующихся по карманному механизму. В случае реализации других механизмов агломерации расчетные значения оказываются либо заниженными, либо завышенными относительно истинной дисперсности агломератов, формирующихся по межкарманному или докарманному механизму, т. е. речь может идти об оценке уровня дисперсности агломератов. В результате моделирования структуры вычисляется также доля Z_m^p исходного металлического горючего, находящегося в «карманах», которая соответствует исходной доле металла Z_m^a до начала эволюции агломерирующих частиц на поверхности горящего топлива.

III. Непременным условием применения модели эволюции является предварительный анализ модели свойств газовой фазы, окружающей агломерирующие частицы. Такой анализ возможен при наличии информации о структуре топлива. В зависимости от механизма агломерации — карманного, межкарманного, докарманного — условия среды отличаются. Если в первом случае условия соответствуют завершению выработки «кармана», то во втором и третьем случаях агломерирующие частицы располагаются на поверхности «кармана» в процессе его выработки.

IV. Получение информации о структуре топлива и свойствах газовой фазы позволяет моделировать эволюцию агломерирующих частиц и оценивать параметры Z_m^a и η , а также параметры структуры агломератов.

Существенной проблемой моделирования является необходимость информации о соотношении металл — оксид в составе КС. В настоящее время отсутствует адекватное моделирование процесса горения металлического горючего в каркасном слое. Для решения указанной проблемы, как и при определении времени эволюции агломерирующих частиц на поверхности топлива при карманном механизме, были использованы экспериментальные данные по горению топлив в условиях действия отрывающих

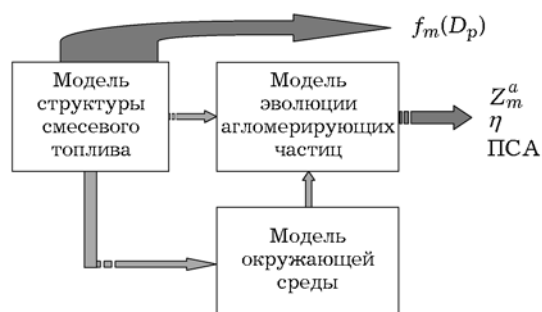


Рис. 1. Схема синтеза моделей (D_p — диаметр агломератов, образующихся по карманному механизму)

Таблица 2

Состав топлив первого типа

Номер состава	Массовая доля дисперсных компонентов, %			
	Al	ПХА		
		10 ÷ 50 мкм	160 ÷ 315 мкм	400 ÷ 600 мкм
I-1	24	64	—	—
I-2	24	25.6	38.4	—
I-3	24	—	64	—
I-4	24	—	—	64

Таблица 3

Результаты моделирования и экспериментов для топлив первого типа

Номер состава	D_{43} , мкм		Z_m^a		η	
	эксперимент	расчет	эксперимент	расчет	эксперимент	расчет
I-1	68 ± 10	23	0.23 ± 0.02	0.25	0.16 ± 0.02	0.15
I-2	98 ± 15	78	0.35 ± 0.02	0.35	0.21 ± 0.02	0.22
I-3	141 ± 21	126	0.41 ± 0.03	0.39	0.21 ± 0.03	0.25
I-4	504 ± 25	275	0.45 ± 0.03	0.42	0.23 ± 0.03	0.25

щих перегрузок [33]. Считалось, что при значительных перегрузках (>30), когда процесс эволюции агломерирующих частиц на поверхности практически не влияет на характеристики агломератов, химический состав формирующихся агломератов соответствует соотношению металл — оксид в КС. Эти характеристики были определены для всех рассматриваемых типов топлива.

Отметим, что совокупность указанных моделей не обеспечивает прогнозирования конкретного механизма агломерации (карманного, межкарманного или докарманного). Однако наличие экспериментальных данных о процессе агломерации применительно к топливам различного типа (см. табл. 1) позволяет применять разработанные подходы для полной или частичной оценки характеристик этого процесса в соответствии с обсуждаемыми правилами использования моделей.

3. СОПОСТАВЛЕНИЕ РАСЧЕТНЫХ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

Ниже приведено сравнение расчетных и экспериментальных данных для указанных че-

тырех типов топлива. Все результаты получены при нулевых отрывающих перегрузках. Проанализированы особенности данных типов топлива применительно к реализации процесса агломерации.

3.1. Топлива первого типа

Были рассмотрены экспериментальные результаты для области низкого давления [22], которая соответствует условиям формирования агломератов по карманному механизму (см. табл. 1). Анализируемые составы отличаются только дисперсностью окислителя (ПХА) (табл. 2). Расчетные и экспериментальные данные, полученные при давлении $p = 1.0$ МПа, приведены в табл. 3.

В целом можно говорить о хорошем соответствии экспериментальных и расчетных результатов. Исключением являются данные по дисперсности агломератов для составов I-1 и I-4. Расчетные значения D_{43} занижены по сравнению с экспериментальными. Отметим, что в работе [22] для состава I-4 зафиксирована существенная роль межкарманного слияния при образовании агломератов, вследствие чего по-

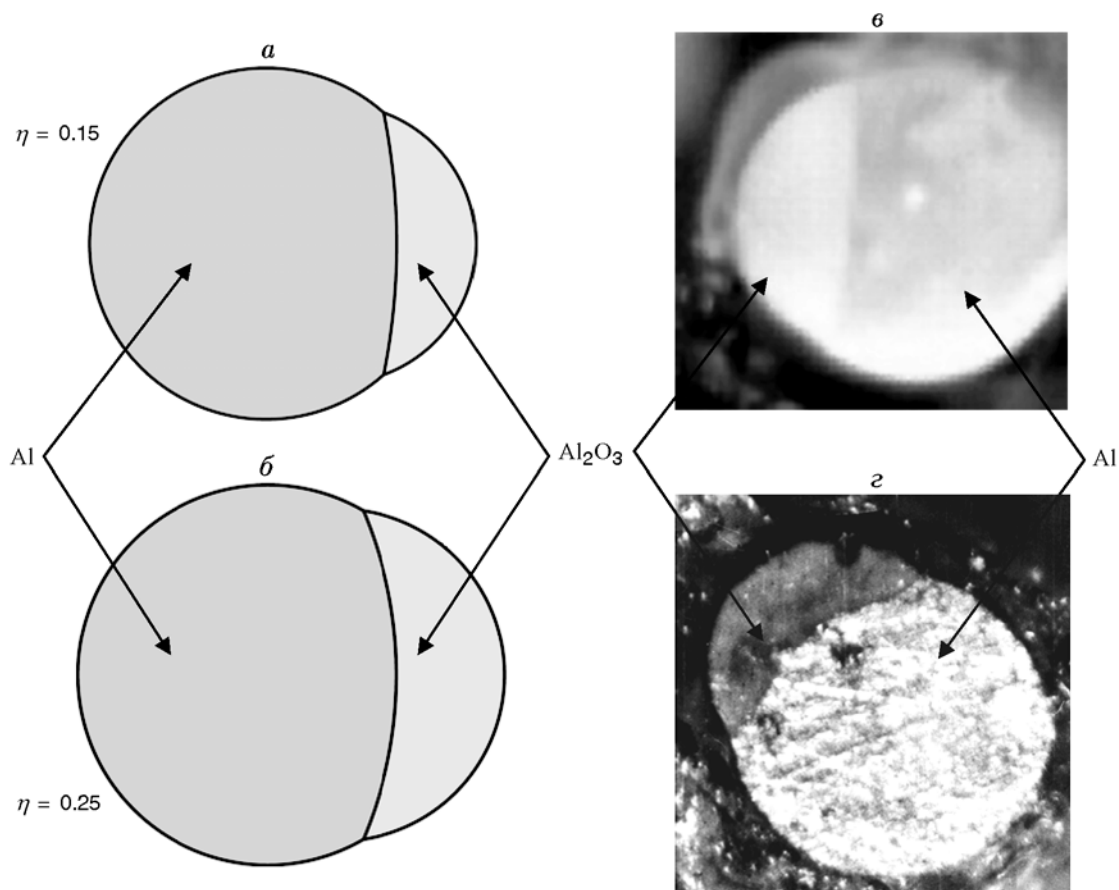


Рис. 2. Структура агломератов:

a, б — результаты моделирования, меридиональное сечение агломерата, *в* — агломерат вблизи поверхности горящего топлива, *г* — шлиф агломерата [21]

являются моды в области больших размеров на экспериментально полученной функции распределения $f_m(D)$.

По типу структуры агломераты данного вида топлив — это частицы металла с нашлепкой оксида (оксидным колпачком, cap oxide). Количественное сопоставление параметров структуры не проводилось. Однако можно говорить о хорошем качественном соответствии результатов моделирования и экспериментальных данных (рис. 2).

3.2. Топлива второго типа

Отличительной особенностью топлив второго типа является использование активно связующего со значительным содержанием окисляющих компонентов, а также применение нитраминов. Составы рассмотренных топлив представлены в табл. 4 [23].

Таблица 4
Состав топлив второго типа

Номер состава	Массовая доля дисперсных компонентов, %		
	Al	ПХА 10 ÷ 50 мкм	Октоген 10 ÷ 700 мкм
П-1	19	14	50.2
П-2	20.3	14	48.9
П-3	19	—	62.7
П-4	19	11	52.2

Агломерация осуществляется преимущественно в области низкого давления, при этом превалирует докарманный механизм (см. табл. 1). В области высокого давления ($p > 4.0$ МПа) доля агломератов существенно

Таблица 5
Результаты моделирования и экспериментов
для топлив второго типа

Номер состава	Z_m^a		η	
	эксперимент	расчет	эксперимент	расчет
II-1	0.45 ± 0.04	0.46	0.33 ± 0.06	0.32
II-2	0.47 ± 0.03	0.50	0.29 ± 0.04	0.30
II-3	0.33 ± 0.04	0.29	0.35 ± 0.09	0.45
II-4	0.45 ± 0.03	0.48	0.33 ± 0.06	0.31

уменьшается: значение параметра Z_m^a падает до нескольких процентов [23, 24].

С учетом роли докарманного механизма агломерации в данном случае рассматриваются только экспериментальные и расчетные данные, полученные при $p = 0.8$ МПа (табл. 5). Следует отметить, что доминирующая роль докарманного механизма вызывает проблемы как при определении размеров агломерирующих частиц, так и при описании их эволюции.

По сравнению с карманным механизмом уменьшение размеров агломерирующих частиц при реализации докарманного механизма агломерации сопровождается сокращением времени их пребывания на верхней поверхности КС. Принимая это во внимание, предположим, что параметры Z_m^a и η одинаково изменяются за время эволюции как при карманном, так и при докарманном механизме агломерации.

Данные табл. 5 свидетельствуют о хорошем соответствии расчетных и экспериментальных результатов. Дисперсность агломератов, образующихся по карманному механизму, ниже по сравнению с фиксируемой экспериментально. Например, для состава II-2 при расчетном значении среднемассового размера «карманов» 496 мкм и соответствующем ему среднемассовом размере агломератов 347 мкм экспериментальное значение среднемассового размера агломератов составляет 230 ± 30 мкм.

3.3. Топлива третьего типа

Сравнение расчетных и экспериментальных данных проводилось для области высокого давления ($p = 6.0$ МПа), в которой преимущественно реализуется карманный механизм агломерации (см. табл. 1). Состав рассмотренных топлив [26], а также экспериментальные и расчетные данные представлены в табл. 6, 7.

При проведении расчетов принято, что для состава III-1 в формировании «карманов» участвуют все частицы окислителя, а для состава III-2 — только частицы ПХА. Такой подход обусловлен результатами работы [26], в которой показано, что поведение ФСНА в поверхностном слое зависит от метода фазовой стабилизации. Частицы окислителя ФСНА-Т, полученного термодинамическим методом, сохраняют свою индивидуальность в поверхностном слое, в то время как частицы ФСНА-К, полученные кинетическим методом, при сравнительно низкой температуре формируют сплошной расплавленный слой в нижней части карманного слоя, как в ситуации с «чистым» нитратом аммония [27]. Утрата индивидуальности частицами окислителя ФСНА-К приводит к тому, что прослойки между ними перестают выполнять функции МКМ, т. е. КС образуется в

Таблица 6
Состав топлив третьего типа

Номер состава	Массовая доля дисперсных компонентов, %			
	Al	ПХА		ФСНА
		10 ÷ 50 мкм	160 ÷ 315 мкм	10 ÷ 600 мкм
III-1	20	5	—	63.3*
III-2	20.5	—	20	48.1**

*Получен термодинамическим методом (ФСНА-Т).

**Получен кинетическим методом (ФСНА-К).

Таблица 7
Результаты моделирования и экспериментов для топлив третьего типа

Номер состава	D_{43} , мкм		Z_m^a		η	
	эксперимент	расчет	эксперимент	расчет	эксперимент	расчет
III-1	184 ± 11	229	0.51 ± 0.05	0.41	0.63 ± 0.04	0.75
III-2	396 ± 52	426	0.71 ± 0.06	0.71	0.67 ± 0.04	0.65

том числе и в пределах узких прослоек между частицами окислителя. В этой ситуации в формировании «карманов» и МКМ участвуют только частицы ПХА.

Данное обстоятельство учитывается при моделировании структуры топлива. Частицы ФСНА-К не рассматриваются как частицы, формирующие «карманы». Тем не менее их наличие влияет на размещение частиц ПХА, что учитывается в модели структуры топлива при определении параметров, описывающих расположение соседних частиц ПХА.

Отметим, что для топлив третьего типа характерно повышенное содержание оксида в составе агломератов по сравнению с остальными типами топлива. Указанное обстоятельство является следствием, с одной стороны, возрастания доли металла, сгорающего в гетерогенном режиме в пределах КС, а с другой — увеличения времени пребывания агломерирующих частиц на верхней поверхности КС и соответствующего возрастания роли эволюции.

Если для состава III-2 расчетные значения искомых параметров находятся в пределах доверительных интервалов экспериментальных значений, то для состава III-1 расчетные и экспериментальные данные отличаются, но не более чем на 14 %.

3.4. Топлива четвертого типа

Сравнивались результаты, полученные при реализации преимущественно карманного механизма агломерации (область высокого давления, табл. 1). Состав рассмотренных топлив [28, 34], а также экспериментальные [28, 34] и расчетные данные при $p = 6.0$ МПа представлены в табл. 8, 9.

Из табл. 9 видно, что расчетные значения искомых параметров находятся в пределах либо весьма близки к границам доверительных интервалов, определенных экспериментально.

Таблица 8
Состав топлив четвертого типа

Номер состава	Массовая доля дисперсных компонентов, %		
	Al	ПХА 160 ÷ 315 мкм	АДНА 160 ÷ 210 мкм
IV-1	20	—	68
IV-2	8 + 9*	68.9	—

*Наноалюминий.

4. ОБСУЖДЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

В целом для всех искомых параметров можно говорить о хорошем соответствии расчетных и экспериментальных результатов. Для некоторых составов, при горении которых реализуется механизм агломерации, отличный от карманного (составы I-4 и II-1 ÷ II-4), возможна приближенная оценка параметров дисперсности агломератов, полученная на основе расчетной информации о распределении «карманов» по размерам. Отметим, что данная оценка не противоречит экспериментальным данным. Особое место занимают составы I-1 и III-1. Для состава I-1 расчетные и экспериментальные данные по дисперсности агломератов значительно различаются. Для понимания природы этого рассогласования необходимы дополнительные исследования составов на базе высокодисперсного окислителя (размер частиц менее 50 мкм). В случае состава III-1 имеются значимые (но не кардинальные) отличия расчетных и экспериментальных данных как по дисперсности агломератов, так и по доле металла, участвующего в формировании агломератов. Можно предположить, что расхождения связаны с излишней категоричностью утверждения о том, что все частицы окислителя ФСНА-Т сохраняют свою индивидуальность.

Таблица 9
Результаты моделирования и экспериментов для топлив четвертого типа

Номер состава	D_{43} , мкм		Z_m^a		η	
	эксперимент	расчет	эксперимент	расчет	эксперимент	расчет
IV-1	101 ± 16	85	0.45 ± 0.04	0.41	0.37 ± 0.04	0.39
IV-2	124 ± 18	103	0.48 ± 0.05	0.42	0.46 ± 0.04	0.41

дуальность в поверхностном слое. Если предположить, что некоторая доля частиц ФСНА-Т утрачивает индивидуальность, то это должно привести к возрастанию как размеров агломератов, так и параметра Z_m^a , а следовательно, и к лучшему соответствию расчетных и экспериментальных данных.

Следует подчеркнуть, что по степени соответствия экспериментальных и расчетных функций плотности распределения агломератов по размерам $f_m(D)$ можно судить либо о преимущественной реализации карманного механизма, либо о реализации иных (докарманного, межкарманного) механизмов агломерации (рис. 3).

В целом, мы полагаем, разработанные мо-

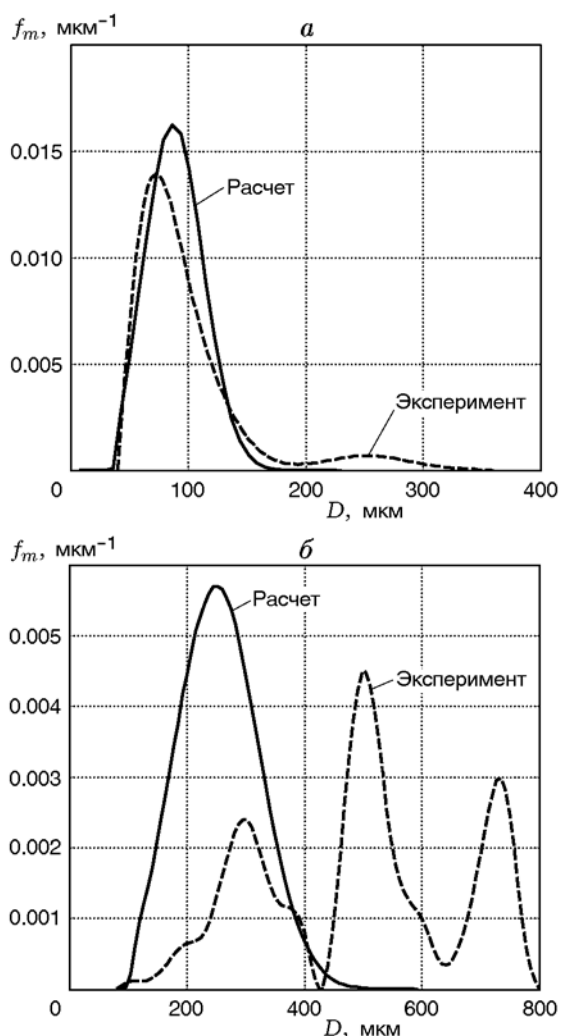


Рис. 3. Массовая функция плотности распределения агломератов по размерам:

a — состав IV-1, *б* — состав I-4

дели обеспечивают решение задачи оценки характеристик процесса агломерации. Следует подчеркнуть, что совокупность созданных моделей позволяет определять не только размеры формирующихся агломератов, но и их массово-химические характеристики и параметры структуры.

Кроме того, анализ результатов разработанных моделей для широкого круга топлив дает основание для вывода о правомерности принятой общей физической картины формирования конденсированных продуктов у поверхности горящего топлива.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе в рамках принятого подхода к моделированию агломерации, базирующегося на общих физических закономерностях формирования агломератов, но при этом являющегося индивидуальным для каждого типа топлив, показана возможность использования разработанных моделей для определения всей совокупности либо части характеристик процесса агломерации. Корректность разработанного описания и адекватность моделирования подтверждены сравнением с широким набором экспериментальных данных, полученных для различных типов топлива и условий их горения.

Совокупность разработанных моделей может быть использована для прогнозирования характеристик агломератов при исследовании новых топлив, если их можно отнести к одному из рассмотренных типов. Для топлив первого типа определение характеристик агломератов осуществляется в области низкого давления, т. е. вне области типичных рабочих давлений в энергетической установке. В этой связи возникает необходимость решения в дальнейшем задачи моделирования процесса агломерации для этих топлив в области высокого давления. Разработка адекватных моделей агломерации при реализации докарманного и межкарманного механизмов, а также модели гетерогенного горения металла в подповерхностной зоне горящего топлива позволит существенно расширить область применения созданных расчетных средств.

ЛИТЕРАТУРА

1. Crump J. E. Aluminum combustion in composite propellants // Proc. of 2nd ICRPG Combustion

- tion Conf. CPIA. — Publ. 105. — 1966. — V. 1. — P. 321–329.
2. **Beckstead M. W.** A model for solid propellant combustion // Proc. of 14th JANNAF Combustion Meeting. CPIA. — Publ. 292. — 1977. — V. 1. — P. 281–306.
 3. **Григорьев В. Г.** Исследование агломерации алюминия при горении смесевых композиций с варьiruемой дисперсностью компонентов: дис. ... канд. физ.-мат. наук / Ин-т химической кинетики и горения СО АН СССР. — Новосибирск, 1983.
 4. **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.
 5. **Gallier S.** A stochastic pocket model for aluminum agglomeration in solid propellants // Propell., Explos., Pyrotech. — 2009. — V. 34, N 2. — P. 97–105.
 6. **Maggi F., De Luca L. T., Jackson T. L.** Using statistics for agglomerate prediction in aluminized rocket propellants // Proc. of 3rd Eur. Conf. for Aerospace Sciences, Versailles, France, 6–10 July 2009. — Paper 308. — P. 1–10.
 7. **Jackson T. L., Najjar F., Buckmaster J.** New aluminum agglomeration models and their use in solid — propellant — rocket simulations // J. Propul. Power. — 2005. — V. 21, N 5. — P. 925–936.
 8. **Гладун В. Д., Фролов Ю. В., Кашпоров Л. Я.** Агломерация частиц порошкообразного металла при горении смесевых конденсированных систем. — Черногoловка, 1977. — (Препр. / ОИХФ АН СССР).
 9. **Gany A., Caveny L. H., Summerfield M.** Aluminized solid propellants burning in a rocket motor // AIAA Journal. — 1978. — V. 16, N 7. — P. 736–739.
 10. **Зырянов В. Я.** Модель для прогнозирования агломерации при горении металлизированных систем // Материалы VIII Всесоюз. симпоз. по горению и взрыву. — Черногoловка, 1986. — С. 59–62.
 11. **Ковалев О. Б., Петров А. П., Фольц А. В.** К моделированию процесса агломерации порошкообразного алюминия при горении смесевых конденсированных систем // Физика горения и взрыва. — 1987. — Т. 23, № 2. — С. 17–21.
 12. **Ковалев О. Б.** Физико-математическое моделирование агломерации алюминия при горении смесевых конденсированных систем // Физика горения и взрыва. — 1989. — Т. 25, № 1. — С. 39–48.
 13. **Коэн Н. С.** Модель «карманов» для описания процесса агломерации алюминия в смесевых ракетных топливах // Аэрокосм. техника. — 1984. — Т. 2, № 2. — С. 67–75.
 14. **Ковалев О. Б., Петров А. П., Фомин В. М.** Структура волны горения гетерогенных твердых топлив // Физика горения и взрыва. — 1993. — Т. 29, № 3. — С. 8–16.
 15. **Бабук В. А., Долотказин И. Н., Свиридов В. В.** Моделирование дисперсности агломератов при горении алюминизированных твердых топлив // Физика горения и взрыва. — 2003. — Т. 39, № 2. — С. 86–96.
 16. **Tanner M. W.** Multidimensional modeling of solid propellant burning rates and aluminum agglomeration and one-dimensional modeling of RDX/GAP and AP/HTPB: Ph.D. dissertation / Brigham Young Univ. — Provo, Utah, USA, 2008.
 17. **Рашковский С. А.** Статистическое моделирование горения гетерогенных конденсированных смесей: дис. ... д-ра физ.-мат. наук / Ин-т проблем механики РАН. — М., 2004.
 18. **Srinivas V., Chakravarthy S. R.** Computer model of aluminum agglomeration on burning surface of composite solid propellant // J. Propul. Power. — 2007. — V. 23, N 4. — P. 728–736.
 19. **Babuk V. A., Dolotkazin I. N., Nizyaev A. A.** Analysis and synthesis of solutions for the agglomeration process modeling // EUCASS Book Series. Advances in Aerospace Sciences. — Paris: EUCASS, Torus Press, EDP Sciences, 2013. — P. 33–58. — (Prog. Propulsion Phys.; V. 4).
 20. **Бабук В. А.** Свойства поверхностного слоя и закономерности горения металлизированных твердых топлив // Физика горения и взрыва. — 2009. — Т. 45, № 4. — С. 156–165.
 21. **Babuk V. A., Vasilyev V. A., Sviridov V. V.** Formation of condensed combustion products at the burning surface of solid rocket propellant // Solid Propellant Chemistry, Combustion, and Motor Interior Ballistics / V. Yang, T. B. Brill, W. Z. Ren (Eds). — Reston: VA: AIAA, 2000. — Ch. 2.21. — P. 749–776. — (Prog. Astronaut. Aeronaut.; V. 185.).
 22. **Babuk V. A., Vasilyev V. A., Malakhov M. S.** Condensed combustion products at the burning surface of aluminized solid propellant // J. Propul. Power. — 1999. — V. 15, N 6. — P. 783–794.
 23. **Babuk V. A., Dolotkazin I. N., Glebov A. A.** Burning mechanism of aluminized solid rocket propellants based on energetic binders // Propell., Explos., Pyrotech. — 2005. — V. 30, N 4. — P. 281–290.
 24. **Глотов О. Г., Ягодников Д. А., Воробьев В. С., Зарко В. Е., Симоненко В. Н.** Воспламенение, горение и агломерация капсулированных частиц алюминия в составе смесевоего твердого топлива. II. Экспериментальные исследования агломерации // Физика горения и взрыва. — 2007. — Т. 43, № 3. — С. 83–97.
 25. **Пономаренко В. К.** Ракетные топлива. — СПб.: Изд-во ВИККА им. А. Ф. Можайского, 1995.

26. Babuk V. A., Glebov A. A., Arkhipov V. A., Vorozhtsov A. B., Klyakin G. F., Severini F., Galfetti L., DeLuca L. T. Dual-oxidizer solid rocket propellants for low-cost access to space // Space Propulsion / L. T. DeLuca, R. L. Sackheim, B. A. Palaszewski (Eds). — Bergamo, Italy: Grafiche GSS, 2005. — Paper 15. — P. 1–20.
27. Babuk V. A., Vasilyev V. A., Glebov A. A., Dolotkazin I. N., Galeotta M., DeLuca L. T. Combustion mechanisms of AN-based aluminized solid rocket propellants // Novel Energetic Materials and Applications / L. T. DeLuca, L. Galfetti, R. A. Pesce-Rodriguez (Eds). — Bergamo, Italy: Grafiche GSS, 2004. — Paper 44. — P. 1–20.
28. Babuk V., Dolotkazin I., Gamsov A., Glebov A., DeLuca L. T., Galfetti L. Nanoaluminum as a solid propellant fuel // J. Propul. Power. — 2009. — V. 25, N 2. — P. 482–489.
29. Глотов О. Г. Конденсированные продукты горения алюминизированных топлив. IV. Влияние природы нитраминов на агломерацию и эффективность горения алюминия // Физика горения и взрыва. — 2006. — Т. 42, № 4 — С. 78–92.
30. Бабук В. А., Низяев А. А. Моделирование структуры смесового твердого топлива и проблема описания процесса агломерации // Хим. физика и мезоскопия. — 2014. — Т. 16, № 1. — С. 31–42.
31. Зельдович Я. Б., Баренблатт Г. И., Либрович В. Б., Махвиладзе Г. М. Математическая теория горения и взрыва. — М.: Наука, 1980.
32. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания / под ред. В. П. Глушко. — М.: ВИНТИ, 1971. — Т. 1.
33. Бабук В. А., Васильев В. А., Потехин А. Н. Экспериментальное исследование процесса агломерации при горении алюминизированных твердых топлив в поле перегрузок // Физика горения и взрыва. — 2009. — Т. 45, № 1. — С. 38–46.
34. Babuk V. A., Vasilyev V. A., Sviridov V. V. Propellant formulation factors and metal agglomeration in combustion of aluminized solid rocket propellant // Combust. Sci. Technol. — 2001. — V. 163. — P. 261–289.

*Поступила в редакцию 1/IV 2014 г.,
в окончательном варианте — 3/X 2014 г.*
