

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИСПЕРСНОСТИ АГЛОМЕРАТОВ ПРИ ГОРЕНИИ АЛЮМИНИЗИРОВАННЫХ ТВЕРДЫХ ТОПЛИВ

В. А. Бабук, И. Н. Долотказин, В. В. Свиридов

Балтийский государственный технический университет, 198005 Санкт-Петербург, babuk@peterlink.ru

Работа посвящена математическому моделированию дисперсности агломератов, образующихся при горении алюминизированных твердых топлив. Показано существенное влияние на размеры агломератов условий отрыва укрупняющихся частиц металла от поверхности горящего топлива. Создана математическая модель образования агломератов применительно к топливам, для которых характерно активное горение металлического горючего в поверхностном слое. Удовлетворительное качество моделирования подтверждено соответствием экспериментальных данных и результатов расчетов.

Ключевые слова: твердое ракетное топливо, агломерат, дисперсность, функция распределения по размерам.

ВВЕДЕНИЕ

К числу важнейших характеристик агломератов, образующихся при горении алюминизированных твердых топлив, относится их дисперсность. Информация о функции распределения агломератов по размерам имеет большое практическое значение, поскольку обеспечивает возможность решения задач, связанных с определением параметров двухфазного потока продуктов сгорания в камере двигателя. Зачастую исследование агломерации сводится только к определению функции распределения по размерам, что, учитывая многообразие свойств агломератов, обусловленное различием их химического состава, формы, внутреннего строения, представляется недостаточным.

Естественно, что при математическом моделировании процесса агломерации возникает необходимость описания эволюции размеров частиц металла. Попытки решения задачи моделирования этого процесса сводятся в основном к анализу именно данной проблемы.

Определение размеров агломератов базируется на физических представлениях о поведении агломерирующих частиц в поверхностном слое горящего топлива и об условиях отрыва укрупняющихся частиц от элементов конденсированной фазы топлива.

В работе [1] принято, что укрупнение частиц происходит при наличии жидковязкого реакционного слоя. Предполагается, что металлическое горючее и дисперсный окислитель представляют собой монодисперсные порошки сферических частиц, равномерно распреде-

ленных в топливе. Контакт между частицами отсутствует. Учитываются различные стадии укрупнения: установление контакта, спекание частиц во время их пребывания в реакционном слое конденсированной фазы и на поверхности горения. Это позволяет оценить влияние ряда параметров (коэффициента избытка окислителя, давления, исходного размера частиц, скорости горения топлива) на степень укрупнения (отношение диаметров агломерата и исходной металлической частицы).

Анализ модели выполнен для случая высокометаллизированных двойных систем. Сравнение результатов теоретических расчетов с экспериментом показало хорошее качественное согласие.

Основное положение модели, связанное с наличием жидковязкого слоя, определяет ограничения по ее использованию.

В работе [2] полагается, что степень укрупнения частиц зависит от времени их пребывания на поверхности горящего топлива, что, в свою очередь, зависит от соотношения между силами, действующими на частицу. На основе анализа экспериментальных данных сделан вывод о том, что отрыв укрупняющейся частицы происходит в результате разрыва перемычки, связывающей ее с конденсированной фазой горящего топлива. Данная перемычка, по мнению автора, состоит из спекшихся между собой исходных частиц металла. Считается, что температура агломерирующей частицы равна температуре газовой фазы на расстоянии от поверхности горения, равном диамет-

ру этой частицы. После введения ряда коэффициентов получены соотношения, определяющие диаметр агломерата. Установление адекватности данной модели затруднено отсутствием сопоставления результатов ее параметрического анализа с экспериментальными данными о влиянии различных факторов на дисперсность агломератов.

Экспериментально фиксируемое значительное влияние размера частиц окислителя на процесс агломерации вызвало появление моделей, базирующихся на понятии «кармана». Это понятие связано с ячейкой композиции связующее — металл, ограниченной частицами окислителя. В приближении «карманного» механизма агломерации, когда металл каждого «кармана» образует один агломерат, геометрическая структура топлива становится фактором, однозначно определяющим дисперсность агломератов.

Впервые моделирование дисперсности «карманов» было проведено в работах [3, 4]. В работе [3] принято, что частицы окислителя находятся в узлах кубической решетки, в то время как в работе [4] считалось, что центры этих частиц в топливной массе распределены в соответствии с законом Пуассона. Для этих работ принципиально положение об участии всех частиц окислителя в формировании «карманов».

Разработанный в работе [4] математический аппарат позволил впервые для сравнительно неплотных упаковок частиц окислителя (их объемная доля не должна превышать $0,45 \div 0,5$) получить функцию распределения «карманов» по размерам и, как следствие, соответствующую функцию для агломератов, образующихся по «карманному» механизму. Отличие расчетных значений и экспериментальных данных, полученных авторами [4], не превышает $10 \div 15$ %.

Анализируя работы [3, 4], следует отметить два обстоятельства, которые стимулируют дальнейшее развитие их положений:

- отсутствует определение условий реализации «карманного» механизма агломерации (данные многочисленных экспериментов не дают основания считать его универсальным);

- небезупречно утверждение об участии всех частиц окислителя в формировании «карманов», т. е. существует основание говорить о неточности описания структуры топлива [5–7].

В работе [8] предпринята попытка описать

образование агломератов с учетом возможности реализации не только «карманного» механизма. Основное положение модели заключается в том, что время пребывания укрупняющейся частицы на поверхности горения и степень укрупнения определяются условиями воспламенения. После воспламенения частицы переходят в газовую фазу.

Размер агломерата определяется интегрированием дифференциальных уравнений, описывающих изменение массы частицы и ее внутренней энергии до момента ее воспламенения. В соответствии с моделью [8], если частица воспламеняется до выгорания «кармана», реализуется «докарманый» механизм агломерации, т. е. при выгорании «кармана» образуется более одного агломерата, в противном случае — «межкарманый» механизм, для которого характерно слияние частиц металла из различных «карманов».

Отсутствие в работе [8] подробного сопоставления результатов моделирования и экспериментов не позволяет сделать вывод об адекватности модели и возможности ее использования для прогнозирования параметров агломератов в зависимости от состава топлив и условий горения. Необходимо отметить, что ряд положений модели противоречит экспериментально наблюдаемым фактам. Так, воспламенение частиц не обязательно является условием прекращения связей с конденсированной фазой горящего топлива [7, 9 и др.], на укрупняющихся частицах отсутствует сплошная оксидная пленка [7, 10].

В целом анализ работ, посвященных моделированию дисперсности агломератов, свидетельствует об отсутствии значимых успехов. Сложность и многообразие процесса агломерации, трудность получения в необходимом объеме экспериментальной информации затрудняют создание адекватной модели применительно к произвольным топливным композициям.

Настоящая работа посвящена разработке принципов математического моделирования дисперсности агломератов при горении топлив, которые в соответствии с терминологией работ [7, 11] относятся к классу А.

1. ОСОБЕННОСТИ ГОРЕНИЯ ТОПЛИВ КЛАССА А

В соответствии с имеющимися данными о физической природе агломерации решающую

роль в ее осуществлении играет специфическая структура поверхностного слоя горящего топлива, которая получила название каркасного слоя (КС) [7, 12–14]. Каркасный слой — это газопроницаемая объемная структура, состоящая преимущественно из металла и его оксида, а также из термостойких углеродистых элементов, которая находится в верхней части поверхностного слоя горящего топлива. Нижней поверхностью КС считается зона горения, где в основном завершается разложение связующего до газообразных продуктов и твердых углеродистых элементов. На верхней поверхности КС (обращенной к газовой фазе) находятся укрупняющиеся частицы, формирующие после отрыва от нее поток агломератов.

Свойства КС существенно зависят от особенностей горения углеродистых элементов и металлического горючего в пределах поверхностного слоя. При горении топлив класса А металлические частицы воспламеняются при температуре более низкой, чем температура начала горения углеродистых элементов. Вследствие этого при горении топлив верхняя часть КС представляет собой углеродистый каркас, поры которого заполнены «жидкостью Al–Al₂O₃», смачивающей его элементы. (Непосредственно после воспламенения металла происходит плавление его оксида.)

Для горения топлив класса А характерна универсальная зависимость дисперсности, параметров химического состава и структуры агломератов от давления. Выделяются две области давлений: низких и высоких, граница между которыми определяется предельным давлением (p^*). Значение p^* зависит от скорости горения топлива: оно уменьшается по мере ее увеличения. В области низких давлений с ростом давления уменьшаются характерные размеры агломератов и содержание оксида в них. При превышении значения p^* давление перестает влиять на эти характеристики агломератов. В области низких давлений образование агломератов происходит как по «карманному», так и «межкарманному» механизму, в области высоких давлений преобладает «карманный» механизм формирования агломератов. Следствием указанного обстоятельства является двухмодальный характер функции плотности распределения агломератов по размерам для области низких давлений и одномодальный — для области высоких давлений [7]. При горении топлив класса А образуются «матричные»

агломераты и агломераты, в составе которых формируется «нашлепка» оксида [7, 11]. Однако в области высоких давлений образуются преимущественно агломераты второго типа.

Для рассматриваемых топлив поведение укрупняющихся частиц на верхней поверхности КС соответствует закономерностям поведения жидких капель на смачиваемой твердой пористой поверхности в условиях действия отрывающих сил. По мере увеличения времени пребывания этих частиц на поверхности КС возрастает и степень их укрупнения. Таким образом, определение условий отрыва агломерирующих частиц от верхней поверхности КС имеет принципиальное значение для описания дисперсности образующихся агломератов.

Для решения указанной задачи полезно привлечение равновесного приближения. Рассмотрим модель равновесного положения капли на твердой поверхности при наличии внешнего воздействия.

2. МОДЕЛЬ РАВНОВЕСНОГО ПОЛОЖЕНИЯ КАПЛИ

Описание равновесной формы капли, находящейся на твердой поверхности, возможно при использовании различных подходов. Они базируются на условии минимума соответствующей энергии рассматриваемой дисперсной системы либо на условии механического равновесия.

В разработанной модели состояние равновесия находится из условия соответствия капиллярного давления жидкости давлению, определяемому положением капли в поле внешних сил. При этом под внешними понимаются массовая и аэродинамическая силы.

Математически это условие в осесимметричной постановке задачи можно определить следующим образом (рис. 1):

$$p_C + \varphi(Y) = p_0 + \sigma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right). \quad (1)$$

Здесь p_C — давление жидкости в точке C (см. рис. 1); p_0 — давление окружающей среды, которое считается постоянным; σ — поверхностное натяжение на поверхности раздела фаз жидкость — газ; R_1, R_2 — радиусы кривизны двух взаимно перпендикулярных сечений поверхности раздела фаз в системе жидкость — газ; $\varphi(Y) = \rho Y (F_{\text{аэп}}/M \pm gn)$ — функция, описывающая изменение давления жидкости,

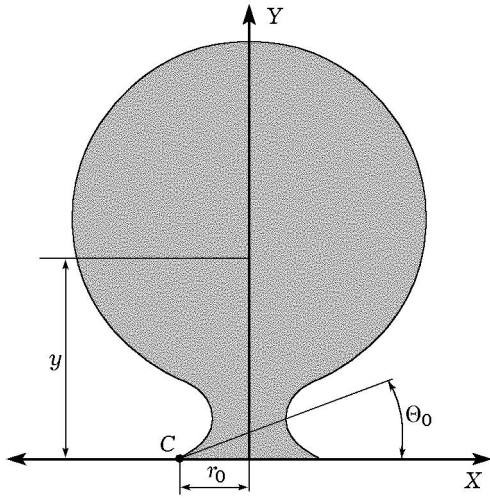


Рис. 1. Схема равновесного положения капли на поверхности

обусловленное действием поля внешних сил (аэродинамической и массовой); ρ — плотность жидкости; M — масса капли; g — ускорение свободного падения; n — перегрузка; $F_{\text{аэр}} = C_y S \rho_r v_r^2 / 2$ — аэродинамическая сила, возникающая при обтекании капли; S — площадь миделева сечения капли; C_y — коэффициент аэродинамического сопротивления; v_r — скорость газового потока; ρ_r — плотность газовой фазы.

Таким образом, параметр p_0 в уравнении (1) определяет давление невозмущенной газовой фазы, а перепад давления, возникающий при обтекании капли, учитывается функцией $\varphi(Y)$.

Для фигур вращения радиусы кривизны находятся с помощью явных выражений [15]:

$$\frac{1}{R_1} = \frac{Y''_{x,x}}{(1 + (Y'_x)^2)^{\frac{3}{2}}}, \quad (2)$$

$$\frac{1}{R_2} = \frac{Y'_x}{X(1 + (Y'_x)^2)^{\frac{1}{2}}}. \quad (3)$$

Подставляя их в (1), можно получить обыкновенное дифференциальное уравнение второго порядка:

$$\Delta p = p_C - p_0 = \sigma \left(\frac{Y''_{x,x}}{(1 + (Y'_x)^2)^{\frac{3}{2}}} + \right.$$

$$\left. + \frac{Y'_x}{X(1 + (Y'_x)^2)^{\frac{1}{2}}} \right) - \varphi(Y), \quad (4)$$

которое интегрируется при следующих граничных условиях:

$$Y = 0, \quad X = r_0, \\ Y = 0, \quad Y'_x = \text{tg}(\pi - \Theta_0) = -\text{tg} \Theta_0.$$

Уравнение (4) позволяет определить форму капли. Интегрирование этого уравнения проводили численно с использованием метода Рунге — Кутты 5-го порядка. Отметим особенности получения конечного решения: численное решение было дополнено процедурой последовательных приближений, что связано с исходной неопределенностью параметра Δp , а также формы капли, которая определяет величину аэродинамической силы. Кроме того, структура уравнения (4) такова, что можно получить несколько вариантов решения, удовлетворяющих данному уравнению. Истинному решению соответствует ситуация, при которой сумма поверхностной и потенциальной энергий дисперсной системы, включающей каплю, газовую фазу и твердую поверхность, минимальна.

По модели можно рассчитать форму капли, а следовательно, и ее объем при заданных площади пятна контакта, параметрах газового потока, перегрузке, значениях поверхностного натяжения жидкости капли и краевого угла смачивания.

Как следует из анализа равновесных положений капли на поверхности, существует два вида характерных состояний. Первое определяется действием поверхностных сил (рис. 2, а), второе (рис. 2, б) — дополнительным действием отрывающих сил (массовой, аэродинамической). При реализации второго положения у капли формируется специфичная «ножка». Для частиц, находящихся в первом положении, отрыв агломерирующих частиц от поверхности КС принципиально невозможен. Второе положение или переход к нему создают предпосылки для реализации отрыва. В этих условиях отрывающая сила способна совершить работу против сил когезии и разорвать связь частицы с элементами КС, т. е. осуществить отрыв. Отрыв отчетливо фиксируется в экспериментах при киносъемке поверхностного слоя горения топлив класса А [7].

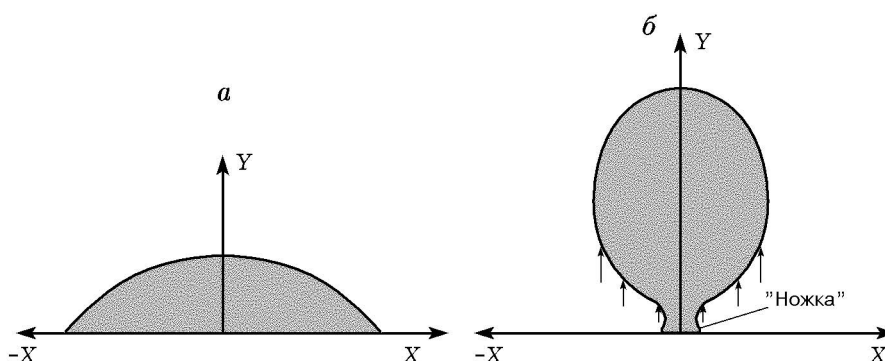


Рис. 2. Равновесные положения капли на поверхности

Кроме того, при уменьшении площади пятна контакта возможно возникновение неравновесных состояний, что приводит к потере связи частиц с КС. Эти процессы могут быть вызваны либо нарушением целостности капли, либо собственно отрывом от поверхности КС, т. е. совершением отрывающими силами работы против сил адгезии.

3. ФОРМАЛИЗАЦИЯ УСЛОВИЙ ОТРЫВА

Рассмотрим общие принципы осуществления «карманного» и «межкарманного» механизмов агломерации при горении топлива класса А.

В соответствии с принятой схематизацией [5, 7] «карман» представляет собой замкнутую ячейку, ограниченную частицами окислителя и «межкарманными мостиками». Если учесть, что для последних образование КС не характерно [7], то в рамках данной схемы должен реализоваться только «карманный» механизм агломерации. Однако наблюдаемое «межкарманное» слияние дает основание полагать, что на некоторой части «межкарманного мостика» (сравнительно малой) образуется КС, связывающий агломерирующие частицы различных «карманов».

После начала выгорания «кармана» вскрытие пор углеродистого каркаса приводит к появлению агломерирующих частиц, которые занимают на поверхности КС положение, близкое к первому равновесному положению (см. рис. 2, а). В пределах «кармана» отсутствуют условия для отрыва частиц, они сливаются между собой, не покидая данный «карман». По мере выгорания «кармана» увеличивается объем капли на поверхности КС.

В момент выработки «кармана» появляется макронеоднородность КС, в качестве которой выступает частица окислителя. Это может привести как к отрыву, так и к переходу частицы в следующий «карман». В первом случае степень неравновесности положения капли должна быть достаточно высокой, и потому отрывающие силы способны совершить работу по отрыву частиц от элементов КС «межкарманного мостика». Если скорость появления неоднородности невелика, частица успевает переместиться по «межкарманному мостику» в соседний «карман», где начинается ее слияние с агломерирующими частицами этого «кармана» («межкарманное» слияние).

В новом «кармане» описанные процессы могут повториться. Однако по мере увеличения массы капли возрастает и скорость ее растекания. Данное обстоятельство может привести к тому, что при изменении внешних условий капля успеет занять равновесное положение. Но если при этом площади пятна контакта будет недостаточно для такого положения, произойдет разрыв частицы, что представляет собой одну из форм потери ее связи с КС.

Необходимо отметить и иной способ «межкарманного» слияния. Размер наиболее крупных частиц на поверхности КС различных «карманов» может быть настолько велик, что частицы начнут контактировать между собой и, как следствие, сливаться.

Итак, согласно изложенному возможность отрыва в существенной мере определяется соотношением между скоростями течения жидкости агломерирующих частиц и появления внешних возмущений, связанных с взаимодействием капли с конденсированной и газовой фазами горящего топлива.

В общем случае определение поля скоростей вязкой жидкости в данных условиях представляет сложную гидродинамическую задачу. Для оценки скорости растекания воспользуемся соотношением для скорости перемещения границы капли, полученным в работе [16]:

$$W_1 = \left(\frac{8M\Delta G'}{\pi\alpha\mu\rho} \right)^m m t^{m-1}. \quad (5)$$

Здесь t — время; m — коэффициент ($m = 0,2 \div 0,25$); $\Delta G'$ — изменение поверхностной энергии Гиббса при растекании, приходящейся на единицу площади поверхности раздела фаз жидкость — твердое тело; α — коэффициент формы, $\alpha = 7 \div 11$ [16]; μ — динамическая вязкость жидкости. В некоторый момент времени

$$\Delta G' = \sigma (\cos \Theta^* - \cos \Theta_0), \quad (6)$$

где Θ^* — угол между касательной к поверхности жидкости и поверхностью твердого тела в точке C (см. рис. 1); Θ_0 — краевой угол смачивания.

Внешние возмущения связаны с изменениями пятна контакта и распределения давления в газовой фазе и в значительной мере обусловлены появлением неоднородностей КС. Скорость появления неоднородностей (W_2) можно считать равной линейной скорости горения топлива (u_T).

Введем параметр ξ , равный отношению средних за время появления неоднородности скоростей растекания и изменения площади пятна контакта:

$$\xi = \frac{\bar{W}_1}{W_2} = \left(\frac{8M\Delta G'}{\pi\alpha\mu\rho} \right)^m \frac{(\Delta/2)^{m-1}}{u_T^m}, \quad (7)$$

где Δ — характерный размер неоднородности. Очевидно, что по мере увеличения этого параметра правомерность использования равновесного подхода для описания положения агломерирующей частицы на поверхности КС возрастает.

Использование параметра ξ позволяет формализовать условия отрыва, обусловленного достаточно большой степенью неравновесности положения капли, когда скорость растекания жидкости значительно меньше скорости появления внешних возмущений. Математически это описывается следующим образом:

$$\xi \leq k_1, \quad (8)$$

$$L(F) \geq k_2 \Delta E, \quad (9)$$

где $L(F)$ — работа, которую способна совершить отрывающая сила F ; ΔE — необходимое изменение энергии системы, включающей каплю, поверхность и газовую фазу, при осуществлении отрыва; k_1 и k_2 — согласующие коэффициенты.

Предложенное описание предполагает, что потеря связи укрупняющейся частицы с КС происходит быстро.

Возможность использования соотношений (5)–(9) для описания отрыва в общем случае не очевидна, и их проверка была осуществлена с применением экспериментальных данных. Если предложенное описание справедливо, то при $p = p^*$ должны существовать предельные значения коэффициентов k_1 и (или) k_2 . При $p < p^*$ «карманный» механизм агломерации перестает быть доминирующим и условия (8), (9) утрачивают свою силу для основной массы частиц. При более высоких давлениях эти условия заведомо выполняются. Для девяти модельных композиций топлива класса А, для которых известны экспериментальные зависимости дисперсности агломератов и скорости горения от давления, были определены параметры ξ , ΔE , $L(F)$ при $p = p^*$. Определение базировалось на следующих положениях.

1. При $p > p^*$ $\Theta_0 = \text{const}$, параметры σ , ρ , μ (для оксида) зависят от температуры, которая, в свою очередь, является функцией давления в соответствии с зависимостью температуры горящих агломератов от давления [17].

2. В момент выработки «кармана» капля, образовавшаяся из имевшихся в нем частиц металла, занимает первое равновесное положение. Модель структуры топлива [5] позволяет определить размеры частиц окислителя, формирующих «карман», и «межкарманных мостиков». Таким образом, параметры неоднородности (Δ) и пятна контакта известны.

3. Отрывающая сила равна аэродинамической. При ее определении используется коэффициент C_y , соответствующий обтеканию пластины. Работа, совершаемая этой силой, равна $L(F) = L(F_{\text{аэр}}) = F_{\text{аэр}} \Delta Y_M$ (ΔY_M — перемещение в пространстве центра масс капли при отрыве). Конечное положение частицы соответствует ее сферической форме, при которой она не касается поверхности КС.

4. Величина ΔE определяется изменением поверхностной энергии Гиббса при отрыве жидкости от твердого тела и изменением

потенциальной энергии частицы в поле массовых сил при ее перемещении в пространстве: $\Delta E = \sigma(1 + \cos \Theta_0)\Omega + Mg\Delta Y_m$ (Ω — площадь пятна контакта).

Результаты расчетов показывают, что разброс значений коэффициента k_1 не превышает 9 %. Разброс значений коэффициента k_2 больше, но при этом всегда $k_2 < 1$. Последнее обстоятельство — очевидное следствие того, что только некоторая часть «межкарманного мостика» участвует в формировании КС. Сравнительно малый разброс значений k_1 позволил сделать вывод о том, что его предельное значение наблюдается при $p = p^*$ и, следовательно, предложенные соотношения можно использовать для описания отрыва. Минимальное полученное значение k_2 (0,011) было принято в качестве параметра, определяющего долю поверхности «межкарманного мостика», формирующей КС. Это значение k_2 и среднее из полученных значений коэффициента k_1 (2,01) используются далее в соотношениях (8) и (9) при описании отрыва. Кроме того, результаты расчетов позволяют утверждать, что переход к «карманному» механизму агломерации обеспечивается в основном «динамизмом» процесса горения.

При использовании соотношений (8), (9) возникает проблема выбора значения Θ_0 в зависимости от условий горения. В общем случае степень смачивания, в том числе оксидом алюминия, различных материалов определяется поверхностными свойствами веществ, т. е. зависит от температуры, наличия или отсутствия химического взаимодействия на границах раздела фаз и т. д. [18]. Кроме того, на положение капли на поверхности существенно влияет ее пористость, которая приводит к изменению эффективного значения Θ_0 [15]. При горении источником пористости поверхности, на которой находятся агломерирующие частицы, являются микронеоднородности КС (поры КС в пределах каждого «кармана»), наличие которых связано с неоднородным характером разложения и газификации связующего при формировании поверхностного слоя горящего топлива [7]. Из самых общих соображений о процессе газообразования можно принять, что размер этих пор обратно пропорционален скорости горения топлива в некоторой степени ($d_p \sim u_T^{-n}$, $n \approx 2$), а их объемная доля примерно постоянна для данного топлива независимо от условий горения. Таким образом, при увеличении давления

(скорости горения топлива) размер пор уменьшается, а их количество возрастает. Проведенные с использованием экспериментальных данных оценки показали, что $p^* \sim u_T^{-2}$. В областях низких и высоких давлений характер взаимодействия агломерирующих частиц с элементами КС различен, для области низких давлений характерна более высокая степень смачивания [19]. Данное обстоятельство позволяет предположить, что в области высоких давлений площадь поры существенно меньше площади пятна контакта, а при переходе в область низких давлений они становятся соизмеримыми. Следовательно, можно принять, что в области высоких давлений $\Theta_0 = \text{const}$, а по мере падения давления значение Θ_0 уменьшается. Предполагается, что предельно высокое значение Θ_0 соответствует условиям смачивания углеродистых элементов жидким оксидом алюминия. Влияние температуры на величину Θ_0 не учитывается.

Ситуацию, в которой при малой площади пятна контакта возникают самопроизвольные процессы, приводящие к отрыву, можно описать в следующем виде:

$$\xi > k_3, \quad (10)$$

$$\Omega_2 < \Omega_1, \quad (11)$$

где Ω_1 , Ω_2 — площадь пятна контакта частицы с поверхностью в равновесном положении и в условиях, имеющих место при горении, т. е. при появлении неоднородности; k_3 — согласующий коэффициент.

Условия (10), (11) соответствуют ситуации, при которой капля в случае появления неоднородности КС быстро перестраивается на его поверхности, стремясь занять новое равновесное положение, что невозможно при сохранении ее целостности. Значение коэффициента k_3 подбиралось так, чтобы полученное экспериментально распределение по размерам агломератов, образующихся по «межкарманному» механизму, наилучшим образом соответствовало результатам расчета с использованием описанного ниже метода (минимизации расхождений моментов, отвечающих этим распределениям). Выбрано значение $k_3 = 2,89$.

Второе условие отрыва близко к используемому в работе [20]. В этой работе рассматривалось явление потери связи двух сферических частиц, между которыми закреплена жидкость.

При некоторых геометрических размерах перемычки жидкости происходил ее саморазвивающийся разрыв.

Совершенно естественно, что предложенные соотношения не описывают все возможные процессы, приводящие к отрыву агломерирующих частиц. Однако предполагается, что они соответствуют наиболее общим закономерностям для основной массы частиц.

4. МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИСПЕРСНОСТИ АГЛОМЕРАТОВ

Формализованные условия отрыва агломерирующих частиц от поверхности КС и модель равновесного положения капли на поверхности КС позволили перейти к решению задачи моделирования дисперсности агломератов. При этом в качестве исходной информации выступают:

- 1) данные о массовых долях компонентов топлива;
- 2) функция распределения частиц дисперсного окислителя по размерам;
- 3) зависимость скорости горения топлива от давления.

Используя эту информацию, с помощью модели структуры смесового топлива [5] можно определить функцию распределения «карманов» по размерам.

Количество конденсированных веществ, участвующих в процессе агломерации, с учетом доли металла, сгорающего в газофазном и гетерогенном режимах в пределах каркасного слоя, находится по модели [19].

Информация о дисперсности как частиц окислителя, так и «карманов» задается в виде гистограмм. Принимается, что в пределах каждого разряда закон распределения рассматриваемых объектов соответствует закону равномерной плотности.

Вначале определяется предельное давление. Для этого находится масса конденсированных веществ, соответствующая каждому «карману». Далее с использованием соотношений (8), (9) отыскивается давление, начиная с которого основное количество (не менее 90 % по массе) конденсированных веществ покидает поверхность КС после выработки «карманов». Это давление и принимается в качестве предельного. Результаты расчетов свидетельствуют, что предельное давление уменьшается при увеличении скорости горения топлива и разме-

ра частиц окислителя, что соответствует экспериментальным фактам.

Считается, что при $p \geq p^*$ реализуется «карманный» механизм агломерации и дисперсность агломератов определяется исключительно дисперсностью «карманов» и содержанием в них конденсированных веществ.

Моделирование дисперсности агломератов при $p < p^*$ проводится с помощью метода статистических испытаний (Монте-Карло) [21], который обеспечивает воспроизводство разнообразных ситуаций, возникающих при формировании агломератов.

В соответствии с рассмотренными ранее представлениями считается, что конденсированные вещества (алюминий и его оксид), образующиеся из металлического горючего данного «кармана», сливаются в одну частицу. В дальнейшем возможен ее отрыв после выгорания данного «кармана» либо переход в другой «карман» с последующим укрупнением за счет содержащихся в нем конденсированных продуктов. Переход в другой «карман» происходит либо в результате слияния с достаточно крупными частицами соседних «карманов», либо в случае, когда частица не отрывается после выгорания своего «кармана» и, задерживаясь на поверхности топлива, переходит в следующий по направлению волны горения «карман».

Процедура моделирования сводится к следующему.

В соответствии с видом функций распределения «карманов» и частиц окислителя по размерам моделируются размеры «кармана» и частиц окислителя, его формирующих. Далее находится объем частицы, которая образуется из конденсированных продуктов всего «кармана». По условиям (8), (9) с использованием данных о скорости горения и температуре частицы в зависимости от давления определяется возможность отрыва частицы от поверхности КС. В случае отрыва находится размер агломерата. В противном случае запоминается размер частицы в данном «кармане» и определяется характер «межкарманного» слияния.

Если размер частицы конденсированных веществ не превышает размера «кармана», то моделируется размер «кармана» с исходными конденсированными веществами, с которыми и сливается эта частица, а новая становится «принадлежностью» вновь рассматриваемого «кармана». В противном случае определяет-

ся размер «кармана» с уже накопленными конденсированными веществами. Если размер частиц данного «кармана» достаточно велик (превышает размер «кармана»), то частицы сливаются, и новая частица становится «принадлежностью» большего «кармана». В противном случае также осуществляется обращение к «карману» с исходными конденсированными веществами с последующим описанием образования частицы нового «кармана».

Для частицы, появившейся в результате «межкарманного» слияния, в новом «кармане» повторяются ранее описанные действия. При этом для проверки реализации условий отрыва используются соотношения (8)–(11). Судьба конденсированных веществ конкретного «кармана» в рамках используемого метода прослеживается вплоть до их поставки в газовую фазу. После этого анализируются превращения конденсированных веществ следующего «кармана», и т. д.

Количество анализируемых «карманов» выбирается таким образом, чтобы точечные оценки их характерных размеров соответствовали исходным с заданной точностью. После превышения этого количества моделирование завершается, и сравниваются функции распределения по размерам частиц, покинувших поверхность топлива (агломератов) и находящихся в различных «карманах» в процессе горения. Поскольку вид первой функции зависит от характеристик второй, для поиска этих функций применяется процедура последовательных приближений.

Результаты численного анализа модели свидетельствуют о воспроизводстве экспериментально фиксируемых закономерностей: в области высоких давлений агломераты образуются преимущественно по «карманному» механизму, в области низких давлений — как по «карманному», так и по «межкарманному» механизму. Следствием реализации указанных процессов является одномодальный характер функции плотности распределения агломератов по размерам, получаемой в области высоких давлений, и двухмодальный — в области низких давлений.

Результаты расчетов для модельных топливных композиций класса А, представленные на рис. 3, свидетельствуют о близости расчетных и экспериментальных данных о дисперсности агломератов.

Поскольку точная информация о функции

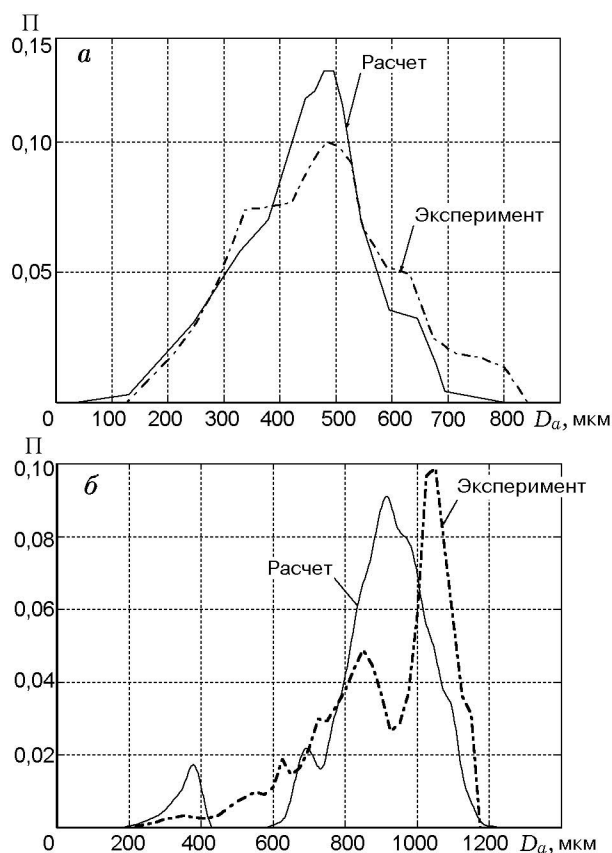


Рис. 3. Сглаженные плотности распределения агломератов по размерам при реализации «карманного» (а) и «межкарманного» (б) механизмов:

а — давление 6,2 МПа, б — 0,4 МПа

$\Theta_0(p)$ отсутствует, в области низких давлений существуют очевидные проблемы с обеспечением соответствия между расчетными и экспериментальными функциями распределения агломератов по размерам. Наилучшее соответствие достигается в случае образования агломератов либо преимущественно по «карманному», либо в основном по «межкарманному» механизму. При этом количественные отличия математического ожидания и дисперсии в обоих случаях не превышают 15 %.

Таким образом, разработанная модель позволяет качественно описывать влияние параметров топлива и двигателя на дисперсность агломератов, а также получать количественные результаты, имеющие практическое значение. Область ее использования ограничена не только топливами класса А. В случае, когда массовая сила препятствует отрыву частиц, а ее значение соизмеримо (или больше) с аэродинамической силой, изменяются закономер-

ности процесса агломерации [22] и, как следствие, описанная модель утрачивает свою правомерность.

Следует подчеркнуть, что модель структуры топлива [5] позволяет определять массовую долю металлического горючего, участвующего в агломерации, а модели горения металлического горючего в поверхностном слое топлива [20] — химический состав агломератов. Следовательно, имеющиеся в настоящее время средства обеспечивают (применительно к топливам класса А) проведение оценки количества, дисперсности и параметров химического состава агломератов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Создана математическая модель образования агломератов применительно к топливам класса А, которая позволяет прогнозировать дисперсность агломератов при наличии информации о свойствах топлива и давлении, при котором оно горит. Результаты численных расчетов по этой модели удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными. Это позволяет надеяться, что в дальнейшем возможно решение задачи математического моделирования агломерации и при горении топлив других классов.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Гладун В. Д., Фролов Ю. В., Капиров Л. Я.** Природа агломерации при горении металлизированных конденсированных систем. Черногловка: ОИХФ АН СССР, 1977.
2. **Зырянов В. Я.** Модель для прогнозирования агломерации при горении металлизированных систем // *Материалы VIII Всесоюз. симпоз. по горению и взрыву*. Черногловка, 1986. С. 59–62.
3. **Cohen N. S.** A pocket model for aluminum agglomeration in composite propellants // *AIAA Paper*. 1981. N 1585.
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. **Бабук В. А., Васильев В. А., Свиридов В. В.** Моделирование структуры смесевой твердого ракетного топлива // *Физика горения и взрыва*. 1999. Т. 35, № 2. С. 35–40.
6. **Babuk V. A., Vasilyev V. A., and Malakhov M. S.** Condensed combustion products at the burning surface of aluminized solid propellant // *J. Propulsion and Power*. 1999. V. 15, N 6. P. 783–794.
7. **Babuk V. A., Vasilyev V. A., and 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, and W. Z. Ren (Eds). Progress in Astronautics and Aeronautics; V. 185. Reston, VA: Amer. Inst. of Aeronautics and Astronautics, July, 2000. P. 749–776.
8. **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.
9. **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. 26–31.
10. **Crump E. I., Prentice I. L., Kracuth K. I.** Role of scanning electron microscope in the study of propellant combustion. II. Behavior of metal additives // *Combust. Sci. Technol.* 1969. V. 1, N 3. P. 205–223.
11. **Бабук В. А., Белов В. П., Ходосов В. В., Шелухин Г. Г.** Исследование структуры агломератов при горении смесевых конденсированных систем // *Физика горения и взрыва*. 1988. Т. 24, № 5. С. 52–57.
12. **Бабук В. А., Белов В. П., Ходосов В. В., Шелухин Г. Г.** Исследование агломерации частиц алюминия при горении в составе смесевых конденсированных систем // *Физика горения и взрыва*. 1985. Т. 21, № 3. С. 20–26.
13. **Бабук В. А., Белов В. П., Романов О. Я., Ходосов В. В.** Структура поверхностного слоя при горении конденсированных систем // *Материалы IX Всесоюз. симпоз. по горению и взрыву*. Черногловка, 1989. С. 21–25.
14. **Бабук В. А.** Горение металлического горючего в составе ракетных топлив // *Сборник лекций Междунар. школы-семинара «Внутрикамерные процессы, горение и газовая динамика дисперсных систем»*. СПб, 1996. С. 74–85.
15. **Адамсон А.** Физическая химия поверхности. М.: Мир, 1979.
16. **Елютин В. П., Костиков В. И., Маурах М. А.** Поверхностные явления в расплавах и возникающих в них твердых фазах. Нальчик: Каб.-Балкар. кн. изд-во, 1965. С. 352–356.
17. **Babuk Valery A., Vasilyev Vyacheslav A.** Model of Al–Al₂O₃ agglomerate evolution in the flow of solid propellant products // *Proc. Conference «Space Solid Propulsion»*. Rome, November 21–24, 2000.
18. **Маурах М. А., Митин Б. С.** Жидкие тугоплавкие окислы. М.: Металлургия, 1979.
19. **Бабук В. А.** Горение металлического горючего в поверхностном слое твердого ракетного топлива // *Сборник лекций Второй междунар.*

- школы-семинара «Внутрикамерные процессы, горение и газовая динамика дисперсных систем». СПб, 1997. Т. 1. С. 194–219.
20. **Гладун В. Д., Фролов Ю. В., Кашпов Л. Я, Острецов Г. А.** О модели отрыва конденсированной частицы от поверхности горения // Физика горения и взрыва. 1976. Т. 12, № 2. С. 194–197.
21. **Бусленко Н. П., Шрейдер Ю. А.** Метод статистических испытаний. М.: Гос. изд-во физ.-мат. лит., 1961.
22. **Babuk V. A., Vasilyev V. A., Potekhin A. N.** Experimental investigation of metal agglomeration in combustion of aluminized solid propellants under acceleration // Proc. of the 3rd Intern. High Energy Materials Conference and Exhibit, HEMCE-2000, Dec. 2000, Thiruvananthapuram, India. P. 526–530.

*Поступила в редакцию 17/VII 2001 г.,
в окончательном варианте — 22/X 2002 г.*
