

文章编号: 1006-9941(2017)03-0178-06

# AP/HTPB 推进剂微尺度燃烧特性的数值分析

马龙泽, 余永刚

(南京理工大学能源与动力工程学院, 江苏 南京 210094)

**摘要:** 为研究高氯酸铵/端羟基聚丁二烯(AP/HTPB)固体推进剂颗粒的微尺度燃烧特性,基于气固耦合,采用简化的两步总包化学反应动力学机理,建立了二维周期性三明治定常燃烧模型,采用 FLUENT 软件,数值分析了 AP/HTPB 的微观燃烧特性。结果表明,AP 体积分数为 0.75 条件下,低压( $<0.4$  MPa)时,AP/HTPB 燃烧的总火焰以预混燃烧为主,AP 燃速低于 HTPB 燃速,随着压力升高,大于 2.5 MPa 时,火焰呈扩散结构,AP 燃速高于 HTPB 燃速;压力越高,气相对固相的热反馈越强,耦合面上的温度和燃烧速率越高。气相的体积释放速率随着压力的增加而增加,放热区域收缩,相连的两个放热核心区分裂为两个独立的放热核心区。当燃烧压力不变(2.5 MPa),AP 体积分数为 0.7~0.95 时,AP 含量越小,则一个周期三明治单元中粘合剂 HTPB 的宽度相对越大,火焰面趋于分裂为两个狭长带状火焰面,温度随之递增。

**关键词:** 高氯酸铵/端羟基聚丁二烯(AP/HTPB); 含能颗粒; 火焰结构; 燃速; 数值模拟

**中图分类号:** TJ55; V512

**文献标志码:** A

**DOI:** 10.11943/j.issn.1006-9941.2017.03.001

## 1 引言

高氯酸铵/端羟基聚丁二烯(AP/HTPB)是一种典型的复合固体推进剂,由氧化剂 AP 颗粒和粘合剂 HTPB 混合而成,其燃烧特性和火焰结构依赖于燃烧压力和材料非均匀性质。针对 AP/HTPB 的燃烧特性,前人做了诸多工作,Price 等<sup>[1]</sup>通过扫描电镜(SEM)观察发现,AP/HTPB 在微观尺度上呈准周期性排列,结构表现为三明治分布,因此可以将 AP/HTPB 复合推进剂宏观燃烧简化为微观三明治单元燃烧。Chorpening<sup>[2]</sup>利用紫外线透射成像技术观测了不同压力下推进剂燃烧表面上方的火焰结构。Beckstead 等<sup>[3]</sup>对 AP/HTPB 复合推进剂表面结构进行了大量实验观测后,提出了 BDP 多火焰模型,能合理地解释推进剂的诸多燃烧特征。Bilger 等<sup>[4]</sup>以  $Pe$  数或雷诺数形式研究了推进剂燃烧时对流和扩散在方程和边界条件中应用的重要性。Buckmaster<sup>[5]</sup>和 Jackson<sup>[6]</sup>采用总包气相反应建立了二维和三维几何模型,对推进剂

燃烧的火焰结构进行了模拟,进一步支持了 Bilger 的研究成果。Hegab 等<sup>[7]</sup>研究了 AP/HTPB 复合固体推进剂燃烧气相与固相间的耦合问题。Cai<sup>[8]</sup>分析了 AP 颗粒尺寸、环境压力和气相反应速率等参数对推进剂燃烧气相火焰结构的影响。Jackson<sup>[9]</sup>建立了 AP 颗粒随机分布的三维非定常模型并进行了数值模拟。叶锐和曹永杰<sup>[10-11]</sup>以  $Pe$  数为基础,讨论了不同工况下侧向速度等参数对燃烧的影响。AP/HTPB 复合固体推进剂燃烧火焰可以看作是由大量的微尺度火焰单元组成,研究单个火焰单元的燃烧特性,有助于从宏观上深入了解其燃烧机理和性能。

为了进一步研究 AP/HTPB 微观单元的燃烧特性和火焰结构,本研究基于气相火焰与固相推进剂的耦合,利用计算流体动力学(CFD)方法,从流动燃烧角度,采用简化的两步总包化学反应动力学机理,基于 BDP 多火焰模型,建立了二维周期性三明治定常燃烧模型,借助 FLUENT 软件,数值分析了 AP 体积分数一定(0.75)时,不同燃烧压力下的燃烧参数分布特性以及氧化剂含量( $0.7 < \alpha < 0.95$ )对燃烧的影响。

## 2 物理模型

针对本文采用的 AP/HTPB 二维微尺度周期性三明治燃烧模型,如图 1 所示,作如下简化假设:

收稿日期: 2016-11-03; 修回日期: 2016-11-22

基金项目: 国家自然科学基金资助(51176076)

作者简介: 马龙泽(1992-),男,博士生,主要从事含能固体燃烧理论与技术研究。e-mail: zxfxlmz@163.com

通信联系人: 余永刚(1963-),男,教授,博士生导师,主要从事含能材料瞬态燃烧理论与技术研究。e-mail: yygnjust801@163.com

(1) 燃气为不可压理想气体, 气相各组分 Lewis 数均为 1;

(2) 固相热分解和气相反应均满足 Arrhenius 定律;

(3) 固相分解仅发生在燃面层, 通过质量、能量通量平衡以及温度连续性关系耦合气固两相;

(4) 不考虑燃气辐射及燃面形状;

(5) 以源项法描述固相热分解及气相扩散燃烧。

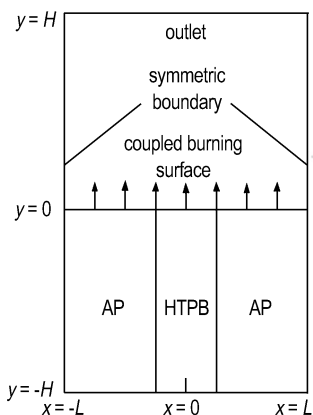


图 1 AP/HTPB 微尺度燃烧模型

Fig.1 Microscale combustion model of AP/HTPB

### 3 数学模型

根据上述物理模型, 建立低雷诺数下二维定常流动燃烧基本控制方程, 具体如下:

#### 3.1 气相控制方程

(1) 质量守恒方程

$$\nabla \cdot (\rho_g \mathbf{u}) = 0 \quad (1)$$

(2) 动量守恒方程

$$\frac{\partial}{\partial x_k} (\rho_g u_j u_k) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \mu_g \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \right) - \frac{\partial p}{\partial x_j} + S_j \quad (2)$$

(3) 组分守恒方程

$$\rho_g \mathbf{u} \cdot \nabla Y_i = \nabla \cdot \left( \frac{\lambda_g}{c_p Le} \nabla Y_i \right) + S_{Y_i} \quad (3)$$

(4) 能量守恒方程

$$\rho_g c_p \mathbf{u} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (\lambda_g \nabla T) + S_T \quad (4)$$

(1)式~(4)式中,  $\mathbf{u}$  为速度矢量,  $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ ;  $u_j$  和  $u_k$  为速度张量,  $j$  和  $k$  指标范围是(1,2);  $\rho_g$  为气相密度,  $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ;  $\mu_g$  为气相粘性系数,  $\text{N} \cdot \text{s} \cdot \text{m}^{-2}$ ;  $\lambda_g$  为气相导热系数,  $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ;  $c_p$  为气相的定压比热容,  $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ;  $Y_i$  为气相组分  $i$  的质量分数;  $Le$  为无

量纲 Lewis 数,  $S_j$  为气相动量源项,  $\text{N} \cdot \text{m}^{-3}$ ;  $S_{Y_i}$  为气相组分源项, 为无量纲;  $S_T$  为气相能量源项,  $\text{W} \cdot \text{m}^{-3}$ 。

#### 3.2 固相能量方程

$$\rho_c c_c r \frac{\partial T}{\partial y} = \nabla \cdot (\lambda_c \nabla T) \quad (5)$$

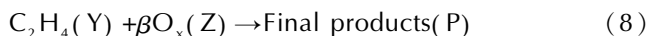
式中,  $\rho_c$  为固相密度,  $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ;  $\lambda_c$  为固相导热系数,  $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ;  $c_c$  为固相比热容,  $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ;  $r$  为固相燃速,  $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ 。其中,

$$\lambda_c = \begin{cases} \lambda_{AP} & L < |x| < L \\ \lambda_B & |x| < (1-\alpha)L \end{cases}; \rho_c = \begin{cases} \rho_{AP} & L < |x| < L \\ \rho_B & |x| < (1-\alpha)L \end{cases}; c_c = \begin{cases} c_{AP}(1-\alpha) & L < |x| < L \\ c_B & |x| < (1-\alpha)L \end{cases} \quad (6)$$

式中, 下标 AP 和 B 分别代表氧化剂 AP 和粘结剂 HTPB;  $x$  为横坐标,  $\text{m}$ ;  $\alpha$  为 AP 体积分数。

#### 3.3 气相化学反应动力学

采用基于 BDP 多火焰模型的两步总包反应机理<sup>[7]</sup>:



式中, X 为氧化剂颗粒 AP 分解反应生成的  $\text{NH}_3$  和  $\text{HClO}_4$ , Z 为其分解产生的氧化性气体混合物, Y 为粘合剂 HTPB 的热解产物,  $\beta$  为化学计量系数, 为无量纲, 其值由 AP 体积分数  $\alpha$  决定, 如(9)式所示:

$$\beta = \rho_{AP} \alpha / (\rho_B (1-\alpha)) \quad (9)$$

化学反应速率遵循基于压力的 Arrhenius 定律<sup>[7]</sup>:

$$R_1 = D_1 p^{n_1} [X] \exp(-E_1 / R_u T) \quad (10)$$

$$R_2 = D_2 p^{n_2} [Y] [Z] \exp(-E_2 / R_u T) \quad (11)$$

式中,  $D_1$ 、 $D_2$  为化学反应速率常数,  $[X]$ 、 $[Y]$ 、 $[Z]$  为相应组分的质量分数,  $n_1$ 、 $n_2$  为压力指数,  $E_1$ 、 $E_2$  为活化能,  $R_u$  为通用气体常数。

#### 3.4 边界条件

针对图 1 所示计算模型, 计算域取周期性半宽  $L = 90 \mu\text{m}$ , 气固两相高度均为  $H = 500 \mu\text{m}$ , 左右边界为周期性边界, 上下边界为远场边界, 气固耦合面处组分分布为:

$$\begin{cases} X=1, Y=0, Z=0 & (1-\alpha)L < |x| < L \\ X=0, Y=1, Z=0 & |x| < (1-\alpha)L \end{cases} \quad (12)$$

### 4 数值模拟结果及讨论

采用基于有限体积法的 CFD 软件 FLUENT, 对 AP/HTPB 微观单元的定常燃烧过程进行了数值模拟, 模型计算所需的化学反应动力学及物性参数<sup>[12]</sup> 如表 1 所示。

表 1 AP/HTPB 的反应动力学及物性参数<sup>[12]</sup>Table 1 Reaction kinetic and physical property parameters of AP/HTPB<sup>[12]</sup>

parameter	value	parameter	value
$E_{AP}/J \cdot mol^{-1}$	$9.145 \times 10^4$	$\rho_{AP}/kg \cdot m^{-3}$	1950
$E_B/J \cdot mol^{-1}$	$6.236 \times 10^4$	$\rho_B/kg \cdot m^{-3}$	920
$E_1/J \cdot mol^{-1}$	$6.651 \times 10^4$	$\lambda_{AP}/W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$	0.405
$E_2/J \cdot mol^{-1}$	$9.145 \times 10^4$	$\lambda_B/W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$	0.276
$R_u/J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$	8.341	$c_p/J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$	1255.2

Note:  $E_{AP}$  and  $E_B$  are the decomposition activation energies,  $E_1$  and  $E_2$  are activation energies,  $R_u$  is the universal gas constant,  $\rho_{AP}$  and  $\rho_B$  are densities of AP and HTPB, respectively,  $\lambda_{AP}$  and  $\lambda_B$  are thermal conductivities of AP and HTPB, respectively,  $c_p$  is the specific heat.

#### 4.1 火焰结构特性

AP 体积分数为 0.75 时,不同燃烧压力下的温度分布云图如图 2 所示,可以看出,当  $0.1 \text{ MPa} \leq p \leq 6.0 \text{ MPa}$  时,随着压力升高,气相火焰温度随之先递增再衰减,火焰结构呈现出不同燃烧特性。由式(10)和式(11)可知,气相化学反应速率与  $p^n$  相关,随着压力升高,化学反应速率迅速增大。当压力小于 0.4 MPa 时,火焰温度较低,但分布较为均匀,这是因为 AP/HTPB 燃烧的火焰温度分布受气相化学反应和扩散的共同作用,此时,扩散混合占据主导位置,固相分解产物能在气相发生反应前混合充分,故而燃烧火焰总体呈预混燃烧特性。当  $0.4 \text{ MPa} \leq p < 2.5 \text{ MPa}$  时,气相化学反应速率加快,与扩散速率相当,这时燃烧火焰呈预混-扩散特征,火焰温度分布基本呈现“W”形态,HTPB 火焰高于 AP 火焰,说明 HTPB 燃速比 AP 大,形成 AP 凸出于粘结剂表面,此时当压力为 1.5 MPa 时,火焰达到最高温度。当  $2.5 \text{ MPa} < p \leq 6.0 \text{ MPa}$  时,随着压力升高,化学反应速率较快,扩散速率相对较慢,这时扩散输运成为燃烧的控制因素,燃烧火焰结构具有典型的扩散特征,火焰温度分布呈明显的“W”形态,AP 火焰高于 HTPB 火焰,表明 HTPB 燃速比 AP 小,形成 AP 凹陷于粘结剂表面。图 3 为 Chorpening<sup>[2]</sup> 实验观测的火焰结构随压力的变化规律,图中红色条状为 HTPB,两侧黄色部分为 AP,发现压力为 0.2 MPa 时,火焰为预混火焰,随着压力升高,扩散火焰逐渐占主导,压力小于 1.5 MPa 时,AP 凸出于 HTPB,但两者高度差随压力增大而缩小,压力达到 3.2 MPa 时,火焰为扩散火焰,AP 凹陷于 HTPB,计算所得结论与之吻合。

#### 4.2 火焰热释放及其对燃面的热反馈

氧化剂 AP 体积分数为 0.75 时,不同压力下的容

积释放速率分布如图 4 所示,总体来看,气相火焰热释放速率随压力升高而递增,火焰对燃面的热反馈随压力增大而加强。压力较低 ( $< 0.4 \text{ MPa}$ , 图 4a) 时,预混火焰热释放区域为一个整体,纵向分布较大,容积放热速率较小,在 AP 燃面上方各有一个较大的放热核心,

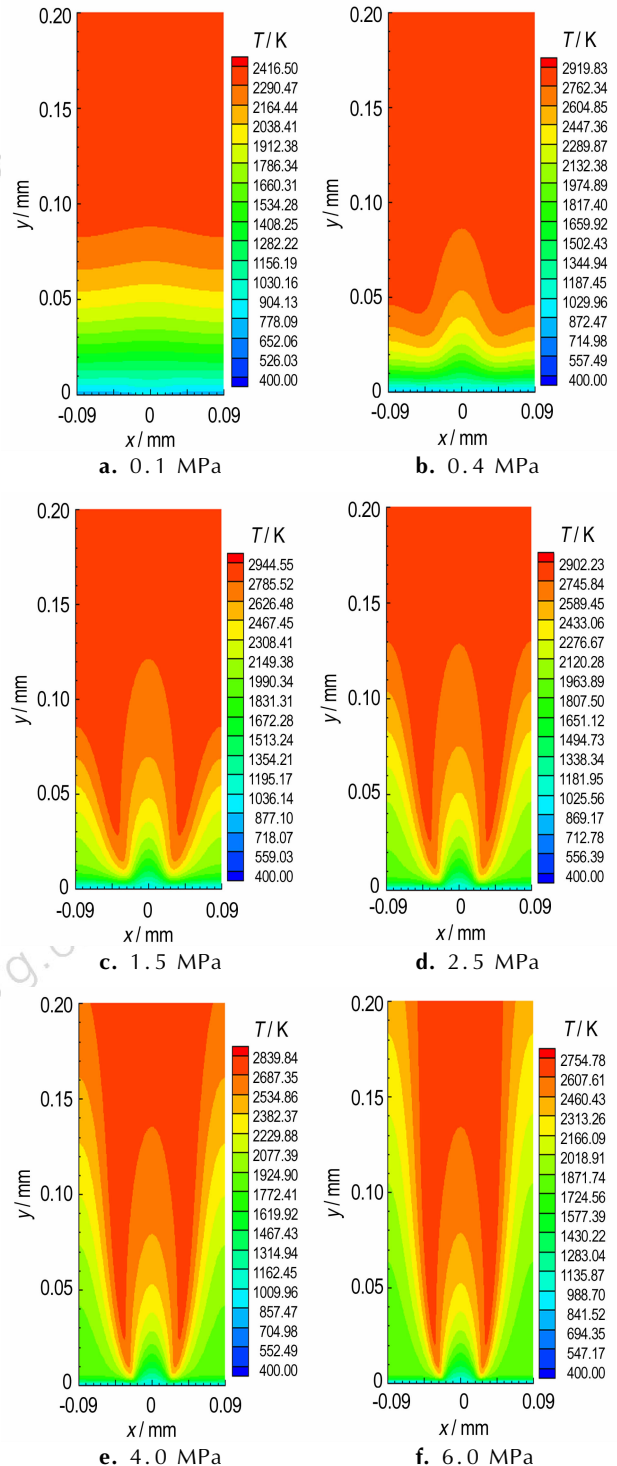
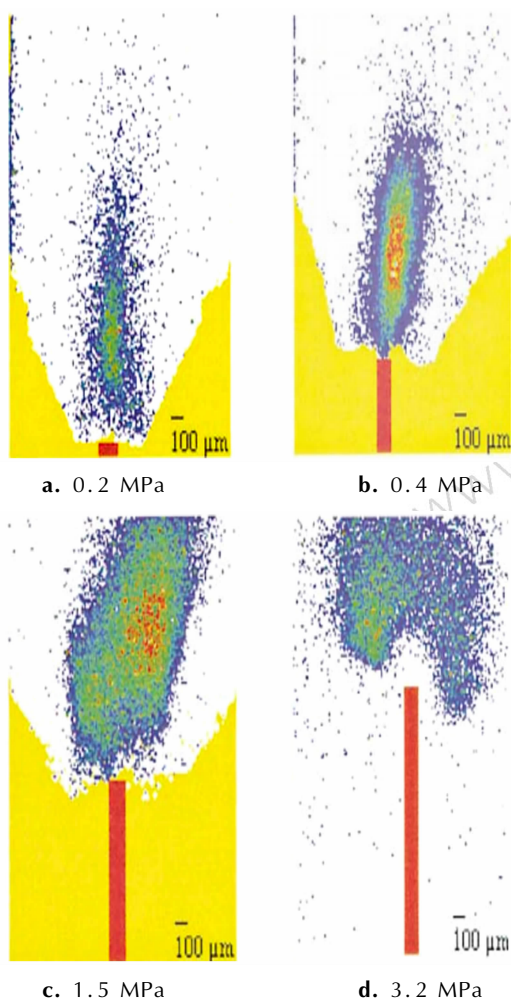


图 2 不同压力下的气相火焰温度分布

Fig. 2 Gas phase flame temperature distribution at different pressure

图3 不同压力下的火焰紫外发射图<sup>[2]</sup>Fig.3 Flame UV emission images at different pressure<sup>[2]</sup>

随着压力升高,火焰热释放区域轴向缩减变窄,面积减小,两个放热核心收缩且逐渐分离,火焰由一个整体逐渐分裂形成两个扩散火焰带,并且压力越高,火焰放热核心越贴近燃烧表面。

图5为不同压力下燃面各处的温度分布。由图5可以看出,随着压力增大,氧化剂AP燃面温度比粘结剂燃面温度低,燃面各处温度升高,但HTPB燃面最高温度变化幅度大于AP燃面处的温度增幅,燃面最高温度位置处于粘结剂一侧。由于燃面退移速率与温度成正相关,可推断出不同压力下燃面各处的燃速,如图6所示,燃速整体随着压力升高而增大,但AP燃速随压力变化增幅更大,所以压力较低时,HTPB燃速高于AP燃速,压力较高时,HTPB燃速反而低于AP燃速。图7为Price<sup>[1]</sup>扫描电镜观测到的低压和高压下的燃面轮廓,可知低压下AP相对HTPB凸起,高压下AP相对于HTPB凹陷,计算结果与该实验相吻合。

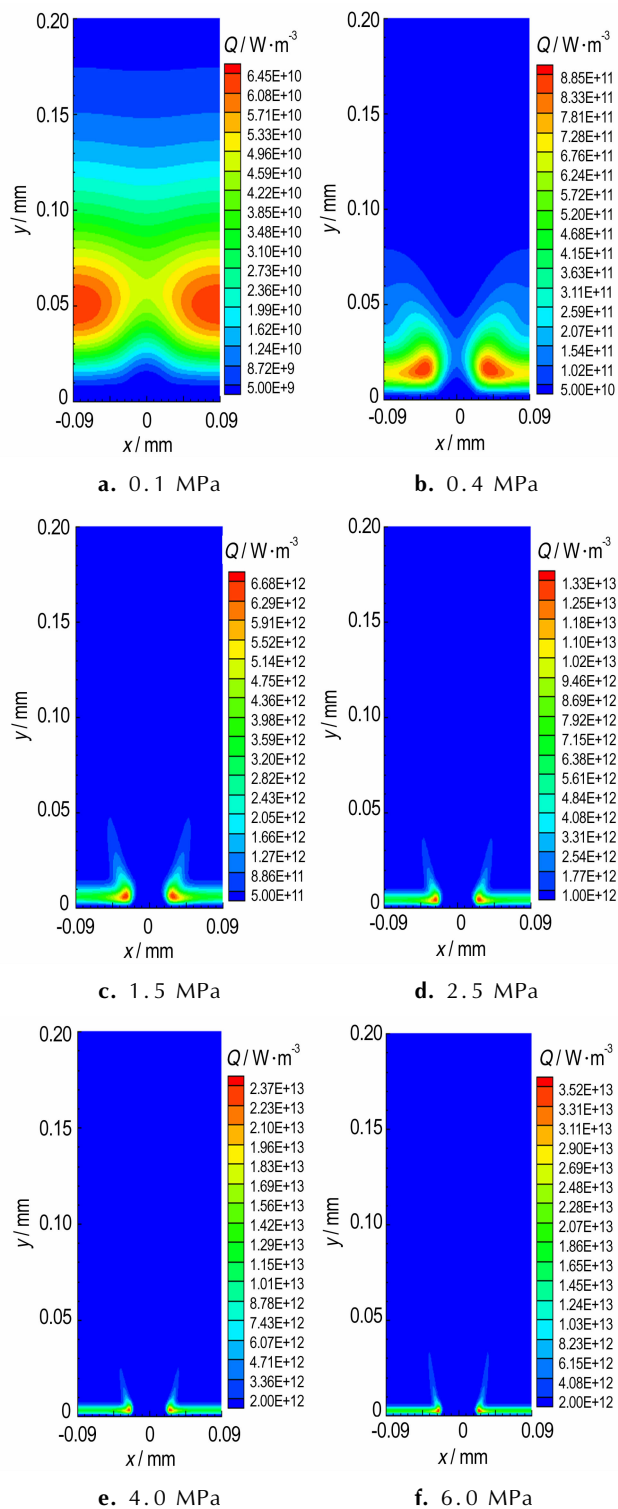


图4 不同压力下的容积放热速率分布

Fig.4 Volume heat release rate distribution at different pressure

### 4.3 氧化剂含量对燃烧的影响

当燃烧压力不变时,以2.5 MPa为例,不同氧化剂AP体积分数下的容积放热速率云图,如图8所示。可以看出,AP体积分数为0.7~0.95时,随着AP含

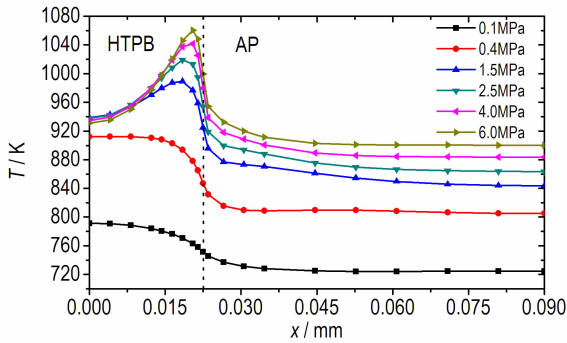


图5 不同压力下的燃面温度分布

Fig. 5 Temperature distribution of the burning surface at different pressure

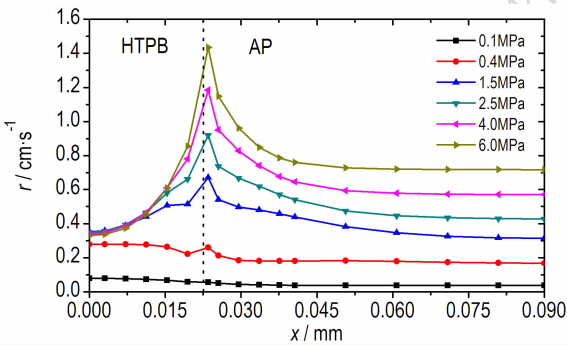


图6 不同压力下的燃面燃速分布

Fig. 6 Burning rate distribution of the burning surface at different pressure

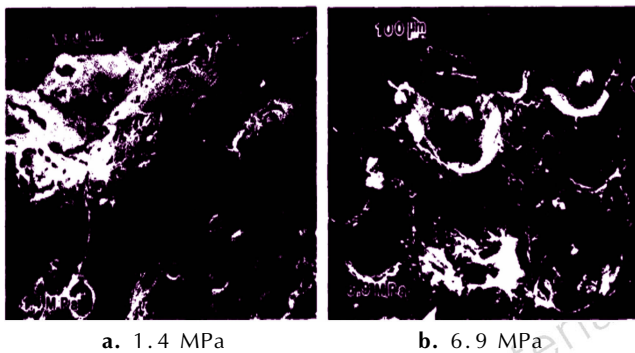
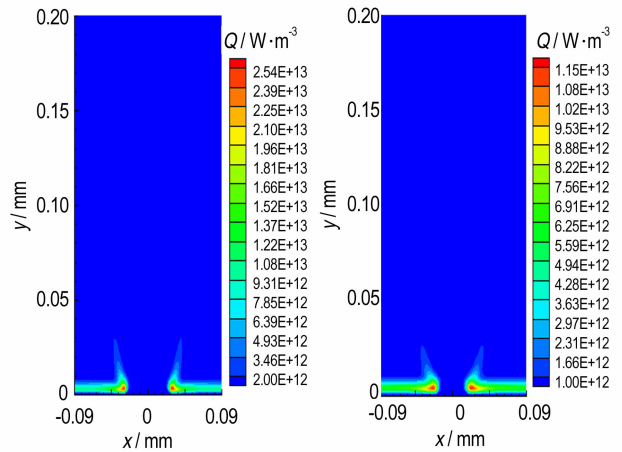


图7 低压和高压下熄火推进剂的燃面<sup>[1]</sup>

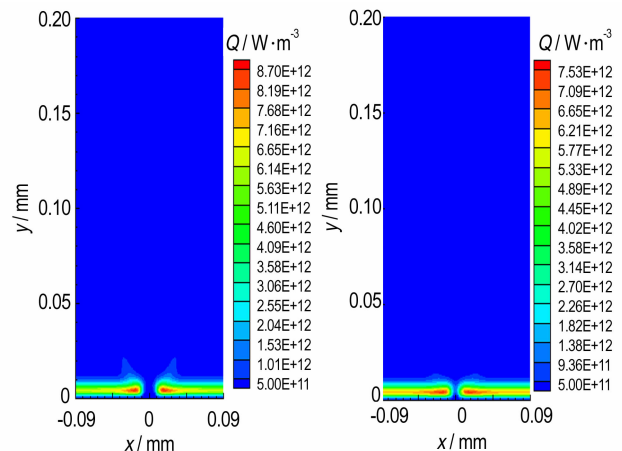
Fig. 7 Burning surface of the propellant quenched at low and high pressure<sup>[1]</sup>

量增大,则粘结剂相对越窄,容积放热速率越小,气相热释放区域由两个合并连接形成一个整体,AP/HTPB交界处上方的火焰带逐渐变短消失。图9为AP高体积分数和低体积分数下的火焰温度分布云图,结合图8可知, $\alpha=0.7$ 时,气相火焰热释放最大,此时微观单元火焰呈现出富燃特性,有两个狭长带状火焰面,最大容积放热速率为  $2.54 \times 10^{13} \text{ W} \cdot \text{m}^{-3}$ ,燃烧火焰最高温度为 3376 K,随着氧化剂AP体积分数增大, $\alpha=0.95$ 时,



a.  $\alpha=0.7$

b.  $\alpha=0.8$

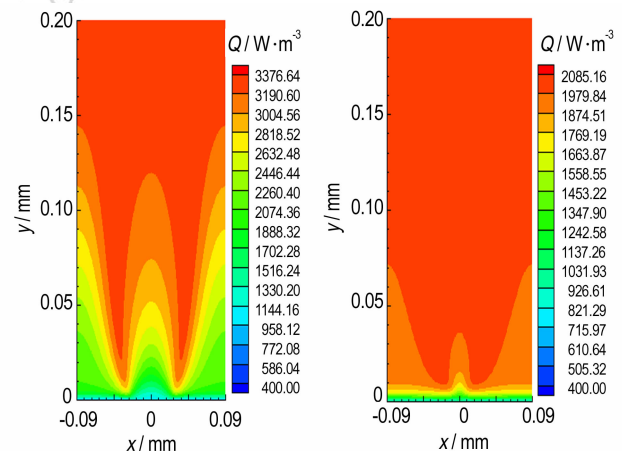


c.  $\alpha=0.9$

d.  $\alpha=0.95$

图8 不同AP体积分数下的体积热释放速率分布

Fig. 8 Volume heat release rate distribution under the different volume fraction of AP



a.  $\alpha=0.7$

b.  $\alpha=0.95$

图9 不同AP体积分数下的气相火焰温度分布

Fig. 9 Gas phase flame temperature distribution under the different volume fraction of AP

气相热释放区域为一个整体,热释放量最小,火焰单元呈贫燃特性,此时最大容积放热速率为  $7.53 \times 10^{12} \text{ W} \cdot \text{m}^{-3}$ ,燃烧火焰最高温度降低为 2085 K。可见,随着氧化剂 AP 体积分数增大,容积放热速率减小,气相对固相燃面的热反馈降低,导致燃面温度衰减,燃速降低。

## 5 结 论

建立了 AP/HTPB 微观单元的二维周期性三明治定常燃烧模型,对不同压力 and 不同氧化剂含量下的扩散燃烧过程进行了数值模拟,可得如下结论:

(1) AP 体积分数为 0.75, 燃烧压力小于 0.4 MPa 时,燃烧火焰呈预混燃烧特性,随着压力升高,为 0.4 ~ 2.5 MPa 时,火焰呈预混-扩散双重燃烧特性,压力大于 2.5 MPa 时,燃烧火焰结构发展为扩散结构。

(2) 当 AP 体积分数为 0.75, 燃烧压力为 0.1 ~ 6.0 MPa 时,压力越大,气相燃烧热释放及其对固相的热反馈越强,燃面的温度越高,对颗粒燃烧速度起更大的推进作用,但 AP 燃速随压力变化更大,故低压下 AP 相对 HTPB 凸起,高压下 AP 相对于 HTPB 凹陷。

(3) 当压力不变时,即在 2.5 MPa 下,AP 体积分数为 0.7 ~ 0.95 时,随着 AP 含量增大,粘结剂相对越窄,气相放热量变小,火焰温度降低,两个分裂的独立放热区域逐渐合并形成一个整体,且在 AP/HTPB 交界处上方的两个狭长带状火焰面逐渐消失。

### 参考文献:

[1] Price E W, Sambamurthi J K, Sigman R K, et al. Combustion of

- ammonium perchlorate-polymer sandwiches [J]. *Combustion and Flame*, 1986, 63(3): 381-413.
- [2] Chorpene B T, Brewster M Q. Flame structure and burning rate of ammonium perchlorate/hydroxyl-terminated polybutadiene[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2000, 28(1): 847-853.
- [3] Beckstead M W, Derr R L, Price C F. A model of composite solid-propellant combustion based on multiple flames[J]. *Journal of AIAA*, 1970, 8(12): 2200-2207.
- [4] Bilger W R, Jia X. The burke-schumann diffusion flame with zero net flux boundary condition[J]. *Combustion Science and Technology*, 1994, 99(4): 371-376.
- [5] Buckmaster J, Jackson T L, Yao J. An elementary discussion of propellant flame geometry[J]. *Combustion and Flame*, 1999, 117(3): 541-552.
- [6] Jackson T L, Buckmaster J. Nonpremixed periodic flames supported by heterogeneous propellants[J]. *Journal of Propulsion and Powder*, 2000, 16(3): 498-504.
- [7] Hegab A, Jackson T L, Buckmaster J, et al. Nonsteady burning of periodic sandwich propellants with complete coupling between the solid and gas phases[J]. *Combustion and Flame*, 2001, 125(1): 1055-1070.
- [8] Cai W, Thakre P, Yang V. A model of AP/HTPB composite propellant combustion in rocket-motor environments[J]. *Combustion Science and Technology*, 2008, 180(12): 2143-2169.
- [9] Jackson T L. Modeling of heterogeneous propellant combustion: a survey[J]. *Journal of AIAA*, 2012, 50(5): 993-1006.
- [10] 叶锐, 余永刚, 曹永杰. AP/HTPB 二维火焰结构和燃速数值分析[J]. *工程热物理学报*, 2013, 34(3): 576-580.
- YE Rui, YU Yong-gang, CAO Yong-jie. Numerical analysis of flame structure and burning rate of two dimensional AP/HTPB sandwich combustion[J]. *Journal of Engineering Thermophysics*, 2013, 34(3): 576-580.
- [11] 曹永杰, 余永刚, 叶锐. AP/HTPB 复合推进剂微尺度燃烧模型及数值分析[J]. *推进技术*, 2013, 34(11): 1567-1574.
- CAO Yong-jie, YU Yong-gang, YE Rui. A microscale combustion model and numerical analysis of AP/HTPB composite propellant[J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2013, 34(11): 1567-1574.
- [12] Jackson T L, Buckmaster J. Heterogeneous propellant combustion[J]. *Journal of AIAA*, 2002, 40(6): 1122-1130.

## Numerical Simulation of Micro-scale Combustion Characteristics of AP/HTPB Propellant

MA Long-ze, YU Yong-gang

(School of Energy and Power Engineering, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing 210094, China)

**Abstract:** To study the microscale combustion characteristics of ammonium perchlorate/hydroxyl-terminated polybutadiene (AP/HTPB) composite propellant particle, a 2D steady state combustion model of a periodic sandwich unit was established based on gas-solid coupling, using simplified two-step global chemical reaction kinetic mechanism. The microscale combustion characteristics of AP/HTPB were numerically analyzed by FLUENT software. Results show that under the condition of volume fraction of AP as 0.75, at the low pressure of <0.4 MPa, the overall flame of AP/HTPB combustion is a premixed combustion and the burning rate of AP is lower than that of HTPB. With increasing the pressure, when the pressure is more than 2.5 MPa, the flame reveals in a diffusion structure and the burning rate of AP is higher than that of HTPB. The higher the pressure, the stronger the thermal feedback from gas phase to solid phase, and the higher the temperature and burning rate on coupled surface. The volume release rate in the gas phase increases with increasing the pressure, the exothermic region contracts and the two connected exothermic core regions split into two independent core regions. When the combustion pressure is constant (2.5 MPa) and the volume fraction of AP changes from 0.7 to 0.95, the smaller the AP content, the relatively larger the binder HTPB width in a periodic sandwich unit, the flame surface tends to split into two narrow and long strip flame surface, and the temperature increases with splitting.

**Key words:** perchlorate/hydroxyl-terminated polybutadiene (AP/HTPB); energetic particle; flame structure; burning rate; numerical modeling

CLC number: TJ55; V512

Document code: A

DOI: 10.11943/j.issn.1006-9941.2017.03.001