

УДК 621.454

doi: 10.53816/20753608_2025_2_126

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ГОРЕНИЯ ПАСТООБРАЗНЫХ ТОПЛИВ MODELING THE COMBUSTION PROCESS OF PASTY PROPELLANTS

Чл.-корр. РАРАН В.А. Бабук, Э.С. Бурачек

БГТУ «ВОЕНМЕХ» им. Д.Ф. Устинова

V.A. Babuk, E.S. Burachek

В статье рассматриваются методы моделирования горения высокоэнергетических пастообразных топлив для космических двигателей. Разработана физическая картина процесса и математический аппарат для моделирования. Проведен анализ результатов, подтверждена правомерность модели и ее применение для оценки рецептур. Определены пути ее улучшения.

Ключевые слова: топливо, условное топливо, скорость горения, структура топлива, пастообразное топливо.

The article discusses methods for modeling the combustion process of high-energy pasty propellants for space propulsion engines. A physical picture of the process and a mathematical apparatus for solving the modeling problem are presented. The analysis confirms the validity of the model and its applicability for estimating composition solutions. Directions for model improvement are outlined.

Keywords: propellant, conventional propellants, burning rate, propellant structure, pasty propellant.

Введение

Двигатели космического назначения предназначены для решения разнообразных задач, связанных с транспортировкой аппарата, коррекцией орбиты, торможением спускаемого аппарата и т.д. Универсальным требованием к подобным двигателям, как и ко всем изделиям, используемым в космосе, является обеспечение высоких массово-габаритных характеристик. Как правило, используются химические двигатели — двигатели на жидком (ЖРД) и твердом (РДТТ) топливе. Возможной альтернативой этим двигателям являются двигатели на пастообразном топливе (РДПТ). Совокупность достоинств, заимствованных от ЖРД и РДТТ, делает РДПТ перспективным инструментом

для решения различных задач. Сдерживающим фактором при создании высокоэффективных РДПТ является недостаточная изученность процесса горения пастообразных топлив в настоящее время.

К пастообразным топливам (ПТ) [1, 2] относятся высоковязкие гетерогенные наполненные системы, сохраняющие физико-химическую стабильность и вязкотекучее состояние в заданном температурном диапазоне эксплуатации и хранения [1]. Основная компонентная база пастообразных топлив сходна с компонентной базой твердых топлив. Однако пастообразные топлива отличаются использованием так называемого жидковязкого связующего [1]. В известном смысле пастообразные топлива близки по свойствам к твердым топливам с неотвержденным

связующим, которое обеспечивает седиментационную устойчивость топлива [1, 2].

Целью настоящей работы является создание модели процесса горения ПТ, обеспечивающей решение задачи прогнозирования закона скорости горения.

Состав исследуемых топливных композиций

Авторами работы [2] был разработан состав ПТ для двигательных установок космического назначения. Он включает перхлорат полиэтиленполиамиона, пластифицированный этиленгликолем (ХПЕПА-22Э); октоген (НМХ); перхлорат аммония (ПХА) и алюминий (АI). Определен состав компонентов: ХПЕПА-22Э — 21%; НМХ — 28,27%; ПХА — 30%; АI — 20,73%. Данное рецептурное решение представляет собой базовый состав (Bas_0). Посредством модификации связующего с целью увеличения скорости горения [2] был получен топливный состав Bas_1. Добавление 0,5% (масс.) активированного угля в состав Bas_1 для изменения закона скорости горения — приводит к появлению состава Bas_2 [3]. В работе [4] исследуется влияние дисперсности окислителя при использовании состава Bas_2 на процесс горения. Таким образом, вводятся следующие композиции: Bas_3 (только мелкая фракция ПХА), Bas_4 (только крупная фракция ПХА). Последовательное развитие компонентного состава топливных композиций представлено схемой на рис. 1.

Результаты экспериментального исследования процесса горения

Применительно к ранее рассмотренным топливным композициям проведено экспериментальное исследование процесса горения, методика которого описана в работах [2, 3]. Результаты этого исследования обеспечивают определение закона скорости горения, характеристик процесса агломерации, а также свойств поверхностного слоя.

Зависимости, приведенные на рис. 2, 3 [4], иллюстрируют влияние рецептурных решений на скорость горения r_b и степень вовлеченности металлического горючего в агломерационный процесс Z_m^a .

Фиксируется образование каркасного слоя (КС), который представляет собой газопроницаемую объемную структуру, состоящую из углеродистых элементов, металла и его оксида, и находящуюся в поверхностном слое горящего топлива [5, 6]. Особенностью КС является то, что он занимает только часть поверхности свободной от частиц окислителя.

Отметим, что параметр Z_m^a коррелируется с долей поверхности горящего топлива, на которой имеет место формирование каркасного слоя.

Физическая картина процесса горения

Ранее, в работе [4], была представлена общая физическая картина процесса горения

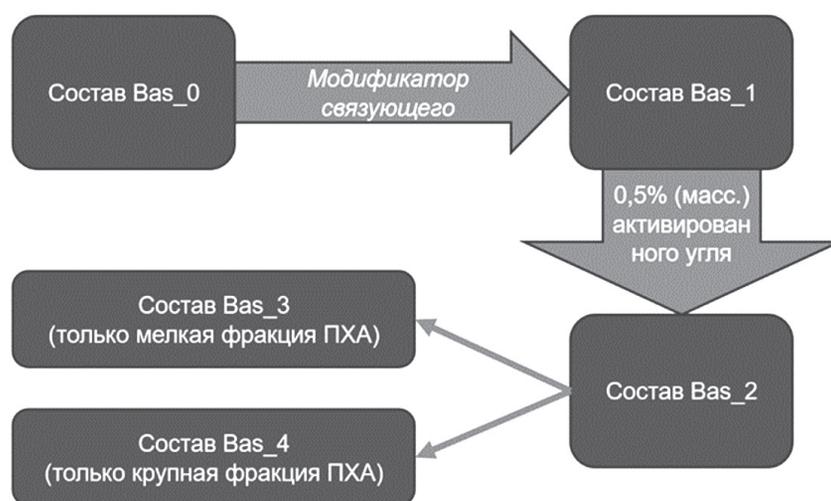


Рис. 1. Схема трансформации рецептурных решений

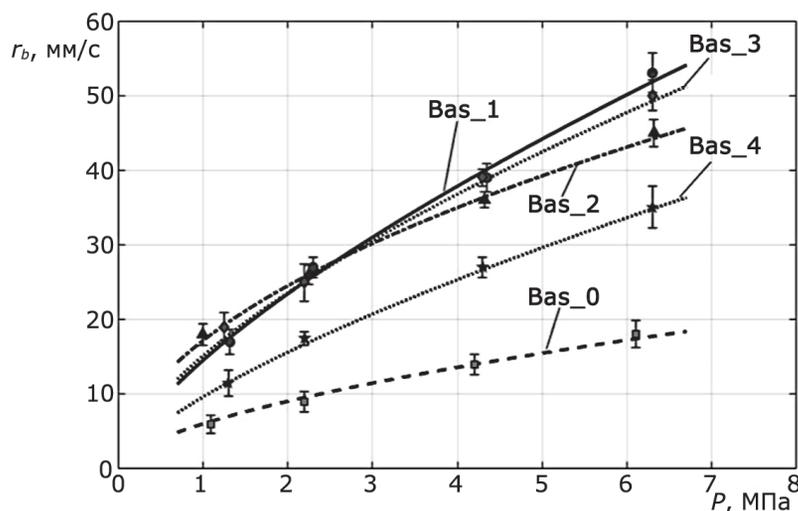


Рис. 2. Зависимость скорости горения топливных композиций от давления

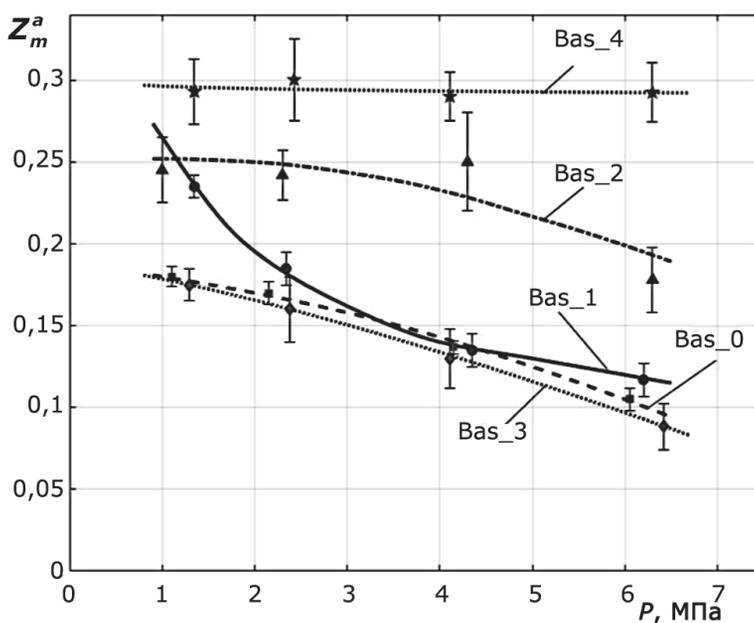


Рис. 3. Зависимости массовой доли агломерирующего металла от давления

исследуемых ПТ. Она базируется на введении понятий об условных топливах, которые связаны со структурой топлива. Эта структура описывается в свою очередь с помощью таких понятий, как «карман» и «межкарманный мостик» (МКМ). «Карман» — это ячейка композиции связующее — металл, ограниченная частицами окислителя, а «межкарманный мостик» — ячейка этой композиции между двумя частицами окислителя, формирующими «карман». Существенной особенностью «кармана» является возможность образования каркасного слоя, а следовательно, и агломератов. Установлено, что на-

личие КС имеет значительное влияние на закон скорости горения [6].

Учитывая тепловую природу процесса горения, скорость горения в существенной мере определяется тепловыми потоками, поступающими из газовой фазы в конденсированную фазу горящего топлива. В этой связи выделим источники тепловыделения (пламена) в газовой фазе. При горении «межкарманных мостиков» формируется топливная смесь, которая в значительной степени является однородной, образуя гомогенное (кинетическое) пламя. В границах «карманов» имеет место

формирование гомогенного пламени при наличии КС, гомогенного пламени при отсутствии КС и диффузионного пламени. Отдельно необходимо выделить тепловыделение, обусловленное сгоранием агломерирующего металла в пределах КС. Схема пламен в зоне горения представлена на рис. 4.

Таким образом, разработанное описание позволяет определить источники тепловыделения, обеспечивающие реализацию процесса горения. Это описание может служить основой для математического моделирования процесса горения рассматриваемых топлив.

Математическое описание процесса горения

В основе математического описания процесса горения ПТ лежит идеология модели конкурирующих пламен, также известная как Beckstead — Derr — Price (BDP) модель [7].

Допущением BDP-модели является утверждение о том, что поверхность горения — плоская. Следовательно, для упрощения проводимых расчетов не учитывается кривизна поверхности горения, которая имеет место при распространении волны горения.

Топливная композиция рассматривается как совокупность двух условных топлив (УТ), способных к самостоятельному горению:

1) гомогенное топливо — смесь горюче-связующего, порошка алюминия и мелкой фракции ПХА;

2) гетерогенное топливо — смесь горюче-связующего, порошка алюминия, мелкой и крупной фракции ПХА, НМХ.

Знание скоростей горения условных топлив и их содержания в составе ПТ позволяет определить и скорость горения топлива в целом [8]:

$$r_b = \frac{1}{\gamma_1 / r_{p1} + \gamma_2 / r_{p2}},$$

где $\gamma_1, \gamma_2, r_{p1}, r_{p2}$ — объемные доли и скорости горения условных топлив.

Рассмотрим принципы математического описания процесса горения условных топлив. При этом примем следующие допущения:

- распределение параметров области горения является одномерным;
- температура газовой фазы в зависимости от пространственной координаты изменяется линейно;

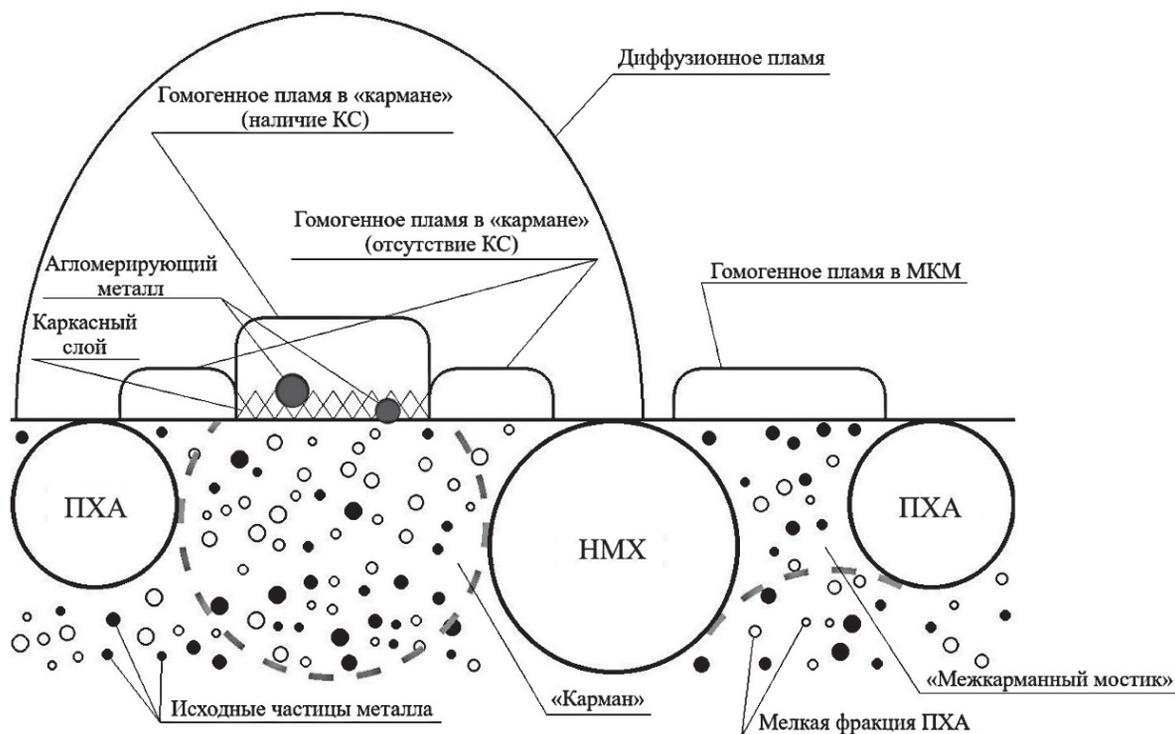


Рис. 4. Схематизация пламен в зоне горения

– реакции в конденсированной фазе осуществляются на поверхности горящего топлива;

– параметры диффузионного пламени определяются только молекулярной диффузией.

Учитывая идеологию BDP-модели и введенные допущения, уравнение, выражающее наличие теплового баланса на поверхности каждого УТ, имеет следующий вид:

$$q_{io_c} = r_p \rho_p [c_p (T_s - T_i) + \Delta H], \quad (1)$$

где q_{io_c} — плотность теплового потока, поступающая в конденсированную фазу из области горения;

r_p — линейная скорость горения условного топлива;

ρ_p — плотность исходного топлива;

c_p — удельная теплоемкость исходного топлива;

T_s, T_i — температура поверхности горения условного топлива и начальная температура топлива;

ΔH — удельная теплота физико-химических превращений в конденсированной фазе.

Соотношение (1) является следствием закона сохранения энергии. Массовая скорость горения может быть определена при использовании одного из основных соотношений химической кинетики — уравнения Аррениуса. Оценим процесс горения как реакцию нулевого порядка. Тогда массовая скорость горения УТ имеет следующий вид:

$$r_p \rho_p = A \cdot e^{-\frac{E}{RT_s}},$$

где A — предэкспонентный коэффициент;

E — энергия активации разложения условного топлива;

R — универсальная газовая постоянная.

Первое УТ располагается в пределах «межкарманных мостиков» (рис. 4). Интенсивность подвода тепла из зоны горения в газовой фазе зависит от кинетических факторов. Величина q_{io_c} определяется следующим образом:

$$q_{io_c} = q_{hf},$$

где q_{hf} — плотность теплового потока гомогенного пламени.

Величина q_{hf} зависит от температуры пламени и поверхности топлива, теплофизических свойств газовой фазы и параметров, определяющих кинетику химических реакций в этой фазе [9].

Второе условное топливо располагается в пределах «карманов». Оно имеет в значительной степени неоднородную структуру — реализуется механизм горения гетерогенного топлива. При определении q_{io_c} учитывается доля поверхности «кармана», которая покрыта каркасным слоем. В общем случае выражение для определения q_{io_c} имеет следующий вид:

$$q_{io_c} = (1 - \xi) \cdot q'_{hf} + \xi \cdot (q_{mb} + q''_{hf}) + q_{df},$$

где ξ — доля поверхности «кармана», на которой находится каркасный слой;

q'_{hf} — плотность теплового потока от гомогенного пламени при отсутствии каркасного слоя;

q_{mb} — плотность теплового потока, обусловленного горением металла в каркасном слое;

q''_{hf} — плотность теплового потока от гомогенного пламени при наличии каркасного слоя;

q_{df} — плотность теплового потока от диффузионного пламени.

Интенсивность подвода тепла от гомогенного пламени описывается также как и для первого условного топлива. Определение величины q_{df} базируется на знании температуры и высоты диффузионного пламени. Эта высота определяется при использовании размера частиц крупной фракции окислителя и коэффициента молекулярной диффузии [9].

При определении величины q_{mb} считается, что теплоподвод от КС определяется сгоранием металла в гетерогенном режиме [10]. Для отыскания этой величины используется соотношение следующего вида:

$$q_{mb} = H_{mb} \cdot e^{-\frac{E_m}{RT_m}} T_m;$$

$$T_m = k_m \cdot T_{melting} + (1 - k_m) \cdot T_{boiling},$$

где H_{mb} — постоянный коэффициент;

E_m — эффективная энергия активации;

T_m — температура металла;

k_m — коэффициент, учитывающий неопределенность температуры металла;

$T_{melting}$ — температура плавления оксида металла;

$T_{boiling}$ — температура кипения системы металл — оксид.

Приведенное выше описание предполагает наличие пространственного информационного обеспечения. Предполагается, что часть этого обеспечения должна быть получена при использовании экспериментальных данных, а другая — посредством применения расчетных средств. Рассмотрим используемые расчетные методы.

Информационное обеспечение

Расчетными методами могут быть определены характеристики пламен и параметры структуры топлива.

Для отыскания характеристик пламен предлагается использовать аппарат равновесной термодинамики [11]. В основе определения характеристик пламен лежит следующее допущение. Топливо состоит из совокупности фрагментов, горение которых осуществляется в адиабатных условиях с образованием равновесной смеси продуктов сгорания. Характеристики этой смеси и определяют характеристики соответствующего пламени. Исходные данные (условная формула и энтальпия) определяются исходя из содержания компонентов в соответствующем фрагменте.

Определим рассматриваемые фрагменты и тип пламени, которым они соответствуют.

1. Связующее, мелкая фракция ПХА, частично крупная фракция окислителя, А1 — гомогенное пламя первого УТ.

2. Связующее, мелкая фракция ПХА, А1 — гомогенное пламя второго УТ при отсутствии КС.

3. Связующее, мелкая фракция ПХА, А1 — гомогенное пламя второго УТ при наличии КС.

4. Связующее, ПХА, НМХ, неагломерирующее металлическое горючее — диффузионное пламя второго УТ.

Результатом расчета являются температуры всех рассмотренных пламен.

Определение характеристик структуры осуществлялось при использовании модели, представленной в работе [12]. Эти характеристики обеспечивают отыскание соотношения между «карманами» и МКМ, параметров дисперсности «карманов» и частиц окислителя, формирующих «карманы» различных размеров.

Схематизация структуры при использовании таких понятий, как «карман» и МКМ, показана на рис. 5.

Входными данными используемой модели являются:

- параметры дисперсности частиц окислителя;
- содержание компонентов в составе топлива.

Результаты моделирования структуры ПТ для топливных составов Bas_1, Bas_2, Bas_3 и Bas_4 представлены в таблице.

Решение задачи многопараметрической оптимизации

Для подтверждения адекватности предложенной модели, а также получения ее информационного обеспечения используется оптимизационная процедура.

Следствием ее реализации является определение варьируемых параметров, обеспечивающих минимальное значение целевой функции, при наличии функциональных и параметрических ограничений.

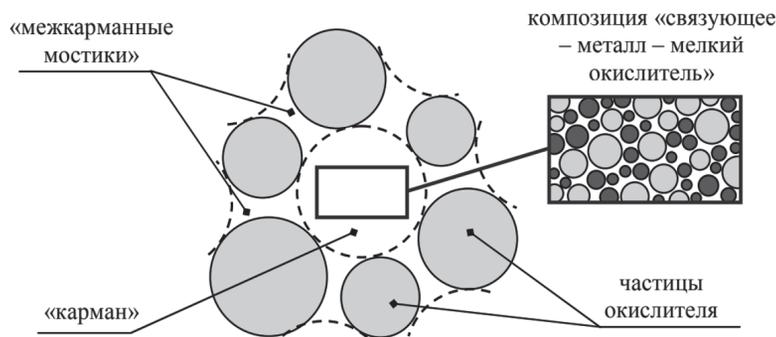


Рис. 5. Схематизация структуры ПТ

Результаты моделирования структуры исследуемых ПТ

	Средне-массовый размер «карманов», мкм	Массовая доля «карманов» в композиции «связующее — металл», мкм	Средне-массовый размер частиц, образующих «карман», мкм
Bas_1	104,67	0,702	204
Bas_2			
Bas_3	91,87	0,568	189
Bas_4	143,19	0,561	212

Целевой функцией является параметр, определяющий рассогласование между расчетными и экспериментальными данными:

$$err = \frac{\sum_1^k \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n \left((r_b)_i - (r_{exp})_i \right)^2}{(r_{exp})_i^2}} / n}{k},$$

где k — количество исследуемых топливных составов;

n — количество точек по давлению, используемых для оптимизации;

$(r_b)_i$ — расчетное значение скорости горения для i -го давления;

$(r_{exp})_i$ — экспериментально определенная скорость горения для i -го давления.

Абсолютное значение параметра err можно рассматривать как параметр, определяющий качество моделирования.

В качестве варьируемых используются параметры, которые определяют кинетику процессов в газовой и конденсированной фазах.

В условиях многопараметрической оптимизации велика вероятность того, что искомые величины примут значения, которые противоречат физической природе рассматриваемых процессов. Для решения этой проблемы вводится совокупность функциональных и параметрических ограничений. Рассмотрим эти ограничения.

Температура поверхности условных топлив принимается в диапазоне от 600 до 750 К, что соответствует экспериментально наблюдаемым значениям [9]. Параметрическое ограничение на энергию активации реакций в газовой фазе (МКМ и «карман») сводится к диапазону от $5e+4$ до $2e+5$ Дж/моль [13].

Кроме того, в рамках идеологии BDP-модели, вводится ограничение на соотношение плот-

ностей тепловых потоков от различных источников тепловыделения. Они должны быть «конкурентно способны». В настоящей работе применялось ограничение к плотностям тепловых потоков в «кармане», за исключением плотности теплового потока, поступающего от горящего металла в пределах КС, — максимальная плотность теплового потока может отстоять от минимального не более чем в 100 раз.

Для получения физически правомерных результатов требуется выполнение условия превышения линейной скорости горения МКМ над скоростью горения «кармана».

Решение оптимизационной задачи

К настоящему времени разработано множество алгоритмов решения оптимизационных задач — нахождения глобального минимума функции. В рамках настоящей работы используется метод дифференциальной эволюции (DE) [14]. Данный метод представляет собой прямой метод многомерной математической оптимизации, относящийся к классу стохастических алгоритмов оптимизации и использующий некоторые идеи генетических алгоритмов. Метод DE предназначен для нахождения глобального минимума недифференцируемых, нелинейных, мультимодальных функций от многих переменных. Основными достоинствами данного метода являются простота реализации алгоритма в программном коде и возможность распараллеливания вычислений, что позволяет сократить время счета на многоядерных ЭВМ.

Оптимизационным задачам с высокой степенью размерности может сопутствовать значительное количество локальных минимумов. Возникает проблема влияния начальных значе-

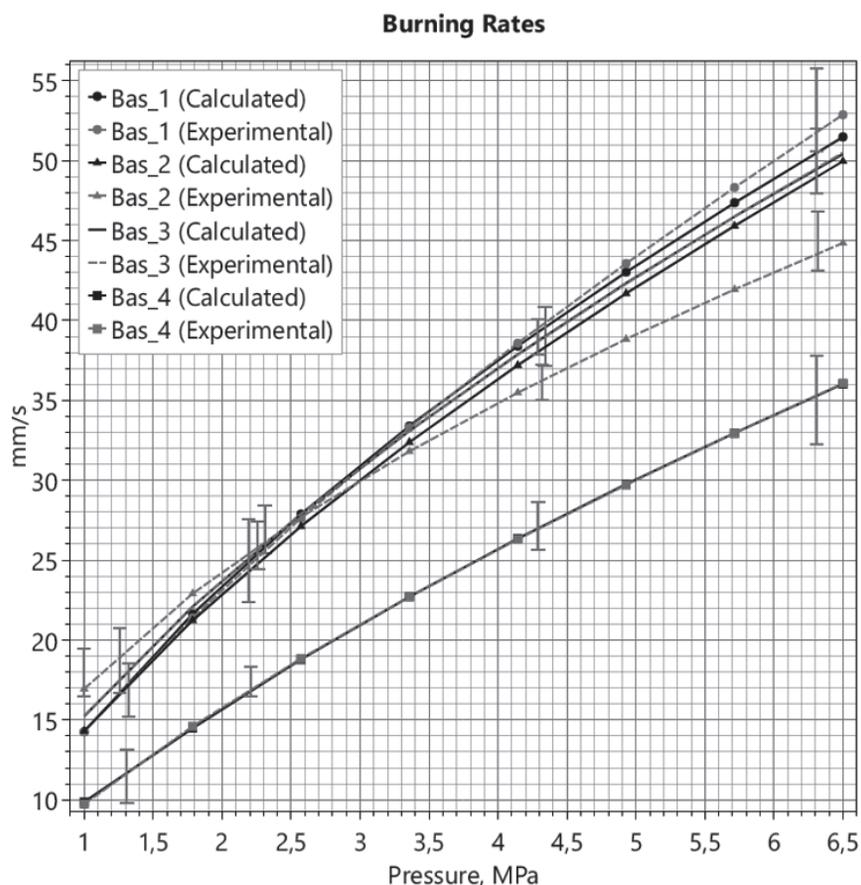


Рис. 6. График зависимости скорости горения от давления

ний варьируемых параметров на получаемый результат. Уверенность в соответствии полученного решения глобальному минимуму требует отдельного исследования. В рамках настоящей работы проводился многократный запуск оптимизационного алгоритма. Было показано, что ввиду стохастической природы алгоритма DE изменение значений не влияет на получаемый результат.

Обсуждение полученных результатов. Направление дальнейших работ

Анализ экспериментальных данных позволил сделать вывод, что процесс горения составов Bas_1, Bas_2, Bas_3, Bas_4 отличается только параметрами структуры (соотношением «карманов» и МКМ) и относительной поверхностью «карманов», на которой формируется каркасный слой (параметр ξ). Применительно к этим составам и была использована разработанная модель. Полученное значение целевой функции со-

ставляет величину 0,027. На рис. 6 приведены расчетные и экспериментальные зависимости скорости горения от давления.

Полученные результаты свидетельствуют, что наибольшие проблемы при моделировании процесса горения существуют для состава Bas_2 (рис. 6). Для остальных составов расчетные зависимости $r_b(P)$ находятся в пределах доверительных интервалов, полученных экспериментально (рис. 6). В целом можно говорить, что модель позволяет описывать основные закономерности процесса горения.

Состав Bas_2 отличается от состава Bas_1 только интенсификацией образования КС и, как следствие, существенно большей вовлеченностью металлического горючего в агломерационный процесс (рис. 3). Был сделан вывод о наличии проблем при описании теплового потока, возникающего вследствие наличия КС. По-видимому, при определении величины q_{mb} следует учитывать геометрические размеры и структуру каркасного слоя, а также влияние на эти характе-

ристики давления. Направление дальнейших работ по совершенствованию моделирования процесса горения должно быть связано с решением этой проблемы.

Заключение

При выполнении настоящей работы получены следующие основные результаты.

1. Разработан алгоритм описания сложного физического явления — процесса горения высокоэнергетического пастообразного топлива, базирующийся на использовании процедуры многопараметрической оптимизации.

2. Создана математическая модель процесса горения пастообразных топлив. Модель базируется на полученном экспериментальном материале. Она позволяет оценивать влияние различных рецептурных решений на закон скорости горения этих топлив. Эти решения связаны с изменением содержания компонентов, дисперсностью окислителя, наличием добавок, влияющих на формирование каркасного слоя. Определены направления совершенствования модели.

Список источников

1. Ракетно-прямоточные двигатели на твердых и пастообразных топливах. Основы проектирования и экспериментальной отработки / Соколин В.А. [и др.]. М.: Физматлит, 2010. 321 с.

2. Бабук В.А., Куклин Д.И., Нарыжный С.Ю., Низяев А.А. Пастообразные топлива и закономерности их горения // Физика горения и взрыва. 2023. Т. 59. № 2. С. 125–132.

3. Babuk V.A., Kuklin D.I., Naryzhny S.Yu. Features of the mechanism of pasty propellants burning // *Energetic Materials Frontiers*. 2024. Vol. 5. Issue 3. Pp. 232–238.

4. Бабук В.А., Куклин Д.И., Нарыжный С.Ю., Низяев А.А. Рецептурные решения и закономерности горения пастообразных конденсированных систем // Горение и взрыв. 2024. Т. 17. № 3. С. 101–110.

5. Бабук В.А. Свойства поверхностного слоя и закономерности горения металлизированных твердых топлив // Физика горения и взрыва. 2009. Т. 45. № 4. С. 159–165.

6. Будный Н.Л., Куклин Д.И., Нарыжный С.Ю., Низяев А.А. и др. Промежуточные структуры в процессе горения высокоэнергетических конденсированных систем // Физика горения и взрыва. 2022. Т. 58. № 4. С. 16–23.

7. Beckstead M.W., Derr R.L., Price C.F. A model of composite solid-propellant combustion based on multiple flames. *AIAA J*, 1970; 8(12):2200-7.

8. G. Lengelle, J. Duterque, and J.F. Trubert, *Physico-Chemical Mechanisms of Solid Propellant Combustion*, in V. Yang, T.B. Brill, and W.Z. Ren, (Eds), *Solid Propellant Chemistry, Combustion, and Motor Interior Ballistics*, American Institute of Aeronautics and Astronautics, Reston, 2000. Pp. 287–334.

9. Пономаренко В.К. Ракетные топлива: учебник. СПб.: ВИККА им. А.Ф. Можайского, 1995. 619 с.

10. Valery Babuk, Ildar Dolotkazin, Alexey Gamsov, Andrey Glebov, Luigi T. DeLuca, and Luciano Galfetti. Nanoaluminum as a Solid Propellant Fuel // *Journal of Propulsion and Power*, 2009. V. 25. No. 2. Pp. 482–489.

11. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания. Т. 1; под ред. В.П. Глушко. М. 1971. 266 с.

12. Бабук В.А., Низяев А.А. Моделирование структуры смесевых твердых топлив и проблема описания процесса агломерации // Химическая физика и мезоскопия. 2014. Т. 16. № 1. С. 31–42.

13. Карзунов М.Д., Бабук В.А. Моделирование процесса горения пастообразных топлив // Молодежь. Техника. Космос: труды XV общероссийской молодежной науч.-техн. конф. в 4 т. 2023. Т. 1. С. 72–75.

14. R. Storn and K. Price. Differential evolution — A simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces // *J. Global Optim.* 1997. Vol. 11. No 4. Pp. 341–359.