УДК 536.46

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГОРЕНИЯ СМЕСЕВОГО ТВЕРДОГО ТОПЛИВА, СОДЕРЖАЩЕГО ПОРОШОК БОРА

В. А. Порязов, К. М. Моисеева, А. Ю. Крайнов, В. А. Архипов

Томский государственный университет, 634050 Томск, Moiseeva_KM@t-sk.ru

Представлены результаты численного исследования особенностей горения смесевого металлизированного твердого топлива, содержащего частицы бора. Математическая модель основана на подходах механики двухфазных реагирующих сред для описания процессов в двухфазном потоке над поверхностью топлива и модели Германса для описания разложения смесевого твердого топлива. Модель горения смесевого металлизированного твердого топлива учитывает окисление и горение частиц бора. Из параметрического исследования определена зависимость скорости горения металлизированного смесевого твердого топлива от давления газа над поверхностью горения и размера частиц бора.

Ключевые слова: металлизированное смесевое твердое топливо, двухфазный поток, порошок бора, скорость горения, математическое моделирование.

DOI 10.15372/FGV20220209

ВВЕДЕНИЕ

Интерес к исследованию горения металлизированных смесевых твердых топлив сохраняется на протяжении десятков лет. Это связано с разработкой новых составов смесевых металлизированных твердых топлив с использованием различных высокоэнергетических компонентов. Наиболее распространенной добавкой в смесевое твердое топливо является порошок алюминия. Частицы бора горят с большим тепловым эффектом, что делает актуальным изучение горения смесевого твердого топлива с добавлением порошка бора. Однако у бора высокие температуры плавления и кипения [1], наблюдается большое недогорание его частиц при горении таких топлив [2]. Поэтому актуальным является математическое и численное моделирования горения смесевого топлива, содержащего частицы бора.

При разложении металлизированного смесевого твердого топлива образуется двухфазный поток от поверхности топлива, содержащий частицы бора, способный к экзотермическому химическому реагированию. Для описания горения частиц бора в воздухе разработана модель [3], которая учитывает особенности низкотемпературного и высокотемпературного окисления частиц бора. Такие особенности горения частиц бора были использованы в работах [4–13]. В работах [4–8] определен закон горения одиночных частиц и частиц бора в составе газовзвесей. В [4] получены зависимости времени горения частиц бора от радиуса частицы, от давления паров окислителя, от температуры и коэффициента диффузии в газе. Показано, что время горения частицы пропорционально квадрату радиуса частицы. В [5] выполнено исследование режимов распространения пламени по газовзвеси смеси порошков бора и алюминия и показано, что скорость горения газовзвеси уменьшается с увеличением массовой доли частиц бора. В [7] предложен механизм горения частиц бора, учитывающий образование газообразных оксидов ВО и В₂О₂ на поверхности частицы, способных к последующему окислению в газовой фазе. В монографии |9| представлена зависимость видимой скорости перемещения фронта горения по взвеси частиц в зависимости от коэффициента избытка окислителя, показано, что при значениях коэффициента избытка окислителя, близких или превышающих стехиометрическое значение, видимая скорость практически не меняется. В [11, 12] приведена физико-математическая модель горения частицы диборида алюминия. Определено время задержки воспламенения частицы диборида алюминия в зависимости от начальной температуры среды и начального диаметра частиц. В [13] показан переход от низкотемпературной

Исследование выполнено при поддержки Российского научного фонда (проект №19-79-10054).

[©] Порязов В. А., Моисеева К. М., Крайнов А. Ю., Архипов В. А., 2022.

стадии горения частиц бора к высокотемпературной.

При наличии в газе водяного пара, хлора, азота скорость горения частиц бора меняется [13]. В частности, в [13] показано, что чем выше концентрация водяного пара, тем больше скорость исчезновения оксидного слоя. Присутствие водяного пара в окружающем частицу газе снижает температуру воспламенения частиц бора. Наличие хлора или азота в газе приводит к уменьшению скорости горения частиц бора из-за снижения удельной теплоты его горения и возникновения промежуточных продуктов реакции [13]. Поэтому в данной работе мы приняли допущение о том, что механизм горения частиц бора аналогичен описанному в [3, 13, 14]: если температура частицы бора относительно низкая, оксид бора находится в конденсированном состоянии и образует на поверхности частицы пленку. Полагается, что в этом случае идет процесс окисления частицы с образованием оксидного слоя и одновременным его испарением. Скорость окисления бора лимитируется диффузией окислителя через слой оксида. Если слой нарастает быстрее, чем испаряется, то после воспламенения частицы толщина пленки с течением времени возрастает, скорость диффузии окислителя снижается. Если температура частицы бора высокая, то идет испарение оксидного слоя. После полного испарения слоя частица бора реагирует гетерогенно. В ходе высокотемпературного реагирования образуются промежуточные газообразные продукты реакции ВО и В₂О₂, которые далее реагируют с окислителем в газовой фазе с образованием конечного газообразного оксида B_2O_3 .

В настоящей статье предложена новая физико-математическая модель горения металлизированного смесевого твердого топлива (МСТТ), в которой над поверхностью твердого топлива учитываются газодинамические процессы в двухфазной, двухскоростной, двухтемпературной теплопроводной среде. Для формулировки математической модели используется подход Р. И. Нигматулина [15]. В отличие от ранее разработанной изобарической модели горения МСТТ [16], в которой предполагается постоянство пространственного распределения давления над поверхностью горения, в модели учитываются межфазный обмен импульсом и пространственное распределение давления над поверхностью топлива. Для определения линейной скорости горения в данной работе использована модель горения смесевого твердого топлива Германса [17], основанная на предположении, что скорость горения определяется массовыми потоками компонентов с поверхности топлива.

На основе физико-математических постановок [14, 16], а также предположений теории многофазных реагирующих сред Р. И. Нигматулина [15] разработана модель горения МСТТ, учитывающая динамическое, тепловое и химическое взаимодействие между газом и частицами бора при движении продуктов газификации МСТТ от его поверхности. Целью исследования является определение скорости горения МСТТ в зависимости от давления, массовой концентрации и дисперсности порошка бора.

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Математическая постановка задачи формулируется при следующих допущениях. Слева от границы рассматриваемой области находится МСТТ, состоящее из окислителя, связки и частиц бора. На правой границе области полагается истечение газодисперсной смеси в объем с заданным давлением. С поверхности твердого топлива истекают продукты его газификации и частицы бора. Газовая фаза состоит из смеси газообразных окислителя и горючего, способных к экзотермической химической реакции. Скорость этой реакции зависит от температуры по закону Аррениуса. Газ при нагревании расширяется, возникает течение его от поверхности МСТТ, которым захватываются частицы бора. Коэффициент диффузии и теплопроводность газа зависят от температуры. Окисление и горение частиц бора включает в себя три реакции: реакция образования и испарения оксида бора В₂О₃; две поверхностные реакции между окислителем и бором с образованием двух газообразных оксидов бора ВО и В₂О₂, которые окисляются в газовой фазе до В₂О₃. При относительно невысокой температуре частиц бора окисление присходит с образованием оксидной пленки. Последующий нагрев частиц приводит к испарению оксидной пленки, скорость испарения определяется давлением насыщенных паров вокруг частиц. Окисление бора через оксидную пленку определяется эффективным коэффициентом массообмена, учитывающим слой оксида на частице. Разогрев частицы до температуры кипения оксида бора приводит к испарению оксидной пленки. После ее испарения начинаются гетерогенные химические реакции на поверхности частицы, которые описываются аналогично данным [3]: образуются промежуточные газообразные продукты реакции BO и B₂O₂, реагирующие в газовой фазе с окислителем с образованием конечного продукта реакции в виде газообразного оксида В₂О₃. Последние реакции, предполагается, проходят в кинетическом режиме. Поэтому в постановке задачи учитывается образование конечного газообразного продукта реакции В₂О₃ с учетом расхода окислителя на реакции образования и последующего реагирования оксидов ВО и B_2O_2 .

При принятых допущениях физикоматематическая постановка задачи имеет вид: уравнение сохранения массы газа

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \frac{\partial \rho_g u_g}{\partial x} = G_1 + G_2 - \alpha_3 G_3 + G_4, \quad (1)$$

уравнение сохранения импульса газа

$$\frac{\partial(\rho_g u_g)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_g u_g^2 + p)}{\partial x} =$$
$$= (G_1 + G_2 - \alpha_3 G_3 + G_4)u_p - \tau_{fr}, \qquad (2)$$

уравнение сохранения энергии газа

$$\frac{\partial \rho_g(\varepsilon_g + 0.5u_g^2)}{\partial t} + \frac{\partial [\rho_g u_g(\varepsilon_g + 0.5u_g^2) + pu_g]}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_g(T_g) \frac{\partial T_g}{\partial x} \right) + \alpha_p n_p S_p(T_p - T_g) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_g(T_g) \frac{\partial T_g}{\partial x} \right) + \alpha_p n_p S_p(T_p - T_g) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_g(T_g) \frac{\partial T_g}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_g(T_g) \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_g(T$$

$$+ (G_1 + G_2 - \alpha_3 G_3 + G_4)(c_p T_p + 0.5u_p^2) - u_p \tau_{fr} + (Q_3 - Q_1)G_1 + (Q_3 - Q_2)G_2 + Q_5G_5, (3)$$

уравнение сохранения массы окислителя в газе

$$\frac{\partial \rho_{ox}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_{ox} u_g}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_g \rho_g(T_g) \frac{\partial a_{ox}}{\partial x} \right) - \alpha_1 G_1 - \alpha_2 G_2 - \alpha_3 G_3 - G_5,$$
(4)

уравнение баланса массы газообразных продуктов реакции окисления бора

$$\frac{\partial \rho_{B_2O_3}^g}{\partial t} + \frac{\partial \rho_{B_2O_3}^g u_g}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_g \frac{\partial \rho_{B_2O_3}^g}{\partial r} \right) + (1 + \alpha_1)(G_1 + G_2) + G_4, \quad (5)$$

уравнение сохранения массы частиц

$$\frac{\partial \rho_p}{\partial t} + \frac{\partial \rho_p u_p}{\partial x} = -(G_1 + G_2 - \alpha_1 G_3 + G_4), \quad (6)$$

уравнение баланса массы твердого оксида бора

$$\frac{\partial \rho_{\rm B_2O_3}^c}{\partial t} + \frac{\partial \rho_{\rm B_2O_3}^c u_p}{\partial x} = (1 + \alpha_3)G_3 - G_4, \quad (7)$$

уравнение сохранения импульса частиц

$$\frac{\partial(\rho_p u_p)}{\partial t} + \frac{\partial\rho_p u_p^2}{\partial x} =$$

$$= \tau_{fr} - (G_1 + G_2 - \alpha_3 G_3 + G_4)u_p, \quad (8)$$

уравнение сохранения энергии частиц

$$\frac{\partial \rho_p(\varepsilon_p + 0.5u_p^2)}{\partial t} + \frac{\partial \rho_p u_p(\varepsilon_p + 0.5u_p^2)}{\partial x} = = -\alpha_p S_p n_p (T_p - T_g) + \tau_{fr} u_p - - (G_1 + G_2 - \alpha_3 G_3 + G_4) (c_p T_p + 0.5u_p^2) + + Q_1 G_1 + Q_2 G_2 + Q_3 G_3 - Q_4 G_4, \qquad (9)$$

уравнение сохранения количества частиц

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} + \frac{\partial n_p u_p}{\partial x} = 0, \tag{10}$$

уравнение состояния идеального газа

$$p = \rho_q R_q T_q. \tag{11}$$

Начальные условия

$$T_g(x,0) = T_p(x,0) = T_b,$$

$$\rho_{ox}(x,0) = 0, \quad \rho_p(x,0) = 0, \quad \rho_g(x,0) = \rho_b,$$

$$\rho_{B_2O_3}^c(x,0) = \rho_{B_2O_3,b}^c, \quad \rho_{B_2O_3}^g(x,0) = 0,$$

$$u_g(x,0) = u_p(x,0) = 0, \quad n_p(x,0) = 0.$$
(12)

Граничные условия на поверхности топлива при x = 0:

$$\begin{split} \lambda_g \frac{T_g(0,t)}{\partial x} &= \\ &= \rho_{mix} v_{mix} (c_{p,g} T_g(0,t) - Q_s - c_{mix} T_{mix}), \\ &\frac{\partial \rho_{\text{B}_2\text{O}_3}^c(0,t)}{\partial x} = \frac{\partial \rho_{\text{B}_2\text{O}_3}^g(0,t)}{\partial x} = 0, \end{split}$$

$$T_p(0,t) = T_g(0,t), \ \rho_p(0,t) = \alpha_{\rm B}\rho_{mix},$$
(13)

 $\alpha_{ox} v_{mix} \rho_{mix} = D_g \frac{\partial \rho_{ox}(0,t)}{\partial x} + u_g(0,t) \rho_{ox}(0,t),$

$$\rho_g(0,t) = \frac{p}{R_g T_g(0,t)}, \quad n_p(0,t) = \frac{\rho_p(0,t)}{(4/3)\pi r_{p,0}^3 \rho_p^0},$$
$$\alpha_{\rm B}\rho_{mix} v_{mix} = \rho_p(0,t) u_p(0,t),$$
$$(1-\alpha_{\rm B})\rho_{mix} v_{mix} = \rho_g(0,t) u_g(0,t).$$

На границе $x = x_e$ задается давление

$$p(x_e, t) = p_e. \tag{14}$$

В уравнениях (1)–(14) α_p — коэффициент теплообмена газа с частицами, α_i — стехиометрические коэффициенты реакций кислорода с горючими компонентами (частицами и газом), $\gamma = c_{p,g}/c_{v,g}$ — показатель адиабаты, c_p , c_v — теплоемкость соответственно при постоянном давлении и постоянном объеме, $\varepsilon_g=p/(\rho_g(\gamma-1))$ — внутренняя энергия газа, $\varepsilon_p=c_pT_p$ — внутренняя энергия частиц, $\lambda = \lambda_{st} (T_g/T_b)^{2/3}$ — теплопроводность газа, au_{fr} — сила трения, ho_{mix} — плотность смесевого твердого топлива, ho_g — плотность газа, ρ_{ox} — парциальная плотность окислителя, ρ_p — распределенная плотность вещества частиц, $\rho^g_{\mathrm{B}_2\mathrm{O}_3}$ — парциальная плотность газообразного оксида бора, $\rho^c_{\mathrm{B}_2\mathrm{O}_3}$ — распределенная плотность конденсированного оксида бора, *D* — коэффициент диффузии, *G* — скорость изменения массы частиц при горении или окислении, n_p — количество частиц в единице объема, р — давление, Q — тепловой эффект реакции, Q_s — суммарный тепловой эффект реакций на поверхности конденсированной фазы, $S_p = 4\pi r_p^2$ — площадь поверхности частицы, R_q — газовая постоянная, t — время, T_{mix} температура поверхности топлива, Т — температура, *и* — скорость частиц или газа, *v_{mix}* -

линейная скорость горения МСТТ, x — координата. Индексы: 1, 2, 3, 4, 5 — для реакций, b — параметры в начальном состоянии, st параметры при нормальных условиях, mix смесевое твердое топливо, g — газ, p — частицы, c — конденсированная фаза оксида бора, ox — окислитель, f — горючее.

Радиус частицы бора вместе с оксидом определяется из выражения

$$r_p = \sqrt[3]{3\rho_p/(4\pi n_p \rho_p^0)},$$

без оксида — по формулам

$$r_{\rm B} = \left[\frac{3(\rho_p - \rho_{\rm B_2O_3}^c)}{4\pi n_p \rho_p^0}\right]^{1/3}$$

(на этапе окисления частицы),

$$r_{\rm B} = r_p$$

(на этапе гетерогенного горения частицы).

Здесь ρ_p^0 — начальная плотность материала частиц.

Скорости изменения массы частиц бора за счет гетерогенных реакций на поверхности частиц имеют вид [18]

$$G_1 = \frac{k_{01} \exp(-E_{a,1}/(R_u T_p))\beta_m}{k_{01} \exp(-E_{a,1}/(R_u T_p)) + \beta_m} n_p \rho_{ox} S_p,$$

$$G_2 = \frac{k_{02} \exp(-E_{a,2}/(R_u T_p))\beta_m}{k_{02} \exp(-E_{a,2}/(R_u T_p)) + \beta_m} n_p \rho_{ox} S_p,$$

где E_a — энергия активации, R_u — универсальная газовая постоянная, k_0 — константа скорости химической реакции, $\beta_m = \lambda_g \text{Nu}_d/(c_{p,g}\rho_g r_p)$ — коэффициент массообмена частиц, Nu_d — диффузионный аналог числа Нуссельта.

Скорость изменения массы частиц бора за счет окисления частиц с образованием конденсированного оксида B₂O₃ записывается в виде

$$G_3 = \beta_{m,eff} n_p \rho_{ox} S_p$$

где $\beta_{m,eff}$ — эффективный коэффициент массообмена, учитывающий диффузию окислителя через сферический слой оксида. Эффективный коэффициент массообмена окислителя определяется из выражения, аналогичного выражению для расчета эффективного коэффициента теплообмена через сферический слой [19]:

$$\beta_{p,eff} = \left[\frac{r_p}{D_g} + \frac{r_{\rm B}^2(1/r_{\rm B} - 1/r_p)}{D_d \exp(-E_d/(R_u T_p))}\right]^{-1},$$

где D_d — константа в зависимости коэффициента диффузии окислителя от температуры, E_d — энергия активации диффузии.

Скорость изменения массы частиц бора за счет испарения расплава оксида B_2O_3 имеет вид

$$G_4 = n_p \beta_m (\rho_{\mathrm{B}_2\mathrm{O}_3}^{sv} - \rho_{\mathrm{B}_2\mathrm{O}_3}^g) S_p,$$

где $\rho_{\rm B_2O_3}^{sv} = (p_{sv}\mu_g)/(R_uT_g)$ — плотность насыщенных паров вокруг частицы, $p_{sv} = p_{st}\exp(-L/(R_uT_p) + L/(R_uT_{p,boil}))$ — давление насыщенных паров, L — теплота парообразования, $T_{p,boil}$ — температура кипения оксида бора.

Скорость изменения массы окислителя в реакции в газовой фазе определяется выражением

$$G_5 = \rho_{ox} k_{05} \exp(-E_5/(R_u T_q)).$$

Сила трения между частицами и газом определяется выражением $\tau_{fr} = n_p F_{fr}$ [20], где $F_{fr} = C_r S_m \rho_g (u_g - u_p) |u_g - u_p|/2$ — сила вза-имодействия одиночной частицы с газом, $C_r = 24(1+0.15 {\rm Re}^{0.682})/{\rm Re}$ — коэффициент трения, ${\rm Re} = 2\rho_g r_p |u_g - u_p|/\eta_g$ — число Рейнольдса, S_m — площадь миделева сечения, η_g — динамическая вязкость газа.

Коэффициент теплообмена между газом и частицами вычисляется по эмпирической зависимости

$$\alpha_p = \lambda_q \mathrm{Nu}_p / (2r_p),$$

где $\operatorname{Nu}_p = 2 + (\operatorname{Nu}_l^2 + \operatorname{Nu}_t^2)^{1/2}$ — число Нуссельта, $\operatorname{Nu}_l = 0.664\sqrt{\operatorname{Re}}, \operatorname{Nu}_t = 0.037 \operatorname{Re}^{0.8}.$

В системе уравнений (1)–(14) координата x = 0 соответствует поверхности МСТТ. Полагалось, что граница горения перемещается со скоростью v_{mix} , при этом линейная скорость горения v_{mix} смесевого твердого топлива определяется по формуле $v_{mix} = (\nu_f m_f + \nu_B m_B + \nu_{ox} m_{ox}) / \rho_{mix}$ температура поверхности MCTT T_{mix} $\lambda_g \frac{T_g(0,t)}{\partial x}$ находится из выражения $\rho_{mix}v_{mix}(c_pT_q(0,t)-Q_s-c_{mix}T_{mix,0}),$ суммарный тепловой эффект в конденсированной фазе — $Q_s = \alpha_{ox}H_{ox} - (\nu_f H_f +$ $\nu_{\rm B}c_{\rm B})m_f/(\rho_{mix}v_{mix})$. В указанных выражениях c_{mix} — удельная теплоемкость МСТТ, $m_f = (\rho_f + \rho_B)k_{0f} \exp(E_f/R(T_g(0,t))),$ $m_{ox} = \rho_{mix}v_{mix}(\alpha_{ox}/\nu_{ox}), \nu_{ox}, \nu_f, \nu_B$ — объемные доли окислителя, горючего связующего и порошка бора в составе топлива, α_{ox} , α_f, α_B — массовые доли окислителя, горючего связующего и порошка бора в составе топлива, m_{ox}, m_f, m_B — массовые потоки окислителя, горючего связующего и порошка бора с единицы поверхности топлива, H_f , H_{ox} — тепловые эффекты реакций пиролиза связующего и разложения перхлората аммония соответственно.

Постановка задачи (1)–(14) не учитывает тепловую инерционность конденсированной фазы топлива (модель Германса [17]). Дисперсность окислителя в составе МСТТ не учитывается. Система уравнений записана в предположении монодисперсности частиц бора, выходящих с поверхности МСТТ в газовую фазу и избытка горючего в продуктах газификации МСТТ. Система уравнений (1)–(14) приведена в нестационарной постановке, так как для ее решения использовался метод установления.

ЧИСЛЕННЫЙ АЛГОРИТМ

Задача (1)–(14) решалась численно, аналогично [14, 20] с использованием метода Годунова [21] для уравнений движения газа. Слагаемые в правых частях уравнений, описывающие процессы переноса за счет механизмов теплопроводности и диффузии, аппроксимировались явно на трехточечном шаблоне. Расчет уравнений для частиц выполнен аналогично [22], использована схема распада в среде, лишенной собственного давления. В соответствии с условием устойчивости решения задачи шаг по времени определялся выражением $\Delta t < \Delta h / \max[c_q + |u_q|]$, где c_q — скорость звука в газе. Величина схемной диффузии при выбранном минимальном шаге $h = 10^{-6}$ м была много меньше коэффициента диффузии D_a .

Проверка достоверности программы осуществлялась из расчета адиабатической температуры горения и проверки выполнимости законов сохранения. Законы сохранения выполнялись с высокой точностью, погрешность составляла не более 0.05 %. Расчет адиабатической температуры давал отклонение от теоретически предсказанной температуры не более 0.1 %.

Система уравнений (1)–(14) решалась в соответствии со следующим алгоритмом вычисления значений неизвестных на (n + 1)-м временном слое (счет шага по времени). Вначале вычислялись значения потоков массы, импульса и энергии на границах ячеек, затем по явной разностной схеме определялись параметры (температура, скорость, массовые концентрации частиц и компонентов газа) на (n + 1)-м временном слое. Из параметров на (n + 1)-м временном слое определяли температуру поверхности МСТТ, а затем с ее помощью вычисляли линейную скорость горения на (n + 1)-м временном слое. Счет шага по времени повторялся необходимое количество раз. Расчеты проводились до установления стационарного распределения параметров газодисперсной среды над поверхностью горения.

Для согласования результатов расчета с известными экспериментальными результатами [23, 24] подбирались параметры реакций в газе и реакций окисления и горения частиц бора.

Вначале подбирались параметры реакции в газовой фазе для смесевого твердого топлива, не содержащего частиц бора. В качестве параметров согласования выступали тепловой эффект реакции в газе и предэкспоненциальный множитель в законе Аррениуса. Их подбирали таким образом, чтобы скорость горения смесевого твердого топлива без добавления порошка металла при давлении 10 МПа составляла 9 мм/с, конечная температура продуктов горения равнялась 2 800 K, в соответствии с экспериментальными данными [23].

Далее подбирались параметры реакций окисления и горения частиц бора, параметры реакции в газовой фазе оставались такими же, как и для безметалльного топлива. В качестве параметров согласования выступали коэффициент в законе диффузии окислителя через слой оксида бора к поверхности бора и эффективная теплота сгорания частиц бора.

При горении частиц бора в газе с недостатком окислителя эффективная теплота сгорания бора снижается. При определении эффективной теплоты сгорания частиц бора в продуктах газификации МСТТ использовались данные экспериментов [24], в которых для МСТТ состава $\alpha_{ox} = 0.6, \alpha_f = 0.154, \alpha_{\rm B} = 0.246$ со среднемассовым диаметром частиц бора 19.2 мкм при давлении над поверхностью горения 4.6 МПа скорость горения составила $v_{mix} = 13.8$ мм/с. Такое же значение v_{mix} было получено путем варьирования эффективной теплоты сгорания частиц бора и множителя D_d в законе зависимости коэффициента диффузии окислителя от температуры. При этом конечная температура продуктов сгорания составила 4080 К. Все дальнейшие параметрические расчеты проводились с подобранными значениями химикокинетических параметров реакции в газовой фазе и эффективной теплоты сгорания частиц бора.

СКОРОСТЬ ГОРЕНИЯ МСТТ

Для расчета использовались подобранные величины: Q₅, k₀₅ для реакции в газовой фазе; Q_{3.4}, D_d для реакций окисления и горения частиц бора. Формально-кинетические параметры химической реакции и теплота разложения ПХА в твердой фазе взяты из [25], формальнокинетические параметры реакции в газовой фазе — из [17, 26], а для химической реакции окисления бора — из [7]. Численное решение задачи (1)–(14) выполнено при следующих значениях физических величин: $Q_1 = 31.2 \text{ MДж/kr}$, $Q_2 = -1.3$ МДж/кг, $Q_3 = 31$ МДж/кг, $Q_4 = 0.3$ МДж/кг, $Q_5 = 7.8$ МДж/кг, $k_{01} = -1.3$ 10^3 M/c, $k_{02} = 10^5$ M/c, $k_{05} = 10^{10} c^{-1}$, L = 0.36 МДж/кг, $E_1 = 112$ кДж/моль, $E_2 = 252$ кДж/моль, $E_d = 10$ кДж/моль, $E_5 = 188$ кДж/моль, $E_f = 50.24$ кДж/моль, $\alpha_1 = 2.18, D_d = 1.89 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{c}, c_{p,g} =$ 1065 $\exists \exists m / (\kappa r \cdot K), c_{v,q} = 768.2 \ \exists m / (\kappa r \cdot K),$ $\lambda_{g,0} = 0.06 \text{ Bt}/(\text{M} \cdot \text{K}), H_{ox} = 1\,339.78 \text{ кДж/кг},$ H_f = 732.7 кДж/кг, k_{0f} = 0.4 м/с, R_u = 8.31 Дж/(моль · К), $R_g = 264$ Дж/(кг · К), $\rho_{ox} = 1950$ кг/м³, $\rho_f = 1270$ кг/м³, $\rho_B = 2340$ кг/м³, $\mu_{\rm B} = 11 \cdot 10^{-3} \text{ кг/моль}, c_p = 1\,293 \text{ Дж/(кг \cdot K)}, c_{mix} = 1\,465 \text{ Дж/(кг \cdot K)}, \rho_p^0 = 2\,340 \text{ кг/м}^3, \eta =$ $2 \cdot 10^{-5}$ Па·с, $T_{p.boil} = 2\,133$ К. Окисление бора проходит в соответствии с реакцией 4В + $3O_2 = 2B_2O_3$. Тогда массовые стехиометрические коэффициенты в уравнениях (1)–(9) имеют величину $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 6\mu_{ox}/4\mu_{\rm B} =$ 24/11. Массовая доля окислителя в составе смесевого топлива задавалась равной $\alpha_{ox} = 0.6$, доля связки — $\alpha_f = 0.154, 0.25, 0.3,$ доля бора определялась выражением $\alpha_{\rm B} = 1 - \alpha_{ox} - \alpha_f$. Начальный радиус частиц бора варьировался в диапазоне $r_{p,0} = (0.5 \cdot 10^{-6}) \div 10^{-5}$ м. Предполагается, что на поверхности частиц, выходящих с поверхности МСТТ в газовую фазу, имеется начальный оксидный слой толщиной $\Delta r_{p,0} = 10^{-3} r_{p,0}$. Давление газа над поверхностью горения варьировалось в диапазоне $3 \div 10$ MIIa.



Рис. 1. Линейная скорость горения смесевого твердого топлива (a) и температура его поверхности (δ)

Результаты расчетов приведены на рисунках. На рис. 1, *а* представлена зависимость линейной скорости горения смесевого твердого топлива без добавления порошка металла от давления над поверхностью горения, на рис. $1, \delta$ — зависимость температуры поверхности смесевого твердого топлива от давления.

На рис. 2 представлены установившиеся распределения температуры газа и частиц, скорости движения газа и частиц при p = 6 МПа для МСТТ состава $\alpha_{ox} = 0.6$, $\alpha_f = 0.154$, $\alpha_B = 0.246$ с радиусом частиц $r_{\rm B,0} = 1$ и 9.6 мкм. Видно, что в случае $r_{\rm B,0} = 9.6$ мкм на представ-



Рис. 2. Установившиеся распределения температур (*a*) и скоростей (*б*) газа и частиц по пространству (p = 6 MIIa)

ленном участке температура 4 000 К не достигается, разогрев газа и частиц до такой температуры происходит дальше от поверхности МСТТ. Это связано с тем, что частицы достаточно крупные и их доокисление происходит далеко от поверхности МСТТ. Указанный эффект не сказывается на скорости горения МСТТ. При p = 6 МПа она составила 12.7 мм/с для частиц бора радиусом $r_{\rm B,0} = 1$ мкм и 13.8 мм/с для частиц радиусом $r_{\rm B,0} = 9.6$ мкм.

Согласно расчетам скорость горения состава $\alpha_{ox} = 0.6$, $\alpha_f = 0.154$, $\alpha_{\rm B} = 0.246$ при p = 4.6 МПа равна $v_{mix} = 13.4$ мм/с, что близ-



Рис. 3. Зависимость линейной скорости горения MCTT от давления над поверхностью топлива при различных радиусах частиц бора

ко к результатам экспериментов [24]. Результаты параметрического исследования зависимости линейной скорости горения МСТТ с содержанием частиц бора $\alpha_{\rm B} = 0.246$ от давления газа над поверхностью горения при размере частиц бора $r_{\rm B,0} = 0.5, 1, 2, 4, 9.6$ мкм представлены на рис. 3. Видно, что наибольшая скорость горения достигается для частиц радиуса 0.5 мкм. Скорости горения МСТТ с частицами радиуса 1 и 2 мкм практически совпадают и расположены ниже остальных. Увеличение радиуса частиц от 2 до 4 мкм, а далее до 9.6 мкм приводит к росту линейной скорости горения МСТТ. Это объясняется тем, что для крупных частиц реализуется только реакция образования оксидного слоя на поверхности частиц. Для более мелких частиц происходит еще и испарение оксидного слоя с расходованием энергии частиц. Согласно полученным результатам мелкие частицы при высоком давлении не успевают окислиться, практически сразу реализуется высокотемпературный гетерогенный режим горения порошка бора. Из обработки результатов получены следующие законы скорости горения МСТТ [мм/с]: для частиц бора 0.5 мкм — $v_{mix} = 0.67p^{0.17}$, для частиц 1÷4 мкм — $v_{mix} = 0.5p^{0.21}$, для частиц 9.6 мкм — $v_{mix} = 0.6p^{0.2}$ (p — [атм]).

На рис. 4 представлена зависимость линейной скорости горения МСТТ от давления v_{mix} , мм/с



Рис. 4. Зависимость линейной скорости горения MCTT от давления над поверхностью топлива с различным массовым содержанием бора

при массовом содержании бора в топливе 0.246, 0.15, 0.1. Радиус частиц бора равен 2 мкм. Согласно полученным результатам наибольшую линейную скорость горения имеет МСТТ с наибольшим содержанием бора. Из обработки результатов расчета закон скорости горения для топлива с содержанием бора 0.15 имеет вид $v_{mix} = 0.2p^{0.4}$, а при содержании бора 0.1 $v_{mix} = 0.12p^{0.5}$ (p — [атм]).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе предложена новая физико-математическая модель горения MCTT. Она основана на подходах динамики многофазных реагирующих сред, учитывает изменение давления газа в пространстве и времени. Скорость горения МСТТ определяется на основе модели Германса горения МСТТ. Проведено численное исследование особенностей горения МСТТ, содержащего порошок бора.

Валидация результатов расчетов выполнена путем подбора параметров реакции в газе и теплового эффекта реакции бора с окислителем, таких чтобы расчетная скорость горения состава с заданными параметрами соответствовала экспериментальным данным [24].

Получена зависимость линейной скорости горения MCTT от давления, радиуса частиц бора, содержания бора в MCTT. Показано, что более крупные частицы бора могут увеличивать линейную скорость горения МСТТ. Это связано с тем, что для крупных частиц реализуется только реакция образования оксидного слоя на поверхности частиц. Для мелких частиц реализуются испарение оксидного слоя и уменьшение скорости горения МСТТ. Показано, что уменьшение массового содержания бора в МСТТ приводит к снижению линейной скорости горения топлива и существенному изменению закона скорости горения.

ЛИТЕРАТУРА

- Яновский Л. С., Лемперт Д. Б., Разносчиков В. В., Аверьков И. С., Шаров М. С. Оценка эффективности некоторых металлов и неметаллов в твердых топливах для ракетнопрямоточных двигателей // Физика горения и взрыва. — 2020. — Т. 56, № 1. — С. 81–94. — DOI 10.15372/FGV20200109.
- Mitsuno M., Kuwahara T., Kosaka K., Kubota N. Combustion of metallized propellants for ducted rockets // AIAA/ASME/SAE/ASEE 23rd Joint Propul. Conf. — 1987. — DOI: 10.2514/6.1987-1724.
- King M. K. Boron ignition and combustion in air-augmented rocket afterburners // Combust. Sci. Technol. — 1972. — V. 5, N 4. — P. 155– 164.
- Вовчук Я. И., Золотко А. Н., Клячко Л. А., Полицук Д. И. Высокотемпературное горение неподвижной частицы бора в кислородсодержащей среде // Физика горения и взрыва. — 1975. — Т. 11, № 4. — С. 556–563.
 Золотко А. Н., Мацко А. М., Поли-
- Золотко А. Н., Мацко А. М., Полищук Д. И., Буйновский С. Н., Гапоненко Л. А. Воспламенение двухкомпонентной газовзвеси частиц металлов // Физика горения и взрыва. — 1980. — Т. 16, № 1. — С. 23–26.
- Золотко А. Н., Киро С. А., Вовчук Я. И. Воспламенение частиц карбида бора в сухих кислородсодержащих средах // Физика горения и взрыва. — 1981. — Т. 17, № 6. — С. 3–10.
- 7. Золотко А. Н., Яковлева Т. А. Потухание дисперсных гетерогенных систем // Физика горения и взрыва. 1996. Т. 32, № 6. С. 12–19.
- 8. Zolotko A. N. The ignition and combustion of boron dust systems // Combustion of Boron-based Propellants and Solid Fuels: Book of Papers. — Boca Raton: CRC Press, 1993. — P. 455–468.
- Ягодников Д. А. Воспламенение и горение порошкообразных металлов. — М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2009.
- Ягодников Д. А. Экспериментальное исследование газодисперсного пламени частиц бора // Физика горения и взрыва. — 2010. — Т. 46, № 4. — С. 64–71.

- Ягодников Д. А., Папырин П. В., Сухов А. В. Математическая модель воспламенения одиночной частицы диборида алюминия // Наука и образование: науч. изд-е МГТУ им. Н. Э. Баумана. — 2014. — № 12. — С. 452–462.
- Папырин П. В., Сухов А. В., Ягодников Д. А. Единая математическая модель воспламенения и горения одиночных частиц диборида алюминия // Инж. журн.: наука и инновации. — 2017. — № 6 (66). — С. 5–16.
- Xu H.-X., Pang W.-Q., Guo H.-W., Zhao F.-Q., Wang Y., Sun Z.-H. Combustion characteristics and mechanism of boron-based, fuelrich propellants with agglomerated boron powder // Centr. Eur. J. Energ. Mater. — 2014. — V. 11, N 4. — P. 575–587.
- Крайнов А. Ю., Крайнов Д. А., Моисеева К. М., Порязов В. А., Хакимов А. А. Математическое моделирование горения газовзвеси порошка бора // Инж.-физ. журн. — 2021. — Т. 94, № 2. — С. 360–371.
- 15. **Нигматулин Р. И.** Динамика многофазных сред. М.: Наука, 1987.
- 16. Порязов В. А., Крайнов А. Ю. Расчет скорости горения металлизированного смесевого твердого топлива с учетом распределения агломератов по размерам // Инж.-физ. журн. 2016. Т. 89, № 3. С. 568–574.
- Hermance C. E. A model of composite propellant combustion including surface heterogeneity and heat generation // AIAA J. — 1966. — V. 4, N 9. — P. 1629–1637.
- Франк-Каменецкий Д. А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. — М.: Наука, 1987.
- Исаченко И. П., Осипова В. А., Сукомел А. С. Теплопередача. — М.: Энергия, 1975.
- 20. Моисеева К. М., Крайнов А. Ю., Дементьев А. А. Определение критических условий искрового зажигания бидисперсного порошка алюминия в воздухе // Физика горения и взрыва. — 2019. — Т. 55, № 4. — С. 26–33. — DOI: 10.15372/FGV20190404.
- Годунов С. К., Забродин А. В., Иванов М. Я., Крайко А. Н., Прокопов Г. П. Численное решение многомерных задач газовой динамики. — М.: Наука, 1976.
- 22. Крайко А. Н. О поверхностях разрыва в среде, лишенной «собственного» давления // Прикл. математика и механика. 1979. Т. 43, № 3. С. 500–510.
- Зенин А. А., Глазкова А. П., Лейпунский О. И., Боболев В. К. Влияние алюминия на горение перхлората аммония с полиформальдегидом // Физика горения и взрыва. — 1968. — Т. 4, № 3. — С. 299–304.
- 24. Порязов В. А., Глотов О. Г., Архипов В. А., Суродин Г. С., Дубкова Я. А. Влияние добавок порошков металлов на характеристики горения смесевого твердого топлива на

основе перхлората аммония и инертного связующего // Nonequilibrium Processes: Recent Accomplishments / S. M. Frolov, A. I. Lanshin (Eds). — М.: Торус Пресс, 2020. — С. 101–102.

- 25. Штейнберг А. С. Быстрые реакции в энергоемких системах: высокотемпературное разложение ракетных топлив и взрывчатых веществ. — М.: Физматлит, 2006.
- 26. Булгаков В. К., Липанов А. М. Теория эрозионного горения твердых ракетных топлив. — М.: Наука, 2001.

Поступила в редакцию 17.03.2021. После доработки 28.04.2021. Принята к публикации 09.06.2021.