



装备科技译著出版基金

含能材料译丛

Simulation of Energetic Materials Combustion

含能材料燃烧模拟

[俄] Vladimir Zarko Lev Gusachenko Mahadev Talawar 著

赵凤起 徐司雨 李 猛 裴江峰 译



国防工业出版社
National Defense Industry Press



含能材料译丛

装备科技译著出版基金

含能材料燃烧模拟

Simulation of Energetic Materials Combustion

[俄罗斯] Vladimir Zarko Lev Gusachenko Mahadev Talawar 著

赵凤起 李 猛 裴江峰 译



国防工业出版社

·北京·

著作权合同登记 图字:军-2015-247号

图书在版编目(CIP)数据

含能材料燃烧模拟/(印)马哈德夫·塔拉沃尔,(俄)弗拉基米尔·泽科,(俄)列夫·哥萨申科著;赵凤起等译. —北京:国防工业出版社, 2017.7

书名原文:Simulation of Energetic Materials Combustion

ISBN 978-7-118-11392-1

I. ①含… II. ①马… ②弗… ③列… ④赵… III. ①固体推进剂火箭发动机-功能材料-燃烧试验 IV. ①V435

中国版本图书馆CIP数据核字(2017)第176943号

First published in the English language under the title “Simulation of Energetic Materials Combustion” by Vladimir Zarko, Lev Gusachenko, Mahadev Talawar.

Publication of this translation in consultation with OmniScriptum GmbH & Co. KG.

Copyright © 2013 by OmniScriptum GmbH & Co. K. G.

本书简体中文版由 OmniScriptum GmbH & Co. K. G. 授权国防工业出版社独家出版。版权所有,侵权必究。

※

国防工业出版社 出版发行

(北京市海淀区紫竹院南路23号 邮政编码100048)

腾飞印务有限公司印刷

新华书店经售

*

开本 710×1000 1/16 印张 16 $\frac{3}{4}$ 字数 327 千字

2017年7月第1版第1次印刷 印数1—2000册 定价98.00元

(本书如有印装错误,我社负责调换)

国防书店:(010)88540777

发行邮购:(010)88540776

发行传真:(010)88540755

发行业务:(010)88540717

译 者 序

含能材料是一类含有爆炸性基团或含有氧化剂和可燃物,在一定的外界能量刺激下能独自进行氧化还原反应,并释放出大量能量(通常伴有大量气体和热)的化合物或混合物。含能材料是武器装备实现远程高效毁伤和精确打击的动力源和威力源,具有高温、高压、高速的反应特征和瞬间一次性效应的特点。当前,含能材料燃烧特性及机理研究现状已经与武器装备对火药装药提出的更高性能指标要求不相匹配,出现了诸如燃烧稳定性差、燃烧机理不明、燃烧控制方法缺乏等问题,采用大量火药配方制备和实验观察相结合的方式设计,造成了研制周期长、成本高、人力物力浪费。

含能材料燃烧模拟主要是通过对燃烧过程中复杂的物理化学过程进行建模并求解,详细描述燃烧过程中燃烧波、火焰、气相及凝聚相元素化学变化等信息,是含能材料燃烧特性研究的一种手段,且随着燃烧模拟技术的进一步发展,使预测含能材料的异常燃烧行为、优化新型推进剂配方组成将成为可能。

本书系统全面介绍了国外在含能材料燃烧模拟方面的研究成果,具有理论意义和实践价值。国外对含能材料气相燃烧过程研究开展较多,并获得了大量的研究成果;相对来说,凝聚相燃烧过程研究较少,俄罗斯在这一领域进行了开创性工作并取得了举世瞩目的成果。本书中对单元和双基推进剂的稳态燃烧和不稳定燃烧模拟现状进行了总结;对含能材料燃烧模拟模型验证方法进行了介绍,进一步对实验数据开展分析,为新的综合理论模型提供了基础;书中最后指出,建立模型关键是要考虑实验事实和观察到的实验规律。译者相信,本书将成为含能材料技术工作者很有价值的参考书。

本书共五章。第1章介绍了均质凝聚相体系稳态燃烧的阶段分区和燃烧模型;第2章总结了环状硝酸、HNF、ADN、AP、GAP等单元推进剂及典型双基推进剂的燃烧模拟研究情况;第3章论述了单氧化剂、均相及非均相异质凝聚相体系的稳态燃烧模型;第4章阐述了多组分分散的非均质体系的稳态燃烧行为及燃烧模型;第5章论述了准稳态的气相准均质推进剂的瞬态燃烧、瞬间熔化及非均质凝聚相系统的瞬态燃烧。由于原著中各章节内容长短不同,为保持原著风格,各章节参考文献格式上有所差异,对于内容短的章节,参考文献统一排列在章

末;对于内容较长的章节,参考文献排布在各小节末;译著沿用原著中参考文献排布形式,未做调整。期望本书能为从事火药及装药研究的学者提供有价值的信息。

本书第1章由赵凤起翻译,第2章由徐司雨翻译,第3章和第4章由裴江峰翻译,第5章由李猛翻译;全书由赵凤起和徐司雨校对。

本书中译本出版之际,特别感谢国防工业出版社“装备科技译著出版基金”和燃烧与爆炸技术重点实验室的大力支持。同时,要感谢国防工业出版社肖志力编辑对本书译稿的出版付出的辛勤劳动。另外,还要感谢姚二岗、李恒、张建侃、姜菡雨、郝海霞、裴庆、安亭等同志在译稿整理和校对中给予的帮助。

由于翻译和校稿者水平有限,加之燃烧模拟研究专业性很强、原书语言又较难翻译,译著中难免有不妥甚至错误之处,恳请读者不吝指正。

译者
2017年3月

目 录

引言	1
参考文献	3
第 1 章 均质凝聚相体系的稳态燃烧	6
1.1 背景	6
1.2 阶段燃烧概念	7
1.2.1 各阶段之间的相互关联	8
1.2.2 燃速控制步骤的确定	12
1.2.3 在燃面具有蒸发特征的均质推进剂分阶段燃烧	14
1.3 单阶段燃烧模型	15
1.3.1 无限膨胀情况下的泡沫表面反应区	17
1.3.2 有限泡沫反应层	18
1.3.3 液相反应层的分散	20
1.3.4 固体反应层的分散	22
参考文献	24
第 2 章 单元和双基推进剂燃烧模拟	29
2.1 凝聚相反应区模拟	29
参考文献	37
2.2 环状硝酸胺燃烧	39
2.2.1 热分解动力学	39
2.2.2 环状硝酸胺燃烧模拟	53
参考文献	73
2.3 GAP 的燃烧	85
2.3.1 实验观察	86
2.3.2 燃速模拟	87
参考文献	90
2.4 HNF 的燃烧	91
参考文献	95

2.5	ADN 的燃烧	96
	参考文献	101
2.6	高氯酸铵的燃烧	102
	参考文献	107
2.7	双基推进剂的燃烧	109
	2.7.1 凝聚相反应区热释放可变时的燃烧模拟	112
	2.7.2 初始温度对燃速的影响	116
	参考文献	119
2.8	可蒸发含能材料的新概念燃烧模型	122
	2.8.1 概述	122
	2.8.2 燃烧表面非均匀性反应的合理解释	123
	2.8.3 负面侵蚀作用的解释	124
	2.8.4 蒸发的含能材料燃速模拟分析	126
	参考文献	131
第3章	单氧化剂异质凝聚相体系的稳态燃烧	137
3.1	引言	137
3.2	准均相体系	138
	3.2.1 表面组分均匀混合的配方	138
	3.2.2 小粒径非均匀组分配方	139
	3.2.3 准均相燃烧模型的重要评价	142
3.3	预热区均匀温度分布的非均相体系(UTD 模型)	143
	3.3.1 氧化剂周围黏合剂表面的非均相反应	144
	3.3.2 竞争火焰(Beckstead - Derr - Price)模型	146
	3.3.3 局部非均匀氧燃比的影响	152
	3.3.4 “小集成 Petite ensemble”模型	155
	3.3.5 燃烧表面氧化剂和燃料温度的不同	158
	3.3.6 UTD 模型的几点讨论	159
3.4	粗氧化剂凝聚相体系	166
	3.4.1 氧化剂对自持燃烧的影响	166
	3.4.2 扩散火焰问题的方程(Burke - Schumann 法)	168
3.5	表面温度或组分燃速不同的非均相体系	175
	3.5.1 非均匀表面温度的影响	175
	3.5.2 “接力赛跑”型模型	177
	3.5.3 关于“接力赛跑”模型的几点讨论	180

3.5.4 填料带来的热损失·····	182
参考文献·····	183
第4章 多组分分散的非均质体系的稳态燃烧·····	188
4.1 非均相混合物的 UTD 模型扩展·····	188
4.2 “接力赛跑”模型的扩展·····	192
4.3 不同粒度氧化剂混合物燃烧·····	194
4.4 燃速计算的积分公式·····	195
4.5 关于非均质凝聚相体系燃烧模型的讨论·····	197
参考文献·····	199
第5章 固体推进剂的瞬态燃烧·····	201
5.1 固体推进剂非稳态燃烧模拟的物理背景·····	201
5.2 具有准稳态气相的准均质含能材料的不稳定燃烧·····	203
5.2.1 俄罗斯瞬态燃烧理论研究进展·····	203
5.2.2 西方燃烧响应模拟概要·····	207
5.2.3 准稳态方法的难点·····	211
5.2.4 熔化含能材料的自持燃烧稳定性·····	212
5.2.5 唯象模型的特定分析·····	215
5.3 有完全瞬态气相的熔化准均质材料的瞬态燃烧·····	217
5.3.1 数学模型·····	218
5.3.2 压强改变对燃速影响·····	223
5.3.3 辐射驱动汽化的稳定性·····	225
5.3.4 压强下降和辐射通量脉冲对瞬态燃烧稳定性的影响·····	227
5.3.5 点火特性·····	229
5.3.6 初始温度影响的定性分析·····	231
5.4 非均质凝聚相系统的非稳态燃烧·····	232
5.4.1 含粗粒氧化剂和含能黏合剂的推进剂组分燃烧·····	232
5.4.2 非稳态侵蚀燃烧机理探讨·····	238
5.5 现象学方法的适用范围·····	241
参考文献·····	243
结论·····	258
参考文献·····	259

引 言

自远古时代以来,燃烧就与人类的日常生活息息相关。然而对于燃烧这一复杂现象真正进行科学探究的历史却相对较短,且还远没有完成。目前,在燃烧领域研究最多的是气相燃烧过程,该过程产生了大量的科学研究成果。有关燃烧的基本概念和理论方法可参见 1980 年 Zeldovich 等^[1]和 1985 年 Williams^[2]出版的两本专著。

目前,有关凝聚相体系燃烧过程的研究相对较少,主要是由于实验相对复杂,并且缺乏这种燃烧现象的合适描述,该燃烧过程包含着一些复杂的物理和化学过程。尽管如此,仍有许多研究团队在凝聚相体系的燃烧机理方面开展了卓有成效的研究工作。其研究的动力主要来源于燃烧过程可将含能材料所储存的能量通过不同的技术手段转换为可供实际使用的能量,而这一过程具有很强的现实意义。从整个凝聚相材料体系来看,真正对人类有用的含能材料主要是在燃烧过程中可产生和放出大量气体和热,同时可在惰性介质中持续燃烧的一类凝聚相材料,这些内容在本书中都会涉及。这个定义适用于特定的凝聚相含能材料,如固体推进剂、炸药和烟火药等。深入理解掌握含能材料的燃烧控制规律,是在不同应用领域发挥其最大效能的先决条件。

燃烧机理通常可通过更为复杂的模拟来获得,一般在模拟初期主要进行一些理想化的物理化学变化假设来建立一组微分方程,随后通过算法的不断改进以对这一数学问题进行求解。燃烧模拟或数学建模主要为现有含能材料或新研制的含能材料燃烧特性预估提供一种手段,同时通过燃烧模拟与化学和弹道学相结合,可有效减少实验量和实验次数。随着燃烧模拟技术的不断发展,使预测含能材料的异常燃烧行为、帮助寻求新型有效组分也将成为可能。

对凝聚相燃烧理论贡献最大的当属 Zeldovich,在 20 世纪 40 年代初,他奠定了含能材料燃烧模拟的数学基础。在莫斯科的苏联科学院化学物理研究所开展的实验研究,对含能材料燃烧物理概念的发展有很大的影响。Frolov^[3]编著的书籍中收集整理了苏联科学家在 1930—1950 年间发表的相关研究论文,进一步证明了苏联在这一领域取得的令人瞩目的成果。

以目前化学动力学、传热传质学和热力学等学科的发展水平,使研究人员通过模拟的方法揭示含能材料的燃烧过程成为可能。然而,对于燃烧过程更为详

细的描述还存在许多难以克服的困难,最主要的是缺乏含能材料燃烧过程中在火焰区和凝聚相区元素化学变化的可靠信息。因此,在含能材料燃烧模拟领域,广义的热分析方法已被接受,这意味着使用热释放速率实验数据计算总的燃烧速率成为可能。当然,在缺乏实验数据时,计算结果是近似的。

在本书中,我们试图去查找在文献中可获得的方法来处理含能材料稳态燃烧过程模拟。一方面,概括一些模型进展;另一方面,阐明理论发展途径。在实验数据可以获得的情况下,对计算结果和实验结果进行对比。文献中模型的提出是根据从简单到复杂这样一个递进原则。本书采用了一种特殊的嵌套结构来表述,同时也增加了认知价值。文献资料分析表明,实际含能材料几乎没有公认的理论模型能够完全反映实验观察到的燃烧行为。通常提出的一些理论方法,主要是基于不同的初始假设,或许有着相同的计算精度,解释了燃速与压强和初始温度的依赖关系。表明数学模型具有高的“灵活性”,通常是由于许多系数存在的缘故,这些系数来源于与实验结果符合较好的计算条件。在限定范围内,如果程序可以提供根据燃烧状态改变参数的功能,那么它就是一个适用的模型。当不靠近模型的源系数区间时需要使用外推法,应该使用由不同实验条件或不同区域得到的匹配系数。本说明可以参考双基推进剂燃烧模型的相关实例。

Zeldovich^[4]基于分析易挥发炸药的燃烧得出了双基推进剂燃烧机理的假设,进行了开创性的研究工作。该假设认为,凝聚相的热几乎没有释放,给定压强下燃烧表面的恒温由于沸腾过程被建立起来。因此其遵循气相反应控制燃烧速率的逻辑,燃烧速度取决于火焰的放热强度。二十多年来,该观点被广泛用于含能材料燃烧过程的理论与实践研究,但现有研究表明,其与当代双基推进剂稳态燃烧理论处理方法实验数据相违背,Novozhilov对Zeldovich原始假设的燃烧机理所产生的这些矛盾进行了详细的分析,编写于论述“含能材料不稳定燃烧”的著作中^[5]。

20世纪五六十年代,根据Pokhil^[3]开展的实验研究结论,基于含能材料亚表面层机械破坏的假设,提出了含硝化甘油火药的稳态燃烧过程。在理论研究中^[6,7],燃速的关系式基于很好地描述典型双基推进剂N的燃烧行为的假设而得到,包括硝化棉、硝化甘油、二硝基甲苯,以及单元推进剂聚乙烯醇硝酸盐,在这种假设下考虑了实际的分散程度和分散程度控制方程。理论计算的重要结论是在分散被完全抑制的情况下(通过燃烧表面凝聚相的完全汽化来实现),燃速提高两个数量级以上。然而,在惯性力存在的条件下测量燃速时,其结果表明,分散相对于惯性力来说,其影响燃烧过程是可以忽略的^[8-11]。后来通过实验研究了负压条件下(0.01~1atm)分散对单元和双基推进剂燃烧的影响,结果表

明,分散并不起决定性的作用,至少在大气压强或更高压强条件下,这是因为在这些条件下,分散度是可以忽略不计的(小于1%)^[12,13]。分散问题重新引起关注是由于新的实验证明液体表面层破坏是形成分散颗粒的原因(参见二硝酰胺铵燃烧数据^[14])。然而,火焰中0.1mm相对粗的颗粒观测结果与分散度并没有直接的关系,Merzhanov^[6]的燃烧机理与Williams^[2]提出的不相符合。上述例子说明理论方法不正确,其主要原因是没有一个可靠的实验背景,不符合含能材料燃烧波的理化性质。事实上,燃速计算数据与总体经验燃烧规律之间并没有达成一致,多数情况下,允许质疑初始假设和理论概念的有效性。因此,寻求提高推进剂组成性能和控制弹道性能的方法可能出现了方向性错误。

所建立的模型的验证主要基于分析各种可用的实验信息和假设的直接证据。亟需获得燃烧温度详细分布数据实验方法、燃烧波中的组分浓度分布以及不同温度和压强下的瞬态燃烧。对现有的实验数据进行分析比较可以为新的综合理论模型提供足够的背景。

实际上,当前燃烧理论模型对当代含能材料燃速数值预估还没有精确到3%或更小^[15,16]。因此,建立模型关键是要考虑实验事实和观察到的实验规律。由于本书的作者大多是在含能材料燃烧领域开展研究,其内容很大程度上反映了“用户”的理论观点和对数学建模目标的理解。这意味着理论模型的数学处理不属于本书的范畴。感兴趣的读者可参见其他适当的出版物^[17]。

本书综述了单元和双基推进剂燃烧模拟相关模型。本书部分内容在苏联老版书中已有体现。现在的版本对其进行了更新和扩展,包含了作者最近公开的一些资料。

回顾与众多俄罗斯以及国外同仁富有成效的讨论,促进了本人对复杂燃烧模拟问题的理解。作者期望本书能为从事化学推进研究的学生和研究者提供有价值的信息。

参 考 文 献

1. Zeldovich Ya.B., Barenblatt G.I., Librovich V.B., Makhviladze, G.M. Mathematical theory for combustion and explosion // Moscow: Nauka, 1980.
2. Williams F.A. Combustion Theory // 2nd Edition. Boulder, USA: Westview Press, 1985.-704 pp.
3. Theory of the combustion of powders and explosives (Frolov Yu., Ed.) // Moscow: Nauka, 1982. - 336 pp.

4. Zeldovich Ya.B. On the theory of combustion for powders and explosives // Journal of Experimental and Theoretical Physics (Russian), 1942. - Vol.12. - pp. 498-510.
5. Novozhilov B.V. Unsteady combustion of solid rocket propellants // Moscow: Nauka, 1973. – 176 pp.
6. Merzhanov A.G. On the role of dispersion during combustion of propellants // Reports of the USSR Academy Sciences, 1960. - Vol. 135. - pp. 1439- 1441 (R).
7. Yukhvid V.I, Maksimov E.I, Merzhanov A.G., et al. Mechanism of the action of mass forces on the combustion of disperse condensed substances // Combustion, Explosion, and Shock Waves, 1974. - Vol: 10, No.1. pp. - 22-26.
8. Serkov B.B., Maksimov E.I., Merzhanov A.G., Combustion of condensed systems in a mass-force field // Combustion, Explosion, and Shock Waves, 1968. - Vol. 4, No. 4. - pp. 349-352.
9. Maksimov Yu.M., Maksimov E.I. Laws of combustion of condensed systems in a field of mass forces at average pressures // Combustion, Explosion, and Shock Waves, 1972. - Vol. 8, No. 4. - pp. 424-428.
10. Margolin A.D., Krupkin V.G. Influence of condensed admixtures on the powder combustion rate in an acceleration field // Combustion, Explosion, and Shock Waves, 1975. - Vol. 11, No.5. - pp. 600-605.
11. Margolin A.D., Krupkin V.G., Khubayev V.G., et al. Laws governing the combustion of ballistic compositions with overloads // Combustion, Explosion, and Shock Waves, 1978. - Vol. 14, No.6. - pp. 716-722.
12. Zarko V.E., Zyryanov V.Ya., Chertishchev V.V., et al. Experimental study of dispersion in combustion of condensed systems // Proceedings of the IV All-Union symposium on combustion and explosion, Moscow: Nauka, 1977. - pp. 226-230.
13. Zarko V. E., Zyryanov V. Ya. Surface Layer Destruction During Combustion of Homogeneous Powders // Progress in Astronautics and Aeronautics, AIAA, 1983. -Vol. 88. - pp. 220-227.
14. Fetherolf B.L., Litzinger T.A. CO₂ laser-induced combustion of ammonium dinitramide (ADN) // Combustion and Flame, 1998. – Vol. 114, No. 3-4. - pp. 515-530.
15. Beckstead M.W. Recent progress in modeling solid propellant combustion // Combustion, Explosion, and Shock Waves, 2006. - Vol. 42, No. 6. - pp. 623-641.

16. Kubota N. Propellants and explosives: thermochemical aspects of combustion // Wiley-VCH GmbH, Weinheim, Germany, 2002.
17. Buckmaster J.D. An Introduction to Combustion Theory // In: Mathematics of Combustion, (Buckmaster J.D., Ed.), Philadelphia, USA: Society for Industrial Mathematics, 1987. - pp. 3-46.
18. Gusachenko L.K., Zarko V.E., Zyryanov V.Ya., Bobryshev V.P. Mathematical Simulation of Solids Combustion // Novosibirsk: Nauka, (Science), Siberian Branch, 1985. - 181 pp.

第 1 章 均质凝聚相体系的稳态燃烧

1.1 背景

固体含能材料的燃烧过程由一系列同时发生的多个过程组成,在相对窄小的空间区域,伴随着物质的强烈放热和汽化。燃烧过程包括不同相的转换、凝聚相和气相的化学反应、凝聚相的扩散以及质量和热的传递等过程。由化学反应释放的热,主要作为固体含能材料燃烧的驱动力,燃烧波传播的速率由燃烧区内化学反应的动力学和热传递确定,这早已被 Zeldovich 和 Franck - Kamenskii^[1,2]的研究工作所证实。

从数学的观点来看,燃烧波的传播可由一系列热和质量传递方程以及热源与物质源结合起来进行描述。其问题的本质是热或物质源条件具有极强的非线性。这些源条件与温度呈指数关系,决定了含能材料燃烧的特殊行为。下面将特别强调几个与自持燃烧波相关的问题。对确定燃烧波自主传播的可能性而言,定量的准则是可得到的。基于物理考虑,它们可被表达为^[3,4]

$$\sigma = RT^* / E \ll 1, \gamma = \beta c T^* / Q \ll 1 \quad (1.1)$$

式中, T^* 为过程的特征温度; R 为普适气体常数; E 和 Q 分别为反应的活化能和热效应; c 为比热容。

方程(1.1)的物理意义如下:在过程达到特征温度时,燃烧反应的活化能一定远远高于分子热运动的能量;放热量的大小,一定超过某一热临界值。同时可看出,对于自持燃烧波存在的情况,方程(1.1)给出了所在条件的上限估算值。特别要注意的是,这些准则未包括相关反应发生的直接信息,因此当比较不同的燃烧过程时,燃烧反应的化学本质实际上是不同的。

下面考虑燃烧波一维稳态传播的热传导方程,该方程的条件是在均匀介质的无限空间中。

$$\lambda d^2 T / dx^2 - mcdT / dx + \Phi(T) = 0 \quad (1.2)$$

式中, x 为坐标尺寸; λ 为热导率; $\Phi(T)$ 为热释放的源函数; m 为质量燃速。

方程(1.2)是基于火焰前沿的运动坐标系而得到的。实际上边界条件是自然存在的,在其终点假定反应已完成,而在其起点,假定反应尚未开始,于是有

$$x \rightarrow -\infty, T \rightarrow T_0; x \rightarrow +\infty, T \rightarrow T_m = T_0 + Q/c \quad (1.3)$$

在方程(1.2)和方程(1.3)中,质量燃速 m 的值起着—个特征值的作用。为了保证能够对能量方程求解,方程(1.2)存在 $\Phi(T_m) = 0$ 和 $\Phi(T_0) = 0$ 的附加条件,条件 $\Phi(T_m) = 0$ 适合于物质完全被消耗掉的情况。无论如何,条件 $\Phi(T_0) = 0$ 对—般的初始温度 T_0 来说是不满足的,因为从化学动力学来看, $T_0 > 0$ 时, $\Phi(T_0) \sim \exp(E/RT_0)$ 不等于 0。

因此,方程(1.2)以 $\Phi(T_0) = 0$ 的形式不能解决真实条件($T_0 > 0$)下的稳态燃烧问题。由于多数化学反应活化能较大, $\Phi(T)$ 和 $d\Phi(T)/dT$ 的值在 $T \rightarrow T_0$ 时接近于 0。因此,在 T_0 附近,函数 $\Phi(T)$ 可以人为地进行改进,所以, $\Phi(T_0) = 0$ 的条件得到了认可。实际上,在温度靠近 T_0 的范围内,设定函数 $\Phi(T)$ 等于零是可行的。

$$\Phi(T) \equiv 0, \quad T_0 \leq T \leq T_1$$

$$\Phi(T) > 0, \quad T_1 \leq T \leq T_m$$

另外,从 Kolmogorov^[5] 和 Zeldovich^[6] 所进行的研究工作可看出,上述问题求解的独特性在于,在源函数中附加—个求极限项,即 $(d\Phi/dx)_{T=T_0} \leq 0$ 。

在 $T_0 \sim T_m$ 范围内,Merzhanov 等^[7] 直接计算了质量燃速 m 与 T_1 以及随着 T_1 改变的关系值。结果是在不靠近 T_m 时, m 值与 T_1 存在微弱的依赖关系。假定 σ 和 γ 之间的关系式为

$$\gamma - \sigma = \Gamma = cRT_0 T_m / QE < 0.1 \quad (1.4)$$

为了求解方程(1.4),假定 $T^* = T_m$ 、 $Q = c(T_m - T_0)$,即新参数 Γ 用温度 T_m 和 T_0 时的反应速率比来表征,即: $\Phi(T_m)/\Phi(T_0) = \exp(1/\Gamma)$ 。当参数 Γ 超过 0.1 时,则稳态燃烧波不存在。 $T = 0.1$ 这个临界值对应于足够高的 $\Phi(T_m)/\Phi(T_0)$ 比值,即 $\Phi(T_m)/\Phi(T_0) \geq 10^4$ 。

不等式(1.4)表达了依据 E 和 Q 大小对热释放源的要求,主要是为了保障支持燃烧的存在。换句话说,在初温时,放热反应的活化能一定要远远高于分子热运动能($E \gg RT_0$),初温时的反应热效应一定要不小于系统的焓值($Q \geq cT_0$)。

1.2 阶段燃烧概念

燃烧模拟的目标是要计算燃速值,它与外界条件(压强、温度和重力等)的改变密切相关。发生在燃烧波中的各种过程数目巨大,关系复杂,因此极有必要发展近似的燃烧模型。

如前所述,燃烧波的传播速率与化学动力学紧密相关。但就目前而言,发生在实际凝聚相体系燃烧波中全部的化学反应及其详细的描述很难获得。因此,

在描述燃烧波时,常常使用总包反应,即反应按照某些有效的热释放和活化能来处理。除此之外,当建立含能材料燃烧模型时,以不同的方式来模拟物理化学过程尤为方便。在某种情况下,这使得整个燃烧过程的描述更加紧凑、更加真实。

值得注意的是,燃烧波传播既可用 Lagrange 方法,也可用 Euler 方法来处理。在 Lagrange 方法框架内,人们已掌握瞬时材料比例的变化,如果可能,材料随时间的行为能够被分成几个显著的变化阶段,这些阶段可由物质不同的物理化学状态来表征。对于 Euler 方法,燃烧表面是固定的,纯净原材料流向其固定位置。在这种情况下,上述燃烧过程的几个阶段可被认为是燃烧波的不同空间区域。

在固体物质的燃烧波中,物质转变的物理顺序为数学描述不同空间区域化学过程提供了一个合理的方法。在这种情况下,对独立的燃烧阶段可以构建数学模型。阶段划分最自然的方法就是依据其相态的差异。通常假定几个总反应发生在凝聚相、几个反应发生在气相。这些反应可以完全在独立的空间区域中进行,并可出现部分重叠的情况。例如,分散均匀的含能材料在亚表面层中燃烧,凝聚相的反应和气相火焰的反应是空间交叉重叠的,因为在表面喷射出颗粒,使得凝聚相反应是连续的。

在有限的情况下,从燃烧波中选择燃速控制阶段是可能的。根据定义,这种燃烧控制阶段决定了体系的燃速,因此,独立阶段的数学表达,为得到接近真实燃速和对燃烧条件依赖关系提供了一种方法,该方法可不考虑在这阶段之外的燃烧过程的一些特殊特性。燃速控制阶段的数学模型称为基本燃烧模型。

1.2.1 各阶段之间的相互关联

改变环境条件(压强、温度和重力)会导致每个阶段的功能发生变化,尤其是燃速控制阶段步骤可能改变,相反亦然。其结果是,燃烧波传播由另一个基本燃烧模型描述,燃速对环境因素的依赖关系发生了改变。燃速控制步骤改变的原因与不同阶段的反应速度受环境条件影响的敏感度有关。特别是,如果放热反应既发生在凝聚相又发生在气相,则压强的增加可能导致燃速控制作用由气相向凝聚相转变,尽管燃烧表面温度对压强十分依赖,而气相反应速率受压强影响较弱。此时,凝聚相反应对燃烧表面热平衡的贡献比来自气相的热反馈要大。无论如何,应该记住这些限定条件在燃烧模拟中极为重要。对来自燃烧表面的所有类型反应的描述,包括异相反应在内,均可广泛适用。

在分段燃烧中,对不同区域已有 Khaykin 等^[8]和 Merzhanov 等^[9]进行了研究。他们检查了燃烧波传播最简单的情况,即气体具有两个连续化反应的情况。其关注点是控制规律的分析 and 分类。主要结果可描述如下。

假定燃烧波在均相气体介质中以两个连续的反应 $A \rightarrow B \rightarrow C$ 稳定地传播, 则认为所有组分的双向扩散系数是相同的, 并且与热扩散系数相同。因此, 连续反应的热效应被设定为 $Q_1 (A \rightarrow B)$ 和 $Q_2 (B \rightarrow C)$, 其相应的反应活化能等于 E_1 和 E_2 。

当 $Q_2 > 0$ 为真, 除了要求 $Q_1 + Q_2$ 为正值且高于某个极限值 (如 $Q_1 + Q_2 > cT_0$) 外, 对 Q_1 没有任何特殊的要求。因此, 燃烧温度的最大值 $T_2 = T_0 + (Q_1 + Q_2)/c$, 相应地仅通过第一个反应的温度 $T_1 = T_0 + Q_1/c$, $Q_1 > 0$ 的情况在很多情况下都得到了证实。现在介绍一些变量:

$u_1(T_1)$ ——燃烧波在第一个反应时的传播速率, 此时最高温度为 T_1 , 热效应为 Q_1 ;

$u_1(T_2)$ ——第一个反应进行过程中最高温度为 T_2 时的传播速率, 此时, 热效应为 $Q_1 + Q_2$;

$u_2(T_2)$ ——第二个反应进行过程中最高温度为 T_2 时的传播速率, 此时热效应为 Q_2 (气相的起始温度 $T_1 = T_0 + Q_1/c$)。

传播速率 $u_i(T_i)$ 的值由近似的 Zeldovich - Frank - Kamenetskii 公式 (1.5) 来计算, 而真实的传播速率 u 用数值方法来计算:

$$u_i(T_i) \sim \text{const}(cRT_i^2/Q_i E_i) \times \exp(-E/2RT_i) \quad (1.5)$$

根据分析验证和数学计算, 文献[8,9]的作者确认了三阶段燃烧区的存在, 并对应着主导、连接和融合模式 (这种分类将在下面给出解释)。数值计算表明, 燃速 u 在宽范围内输入参数获得的计算值与阶段传播速率 $u_i(T_i)$ 的某个值非常接近。换句话说, 当改变输入参数时, 发生从一个燃烧区到另一个燃烧区的转变。如图 1.1 所示, 该图表明了无量纲的速度 ω 与无量纲的活化能之间的依赖关系。在所有情况下, 第一和第二阶段的质量流率一定是相等的, 并且等于稳定的质量燃速。

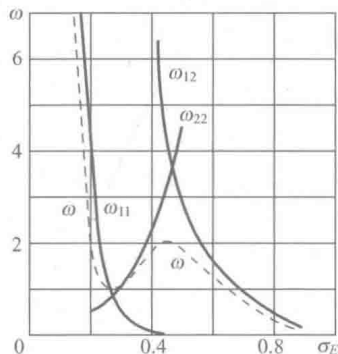


图 1.1 无量纲的燃速 ω_{ij} 与无量纲的活化能 $\sigma_E = E_1 / (E_1 + E_2)$ 之间的变化关系;

$$\omega_{11} = \text{const} \times U_1(T_1), \omega_{12} = \text{const} \times U_1(T_2), \omega_{22} = \text{const} \times U_2(T_2) \quad [8]$$