

МОДЕЛИРОВАНИЕ СУБЛИМАЦИИ ПОЛИМЕТИЛМЕТАКРИЛАТА И УРОТРОПИНА ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫМ АЗОТОМ В ОСЕСИММЕТРИЧНОЙ ПОСТАНОВКЕ

И. А. Бедарев^{1,2,a}, В. М. Темербеков^{1,2}

¹Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН, Новосибирск, Россия

²Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка, Россия

^abedarev@itam.nsc.ru

Создана вычислительная методика для моделирования сублимации твёрдого материала в потоке высокотемпературного газа. Проведена верификация математической модели и численного алгоритма по экспериментальным данным о сублимации уротропина при различных температурах газа на входе в реактор. Показано, что искривление фронта сублимации, с одной стороны, обусловлено наличием пограничного слоя на стенке канала, а с другой стороны, может происходить при интенсификации теплообмена за счёт уменьшения начального диаметра частиц уротропина в засыпке. Выполнены параметрические расчёты динамики течения в пористой среде при сублимации полиметилметакрилата и уротропина. Показано, что разные типы граничных условий приводят к различной динамике поведения температуры на выходе из канала.

Ключевые слова: газогенератор, газификация, пористая среда, математическое моделирование.

Введение

Низкотемпературная газификация (сублимация) может применяться для широкого спектра практических задач. Это и системы пожаротушения [1–3], и наддув ёмкостей различного назначения [4–6], и ряд других приложений [7; 8]. Одним из перспективных направлений является использование испаряемого материала для охлаждения различных конструкций конвективным потоком продуктов газификации. При этом процесс газификации твёрдого материала происходит при фильтрации высокотемпературного газа через пористую среду [9–12]. В настоящей работе методами математического моделирования исследована задача сублимации полиметилметакрилата и уротропина под воздействием потока высокотемпературного газа. Использована математическая модель механики неравновесной сплошной среды, когда твёрдая фаза представляется в виде непрерывного континуума с учётом

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда № 21-79-20008, <https://rscf.ru/project/21-79-20008/>. Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М. В. Ломоносова.

взаимодействия с газовой фазой через источниковые члены в уравнения законов сохранения массы, импульса и энергии. Математическая модель фильтрации высокотемпературного газа через пористую среду с учётом сублимации твёрдого материала реализована на основе программного комплекса Ansys Fluent путём создания пользовательских функций, расширяющих функционал пакета.

1. Постановка задачи и математическая модель

На рис. 1 показана схема течения в расчётной области. Рассмотрение задачи проводилось в плоской и осесимметричной постановке. Рассматривался канал, состоящий из двух секций. В первой секции твёрдая фаза отсутствовала, т. е. задавалась только газовая фаза. В качестве рабочего газа использовался азот. Вторая секция считалась пористым телом. В начальный момент времени во второй секции задавалась постоянная пористость. Для уротропина моделирование проводилось в условиях экспериментальных исследований [13]. При проведении моделирования для уменьшения ошибок округления отсчёт давления проводился от опорного значения, т. е. рассчитывалось избыточное давление в канале. Для анализа влияния граничных условий на результаты моделирования использовались два типа граничных условий на входе в канал: 1) задавался расход газа в соответствии с условиями эксперимента [13]; 2) задавалось полное избыточное давление газа 100 Па. Статическое давление для обоих типов граничных условий является искомым параметром задачи, необходимым, чтобы обеспечить нулевое избыточное статическое давление на выходе из канала. Температура газа на входе варьировалась. Сверху канал ограничивался стенкой с условием теплоизоляции для температуры, снизу задавалась ось симметрии.



Рис. 1. Схема течения

Математическая постановка задачи газификации твёрдой фазы представляется в виде модели двухфазной пористой среды с использованием подхода взаимопроникающих континуумов. В этом случае считается, что твёрдая и газовая фазы непрерывны и полностью заполняют выбранный объём. Основные уравнения вытекают из законов сохранения массы, импульса и энергии, дополняются источниковыми членами для учёта потери импульса в газовой фазе, теплообмена между фазами и замыкаются уравнениями состояния идеального газа. Учёт газификации твёрдого топлива производится через источниковый член в уравнении неразрывности. Детально математическая модель представлена в [12; 14]. В качестве газовой среды использовался азот, а в качестве твёрдой фазы — уротропин и полиметилметакрилат (ПММА). Константы модели приведены в таблице. Для нахождения источникового члена в уравнении сохранения массы, решения уравнения для конверсии твёрдого топлива, решения уравнения для внутренней энергии твёрдой фазы и вычисления изменения пористости использовались пользовательские функции Ansys Fluent (User Defined Function).

Таблица

Вещество	m_{2_0}	r_{22} , кг/м ³	K , 1/с	E , Дж/моль	Q , Дж/кг	c_{p2} , Дж/моль·К
Уротропин	0.62	1157	$1.23 \cdot 10^{11}$	$1.35 \cdot 10^5$	$-0.5 \cdot 10^5$	1470
ПММА	0.7	1150	$3.92 \cdot 10^7$	$1.16 \cdot 10^5$	$-9.85 \cdot 10^5$	1270

2. Результаты расчётов

Проведена верификация математической модели и численного алгоритма по экспериментальным данным о сублимации уротропина [13] при различных температурах газа на входе в реактор. На рис. 2 показано сравнение расчётных и экспериментальных данных о температуре газа на выходе из реактора при различных температурах на входе. Проведённое сравнение расчёта и эксперимента по динамике температуры на выходе из реактора позволило уточнить кинетические константы математической модели сублимации уротропина.

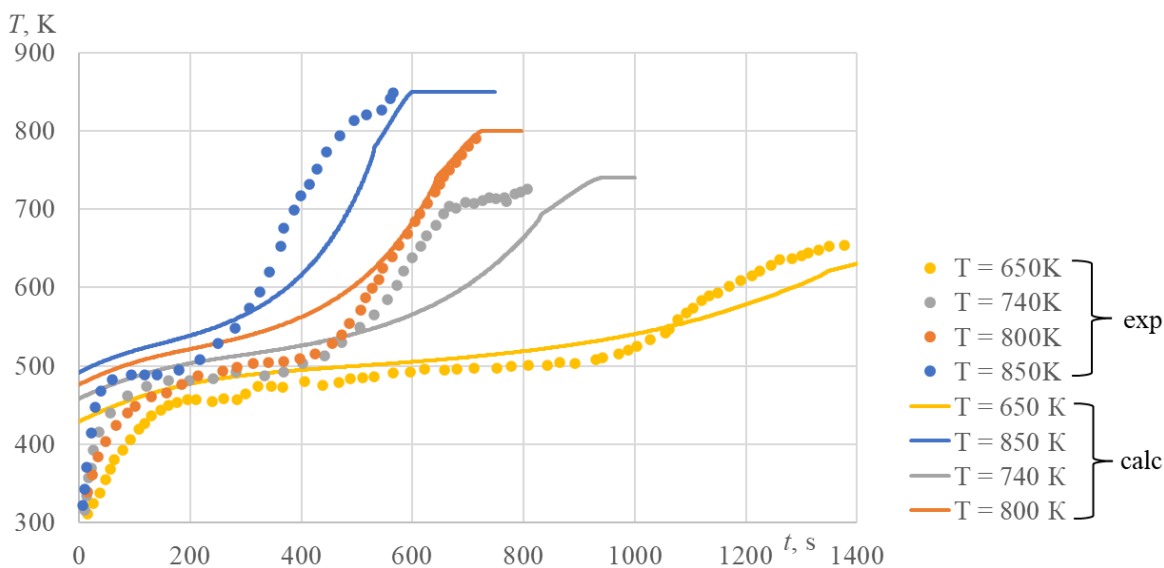


Рис. 2. Сравнение расчётных и экспериментальных данных о температуре газа на выходе из реактора при различных температурах на входе

Выполнены параметрические расчёты динамики течения в пористой среде при сублимации полиметилметакрилата и уротропина. В экспериментальной работе [13] указано, что размер гранул уротропина составлял величину в пределах $5 \div 10$ мм. Математическая модель позволяет учесть этот параметр через закон теплообмена между газовой и твёрдой фазой. На рис. 3 показано распределение степени конверсии твёрдого вещества в момент времени 500 мкс в зависимости от диаметра гранул. Из рисунка видно, что искривление фронта сублимации, с одной стороны, обусловлено наличием пограничного слоя на стенке канала, а с другой стороны, может происходить при интенсификации теплообмена за счёт уменьшения начального диаметра частиц уротропина в засыпке. Кроме того, увеличение диаметра гранул приводит к увеличению ширины фронта газификации твёрдого топлива и замедлению процесса сублимации.

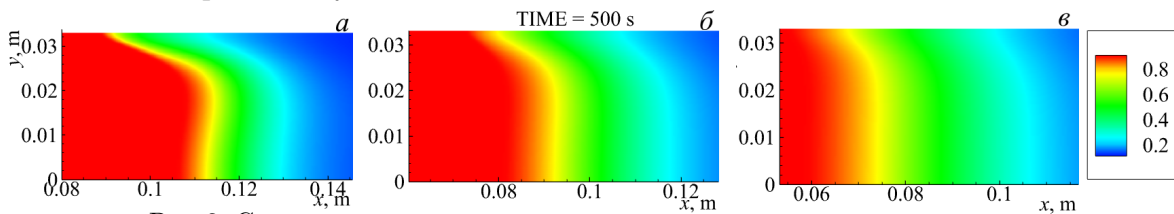


Рис. 3. Степень конверсии уротропина в зависимости от диаметра гранул (a — 5 мм, $б$ — 7.5 мм, $в$ — 10 мм)

Увеличение времени сублимации при увеличении размера гранул можно наблюдать на рис. 4, а, где показана средняя динамика сублимации твёрдой фазы в реакторе в зависимости от диаметра гранул. На рис. 4, б показана скорость сублимации уротропина в зависимости от температуры газа на входе в реактор, которая предсказуемо снижается при уменьшении температуры на входе.

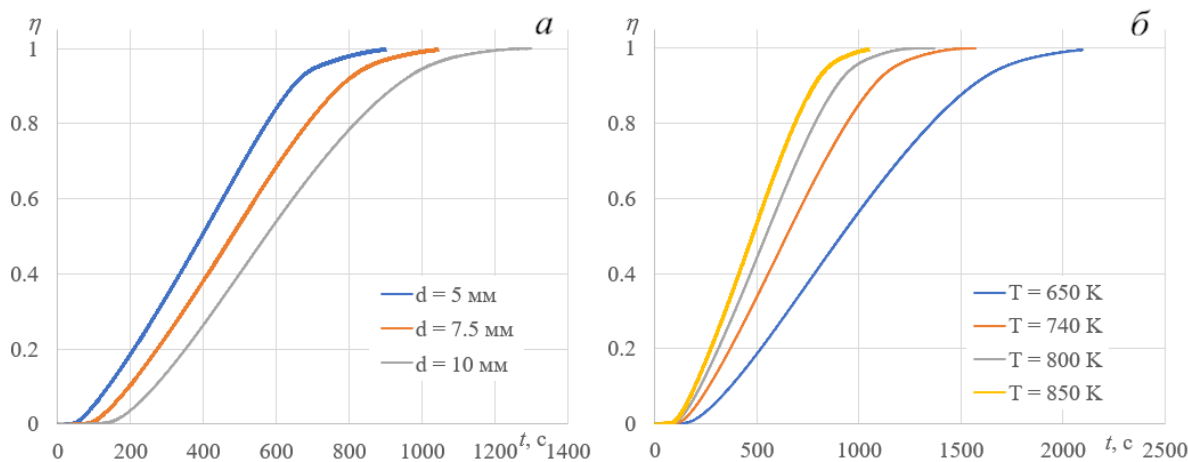


Рис. 4. Степень конверсии твёрдого топлива в зависимости от времени, начального диаметра гранул (а) и температуры на входе в реактор (б)

Также выполнены расчёты сублимации ПММА под воздействием высокотемпературного газа ($T_{in} = 1500$ K) в осесимметричном канале в соответствии со схемой, представленной на рис. 1. На примере этой задачи остановимся на интерпретации расчётов, полученных с использованием различных граничных условий. Применялись два типа граничных условий: постоянное избыточное полное давление и постоянный расход на входе в канал. Далее показаны граничные значения ключевых параметров для условий постоянного полного давления 100 Па (рис. 5, а) и постоянного расхода на входе в канал при расходе 0.025 кг/с (рис. 5, б): статическое давление на входе в канал (P_{in}), температура газа на выходе (T_{out}) и скорость потока газа на входе (V_{in}) и выходе (V_{out}).

Можно отметить, что в случае постоянства полного давления на входе избыточное статическое давление до 300-й секунды, пока скорость потока имеет величину меньше 1 м/с, сохраняет значение, близкое к полному давлению. Затем, по мере газификации твёрдой фазы, поток разгоняется и статическое давление на входе резко уменьшается. Температура газа и скорость потока на выходе возрастают достаточно плавно. В случае постоянства массового расхода на входе в канал (рис. 5, б) понятно, что также постоянной остаётся скорость на входе. При этом статическое давление на входе до момента времени 150 с несколько выше, чем для граничных условий первого типа, что обеспечивает несколько больший расход газа и, соответственно, ускоренную динамику сублимации твёрдой фазы на начальном этапе. Температура на выходе быстро возрастает до 550 K, а затем плавно увеличивается по мере сублимации твёрдой фазы. Повышение температуры на выходе имеет существенно нелинейный характер, с образованием полки около 750 K в промежутке времени 60 ÷ 200 с. Расчёты показывают, что с увеличением расхода газа возможно даже снижение температуры газа на выходе со временем, что, очевидно, обусловлено интенсификацией процесса газификации и, как следствие, повышенным поглощением тепла при этом.

Поведение скорости газа на выходе из канала имеет немонотонный характер, обусловленный противоположным влиянием нескольких факторов. С одной стороны, газификация топлива приводит к увеличению массового расхода газа через

выходную границу, с другой стороны, уменьшение объёмной концентрации твёрдой фазы (увеличение пористости) приводит к уменьшению скорости и при этом снижается сопротивление пористого тела, что ведёт к уменьшению потери импульса и соответственно увеличению скорости.

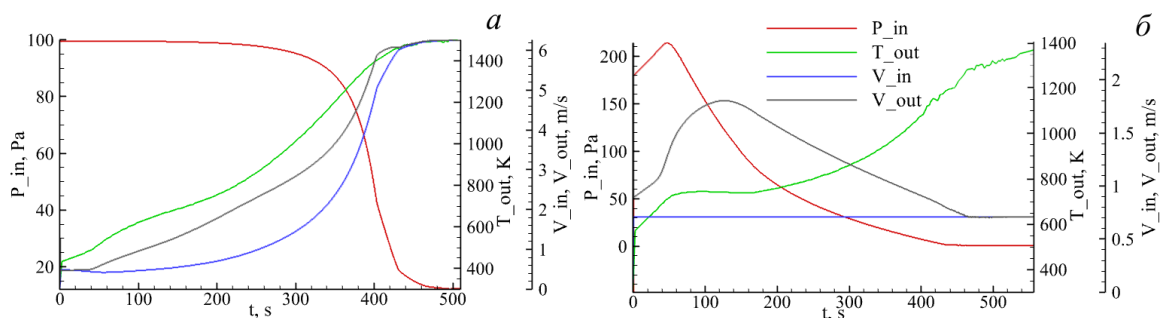


Рис. 5. Статическое давление на входе в канал (P_{in}), температура газа на выходе (T_{out}) и скорость потока газа на входе (V_{in}) и выходе (V_{out}) для граничных условий постоянного избыточного полного давления (а) и постоянного расхода на входе в канал (б)

Выводы

1. На основе континуальной модели двухфазной пористой среды создана вычислительная методика для моделирования сублимации твёрдого материала в потоке высокотемпературного газа.
2. Разработан набор пользовательских функций, расширяющий функционал Ansys Fluent и позволяющий проводить расчёты пористой среды с газификацией твёрдой фазы и изменением пористости.
3. Проведена валидация математической модели и численного алгоритма по экспериментальным данным о сублимации уротропина при различных температурах газа на входе в реактор.
4. Выполнены параметрические и верификационные расчёты динамики течения в пористой среде при сублимации твёрдой фазы. Проведено сравнение различных типов граничных условий на входе в канал. Показано, что разные типы граничных условий приводят к различной динамике поведения температуры на выходе из канала.

Список литературы

1. **Krishnan S., Rajesh K. K.** Experimental investigation of erosive burning of composite propellants under supersonic crossflows // International Journal of Energetic Materials and Chemical Propulsion. 2002. Vol. 5, iss. 1–6. P. 316–325.
2. **Srinivasan R., Raghunandan B. N.** Experiments on thermal response of low aspect ratio packed beds at high Reynolds numbers with varying inflow temperatures // Experimental Thermal and Fluid Science. 2012. Vol. 44. P. 323–333.
3. **Karpov A. I., Lesthev A. Y., Lipanov A. M., Lesthev G. A.** Production of the fire extinguishing mixture by solid propellant propulsion // Journal of Less Prevention in the Process Industries. 2013. Vol. 26. P. 338–343.
4. **Engelen K., Lefebvre M. H., De Ruyek J.** Chemical formulation of solid propellant for specific gas generators // Twenty-fourth International Pyrotechnics Seminar. 1998. P. 203–216.
5. **Hong G. C., Murugesan S., Kim S., et al.** A functional on-chip pressure generator using solid chemical propellant lab-on-a-chip // Lab on a Chip. 2003. Vol. 3. P. 281–286.
6. **Kim A., Crampton G.** Explosion suppression with hybrid gas generator system // Progress in Safety Science and Technoljgy. 2008. Vol. 7. P. 891–895.

7. **Ваулин С. Д., Калинин А. М., Ковин С. Г., и др.** Низкотемпературные газогенераторы на твёрдом топливе. Ижевск : ИПМ УрО РАН, 2006.
8. **Аксёненко Д. Д., Ваулин С. Д., Зезин В. Г., и др.** Теоретическое и экспериментальное исследование низкотемпературных газогенераторов. Ижевск : ИПМ УрО РАН, 2008.
9. **Яновский Л. С., Байков А. В., Аверьков И. С.** Оценка возможности создания ВРД на твёрдом топливе с системой активного охлаждения // Тепловые процессы в технике. 2016. № 2. С. 111–116.
10. **Salgansky E. A., Lutsenko N. A.** Effect of solid fuel characteristics on operating conditions of low-temperature gas generator for high-speed flying vehicle // Aerospace Science and Technology. 2021. Vol. 109. P. 1–6.
11. **Салганский Е. А., Луценко Н. А., Яновский Л. С.** Моделирование газификации твёрдого пористого энергетического материала в низкотемпературном газогенераторе летательного аппарата // Физика горения и взрыва. 2022. Т. 58, № 3. С. 64–70.
12. **Боровик К. Г., Луценко Н. А., Фецов С. С., Салганский Е. А.** Моделирование газификации двухслойного пористого полимера в низкотемпературном газогенераторе // Физика горения и взрыва. 2023. Т. 59, № 4. С. 44–51.
13. **Salganskaya M. V., Zaichenko A. Yu., Podlesniy D. N., Tsvetkov M. V., Tsvetkova Yu. Yu., Salgansky E. A.** Experimental study of hexamethylenetetramine gasification at different temperatures of gas flow // Acta Astronautica. 2023. Vol. 204. P. 682–685.
14. **Бедарев И. А., Темербеков В. М.** Численное моделирование сублимации твёрдого топлива в потоке высокотемпературного газа в континуальном приближении и с выделением границы двух сред // Челяб. физ.-мат. журн. 2022. Т. 7, вып. 3. С. 326–340.

Поступила в редакцию 10.12.2023.

После переработки 11.07.2024.

Сведения об авторах

Бедарев Игорь Александрович, кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией волновых процессов в ультрадисперсных средах, Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН, Новосибирск, Россия; Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка, Россия; e-mail: bedarev@itam.nsc.ru

Темербеков Валентин Макарович, младший научный сотрудник лаборатории волновых процессов в ультрадисперсных средах, Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН, Новосибирск, Россия; Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка, Россия; e-mail: temerbekov@itam.nsc.ru

SIMULATION OF POLYMETHYL METHACRYLATE AND HEXAMINE SUBLIMATION WITH HIGH TEMPERATURE NITROGEN IN AN AXISYMMETRICAL FORMULATION

I.A. Bedarev^{1,2,a}, V.M. Temerbekov^{1,2}

¹*Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics of SB RAS, Novosibirsk, Russia*

²*Federal Research Center of Problems of Chemical Physics and Medicinal Chemistry of RAS, Chernogolovka, Russia*

^a*bedarev@itam.nsc.ru*

A computational technique has been created for modeling the sublimation of solid material in a high-temperature gas flow. The mathematical model and numerical algorithm have been verified using experimental data on the sublimation of hexamine at different gas temperatures at the reactor inlet. It is shown that the curvature of the sublimation front, on the one hand, is due to the presence of a boundary layer on the channel wall, and on the other hand, it can occur when heat transfer is intensified due to a decrease in the initial diameter of hexamine particles in the backfill. Parametric calculations of the dynamics of flow in a porous medium during the sublimation of polymethyl methacrylate and hexamine were performed. It is shown that different types of boundary conditions lead to different dynamics of the temperature behavior at the channel outlet.

Keywords: *gas generator, gasification, porous medium, mathematical modeling.*

References

1. **Krishnan S., Rajesh K.K.** Experimental investigation of erosive burning of composite propellants under supersonic crossflows. *International Journal of Energetic Materials and Chemical Propulsion*, 2002, vol. 5, iss. 1–6, pp. 316–325.
2. **Srinivasan R., Raghunandan B.N.** Experiments on thermal response of low aspect ratio packed beds at high Reynolds numbers with varying inflow temperatures. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 2012, vol. 44, pp. 323–333.
3. **Karpov A.I., Lesthev A.Y., Lipanov A.M., Lesthev G.A.** Production of the fire extinguishing mixture by solid propellant propulsion. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 2013, vol. 26, pp. 338–343.
4. **Engelen K., Lefebvre M.H., De Ruyek J.** Chemical formulation of solid propellant for specific gas generators. *Twenty-fourth International Pyrotechnics Seminar*, 1998, pp. 203–216.
5. **Hong G.C., Murugesan S., Kim S., et al.** A functional on-chip pressure generator using solid chemical propellant lab-on-a-chip. *Lab on a Chip*, 2003, vol. 3, pp. 281–286.
6. **Kim A., Crampton G.** Explosion suppression with hybrid gas generator system. *Progress in Safety Science and Technology*, 2008, vol. 7, pp. 891–895.
7. **Vaulin S.D., Kalinkin A.M., Kovin S.G., et al.** *Nizkotemperaturnye gazogeneratory na tvyordom toplive* [Low-temperature gas generators using solid fuel]. Izhevsk, Institute of Problems of Mathematics of Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, 2006. (In Russ.).

The reported study was funded by the Russian Science Foundation, grant No. 21-79-20008, <https://rscf.ru/project/21-79-20008/>. The work was performed using the equipment of the Center for Collective Use of Ultra-High-Performance Computing Resources of Lomonosov Moscow State University.

8. **Aksyonenko D.D., Vaulin S.D., Zezin V.G., et al.** *Teoreticheskoye i eksperimental'noye issledovaniye nizkotemperaturnykh gazogeneratorov* [Theoretical and experimental study of low-temperature gas generators]. Izhevsk, Institute of Problems of Mathematics of Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, 2008. (In Russ.).
9. **Yanovskiy L.S., Baykov A.V., Averkov I.S.** Estimation of possibility of creating a solid fuel air breathing jet engine with active cooling system. *Thermal Processes in Engineering*, 2016, vol. 8, no. 3, pp. 111–116.
10. **Salgansky E.A., Lutsenko N.A.** Effect of solid fuel characteristics on operating conditions of low-temperature gas generator for high-speed flying vehicle. *Aerospace Science and Technology*, 2021, vol. 109, p. 106420.
11. **Salgansky E.A., Lutsenko N.A., Yanovsky L.S.** Modeling of gasification of a solid porous energetic material in a low-temperature aircraft gas generator. *Combustion, Explosion and Shock Waves*, 2022, vol. 58, no. 3, pp. 312–317.
12. **Borovik K.G., Lutsenko N.A., Fetsov S.S., Salgansky E. A.** Simulation of gasification of a two-layer porous polymer in a low-temperature gas generator. *Combustion, Explosion and Shock Waves*, 2023, vol. 59, no. 4, pp. 44–51.
13. **Salganskaya M.V., Zaichenko A.Yu, Podlesniy D.N., Tsvetkov M.V., Tsvetkova Yu.Yu, Salgansky E.A.** Experimental study of hexamethylenetetramine gasification at different temperatures of gas flow. *Acta Astronautica*, 2023, vol. 204, pp. 682–685.
14. **Bedarev I.A., Temerbekov V.M.** Numerical modeling of the solid fuel sublimation in a high-temperature gas flow in the continuum approach and with boundary separation between two media. *Chelyabinsk Physical and Mathematical Journal*, 2022, vol. 7, no. 3, pp. 326–340.

Article received 10.12.2023.

Corrections received 11.07.2024.