

УДК 662.612.12

## МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ЗАЖИГАНИЯ ЧАСТИЦЫ ГЕЛЕОБРАЗНОГО ТОПЛИВА В ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ВОЗДУШНОЙ СРЕДЕ

© 2023 г. Д. О. Глушков<sup>1</sup>, К. К. Паушкина<sup>1\*</sup>, А. О. Плешко<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия

\*E-mail: kkp1@tpu.ru

Поступила в редакцию 31.03.2022;

после доработки 17.06.2022;

принята в печать 20.06.2022

По результатам ранее выполненных экспериментальных исследований в рамках математического аппарата механики сплошной среды и теории химической кинетики разработана математическая модель зажигания горючей частицы типичного гелеобразного топлива на основе органического полимерного загустителя в разогретом воздухе. Она описывает процесс, соответствующий предельному режиму, при котором характерные времена прогрева топлива и формирующейся парогазовой смеси много больше характерных времен химического реагирования горючего и окислителя в газовой среде. Удовлетворительные результаты верификации математической модели и алгоритма численного решения позволили сделать вывод о возможности применения разработанного подхода для достаточно достоверного прогнозирования характеристик зажигания рассматриваемого класса гелеобразных топлив. Для одиночных частиц гелеобразного топлива размерами 0.25–2.00 мм, нагреваемых в воздушной среде при температурах 750–1473 К, времена задержки воспламенения составляют от 0.3 до 10.0 с.

**Ключевые слова:** гелеобразное топливо, органический полимерный загуститель, горючая частица, разогретый воздух, математическая модель, время задержки воспламенения.

**DOI:** 10.31857/S0207401X23020073, **EDN:** IWPQCU

### ВВЕДЕНИЕ

Перспективными направлениями развития авиакосмической отрасли являются разработка и внедрение новых топлив, в первую очередь гелеобразных составов на основе горючих жидкостей [1–3], которые по классификации агрегатного состояния занимают промежуточное положение между типичными жидкими и твердыми топливами. Гелеобразные топлива не изменяют свои эксплуатационные свойства при хранении более 10 лет [4–7]. Агрегатное состояние гелеобразных топлив, в том числе металлизированных, в обычном состоянии не требует реализации мероприятий по поддержанию их стабильного состояния, сверхнизких температур окружающей среды, герметичности топливных баков.

Интенсивное развитие исследований по тематике гелеобразных топлив [2, 8–13] в последнее время обусловлено широким разнообразием как компонентных составов, так и направлений их практических приложений. Несмотря на многочисленность результатов экспериментальных исследований, физико-химические процессы, протекающие при зажигании и горении гелеобраз-

ных топлив, в полной мере не изучены ввиду большого разнообразия компонентов, применяющихся при их приготовлении, и, соответственно, закономерностей взаимосвязанных процессов, протекающих при горении. Составление соответствующей базы данных, применимой при разработке практических приложений, потребует колоссальных затрат временных и экономических ресурсов. Поэтому разработка математических моделей, позволяющих достоверно прогнозировать характеристики процессов, протекающих при зажигании горючих частиц гелеобразных топлив в высокотемпературной газовой среде в условиях варьирования параметров в рассматриваемой системе в широких диапазонах, является актуальной задачей.

Для топливных составов с самовоспламеняющимися при контакте компонентами гелеобразного топлива в работе [8] выполнено сравнение различных подходов к разработке соответствующей математической модели процесса. С целью теоретического исследования характеристик зажигания полидисперсного спрея гелеобразного топлива в разогретой газовой среде в работе [9]

разработана математическая модель, описывающая физико-химические процессы при условии равенства и постоянства температур совокупности частиц топлива разных размеров в течение периода индукции. В работе [10] для случая взаимодействия одиночных горючих частиц несимметричного диметилгидразина с окислителем четырехоксида азота установлены характеристики зажигания и горения частицы гелеобразного топлива, приготовленного с добавлением органического загустителя. Там же на основе экспериментальных данных разработана математическая модель нестационарного горения частицы топлива, в рамках которой изучены процессы зажигания и горения в условиях, соответствующих условиям пуска двигателя и стационарного горения топлива.

При проведении теоретических исследований в качестве начальных условий, например размеров топливных частиц, применимы результаты проведенного в работе [11] экспериментального изучения характеристик распыления гелеобразного топлива. Как правило, высокоскоростная видеорегистрация позволяет достаточно достоверно устанавливать распределения частиц топлива (капель расплава) по размерам при различных значениях давления впрыска топлива в камеру сгорания.

Соломон с соавт. [2] исследовали процессы, протекающие при горении частиц неметаллизированного гелеобразного топлива на основе керосина и Thixatrol 289 (смесь жидкого метилэтилкетона и гидрогенизированного касторового масла) с диаметрами в диапазоне 1.0–3.5 мм. Полученные результаты послужили в дальнейшем основой для разработки математической модели процесса.

Джиоти, Насим, Бэк (Jyoti, Naseem, Baek) в работе [12] провели сравнение характеристик самовоспламенения металлизированных и неметаллизированных гелеобразных топлив на основе этаноламина. В качестве загустителя горючей жидкости использовался неорганический компонент ( $\text{SiO}_2$ ), в качестве окислителя – пероксид водорода. Установлены наиболее важные свойства такого топлива для инициирования самовоспламенения (например, предельная концентрация катализатора для стабильного зажигания), а также выявлено влияние концентрации загустителя и катализатора на время задержки воспламенения. Такие результаты применимы для верификации соответствующих математических моделей и алгоритмов численного решения.

Несмотря на многочисленность результатов экспериментальных исследований, физико-химические процессы, протекающие при зажигании и горении гелеобразных топлив, в полной мере не изучены ввиду большого разнообразия

компонентов, применяющихся при их приготовлении, и, соответственно, закономерностей взаимосвязанных процессов, протекающих при горении [14]. Цели работы – разработка на основании результатов ранее выполненных экспериментальных исследований [3, 15, 16] математической модели зажигания частицы гелеобразного топлива на основе органического полимерного загустителя в условиях ее нагрева в разогретом воздухе и теоретическое исследование влияния группы значимых факторов (температуры источника нагрева, начального размера горючей частицы топлива, его компонентного состава) на характеристики процесса.

Наиболее характерное отличие разрабатываемой модели от широко известных моделей зажигания и горения гелеобразных топлив будет заключаться в учете совокупности взаимосвязанных физико-химических процессов, протекающих как в конденсированной фазе, так и в газовой среде. При этом большая часть этих процессов протекает одновременно, например: прогрев гелеобразного топлива и плавление его приповерхностного слоя; испарение компонентов топлива с поверхности частицы (тонкая пленка расплава) и движение фронта плавления в глубь частицы; прогрев капли расплава, испарение с поверхности капли, формирование парогазовой смеси в окрестности капли; изменение размеров капли вследствие испарения компонентов, прогрев парогазовой смеси, ее выгорание до достижения условий воспламенения.

## ФИЗИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

На основании результатов экспериментальных исследований [3] разработана схема области решения задачи зажигания частицы типичного гелеобразного топлива (50 об.% масла + 48 об.% 10%-ного водного раствора поливинилового спирта (ПВС) + 2 об.% эмульгатора [17]) в разогретом воздухе (рис. 1).

Перечислим основные характеристики топливных компонентов [18].

1. Индустриальное масло И-40А (по ГОСТ 20799-88, Россия): кинематическая вязкость – 61–75  $\text{мм}^2/\text{с}$  (при 40°C), плотность – 868  $\text{кг}/\text{м}^3$  (при 20°C), зольность – не более 0.005 мас.%, температура замерзания – не выше минус 15°C, температура вспышки – не ниже 220°C.

2. Дистиллированная вода: электропроводность – не более 5  $\text{мкСм}/\text{см}$ .

3. Поливиниловый спирт марки Poval 15-99 производства компании Kuraray Co., Ltd (Japan): динамическая вязкость 4%-го водного раствора при 20°C – (15 ± 2.5)  $\text{мПа} \cdot \text{с}$ , степень гидролиза – (98.4 ± 0.4)%, остаточное содержание ацетильных групп – (1.5 ± 0.4)%, зольность – не более 0.5%.

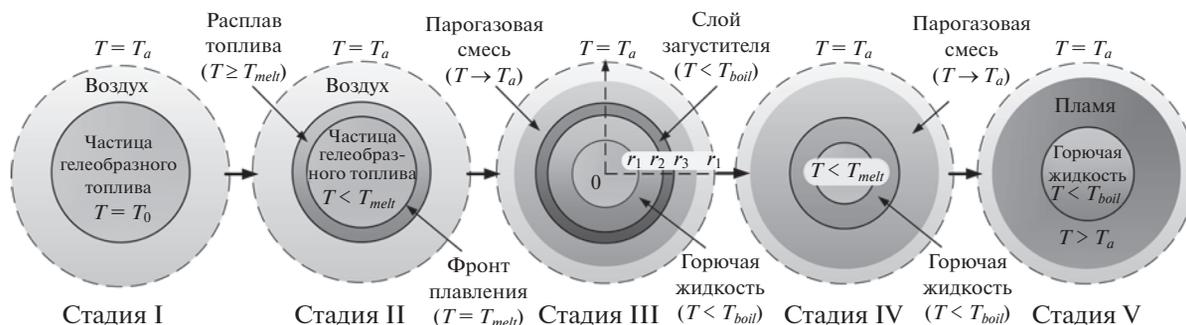


Рис. 1. Схема области решения задачи зажигания горячей частицы гелеобразного топлива.

4. Эмульгатор – полисорбат Твин 80 производства АО “Вектон” (Россия).

Предполагается, что частица холодного топлива (с начальной температурой  $T = T_0$ ) сферической формы радиусом  $r_p$  в начальный момент времени ( $t = 0$ ) вводится в область разогретого до высоких температур неподвижного воздуха ( $T = T_a$ ); рис. 1, стадия I. При прогреве горячей частицы температура ее поверхности достигает температуры плавления гелеобразного топлива ( $T_{melt} = 330$  К) и формируется фронт плавления, граница которого перемещается в направлении центра частицы (рис. 1, стадия II). Расплав топлива в приповерхностном слое горячей частицы представляет собой смесь горячей жидкости и загустителя. После плавления гелеобразного топлива его компоненты разделяются. Из-за различия поверхностных натяжений жидких компонентов на поверхности расплава формируется тонкий слой загустителя, под которым расположена горячая жидкость (рис. 1, стадия III). Толщина слоя загустителя уменьшается до полного его испарения (рис. 1, стадия IV). После этого начинает испаряться горячая жидкость со свободной поверхности (рис. 1, стадия IV).

В окрестности капли расплава топлива в результате диффузии формируется горячая парогазовая смесь (рис. 1, стадия IV). Конвективные течения газов в этой области не описывались по двум причинам. Во-первых, процесс зажигания рассматривался в неподвижной воздушной среде. Во-вторых, результаты экспериментального [3] и теоретического [19] исследований иллюстрируют, что термогравитационная конвекция оказывает влияние на закономерности физико-химических процессов уже после воспламенения топлива.

При достижении предельных условий происходит воспламенение в газовой среде (рис. 1, стадия V). В качестве критерия воспламенения принято выполнение условия быстрого роста температуры горячей газовой смеси в окрестности частицы топлива выше значения  $T_a$ , соответствующее выполнению условий теплового воспламенения Н.Н. Семенова и Д.А. Франк-Каменецко-

го. Какие-либо дополнительные критерии, свидетельствующие об устойчивости исследуемого процесса и его дальнейшем переходе в стационарное горение, не принимались, так как экспериментально установлено [3, 15], что топливо полностью выгорало после воспламенения. Кратковременные вспышки (неустойчивый процесс инициирования горения) не были зарегистрированы в экспериментах.

Сложность решения сформулированной задачи состоит в динамическом изменении положения границ компонентов в системе (рис. 1) на разных этапах индукционного периода вследствие протекания взаимосвязанных процессов плавления топлива и испарения его компонентов. Интенсивности протекания этих процессов различаются, поэтому границы компонентов перемещаются в пространстве также с разными скоростями в направлении центра горячей частицы топлива. Размер последней ( $r = r_p$ ) уменьшается в течение индукционного периода при испарении компонентов топлива.

По данным выполненных экспериментальных исследований [17, 20] процессов зажигания одиночных частиц типичных гелеобразных топлив в неподвижном разогретом воздухе (при варьировании температуры в диапазоне 800–1000°C) были установлены максимальные размеры области, в которой происходило воспламенение горячей парогазовой смеси, формирующейся в течение периода индукции. На основании достаточно большого объема экспериментальных данных сделан обоснованный вывод, что размер (радиус) области горячей парогазовой смеси в окрестности капли расплава гелеобразного топлива не превышает 5 мм для близких к предельным условиям зажигания, когда длительность периода индукции и, соответственно, время формирования горячей парогазовой смеси максимальны. Это означает, что в рамках алгоритма численного решения задачи зажигания в момент воспламенения ни газообразные продукты испарения топлива, ни формирующийся фронт горения не достигают внешней границы

области решения задачи с координатой  $r_1 = 5$  мм. Таким образом, координаты внешней границы ( $r = r_1$ ) области решения (рис. 1) при постановке задачи приняты постоянными. Кроме этого, интенсивность экзотермической реакции в газовой среде напрямую зависит от диффузии компонентов (горючее и окислитель) в этой области при формировании горючей газовой смеси.

### МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Процессы тепломассопереноса и экзотермического реагирования в области решения задачи зажигания (рис. 1) описываются системой дифференциальных уравнений в частных производных, записанных в сферической системе координат. Математическая модель сформулирована в одномерной постановке, описывающей изменение характеристик в рассматриваемой системе вдоль радиуса вследствие равномерности подвода теплоты к поверхности сферической частицы топлива.

Алгоритм решения задачи зажигания предполагает реализацию нескольких вычислительных схем, каждая из которых определялась геометрической структурой области решения задачи, соответствующей разным этапам протекания физико-химических процессов в течение индукционного периода (рис. 1). В рамках каждого из приведенных ниже этапов нумерация координат границ разных компонентов системы “частица топлива – воздух” осуществлялась от центра горючей частицы топлива ( $r = 0$ ) в направлении внешней границы области решения ( $r = r_1$ ). Типичный вариант схемы области решения задачи приведен на рис. 1, стадия III.

#### Первый этап при $0 \leq t \leq t_1$ (рис. 1, стадия I)

Уравнение теплопроводности для гелеобразного топлива ( $0 < r < r_1$ ) есть

$$\rho_1 C_1 \frac{\partial T_1}{\partial t} = \lambda_1 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial T_1}{\partial r} \right), \quad (1)$$

где  $C$  – теплоемкость, Дж/кг · К;  $\lambda$  – теплопроводность, Вт/м · К;  $\rho$  – плотность, кг/м<sup>3</sup>;  $r$  – радиальная координата, м.

Уравнение теплопроводности для воздуха ( $r_1 < r < r_2$ ) есть

$$\rho_5 C_5 \frac{\partial T_5}{\partial t} = \lambda_5 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial T_5}{\partial r} \right). \quad (2)$$

Начальные условия:

$$T_1 = T_0, \quad T_5 = T_a, \quad \mu_f = 0, \quad \mu_g = 0, \quad \mu_a = 1, \quad (3)$$

где  $\mu$  – массовая концентрация.

Граничные условия:

$$\frac{\partial T_1}{\partial r} = 0 \quad \text{при} \quad r = 0; \quad (4)$$

$$-\lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial r} = -\lambda_5 \frac{\partial T_5}{\partial r} - \varepsilon \sigma (T_a^4 - T_1^4), \quad (5)$$

$$T_1 = T_5 \quad \text{при} \quad r = r_1,$$

где  $\varepsilon$  – степень черноты.

$$T_5 = T_a \quad \text{при} \quad r = r_2. \quad (6)$$

#### Второй этап при $t_1 < t \leq t_2$ (рис. 1, стадия II)

Уравнение теплопроводности для гелеобразного топлива ( $0 < r < r_1$ ) есть

$$\rho_1 C_1 \frac{\partial T_1}{\partial t} = \lambda_1 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial T_1}{\partial r} \right). \quad (7)$$

Уравнение теплопроводности для расплава гелеобразного топлива ( $r_1 < r < r_2$ ) –

$$\rho_2 C_2 \frac{\partial T_2}{\partial t} = \lambda_2 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial T_2}{\partial r} \right). \quad (8)$$

Уравнение теплопроводности для воздуха ( $r_2 < r < r_1$ ) –

$$\rho_5 C_5 \frac{\partial T_5}{\partial t} = \lambda_5 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial T_5}{\partial r} \right). \quad (9)$$

Начальные условия соответствуют условиям окончания предыдущего этапа. Граничные условия:

$$\frac{\partial T_1}{\partial r} = 0 \quad \text{при} \quad r = 0; \quad (10)$$

$$-\lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial r} = -\lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial r}, \quad T_1 = T_2 \quad \text{при} \quad r = r_1; \quad (11)$$

$$-\lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial r} = -\lambda_5 \frac{\partial T_5}{\partial r} - \varepsilon \sigma (T_a^4 - T_2^4), \quad (12)$$

$$T_2 = T_5 \quad \text{при} \quad r = r_2;$$

$$T_5 = T_a \quad \text{при} \quad r = r_2. \quad (13)$$

#### Третий этап при $t_2 < t \leq t_3$ (рис. 1, стадия III)

Уравнение теплопроводности для гелеобразного топлива ( $0 < r < r_1$ ) есть

$$\rho_1 C_1 \frac{\partial T_1}{\partial t} = \lambda_1 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial T_1}{\partial r} \right). \quad (14)$$

Уравнение теплопроводности для горючей жидкости ( $r_1 < r < r_2$ ) –

$$\rho_3 C_3 \frac{\partial T_3}{\partial t} = \lambda_3 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial T_3}{\partial r} \right). \quad (15)$$

Уравнение теплопроводности для загустителя ( $r_2 < r < r_3$ ) –

$$\rho_4 C_4 \frac{\partial T_4}{\partial t} = \lambda_4 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial T_4}{\partial r} \right). \quad (16)$$

Уравнение теплопроводности для парогазовой смеси ( $r_3 < r < r_l$ ) –

$$\rho_5 C_5 \frac{\partial T_5}{\partial t} = \lambda_5 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial T_5}{\partial r} \right). \quad (17)$$

Уравнение диффузии паров загустителя в воздухе ( $r_3 < r < r_l$ ) –

$$\rho_5 \frac{\partial \mu_g}{\partial t} = \rho_5 D_5 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \mu_g}{\partial r} \right), \quad (18)$$

где  $D$  – коэффициент диффузии, м<sup>2</sup>/с;

$$\mu_g + \mu_a = 1. \quad (19)$$

При реализации данного этапа исследуемого процесса предполагалось, что пары загустителя являются инертным компонентом газовой смеси, который не участвует в химических реакциях, протекающих в окрестности частицы топлива. Процессы испарения и диффузии относительно холодных паров загустителя оказывают влияние только на формирование температурного поля в области решения задачи зажигания (рис. 1).

Теплофизические характеристики газовой смеси вычислялись по объемным концентрациям воздуха и паров загустителя:

$$\rho_5 = \rho_g \Phi_g + \rho_a \Phi_a, \quad C_5 = C_g \mu_g + C_a \mu_a, \quad \lambda_5 = \lambda_g \Phi_g + \lambda_a \Phi_a, \quad \Phi_g = \frac{\mu_g / \rho_g}{\mu_g / \rho_g + \mu_a / \rho_a}, \quad \Phi_g + \Phi_a = 1, \quad (20)$$

где  $\Phi$  – объемная концентрация.

Начальные условия соответствуют условиям окончания предыдущего этапа. Граничные условия:

$$\frac{\partial T_1}{\partial r} = 0 \quad \text{при } r = 0; \quad (21)$$

$$-\lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial r} = -\lambda_3 \frac{\partial T_3}{\partial r}, \quad T_1 = T_3 \quad \text{при } r = r_1; \quad (22)$$

$$-\lambda_3 \frac{\partial T_3}{\partial r} = -\lambda_4 \frac{\partial T_4}{\partial r}, \quad T_3 = T_4 \quad \text{при } r = r_2; \quad (23)$$

$$-\lambda_4 \frac{\partial T_4}{\partial r} = -\lambda_5 \frac{\partial T_5}{\partial r} - \varepsilon \sigma (T_a^4 - T_4^4) + Q_4 W_4, \quad (24)$$

$$T_4 = T_5 \quad \text{при } r = r_3;$$

где  $-\rho_g D_g \partial \mu_g / \partial r = W_4$ ;

$$T_5 = T_a, \quad \frac{\partial \mu_g}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial \mu_a}{\partial r} = 0 \quad \text{при } r = r_l. \quad (25)$$

#### Четвертый этап при $t_3 < t \leq t_4$ (рис. 1, стадия IV)

Уравнение теплопроводности для гелеобразного топлива ( $0 < r < r_l$ ) –

$$\rho_1 C_1 \frac{\partial T_1}{\partial t} = \lambda_1 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial T_1}{\partial r} \right). \quad (26)$$

Уравнение теплопроводности для горючей жидкости ( $r_1 < r < r_2$ ) –

$$\rho_3 C_3 \frac{\partial T_3}{\partial t} = \lambda_3 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial T_3}{\partial r} \right). \quad (27)$$

Уравнение энергии для парогазовой смеси ( $r_2 < r < r_l$ ) –

$$\rho_5 C_5 \frac{\partial T_5}{\partial t} = \lambda_5 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial T_5}{\partial r} \right) + Q_5 W_5. \quad (28)$$

Уравнение диффузии паров горючей жидкости в воздухе ( $r_2 < r < r_l$ ) –

$$\rho_5 \frac{\partial \mu_f}{\partial t} = \rho_5 D_5 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \mu_f}{\partial r} \right) - W_5, \quad (29)$$

$$\text{где } \mu_f + \mu_a = 1. \quad (30)$$

Предполагалось, что при постановке задачи на этом этапе газовая смесь в окрестности частицы состоит из паров горючей жидкости и воздуха. Присутствие паров загустителя, формирующихся на предыдущем этапе исследуемого процесса, в составе парогазовой смеси не учитывалось. Согласно физике процесса пары загустителя вытесняются из окрестности частицы топлива в окружающую газовую среду при формировании горючей газовой смеси в условиях интенсивного вдува паров горючей жидкости с поверхности капли расплава топлива в среду окислителя.

Теплофизические характеристики газовой смеси вычислялись по объемным концентрациям паров горючей жидкости и воздуха:

$$\rho_5 = \rho_f \Phi_f + \rho_a \Phi_a, \quad C_5 = C_f \mu_f + C_a \mu_a, \quad (31)$$

$$\lambda_5 = \lambda_f \Phi_f + \lambda_a \Phi_a,$$

$$\Phi_f = \frac{\mu_f / \rho_f}{\mu_f / \rho_f + \mu_a / \rho_a}, \quad \Phi_f + \Phi_a = 1.$$

Начальные условия соответствуют условиям окончания предыдущего этапа. Граничные условия:

$$\frac{\partial T_1}{\partial r} = 0 \quad \text{при } r = 0; \quad (32)$$

$$-\lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial r} = -\lambda_3 \frac{\partial T_3}{\partial r}, \quad T_1 = T_3 \quad \text{при } r = r_1; \quad (33)$$

$$-\lambda_3 \frac{\partial T_3}{\partial r} = -\lambda_5 \frac{\partial T_5}{\partial r} - \varepsilon \sigma (T_a^4 - T_3^4) + Q_3 W_3, \quad (34)$$

$$T_3 = T_5 \quad \text{при } r = r_2,$$

где  $-\rho_f D_f \frac{\partial \mu_f}{\partial r} = W_3$ ;

$$T_5 = T_a, \quad \frac{\partial \mu_f}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial \mu_a}{\partial r} = 0 \quad \text{при } r = r_1. \quad (35)$$

#### Пятый этап при $t_4 < t \leq t_d$ (рис. 1, стадия V)

Уравнение теплопроводности для горючей жидкости ( $0 < r < r_1$ ) есть

$$\rho_3 C_3 \frac{\partial T_3}{\partial t} = \lambda_3 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial T_3}{\partial r} \right). \quad (36)$$

Уравнение энергии для парогазовой смеси ( $r_1 < r < r_j$ ) –

$$\rho_5 C_5 \frac{\partial T_5}{\partial t} = \lambda_5 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial T_5}{\partial r} \right) + Q_5 W_5. \quad (37)$$

Уравнение диффузии паров горючей жидкости в воздухе ( $r_1 < r < r_j$ ) –

$$\rho_5 \frac{\partial \mu_f}{\partial t} = \rho_5 D_5 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \mu_f}{\partial r} \right) - W_5, \quad (38)$$

$$\text{где } \mu_f + \mu_a = 1. \quad (39)$$

Теплофизические характеристики газовой смеси вычислялись аналогично (31). Начальные условия соответствуют условиям окончания предыдущего этапа. Граничные условия:

$$\frac{\partial T_3}{\partial r} = 0 \quad \text{при } r = 0; \quad (40)$$

$$-\lambda_3 \frac{\partial T_3}{\partial r} = -\lambda_5 \frac{\partial T_5}{\partial r} - \varepsilon \sigma (T_a^4 - T_3^4) + Q_3 W_3, \quad (41)$$

$$T_3 = T_5 \quad \text{при } r = r_1;$$

где  $-\rho_f D_f \frac{\partial \mu_f}{\partial r} = W_3$ ;

$$T_5 = T_a, \quad \frac{\partial \mu_f}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial \mu_a}{\partial r} = 0 \quad \text{при } r = r_1. \quad (42)$$

Массовые скорости испарения горючей жидкости ( $W_3$ ) и загустителя ( $W_4$ ) задавались постоянными и соответствующими средним значениям характеристик, установленным экспериментально [17]. Скорость реакции окисления парогазовой смеси описывается аррениусовской зависимостью:

$$W_5 = \rho_5 \mu_f \mu_a k_5^0 \exp \left( -\frac{E_5}{R_5 T_5} \right), \quad (43)$$

где  $E$  – энергия активации, Дж/моль;  $k$  – предэкспоненциальный множитель,  $\text{с}^{-1}$ ;  $R_5$  – универсальная газовая постоянная, Дж/моль · К. Положение фронта плавления гелеобразного топлива определялось по координатам изотермы, температура которой соответствовала значению температуры плавления топлива  $T = T_{melt}$ .

Для решения системы нелинейных нестационарных дифференциальных уравнений в частных производных с соответствующими начальными и нелинейными граничными условиями разработан алгоритм (рис. 2), основанный на применении группы численных методов: конечных разностей, локально-одномерного, итераций и прогонки с использованием неявной четырехточечной разностной схемы. Выражения “ $\geq 3$ ”, “ $\leq 3$ ”, “ $\geq 6$ ”, приведенные в блок-схеме алгоритма численного решения (рис. 2), иллюстрируют параметры разностной сетки. Численные значения в элементах сравнения характеризуют число узлов разностной сетки. Так как в рамках разработанного алгоритма описывается динамическое изменение большой группы границ (фронт плавления, граница “горючая жидкость – расплав загустителя”, граница поверхности капли расплава топлива), то для реализации корректных вычислений в пределах различных областей необходимо не менее трех узлов разностной сетки (в соответствии с используемой четырехточечной разностной схемой), приходящихся на соответствующие области.

Алгоритм решения (рис. 2) предполагает последовательную проверку на каждом шаге по времени условий, соответствующих реализации одного из пяти основных этапов индукционного процесса, пересчета на соответствующих этапах координат границ “гелеобразное топливо – расплав” (рис. 1, стадия II), “гелеобразное топливо – горючая жидкость”, “горючая жидкость – загуститель”, “загуститель – газ” (рис. 1, стадия III), “горючая жидкость – газ” (рис. 1, стадия IV), а также проверку условий прекращения вычислений характеристик процесса, соответствующих сформулированному критерию зажигания. Время задержки воспламенения гелеобразного топлива соответствовало значению времени в момент останова работы вычислительного алгоритма. В условиях, когда зажигание топлива не происходило, расчет характеристик процесса продолжался до полного испарения всех компонентов топлива (т.е. при условии  $r_p \rightarrow 0$ ).

Положения координат подвижных границ в области решения задачи зажигания (рис. 1) определялись следующим образом:

– координата границы “гелеобразное топливо – расплав”  $r = r_1$  (рис. 1, стадия II) соответствовала координате изотермы  $T = T_{melt}$ ;

– координата границы “гелеобразное топливо – горючая жидкость”  $r = r_1$  (рис. 1, стадия III) после разделения расплава топлива на исходные компоненты аналогично границе “гелеобразное топливо – расплав”  $r = r_1$  (рис. 1, стадия II) соответствовала координате изотермы  $T = T_{melt}$ ;

– координата границы “горючая жидкость – загуститель”  $r = r_2$  (рис. 1, стадия III) вычислялась

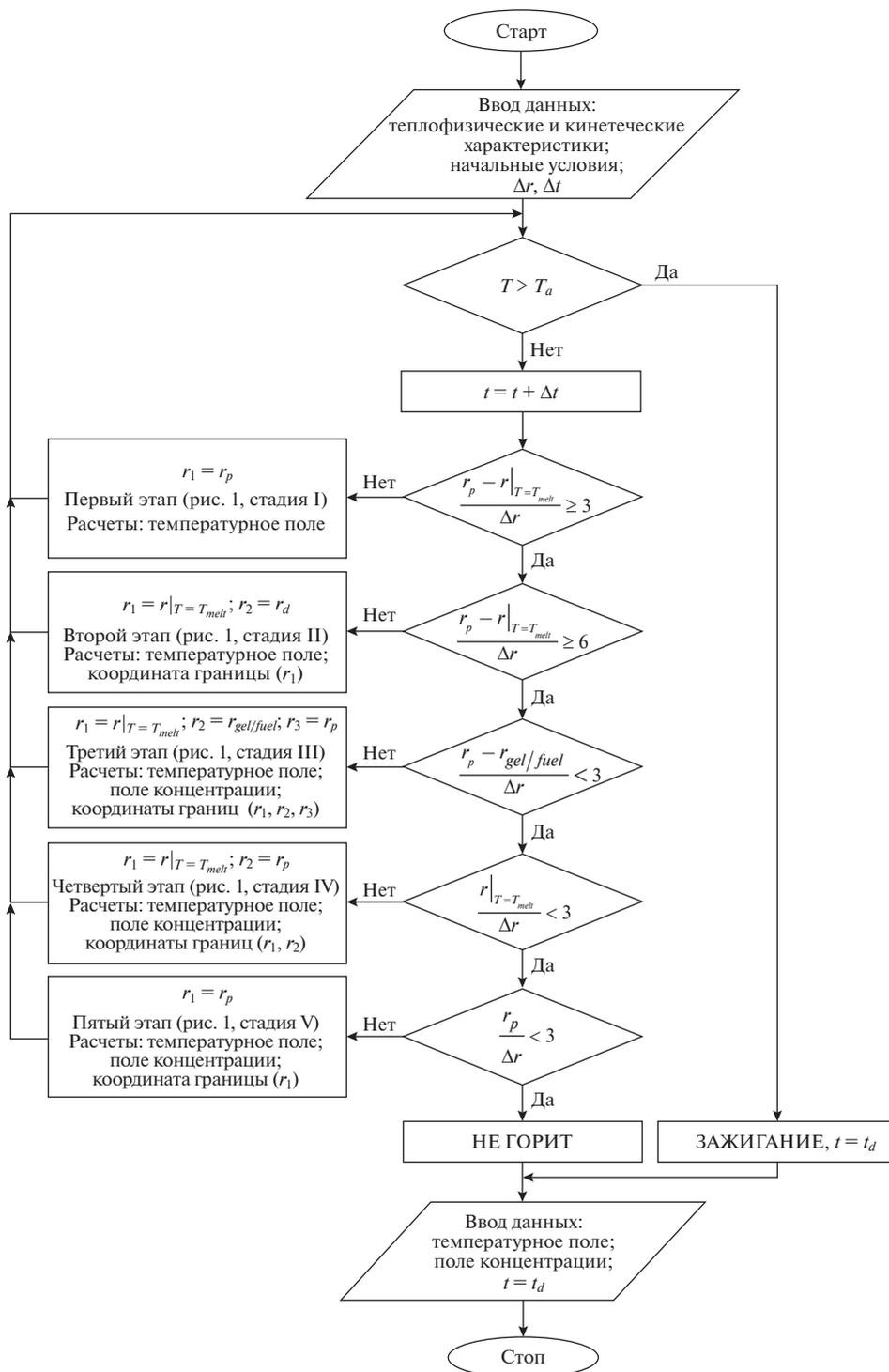


Рис. 2. Блок-схема алгоритма численного решения задачи зажигания гелеобразного топлива.

в соответствии с соотношением концентраций компонентов гелеобразного топлива (горючая жидкость, загуститель) по выражению

$$r_2 = \left( \frac{\rho_4 r_3^3 + \mu_4 \rho_3 r_1^3}{\mu_4 \rho_3 + \rho_4} \right)^{1/3}; \quad (44)$$

– координата границы “загуститель – газ”  $r = r_3 = r_p$  (рис. 1, стадия III) вычислялась в соответствии со скоростью испарения загустителя:

$$r_3 = \left( (r_3 + \Delta r)^3 - \frac{3(r_3 + \Delta r)^2 W_4 \Delta t}{\rho_4} \right)^{1/3}; \quad (45)$$

Таблица 1. Теплофизические характеристики компонентов системы “частица топлива – воздух”

Компонент	$\rho$ , кг/м <sup>3</sup>	$C$ , Дж/кг · К	$\lambda$ , Вт/м · К	Источник
Воздух	1.161	1190	0.026	[21–23]
Гелеобразное топливо	1010	1380	0.16	[24, 25]
Расплав топлива	941	2565	0.17	[21–23]
Горючая жидкость (в составе топлива)	890	1850	0.10	[21–23]
Загуститель (в составе топлива)	998.2	4183	0.60	[21–23]
Пары горючего	2.5	3876	0.072	[24, 25]
Пары загустителя	0.017	1877	0.024	[21–23]

Таблица 2. Характеристики физико-химических процессов

Характеристика	Значение	Источник
Тепловой эффект испарения горючей жидкости ( $Q_3$ ), Дж/кг	$0.14 \cdot 10^6$	[26]
Тепловой эффект испарения загустителя ( $Q_4$ ), Дж/кг	$2.26 \cdot 10^6$	[26]
Тепловой эффект реакции окисления парогазовой смеси ( $Q_5$ ), Дж/кг	$38 \cdot 10^6$	[26]
Предэкспоненциальный множитель ( $k_5^0$ ), с <sup>-1</sup>	$8 \cdot 10^5$	[21–23]
Энергия активации ( $E_5$ ), Дж/моль	$60 \cdot 10^3$	[21–23]
Массовая скорость процесса испарения горючей жидкости ( $W_3$ ), кг/м <sup>2</sup> · с	$(25 \cdot 10^{-3})^*$	[3]
Массовая скорость процесса испарения загустителя ( $W_4$ ), кг/м <sup>2</sup> · с	$(15.3 \cdot 10^{-3})^*$	[3]

\* Средние значения установлены при анализе экспериментальных данных [3].

– координата границы “горючая жидкость – газ”  $r = r_2 = r_p$  (рис. 1, стадия IV) после полного испарения сформировавшейся пленки загустителя вычислялась в соответствии со скоростью испарения горючей жидкости:

$$r_2 = \left[ (r_2 + \Delta r)^3 - \frac{3(r_2 + \Delta r)^2 W_3 \Delta t}{\rho_3} \right]^{1/3}. \quad (46)$$

Верификация разработанных математической модели (1)–(46) и алгоритма численного решения (рис. 2) выполнена путем проверки консервативности используемой разностной схемы. Погрешность выполнения закона сохранения энергии в области решения задачи зажигания (рис. 1) вычислялась на каждом шаге по времени. При варьировании в достаточно широких диапазонах значений шага по пространственной координате ( $\Delta r = 10$ –100 мкм) и шага по времени ( $\Delta t = 0.001$ –10 мс) установлено, что относительно небольшая погрешность выполнения баланса энергии (интегральное значение не превышало 4.3%) в рассматриваемой системе (рис. 1) наряду с малыми вычислительными затратами по определению характеристик зажигания достигается при шагах  $\Delta r = 12.5$  мкм и  $\Delta t = 1$  мс.

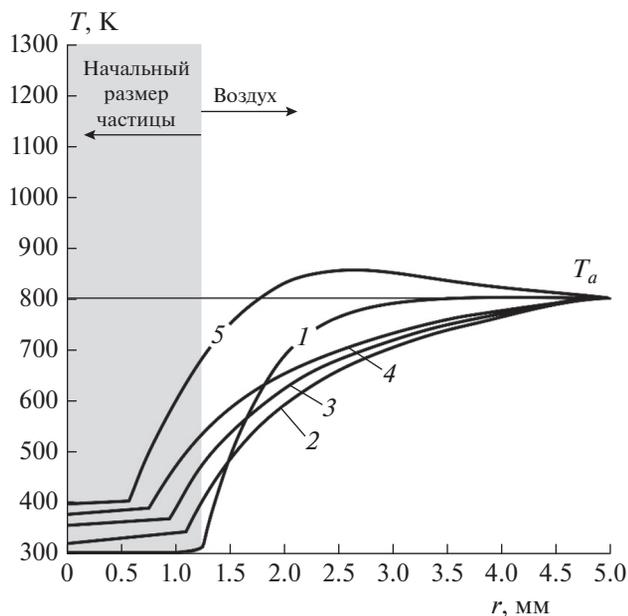
В рамках выполненного исследования среди прочих подходов для верификации разработанной математической модели и результатов чис-

ленного моделирования использован широко распространенный подход сопоставления последних с данными экспериментальных исследований. Графическая иллюстрация этого будет представлена в следующем разделе.

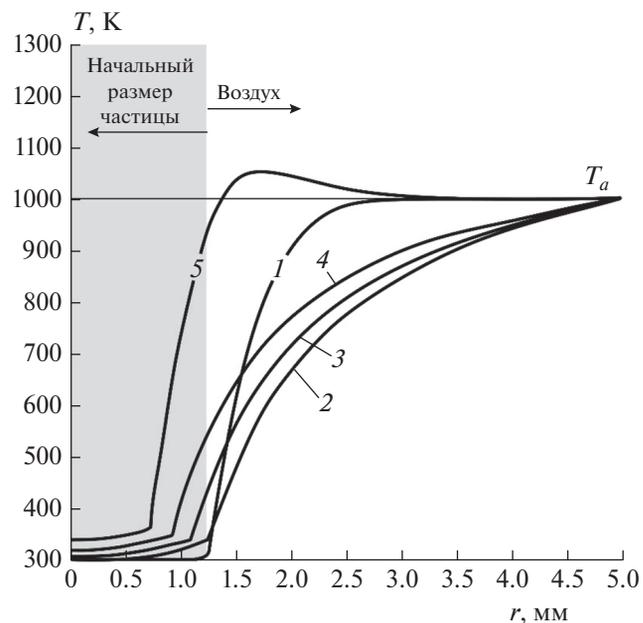
## РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Численное моделирование зажигания гелеобразного топлива на основе маслonaполненного криогеля (50 об.% масло + 48 об.% 10%-ного водного раствора ПВС + 2 об.% эмульгатор) выполнено в системе “частица топлива – воздух” (рис. 1) при соответствующих теплофизических свойствах веществ и материалов (табл. 1), а также характеристиках процессов фазовых превращений и химических реакций (табл. 2). Здесь горючая жидкость – индустриальное масло И-40А, загуститель – водный раствор ПВС. Размер области решения задачи зажигания  $r_l = 5$  мм; начальный размер частицы топлива  $r_p = 1.25$  мм; начальная температура топлива  $T_0 = 300$  К; температура разогретого воздуха  $T_a = 750$ –1473 К; температура плавления гелеобразного топлива  $T_{melt} = 330$  К.

В результате численного моделирования процесса зажигания установлены температурные профили в системе “частица топлива – воздух” (типичные профили приведены на рис. 3–5) для моментов времени  $t = 0.1$  с,  $t = t_d$  ( $t_d$  – время за-



**Рис. 3.** Температурные профили в системе “частица топлива – воздух” при  $T_a = 800$  К в разные моменты времени  $t$ : 1 – 0.1 с, 2 – 2.04 с, 3 – 4.07 с, 4 – 6.11 с, 5 – 8.15 с.

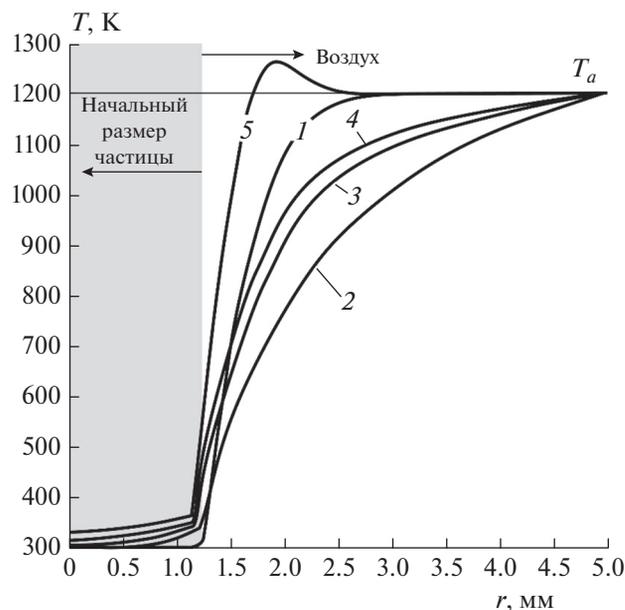


**Рис. 4.** Температурные профили в системе “частица топлива – воздух” при  $T_a = 1000$  К в разные моменты времени  $t$ : 1 – 0.1 с, 2 – 0.55 с, 3 – 1.09 с, 4 – 1.64 с, 5 – 2.19 с.

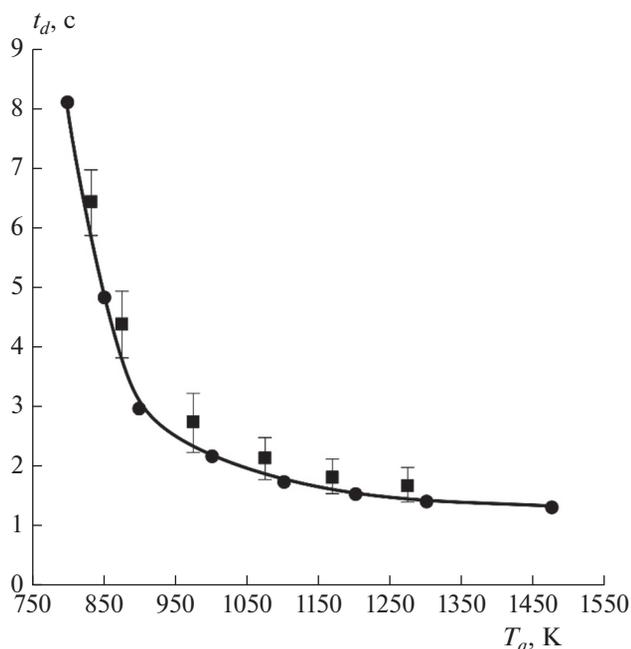
держки воспламенения, с) и трех промежуточных значений температур разогретого воздуха ( $T_a$ ) с равным шагом по времени в диапазоне 800–1200 К. Точки перегиба на температурных профилях при  $0 < r \leq r_p$  соответствуют координате поверхности капли расплава топлива.

Полученные результаты иллюстрируют (рис. 3–5) основные закономерности физико-химических процессов, протекающих в течение периода индукции. В начальный момент времени частица относительно холодного топлива при температуре 300 К помещается в разогретый до температуры  $T_a$  воздух (окислитель). Прогрев горючей частицы топлива ведет к плавлению приповерхностного слоя и испарению компонентов. Так как температура плавления топлива составляет  $T_{melt} = 330$  К, то относительно холодные пары с температурой не менее 330 К поступают в окрестность горючей частицы топлива (разогретый до высоких температур окислитель), тем самым снижая температуру газовой среды в этой области (кривые 3 на рис. 3–5). При прогреве частицы фронт плавления топлива смещается в глубинные слои (рис. 1), температура расплава топлива повышается, интенсивность испарения его компонентов (загустителя и горючей жидкости) возрастает. Это ведет к более существенному снижению температуры газовой смеси в окрестности горючей частицы топлива (кривые 2 на рис. 3–5) вследствие роста поглощения теплоты испарения и концентрации относительно холодных паров.

По мере формирования газовой смеси в результате диффузии паров ее температура повышается при перемешивании продуктов испарения топлива (с температурой немногим более 330 К) с разо-



**Рис. 5.** Температурные профили в системе “частица топлива – воздух” при  $T_a = 1200$  К в разные моменты времени  $t$ : 1 – 0.1 с, 2 – 0.386 с, 3 – 0.77 с, 4 – 1.16 с, 5 – 1.55 с.



**Рис. 6.** Зависимость времени задержки воспламенения горючей частицы гелеобразного топлива от температуры разогретого воздуха: ● — данные численного моделирования, ■ — экспериментальные данные [3].

гретым воздухом (кривые 3 и 4 на рис. 3–5). В результате экзотермической реакции горючего компонента и окислителя температура газовой смеси стремится к значению  $T_a$ . При достижении предельных условий происходит ее воспламенение, о чем свидетельствует быстрый рост температуры газовой смеси в окрестности частицы топлива выше значения  $T_a$  (кривые 5 на рис. 3–5).

Температура источника энергии оказывает существенное влияние на интенсивность физико-химических процессов в течение индукционного периода. Чем выше  $T_a$ , тем выше градиент температуры в горючей частице топлива (температура поверхности соответствует  $T_{melt}$ , а температура в центре частицы —  $T_0$ ), меньше время задержки воспламенения, менее существенно изменяется размер частицы топлива в течение периода индукции, ближе к поверхности частицы располагается зона зажигания (вследствие меньшей концентрации горючих паров в окрестности частицы топлива), характеризующаяся температурным экстремумом (кривые 5 на рис. 3–5) аналогично экспериментальным зависимостям [27]. Выявленные закономерности будут более подробно проанализированы при дальнейшем обсуждении результатов численного моделирования.

На рис. 6 приведена зависимость времени задержки воспламенения горючей частицы гелеобразного топлива от температуры разогретого возду-

ха. Температура  $T_a = 800$  К является минимально необходимой для зажигания частицы гелеобразного топлива. При меньших значениях температуры воздуха топливо не горит. В результате прогрева горючей частицы топливо плавится. Компоненты расплава (загуститель и горючее) испаряются. В таких условиях энергии источника нагрева недостаточно для воспламенения формирующейся парогазовой смеси. Результаты численного моделирования хорошо соответствуют экспериментальным данным [3], полученным в идентичных условиях. Различия времен задержки воспламенения не превышают случайной погрешности (20%) регистрации  $t_d$  в экспериментах [3]. Можно сделать вывод о достаточно достоверном прогнозе характеристик зажигания частицы гелеобразного топлива на основе органического полимерного загустителя в рамках разработанной математической модели (1)–(46). Стоит отметить, что теоретически установленные времена задержки воспламенения топлива в диапазоне температур разогретого воздуха 800–1473 К снижаются более чем в 6 раз (рис. 6). При близких к предельным условиям зажигания (когда  $t_d = 8.15$  с) длительность индукционного периода асимптотически стремится к бесконечности при  $T_a \rightarrow 800$  К (рис. 6). При относительно высокой интенсивности физико-химических процессов (при  $T_a > 1150$  К) время задержки воспламенения топлива не превышает 1.3 с (рис. 6).

Длительность индукционного периода условно можно разделить на два этапа. Первый этап — преобладание процессов тепломассопереноса при прогреве частицы топлива, формировании горючей парогазовой смеси, ее прогреве. Второй этап — преобладание химических реакций при взаимодействии компонентов газовой смеси. Характерные времена этих этапов достаточно существенно различаются. Длительность первого этапа составляет 70–90% от времени  $t_d$  (в зависимости от температуры разогретого воздуха). Второй этап протекает гораздо интенсивнее, и его длительность зависит в основном от кинетических параметров химической реакции горючего компонента и окислителя. Поэтому процессы тепломассопереноса оказывают достаточно существенное влияние на интенсивность зажигания топлива в целом.

В табл. 3 приведены значения радиусов капель расплава топлива в момент зажигания, расстояний от их поверхности до зоны воспламенения в газовой среде при разных температурах разогретого воздуха ( $T_a = 800$ –1473 К), а также соответствующих объемов испарившихся компонентов топлива в течение индукционного периода. Положение зоны воспламенения в газовой среде контролировалось по координате максимума температуры соответствующего температурного профиля (см. кривые 5 на рис. 3–5) в системе “ча-

Таблица 3. Значения радиусов ( $r_d$ ) капли расплава топлива в момент зажигания, расстояний ( $L$ ) от ее поверхности до зоны воспламенения в газовой среде и соответствующих объемов ( $V$ ) испарившихся компонентов топлива в течение индукционного периода

$T_a$ , К	$r_d$ , мм	$L$ , мм	$V$ , мм <sup>3</sup>
800	0.978	1.704	4.261
900	0.990	1.404	4.115
1000	1.027	1.015	3.642
1100	1.115	0.927	2.374
1200	1.165	0.764	1.557
1300	1.183	0.652	1.246
1400	1.190	0.564	1.122
1473	1.194	0.506	1.051

стица топлива – воздух”. Полученные результаты (табл. 3) иллюстрируют ранее выявленную тенденцию закономерностей протекания физико-химических процессов в течение индукционного периода. При температурах разогретого воздуха не более 1000 К частица гелеобразного топлива в течение индукционного периода плавится во всем объеме. Топливо гарантированно не загорается до полного испарения пленки загустителя, поэтому в таких условиях (при  $T_a = 800–1000$  К) размер капли расплава и, соответственно, ее объем изменяются существенно. Последний к моменту зажигания уменьшается более чем в 2 раза по сравнению с начальным объемом горючей частицы топлива. Также при разной интенсивности подвода теплоты к топливу по-разному располагается зона воспламенения в газовой среде относительно поверхности капли расплава топлива. При близких к предельным условиям зона зажигания расположена на расстоянии от поверхности капли, превышающем  $r_p$ . В условиях более интенсивного подвода теплоты ( $T_a \rightarrow 1500$  К) удаление зоны зажигания от поверхности капли расплава не превышает и половины  $r_p$  (табл. 3).

На основании вышеизложенного можно сделать вывод, что разработанная математическая модель может быть использована на практике для достоверного прогноза характеристик процесса зажигания частиц типичных гелеобразных топлив на основе органического полимерного загустителя в разогретом воздухе. Результаты такого исследования являются основой для проведения опытно-конструкторских работ при разработке технологий применения перспективных топлив, в том числе содержащих мелкодисперсные частицы металлов [28–30], в авиакосмической технике.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработанная математическая модель описывает процесс зажигания в рамках предельного режима, при котором скорость подвода теплоты от источника к топливу и горючей парогазовой смеси ограничена, т.е. характерное время прогрева много больше характерного времени химической реакции. В этом случае лимитирующими факторами интенсивности процесса являются теплоподвод и диффузия, а экзотермическую реакцию можно полагать протекающей равномерно с учетом соответствующих условий в газовой среде в окрестности горючей частицы топлива. Как правило, длительность первого и второго этапов составляет соответственно 70–90% и 30–10% от времени задержки воспламенения  $t_d = 0.3–10.0$  с (в зависимости от температуры разогретого воздуха  $T_a = 800–1473$  К).

Показано, что температура источника энергии оказывает достаточно существенное влияние на интенсивность физико-химических процессов в течение индукционного периода. Чем выше температура воздуха, тем выше градиент температуры в частице топлива, меньше время задержки воспламенения (различие времен составляет до 8 раз в диапазоне температур источника нагрева 800–1473 К), менее существенно уменьшается размер горючей частицы топлива (до 15% относительно начального значения) в течение периода индукции, ближе к поверхности частицы располагается зона зажигания (вследствие меньшей концентрации горючих паров в газовой среде).

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 18-13-00031; <https://rscf.ru/project/18-13-00031/>.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Mishra D.P., Patyal A., Padhwai M. // Fuel. 2011. V. 90. № 5. P. 1805.
2. Solomon Y., Natan B., Cohen Y. // Combust. and Flame. 2009. V. 156. № 1. P. 261.
3. Verzhinina K.Y., Glushkov D.O., Nigay A.G. et al. // Ind. Eng. Chem. Res. 2019. V. 58. № 16. P. 6830.
4. Rapp D.C., Zurawski R.L. // Pros. 24th Joint Propulsion Conf. Boston, Massachusetts, USA: American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1988. P. 1.
5. Hodge K.F., Crofoot T.A., Nelson S. // Pros. 35th Joint Propulsion Conf. Reston, Virginia, USA: American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1999. P. 1.
6. Varma M., Pein R. // Intern. J. Energ. Mater. Chem. Propuls. 2009. V. 8. № 6. P. 501.
7. Caldas Pinto P., Hopfe N., Ramsel J. et al. // Pros. 7th Europ. conf. for aeronautics and space sciences (EU-CASS). Milan, Italy: EUCASS association, 2017. P. 1.
8. Hassid S., Natan B. // J. Propuls. Power. 2013. V. 29. № 6. P. 1337.
9. Nave O., Bykov V., Gol'Dshtein V. et al. // Fuel. 2011. V. 90. № 11. P. 3410.

10. *He B., Nie W., Feng S. et al.* // Propellants, Explos. Pyrotech. 2013. V. 38. № 5. P. 665.
11. *Guan H.-S., Li G.-X., Zhang N.-Y.* // Acta Astronaut. 2018. V. 144. P. 119.
12. *Jyoti B.V.S., Naseem M.S., Baek S.W. et al.* // Combust. and Flame. 2017. V. 183. P. 102.
13. *von Kampen J., Alberio F., Ciezki H.K.* // Aerosp. Sci. Technol. 2007. V. 11. № 1. P. 77.
14. *Лемперт Д.Б., Казаков А.И., Дорофеев Е.М. и др.* // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 7. С. 17.
15. *Glushkov D.O., Kuznetsov G. V., Nigay A.G. et al.* // J. Energy Inst. 2019. V. 92. № 6. P. 1944.
16. *Glushkov D.O., Nigay A.G., Yanovsky V.A. et al.* // Energy and Fuels. 2019. V. 33. № 11. P. 11812.
17. *Glushkov D.O., Pleshko A.O., Yashutina O.S.* // Intern. J. Heat Mass Transf. 2020. V. 156. P. 119895.
18. *Glushkov D.O., Kuznetsov G.V., Nigay A.G. et al.* // Powder Technol. 2020. V. 360. P. 65.
19. *Глушков Д.О., Кузнецов Г.В., Стрижак П.А.* // Хим. физика. 2014. Т. 33. № 4. С. 38.
20. *Glushkov D.O., Paushkina K.K., Pleshko A.O. et al.* // Fuel. 2022. V. 313. P. 123024.
21. *Reid R.C., Sherwood T.K., Street R.E.* // Phys. Today. 1959. V. 12. № 4. P. 38.
22. *Юренин В.Н., Лебедев П.Д.* Теплотехнический справочник. Т. 1. М.: Энергия, 1975.
23. *Варгафтик Н.Б.* Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. М.: ООО "Старс", 2006.
24. *Штехер М.С.* Топлива и рабочие тела ракетных двигателей. М.: Машиностроение, 1976.
25. *Щетинков Е.С.* Физика горения газов. М.: Наука, 1965.
26. *Глушков Д.О., Кузнецов Г.В., Стрижак П.А. и др.* Гелеобразные топлива: приготовление, реология, распыление, горение. Новосибирск: СО РАН, 2020.
27. *Вершинина К.Ю., Глушков Д.О., Кузнецов Г.В. и др.* // Химия твердого топлива. 2016. № 2. С. 21.
28. *Лебедева Е.А., Астафьева С.А., Истомина Т.С.* // Хим. физика. 2022. Т. 41. № 4. С. 24.
29. *Гудкова И.Ю., Зюзин И.Н., Лемперт Д.Б.* // Хим. физика. 2022. Т. 41. № 1. С. 34.
30. *Зюзин И.Н., Гудкова И.Ю., Лемперт Д.Б.* // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 9. С. 52.