

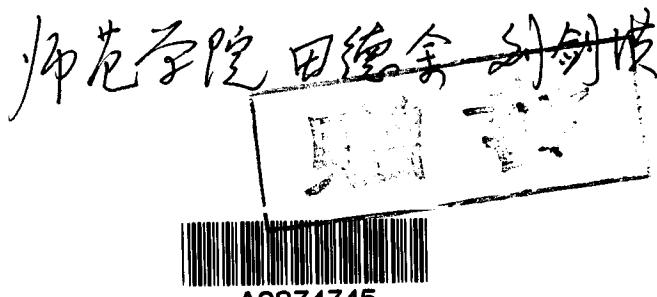
V51

T56

科学与工程计算丛书

化学推进剂计算能量学

田德余 刘剑洪 著



河南科学技术出版社

第一章 絮 论

1.1 推进剂的发展简史

随着航天事业的发展,各式各样的火箭、导弹及各种人造卫星、宇宙飞船对推进剂的要求越来越严格,要求其能量高、性能优良。近年来一些国家加紧了自由基推进、核推进、电推进、光子推进的研究,但离实际使用还有很大距离。化学推进仍是迄今惟一使用的推进剂。

化学推进剂是根据反冲原理工作的火箭,在理想的工作条件下以化学反应热提供必要的推进能,以气态燃烧产物的形式提供工作介质。化学火箭按照内部加热原理工作,需要一个质量和体积小的换热器——能量转化器(即发动机),根据它的发明家的名字命名为拉瓦尔喷嘴。这种推进器是很简单的,它允许任意大的质量流量,在这种情况下用化学火箭达到的加速度,超过地球抛射速度的许多倍,以致使飞行器离开地面进入自由的宇宙或者运行到其他天体的重力场里去。

在化学推进中参加化学反应的全部组分统称为化学推进剂。人们根据这些组分在通常条件下所呈现的状态又把化学推进剂分为液体推进剂、固体推进剂、固液混合推进剂及胶凝推进剂等。它们以化学能的形式把能量贮存起来,在外界激发冲量的作用下,有规律地释放出来,并以推进剂自身燃烧产物——燃气作为工质,该

工质在流经火箭发动机喷管时进行膨胀加速,从而产生反作用推力向外界作功。

推进剂的发展史在某种意义上说就是能量发展史。固体推进剂亦称火药,是我国古代四大发明之一。唐代炼丹家孙思邈(581—682)著有《丹经》、《千金要方》等书,在《丹经》“伏火硫磺法”中首次记述了黑火药的配方,将62g硫磺和62g硝石研成粉末,放在锅内,挖一坑,放锅于坑内与地平,四面以土填实。再将三个皂角子逐一点着,夹入锅内,使硫磺、硝石燃起焰火。等到燃不起焰火时,再拿生熟木炭1500g来炒,等到木炭消去1/3,就退火,趁没有冷却时取出混合物。这样就叫“伏火”了。这三种天然的纯度不高的原材料,混合起来就具备了着火的药的特性,简称火药。直至13世纪才先后传入阿拉伯地区和欧洲,14世纪中期欧洲才有应用火药和火药武器的记载,中国最早发明的黑火药的能量(热量)只有2929kJ/kg左右,使用这种火药的火炮的射程约为6000m。硝化棉火药能量可达3766kJ/kg,火炮的射程提高到30000m左右。双基推进剂出现后,其能量可达5230kJ/kg,但对线膛炮产生严重的烧蚀问题。为适应火药能量的发展,在第一次世界大战后研制出了新式武器——火箭。这就是火药能量的发展,促进了武器发展的实例。由于火箭的出现和发展又对火药提出了更高的要求,1946年后出现了能量更高的复合固体推进剂。第二次世界大战期间使用的沥青推进剂(由沥青和高氯酸钾组成),由于能量低、力学性能差,很快就为交联弹性体的聚硫橡胶推进剂(PS)所代替。合成高分子工业的发展,为推进剂提供了新的粘合剂和浇铸工艺技术。1946年以后,美国JPL研制成功以PS为代表的推进剂以后,相继出现聚氯乙烯推进剂(PVC)、聚氨酯推进剂(PU)、聚丁二烯丙烯酸推进剂(PBAA)、聚丁二烯丙烯腈推进剂(PBAN)、端羧基聚丁二烯推进剂(CTPB)、端羟基聚丁二烯推进剂(HIPB)。为适应火箭、导弹对推进剂高能量、高性能的要求,又研制

成功了浇铸双基推进剂、配浆浇铸推进剂、复合改性双基推进剂(CMDB)、交联改性双基推进剂(XLDB)、复合双基推进剂(CDB)及含硝胺的丁羟复合推进剂等。70年代末至80年代初,为满足战略导弹MX的要求,研制成功硝酸酯增塑的聚醚推进剂,即NEPE推进剂。它突破了双基和复合推进剂在组成上的界限,集两类推进剂的优点于一体,是现装备推进剂中能量最高的一种推进剂。现在,科学家正在研制含高能量密度材料的高能推进剂。为适应现代宇宙航行的需要,人们又在研究用自由基推进、核推进、电推进、光子推进等推进技术。

1.2 计算能量学的科学价值和实际意义

为了全面地研究推进剂的能量特性,人们从燃烧产物的放热性、解离特性及化学键的基本原理出发,系统地阐述推进剂的能量水平,根据系统达到化学平衡时其自由能函数之总和为最小的原理,采用迅速收敛的数学方法,通过重复迭代求得任何复杂系统的化学平衡组成,进而求得比冲等一系列能量特性参数。这些参数是衡量推进剂能量水平的主要量度指标。我们通过理论分析和编程计算,可减少试验工作量,缩短研制周期,节省大量的人力、物力和实验经费,极大地促进了推进剂的研制工作,与推进剂燃烧性能、力学性能预估(计算)相结合,形成独立的计算推进剂学科,为火箭、导弹及航天事业的发展做出更大的贡献。随着科学技术和计算机的迅猛发展,计算推进剂必将像计算物理、计算化学、统计热力学等学科一样,迅速发展成一门独立的学科。

第二章 推进剂的能量特性参数

2.1 推力和动量原理

所有的火箭推进系统都是基于反作用原理,在此系统中经过喷管排出物质的能量给飞行器一反作用力.在化学推进系统中由化学反应所产生的气体,以高速气流从喷管排出,实质上火箭是由化学反应的热能转化为燃烧产物的直接动能所推进的.

简言之,推力就是火箭发动机提供的推动火箭运动的力.如图 2.1,若发动机提供的推力能够克服整个火箭的重力 (W_0) 和阻力 (R),则火箭就能从发射台上上升起,并开始飞行.推力超过火箭的重力和阻力愈多,则火箭加速愈快,火箭就有可能在较短的时间内,达到预定的高度和距离,完成预期的任务.

发动机工作时,内壁受燃气压力的作用,在图 2.2 上用箭头的长短来表示燃气压力的相对大小.作用在发动机内壁上的燃气压力和作用在发动机外壁上的大气压力不平衡,基于对称性原理,产生了一个轴向合力,这就是推力.因此,火箭发动

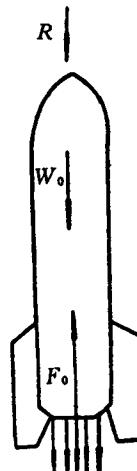


图 2.1 火箭飞行示意图

机的推力,就是当发动机工作时,作用在发动机内壁表面上的燃气压力和作用在发动机外壁表面上的大气压力的轴向合力.

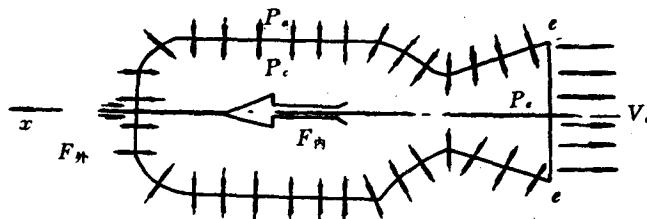


图 2.2 发动机内外表面上的压力分布

2.1.1 推力公式推导

根据牛顿(Newton)定律,作用在控制容积上的力的轴向分量必须等于动量轴向分量随时间的变化率.这个轴向分力是由压力作用力及反作用力组成的,而动量变化则仅由流过出口平面的推进剂气体流动所引起(因为发动机壳体、固体推进剂及其他设备的速度均为零,而且假定火箭发动机内部是定常的).因此,

$$F + P_a A_e = m v_e + P_e A_e. \quad (2.1)$$

式中 F ——轴向推力;

m ——流过出口平面的总质量流率;

v_e ——出口平面外对整个出口面积取平均值的流速的轴向分量;

P_a ——对整个出口面积取平均值的紧挨着出口平面内侧的压力;

P_e ——环境压力;

A_e ——喷管出口面积.

作用在控制容积其余面积上的压力与作用力相互抵消了,故在式(2.1)的左边只出现 A_e 这一项.式(2.1)是按静力学系统导出的,但在动力学条件下仍然适用.

为更具体地推导推力公式,假设燃气在燃烧室喷管中的流动是一元稳定的等熵流动,并认为作用在火箭或发动机外壁上的大气压力是均匀分布的,且为 P_a ,如图 2.2 及图 2.3 所示.取 x 轴为沿着发动机的轴,其正向为逆燃气流动的方向,喷管排气面积为 A_e ,外部大气压力 P_a 作用在除喷管排气截面 A_e 以外的全部发动机外壁上.由于 P_a 是轴对称的均匀分布,其径向分量相互平衡,其合力必然是轴向的,因为喷管是开口的,出口处没有壳体,故其合力

$$F_{\text{外}} = -P_a A_e. \quad (2.2)$$

大气压力的合力也就是大气压力给火箭或发动机的阻力.

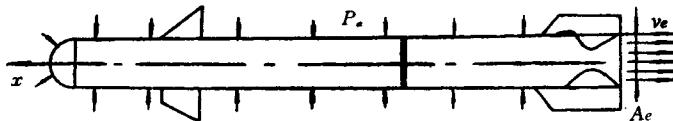


图 2.3 作用在火箭外壁上的大气压力

众所周知,发动机工作时,推进剂燃烧产生的化学能转变成燃气的热能,又经过喷管的膨胀,转变成高速燃气流的动能.燃气以高速排出喷管,其动量发生了变化,由动量定律知,燃气流动量的获得是由于受到发动机结构对它的作用力的结果.根据反作用原理,发动机结构也必然要受到燃气流对它的反作用力,这个反作用力就是 $F_{\text{内}}$,它与发动机结构对燃气流的作用力大小相等,方向相反.

设发动机结构对燃气流的作用力为 $F'_{\text{内}}$, 则有 $F_{\text{内}} = -F'_{\text{内}}$, 只要求出 $F'_{\text{内}}$, 也就知道 $F_{\text{内}}$ 了.

取发动机内壁表面和喷管排气截面 A_e 所包含的燃气流作为示力对象, 根据动量定律, 作用在控制面上的外力的轴向合力, 等于穿过该控制面的燃气流的轴向动量变化率. 若喷管的排气速度为 v_e , 排气面上压力为 P_e , 流经喷管燃气的质量流量为 m , 则动量定律可写成如下表达式:

$$-F_{\text{内}} + P_e A_e = -m g v_e. \quad (2.3)$$

$P_e A_e$ 为喷管出口面上的气体对所取气流的作用力(此力阻碍气流流出).

于是得到发动机内壁作用于燃气流上的轴向合力:

$$F_{\text{内}} = m g v_e + P_e A_e.$$

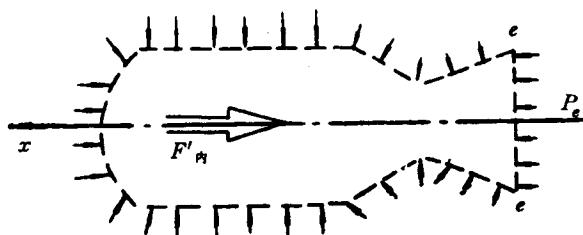


图 2.4 发动机内壁作用于燃气流上的力(示意图)

$F'_{\text{内}}$ 的方向如图 2.4 所示, 指向燃气流动的方向. 因而有

$$F_{\text{内}} = m g v_e + P_e A_e. \quad (2.4)$$

$F_{\text{内}}$ 为燃气流的反作用力, 亦称内推力, 它的方向与 $F'_{\text{内}}$ 的方向相反, 即与排气速度的方向相反, 指向 x 轴的正方向. 它完全取决于发动机内所进行的工作过程, 而与发动机所处的外界介质无关.

将燃气流的反作用力 $F_{内}$ 和大气压力的合力加合起来即得火箭发动机推力 F 的基本公式：

$$F = F_{内} + F_{外} = mgv_e + A_e(P_e - P_a). \quad (2.5)$$

式中 F —— 火箭发动机的推力(N)；

m —— 喷管中燃气的质量流量(通过喷管任一截面)

(kg·s/m)；

v_e —— 喷管的排气速度(m/s)；

A_e —— 喷管出口截面积(m^2)；

P_e —— 喷管出口截面上的燃气压力(Pa)；

P_a —— 外界发动机所在工作高度上的大气压力(Pa)；

g —— 重力加速度(m/s^2)。

在火箭发动机的设计计算中, 经常用到重量流量 G , 它是单位时间内流过喷管的燃气重量,

$$G = mg.$$

因而

$$m = \frac{G}{g}. \quad (2.6)$$

由于固体火箭发动机的流量不易测得, 故可用装药重量 W_p 和发动机的工作时间 t_k 求得:

$$G = \frac{W_p}{t_k}. \quad (2.7)$$

将式(2.6)代入式(2.5)得

$$F = Gv_e + A_e(P_e - P_a). \quad (2.8)$$

式中 G —— 喷管的重量流量(kg/s)；

其余符号意义同式(2.5)。

从公式(2.5)或(2.8)可以看出, 推力由两部分组成:

第一项 Gv_e 或 mgv_e , 表示动量变化, 称为动量推力. 它的大小取决于喷管中燃气的流量和排气速度, 也就是取决于燃气动量对时间的变化率. 它是推力的主要部分, 通常占总推力的 90% 以上. 因此, 增大推力的主要途径是增大喷管单位时间里燃气的流量和提高排气速度, 使推进剂的化学能尽可能多地转换为燃气的动能.

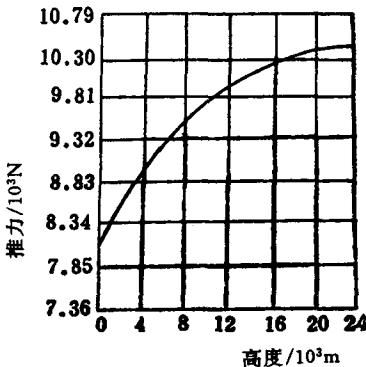


图 2.5 飞行高度对推力的影响

第二项 $A_e(P_e - P_a)$, 称为压力推力. 它是由于外界大气压力 P_a 与喷管出口截面燃气压力 P_e 不平衡而产生的. 其大小与喷管出口截面的尺寸和燃气压力有关, 与发动机所在的工作高度有关. 若发动机(包括推进剂)一定, 则其推力是高度的函数; 随着火箭飞行高度增加, 外界大气压力下降, 压力推力增大, 从而使发动机的推力增大. 推力随高度变化的关系如图 2.5 所示.

2.1.2 最大推力

从式(2.8)可知, 发动机的推力主要取决于喷管中燃气单位时

间的流量和排气速度,同时还与喷管的出口面积、出口压力和外界压力有关.在给定滞止状态和喉部面积的条件下,也就是在给定流量的条件下,改变喷管的排气面积 A_e ,就改变了喷管的膨胀比 A_e/A_t ,这将引起排气面上压力 P_e 与排气速度 v_e 的变化,因而推力亦变化.在进行喷管设计时,燃烧室压力及喷管喉部面积确定后,当外界大气压力 P_a 一定时,应当选择多大的喷管膨胀比 A_e/A_t ,才能获得最大的推力呢?

我们由推力公式(2.8)可知:

$$F = Gv_e + A_e(P_e - P_a).$$

若 $\frac{dF}{dA_e} = 0$, 则 F 取极值, 将上式对 A_e 微分, 并令其等于零, 则有

$$GdV_e + (P_e - P_a)dA_e + A_e dP_e = 0. \quad (2.9)$$

由一元稳定流动的气体,根据质量守恒定律知,单位时间内通过喷管的气体质量即质量流量(常数)为

$$G = \rho v A = \text{常数}. \quad (2.10)$$

式中 A —— 喷管任一截面的横截面积(m^2);

ρ —— 该截面上燃气的密度(kg/m^3);

v —— 该截面上燃气的流动速度(m/s).

将式(2.10)取对数然后微分,得到连续方程的微分形式:

$$\frac{d\rho}{\rho} + \frac{dv}{v} + \frac{dA}{A} = 0. \quad (2.11)$$

该式说明了气体密度、流速和喷管横截面积的变化率之间的关系.

一元稳定流在忽略摩擦和绝能(和外界无热和功的交换)条件下动量方程的微分形式为

$$v dv = - \frac{dP}{\rho}. \quad (2.12)$$

式中 v —— 气体流动速度 (m/s);

ρ —— 气体密度 (kg/m^3);

P —— 气体压力 (Pa).

此式说明, 在气体流动过程中, 如果压力降低 $dP < 0$, 则流速可以增大 $dv > 0$, 即通过气体的膨胀, 可以增大流速.

由式(2.10)和式(2.12)可以得到

$$G dv_e = - A_e dP_e. \quad (2.13)$$

将式(2.13)代入式(2.9)得

$$(P_e - P_a) dA_e = 0,$$

即 $P_e - P_a = 0, P_e = P_a$.

这说明, 获得最大推力的条件是使喷管排气面上的压力 P_e 与外界介质压力 P_a 相等. 即应当选择合适的喷管膨胀比 A_e/A_t , 使喷管在完全膨胀状态下工作, 此时有最大推力

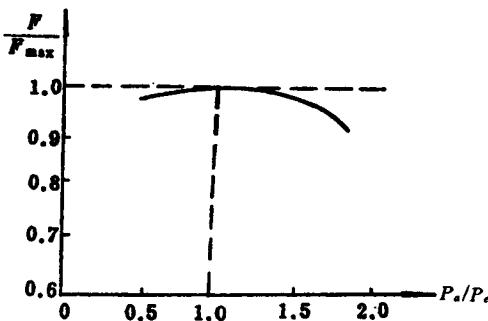


图 2.6 推力比随压力比的变化

$$\dot{F}_{\max} = \frac{G}{g} v. \quad (2.13')$$

图 2.6 表示不同压力比 P_a/P_e 对推力比 F/F_{\max} 的影响. 曲线计算条件为

$$k = 1.25, \quad P_0 = 9.81 \times 10^6 \text{ Pa};$$

$$P_a = 1.0313 \times 10^5 \text{ Pa}.$$

由图 2.6 可以看出:膨胀不足 ($P_e > P_a$) 或膨胀过度 ($P_e < P_a$) 时,推力均会减小.

2.1.3 推力系数

推力系数 C_F 是表征火箭发动机推力的量纲一的量. 它表示发动机的推力与燃烧室压力 P_c 和喷管临界截面面积 A_t 的乘积之比, 即

$$C_F = \frac{F}{A_t \cdot P_c}. \quad (2.14)$$

式中 F ——推力;

P_c ——燃烧室压力;

A_t ——喷管临界截面面积.

在静止试验台上测得推力 F , 用压力传感器测得燃烧室压力 P_c , 用几何方法测定喷管临界截面面积 A_t , 由推力系数的定义可以直接得推力系数 C_F 的值.

推力系数主要取决于喷管中发生的膨胀过程的性质, 也可以说是喷管的一个特性参数, 它表明喷管工作过程的完善程度. C_F 值愈大, 说明燃气在喷管中膨胀过程的质量愈好.

当 k 值一定时, 对于各个不同的压力比 $\frac{P_a}{P_c}$, C_F 是面积比 $\frac{A_e}{A_t}$ 的函数; 当 $k = 1.2$ 时, 这些量的函数关系如图 2.7 所示.

用推力基本公式计算推力, 很麻烦. 为了计算方便, 常将它改成简单形式. 将 V_e 及 C_F 的表达式代入基本公式中整理得

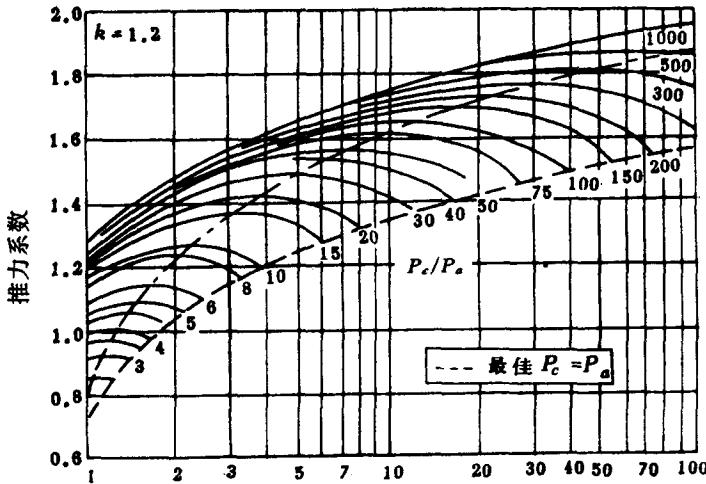


图 2.7 在不同的燃烧室压力与周围环境压力之比的情况下,推力系数作为 A_e/A_t 的函数

$$F = A_t P_c \left\{ \Gamma \cdot \sqrt{\frac{2k}{k-1} \left[1 - \left(\frac{P_e}{P_c} \right)^{\frac{k-1}{k}} \right]} + \frac{A_e}{A_t} \left(\frac{P_e}{P_a} - \frac{P_a}{P_c} \right) \right\},$$

$$F = C_F A_t P_c.$$

故推力系数为

$$C_F = \Gamma \sqrt{\frac{2k}{k-1} \left[1 - \left(\frac{P_e}{P_c} \right)^{\frac{k-1}{k}} \right]} + \frac{A_e}{A_t} \left(\frac{P_e}{P_c} - \frac{P_a}{P_c} \right), \quad (2.15)$$

$$\Gamma = \left[k \left(\frac{2}{k+1} \right)^{\frac{k+1}{k-1}} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (2.16)$$

由于 k 的变化范围较小,故 C_F 的数值范围在 1 与 2 之间,一般在 1.5 左右.实质上,推力系数就是一个放大倍数.即燃气在喷

管中膨胀而产生的推力大于 $A_t P_c$ 的倍数. 这就是说, 如果燃烧室及其压力 P_c 不变, 把喷管换成一个直管嘴, 管嘴的截面积等于 A_t , 那末这种发动机产生的推力就等于 $A_t P_c$. 可见安装喷管的发动机的推力为这种发动机推力的 C_F 倍.

由图 2.7 曲线或由公式(2.15)可知, 当 P_e/P_c 和 P_a/P_e 趋近于零时, 推力系数和推力都达到其最大值.

推力系数的最大值称为最佳推力系数, 并用 C_F^0 表示. 在图 2.8 中给出了以这种方法确定最佳推力系数在不同的 k 值下作为 P_c/P_a 的函数的曲线.

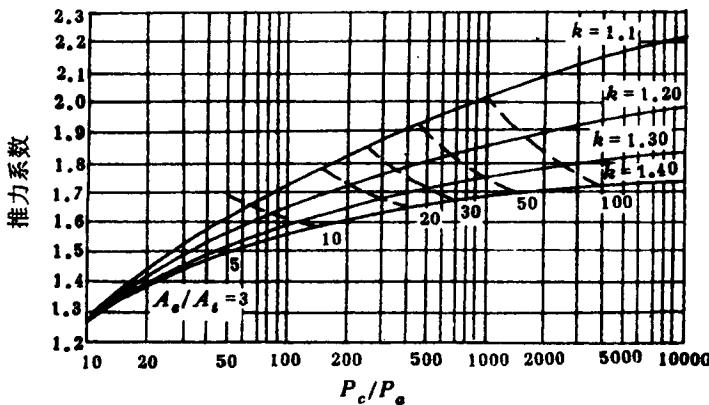


图 2.8 在不同的比热容条件下, 最佳推力系数作为燃烧室压力与周围环境压力之比的函数

2.2 推进剂比冲

2.2.1 总冲量与比冲

1. 总冲量

火箭发动机的总冲量是指在发动机整个工作时间内推力对时间的积分,用 I 表示,如以 t_n 表示发动机的工作时间,则有下列关系:

$$I = \int_0^{t_n} F dt. \quad (2.17)$$

在发动机工作时间内,通常推力是随时间变化的,如图 2.9 所示.若推力不随时间变化,则有

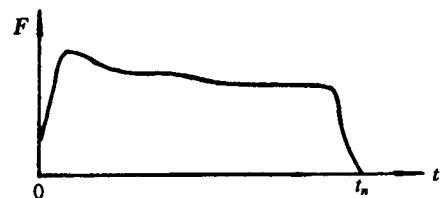


图 2.9 推力随时间的变化曲线

$$I = F t_n. \quad (2.18)$$

总冲量的单位为 N·s.

将式(2.13')代入式(2.17),可得

$$I = \int_0^{t_n} \frac{G}{g} v_e dt. \quad (2.19)$$

对于确定的发动机来说,排气速度变化很小,可视为常量.故

$$I = \frac{v_e}{g} \int_0^{t_n} G dt. \quad (2.20)$$

2. 比冲

火箭推进剂比冲(或称比推力)可定义为推力 F 与质量流量

m 之比

$$I_{sp} = F/m = \frac{mv_e}{m} = \frac{v_e}{g}. \quad (2.21)$$

即推力与推进剂消耗速率之比.在液体推进剂系统中通常采用式(2.21),因为推进剂的流速能方便地测量.当燃气达到完全膨胀时,比冲和发动机喷管出口的排气速度在数值上是相等的.比冲又可定义为由火箭发动机发出的总冲量对推进剂总质量之比,即单位质量推进剂所产生的冲量,其数学表达式为

$$I_{sp} = \frac{1}{W_p} \int_0^{t_n} F dt = \frac{I}{W_p}. \quad (2.22)$$

式中 I_{sp} —— 比冲($\text{N}\cdot\text{s}/\text{kg}$);

F —— 发动机推力(N);

W_p —— 推进剂质量(kg);

t_n —— 推进剂燃烧时间(s);

I —— 火箭发动机总冲量($\text{N}\cdot\text{s}$).

该式用于固体推进剂更方便,由燃烧已知质量的推进剂而获得推力(压力)时间曲线,可测量出比冲来.

比冲是火箭推进剂中用得最多和最重要的能量特性参数,它是衡量推进剂能量大小的重要指标.人们希望推进剂的比冲越大越好,根据齐奥柯夫斯基公式,火箭发动机中推进剂燃烧完时整个火箭系统的最大速度 v_m 可用下式表示:

$$v_m = I_{sp} \ln \frac{W_m}{W_f}. \quad (2.23)$$

因为

$$W_m = W_p + W_f,$$

所以

$$v_m = I_{sp} \ln (1 + W_p/W_f). \quad (2.23')$$

式中 W_m —— 火箭系统总质量(kg);