

液体火箭有机凝胶喷雾液滴蒸发模型及仿真研究*

何博^{1)†} 何浩波²⁾ 丰松江²⁾ 聂万胜²⁾

1) (解放军装备学院研究生一队, 北京 101416)

2) (解放军装备学院航天装备系, 北京 101416)

(2011年10月27日收到; 2011年12月6日收到修改稿)

凝胶推进剂虽然兼具有液体推进剂流量可控和固体推进剂长期可储存等优点, 但凝胶喷雾液滴蒸发燃烧问题却一直困扰着凝胶推进剂研制及燃烧室设计工作, 阻碍了凝胶推进剂实际工程应用. 设计实现了凝胶单液滴蒸发燃烧实验系统, 通过某型有机凝胶偏二甲肼 (UDMH) 单液滴在四氧化二氮蒸气中的蒸发燃烧实验现象, 进一步深入分析了凝胶液滴蒸发燃烧机理. 根据实验中凝胶单液滴在不同阶段的蒸发特性, 建立了有机凝胶喷雾液滴在胶凝剂膜形成、膨胀、破裂三个不同蒸发阶段的多组分蒸发模型, 采用初步选定的模型参数及物性参数对凝胶单液滴在高温气体环境中的蒸发全过程进行了仿真计算, 并与常规液体液滴的仿真结果进行了对比分析. 结果表明, 凝胶喷雾液滴表面胶凝剂含量在蒸发初期增加比较缓慢, 但在某临界时刻后的极短时间内迅速升高至形成胶凝剂膜的质量分数 95%, 导致表面质量流率迅速下降至 0, 表面温度则快速上升至 UDMH 推进剂沸点. 胶凝剂膜形成后, 液滴半径及表面 UDMH 蒸气质量分数出现了实验现象中凝胶液滴反复膨胀 - 破裂的震荡现象, 液滴表面温度维持在略高于沸点的某温度范围内, 凝胶液滴内部的沸腾蒸发明显强于液体液滴表面稳态蒸发流率, 使得凝胶喷雾液滴生存时间小于常规液体液滴.

关键词: 凝胶推进剂, 喷雾液滴, 胶凝剂膜, 蒸发模型

PACS: 82.70.Gg, 68.03.Fg, 47.55.D-, 44.05.+e

1 引言

液体火箭凝胶推进剂是指在液体推进剂中添加有机高分子或无机固体微粒等超分子胶凝剂材料而形成的稳定胶状物, 具有明显的触变及非牛顿流变特性, 并以其高能量密度、高安全性、长期可贮存、流量可控等优点, 逐渐成为一种具有广阔应用前景的新型推进剂^[1-3]. 虽然凝胶推进剂具有以上显著优点, 但添加的胶凝剂改变了喷雾液滴蒸发燃烧特性, 使其实际应用面临的主要困难是增加喷雾液滴蒸发燃烧速率、提高推进剂燃烧稳定性和效率. 因此, 把握凝胶推进剂蒸发燃烧机理并建立凝胶喷雾液滴蒸发模型, 对改善凝胶液体火箭发动机喷雾燃烧 CFD 数值计算精度, 改进凝胶推进剂

配方研制和发动机设计等具有重要意义^[4].

国内近些年陆续开展了凝胶结构及配方研制^[5,6]、凝胶流变及雾化特性等方面的研究^[7,8], 但还未见有关凝胶推进剂蒸发燃烧方面的相关研究, 国外也主要采用实验方法对其蒸发燃烧过程进行了定性观测^[9-11], 仅有少量文献对凝胶推进剂蒸发燃烧建模仿真进行了有益探索^[12-14]. 凝胶推进剂根据所添加的胶凝剂种类分为有机凝胶推进剂和无机凝胶推进剂, 前者主要依靠氢键及高分子有机物长链相互交错形成的网状结构包覆推进剂, 而后者主要依靠碳粉、铝粉等无机微颗粒之间的范德瓦耳力形成网状结构, 因此其凝胶态结构稳定性较前者要差许多. 虽然凝胶推进剂的实际微观结构是网状结构包覆液体推进剂, 但研究结果表明其蒸发燃烧特性非常类似于包含不同挥发性物质的

* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 6131020301) 和国家自然科学基金 (批准号: 51076168) 资助的课题.

† E-mail: drhebo@163.com

多组分推进剂. 文献 [12, 13] 分别针对无机和有机凝胶推进剂建立的凝胶单液滴蒸发模型也都采用了多组分蒸发基本假设, 前者分析了铝粉/碳粉无机凝胶推进剂中固体微粒尺寸及含量对喷雾液滴二次雾化的影响, 后者分析了有机凝胶推进剂中胶凝剂含量和喷雾液滴尺寸对凝胶剂膜形成和破裂时间的影响. 文献 [14] 针对凝胶液滴蒸发燃烧过程, 综述了其他一些理论模型及各种实验研究方法, 并指出了建模及实验研究所面临的困难.

本文首先根据凝胶单液滴蒸发燃烧实验结果, 深入分析了有机自燃凝胶推进剂蒸发燃烧特性, 然后指出了现有有机凝胶喷雾液滴蒸发模型存在的不足, 并根据常规多组分液滴蒸发模型及凝胶推进剂不同阶段的蒸发燃烧特性, 建立了能够实现凝胶喷雾液滴整个蒸发过程的凝胶单液滴蒸发模型; 最后通过仿真计算证实了模型合理性, 并分析了胶凝剂对常规液体喷雾液滴蒸发过程的影响.

2 凝胶推进剂单液滴蒸发燃烧机理

为了把握某型有机凝胶偏二甲肼 (UDMH) 自燃推进剂在四氧化二氮 (NTO) 蒸气中的蒸发燃烧特性, 建立合理的凝胶喷雾液滴蒸发模型, 本文为

凝胶单液滴的蒸发燃烧过程设计了合理的实验系统, 并通过分析实验现象进一步把握了该型凝胶单液滴蒸发燃烧机理.

2.1 单液滴蒸发燃烧实验系统

图 1 给出了本文设计的凝胶单液滴蒸发燃烧实验系统, 主要包含高速摄像子系统、凝胶单液滴生成子系统、氧化剂加热子系统、氧化剂流量控制子系统及数据采集控制子系统.

(1) 高速摄像子系统. 该子系统采用 Phantom v9.1 高速运动分析仪完成凝胶单液滴蒸发燃烧过程的图像动态捕捉工作. 高速摄像机内置了满幅 4:3, 1632×1200 像素的彩色 SR-CMOS 传感器, 具有连续记录、曝光时间连续可调、外触发同步等功能, 可实现全幅拍摄速度 1000 帧/s、最大拍摄速度 153846 帧/s、最小曝光时间 2 μ s.

(2) 凝胶单液滴生成子系统. 该子系统主要根据凝胶推进剂具有明显黏弹性和较大表面张力等特有属性, 能够通过注液装置在针头末端形成大小可控的悬挂凝胶液滴. 通过比较平口针头、平口收口针头及平口斜口针头三种形状针头产生的凝胶液滴形状及尺寸可控性等指标, 最终选择了平口收口针头连接到注液装置.

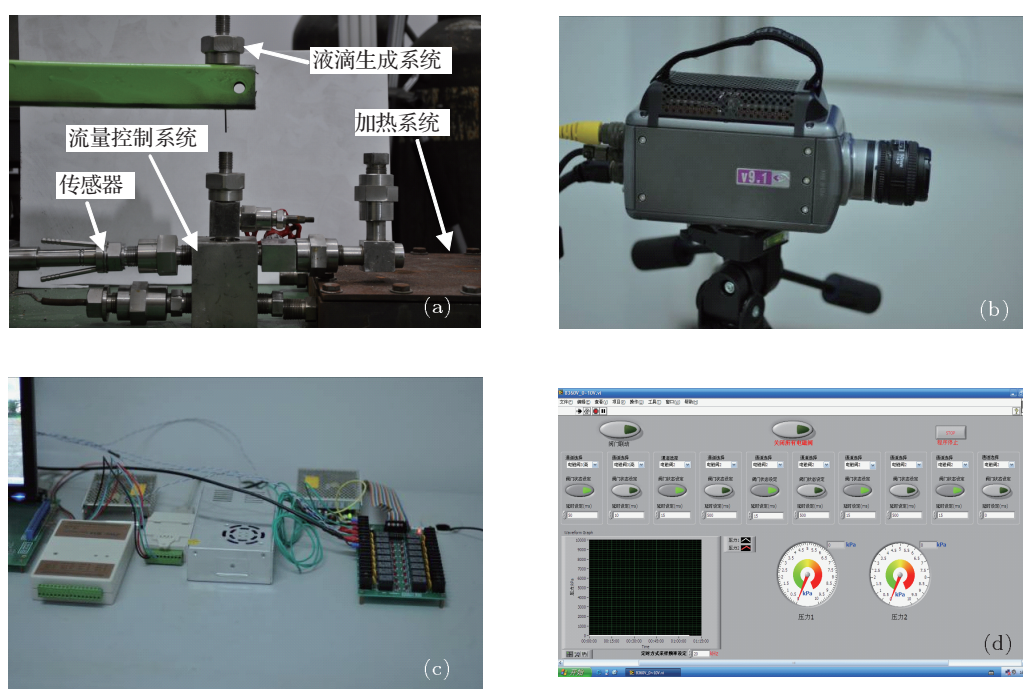


图 1 单液滴蒸发燃烧实验系统 (a) 实验环境平台; (b) 高速摄影子系统; (c) 数据采集控制子系统硬件; (d) 数据采集控制子系统软件

(3) 氧化剂加热子系统. 该子系统采用的密封蛇形管技术能够在有限空间内提高换热效率, 快速调整 NTO 蒸气温度. 当氧化剂低于指定温度时, 向系统发出打开热源快速升温的提示; 当其温度高于指定温度时, 向系统发出打开低温氮气换热流体快速降温的提示.

(4) 氧化剂流量控制子系统. 该子系统根据加热子系统及开放环境中的温度、压力等采样数据计算和控制阀门开启度, 实现了通过调节出口流量方式来控制 NTO 蒸气出口速度的目的.

(5) 数据采集控制子系统. 该子系统主要由温度、压力等传感器硬件设备及开发的算法控制程序软件组成, 用于获取燃烧实验系统各部分压力、温度等参数, 并按照实验流程控制各阀门和电磁开关, 保证各子系统之间工作顺序和同步工作.

由于实验环境为开放环境, 为了减小 UDMH 自燃推进剂挥发对周围环境的污染, 实验准备阶段首先在氧化剂加热系统中预热 NTO 蒸气到指定温度后, 再用凝胶单液滴生成子系统在针头末端产生悬挂凝胶液滴; 然后把喷注装置悬置到 NTO 出口上方, 并同时触动氧化剂流量控制子系统和高速摄像子系统开关, NTO 蒸气在数据采集和控制子系统作用下根据设定的温度和流速进入到开放环境中, 并与上方悬置的凝胶液滴接触发生反应; 高速摄像子系统按照设定的拍摄频幅记录整个自燃着火燃烧过程.

2.2 蒸发燃烧实验现象及机理分析

图 2 给出了有机凝胶自燃推进剂单液滴在着火延迟、喷射燃烧及稳燃熄火三个阶段的蒸发燃烧实验现象.

由图 2(a) 可知, 在着火延迟阶段, 凝胶单液滴附近气相场中出现了大量白色烟雾, 着火时刻的液滴尺寸相比初始时刻会有略微增大. 文献 [15] 研究表明, 所产生的大量白色烟雾是自燃推进剂 UDMH 蒸气与氧化剂 NTO 在着火延迟期间反应生成的中间产物, 该反应过程会在气相环境中释放热量并提高环境温度. 该凝胶液滴在着火初期出现的膨胀现象明显不同于常规推进剂, 其主要原因是凝胶液滴内部特殊网络状分子结构的分子扩散系数非常小, 因此不易挥发的胶凝剂会快速在液滴表面累积而逐步形成胶凝剂膜, 促使气相中更多的

热量用于液滴加热, 导致液滴受热膨胀效果强于推进剂蒸发导致的液滴尺寸缩小.

由图 2(b) 可知, 在喷射燃烧阶段, 凝胶单液滴着火后的火焰迅速蔓延包围住整个液滴, 使得凝胶液滴内部迅速加热超过自燃推进剂沸点温度, 液滴内部结核沸腾蒸发形成的蒸气不能迅速排出液滴表面形成的高分子胶凝剂膜而产生了大量气泡, 这使得液滴尺寸出现了大幅膨胀. 随着液滴膨胀及胶凝剂膜逐渐变薄, 当液滴表面承受的拉伸应力超过胶凝剂膜某处屈服应力时, 胶凝剂膜破裂并瞬间释放出气泡内的大量自燃推进剂蒸气, 使得液滴尺寸迅速回缩, 并导致凝胶液滴周围火焰出现“噗噗”喷射状形态. 由于液滴表面附近流场参数不均匀及胶凝剂膜屈服应力受温度、组分含量等诸多因素影响, 液滴尺寸变化及内部蒸气喷射位置都极不规则, 但实验现象表明初始阶段的喷射燃烧剧烈程度明显不如后期.

由图 2(c) 可知, 在稳燃熄火阶段, 凝胶单液滴内的大量自燃推进剂已经消耗殆尽, 内部所形成的气泡体积显著减小, 胶凝剂膜变厚更加难以破裂, 使得内部蒸气喷射的强度及频率都明显不如喷射燃烧阶段, 液滴半径变化也没有出现显著变化. 剩余的高分子胶凝剂会由于高温火焰而分解成小分子气体, 但随着火焰熄灭导致环境温度降低, 喷注器针头上最终还是剩余了少量未完全分解的残渣.

根据上述有机凝胶自燃推进剂单液滴蒸发燃烧实验现象及机理分析, 若不考虑气相环境中的化学反应过程, 则凝胶液滴在高温环境中的蒸发过程可分为胶凝剂膜形成阶段、胶凝剂膜反复的膨胀及破裂阶段, 图 2 分别给出凝胶单液滴在这三个阶段的蒸发模型.

3 凝胶喷雾液滴蒸发模型

文献 [13] 针对有机凝胶推进剂建立了单液滴多组分扩散蒸发模型, 该模型通过求解液相多组分扩散方程得到了液滴内部胶凝剂分布随时间的变化, 并认为液滴表面胶凝剂质量分数等于 99% 时弹性胶凝剂膜形成, 液滴内部蒸发产生的蒸气促使胶凝剂膜膨胀, 直至超过其屈服应力则认为膜破裂. 虽然该模型从理论上描述了凝胶推进剂在不同阶段的蒸发燃烧本质, 但仍存在下面一些问

题,限制了模型合理性及精度,并仅分析了环境因素及液滴初始参数对凝胶单液滴首次形成凝胶剂膜和破裂的影响,未能实现整个蒸发过程计算仿真.

(1) 液滴表面蒸发流率不合理. 该蒸发模型在气相准稳态假设的条件下,采用了一个简化的经验公式计算液滴表面蒸发流率,导致液滴表面蒸发流率在凝胶剂膜形成前始终保持不变,若在液滴表面采用能量守恒或组分守恒方法计算蒸发流量则能够反映出随时间变化的蒸发流率,并有效改进计算精度.

(2) 液滴表面胶凝剂含量不合理. 该蒸发模型在计算液滴表面胶凝剂含量时认为液滴内部胶凝

剂均匀分布,而实际上胶凝剂在液滴内的扩散系数非常有限,因此假设胶凝剂含量在液滴表面有限薄层内均匀分布才合理.

(3) 液滴温度不合理. 该蒸发模型假设喷雾液滴温度始终保持为推进剂沸点,然而研究表明,含不同挥发性物质的多组分液滴会始终处于非稳态加热阶段,使得液滴内部温度超过易挥发性组分沸点,并在液滴内部沸腾结核形成气泡.

(4) 液滴内部蒸发质量流量不合理. 该蒸发模型在凝胶剂膜形成后,认为外部环境的对流和扩散热流量都完全用于液滴内部推进剂蒸发,而未考虑液滴温度升高所需消耗的热流量,从而增大了推进剂蒸发质量流量及液滴膨胀速度.

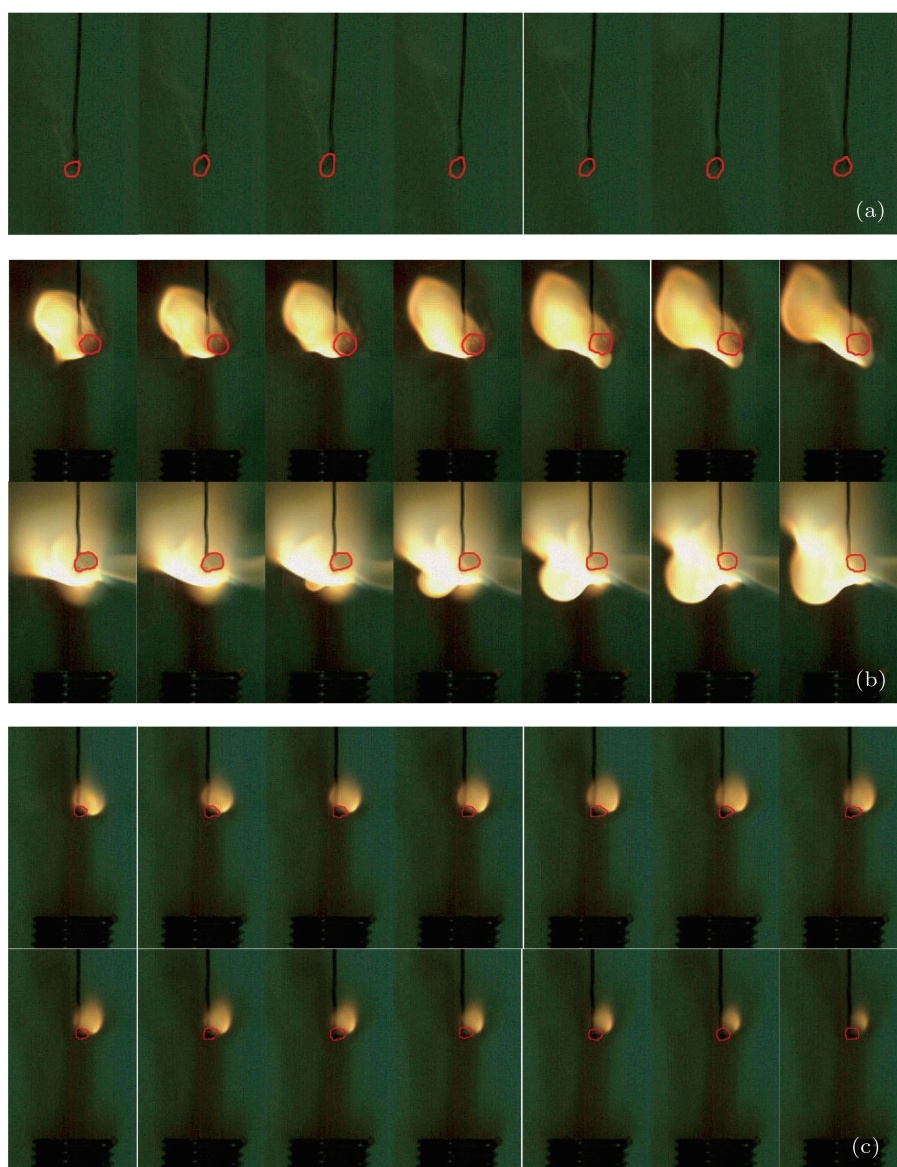


图2 有机凝胶自燃推进剂单液滴不同阶段的液滴尺寸及火焰形态 (a)着火延迟阶段;(b)喷射燃烧阶段;(c)稳燃熄火阶段

3.1 常规多组分流滴蒸发流动控制方程

为了简化模型的复杂程度, 本文假设喷雾液滴及其气相环境参数满足球对称分布, 忽略 Dufour 及 Soret 效应, 忽略辐射传热及气相溶解影响. 为了考虑运动液滴对流速度对喷雾液滴蒸发模型的影响, 液滴蒸发流率采用努塞尔数 (Nu) 进行修正, 液滴内部环流采用有效传热传质系数进行修正. 凝胶喷雾液滴的蒸发燃烧特性非常类似于多组分流滴, 因此下面首先给出多组分单液滴球对称蒸发模型的流动控制方程^[16].

气相连续方程:

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \rho_g v_g) = 0. \quad (1)$$

气相组分传输方程:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial (\rho_g Y_i)}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial (r^2 \rho_g v_g Y_i)}{\partial r} \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \rho_g D_g \frac{\partial Y_i}{\partial r} \right). \end{aligned} \quad (2)$$

气相能量传输方程:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial (\rho_g C_{Pg} T_g)}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial (r^2 \rho_g v_g C_{Pg} T_g)}{\partial r} \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 k_g \frac{\partial T_g}{\partial r} \right). \end{aligned} \quad (3)$$

液相连续方程:

$$\frac{\partial \rho_L}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \rho_L v_L) = 0. \quad (4)$$

液相凝胶剂组分传输方程:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial (\rho_L Y_{gel})}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial (r^2 \rho_L v_L Y_{gel})}{\partial r} \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \rho_L D_L \frac{\partial Y_{gel}}{\partial r} \right). \end{aligned} \quad (5)$$

液相能量传输方程:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial (\rho_L C_{PL} T_L)}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial (r^2 \rho_L v_L C_{PL} T_L)}{\partial r} \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 k_L \frac{\partial T_L}{\partial r} \right). \end{aligned} \quad (6)$$

(1)—(6) 式中, ρ , D , C_P , k , v 分别为密度 (kg/m^3)、扩散系数 (m^2/s)、定压比热容 ($\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$)、热传导系数 ($\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$)、速度 (m/s); r 为计算模型的物理坐标; Y 为组分质量分数; 下标 g , L 分别表示气相和液相; 下标 i 表示气相中各组分, 下标 gel 表示液滴内部凝胶剂质量分数.

为了求解以上流动控制方程, 则需要流场速度、温度、组分质量分数的边界条件, 液滴中心和

气相远场边界均可设置为流场参数梯度为 0, 但凝胶液滴表面的边界条件则需根据凝胶推进剂在不同阶段的蒸发特性进行定义. 下面分别给出了液滴表面在凝胶剂膜形成、膨胀和破裂三个不同阶段的边界条件.

3.2 凝胶剂膜形成阶段

凝胶喷雾液滴开始受热蒸发到液滴表面凝胶剂质量分数首次达到 95% 这一阶段被称为凝胶剂膜形成阶段.

根据能量守恒, 液滴表面蒸发流率:

$$G_S = \left(k_g \frac{\partial T_g}{\partial r} \Big|_{r=R_S} - k_L \frac{\partial T_L}{\partial r} \Big|_{r=R_S} \right) / H_{Eva,S}, \quad (7)$$

(7) 式中, $H_{Eva,S}$ 为液滴表面推进剂组分蒸发焓, R_S 为各时刻的凝胶液滴半径.

由于凝胶剂在液滴内部的扩散系数非常有限, 假设凝胶剂在液滴表面 δ_S 厚度内均匀分布, 则液滴表面液相环境中的凝胶剂质量分数:

$$Y_{gel,S} = \frac{\rho_{gel,0} \left[R_0^3 - (R_0 - \delta_S)^3 \right] Y_{gel,0}}{\rho_{gel,0} \left[R_0^3 - (R_0 - \delta_S)^3 \right] - 3R_S^2 G_S \Delta t}, \quad (8)$$

(8) 式中, R_0 为凝胶液滴初始半径, $\rho_{gel,0}$, $Y_{gel,0}$ 分别为凝胶推进剂初始密度及凝胶剂初始质量分数, Δt 为计算时间步长.

在不考虑气相溶解的条件下, 根据 Stefan 流基本理论, 可得到液滴表面气相环境中的推进剂蒸气质量分数 $Y_{fuel,S}$ 及其他气相组分质量分数 $Y_{i,S}$.

$$Y_{fuel,S} = \left(\rho_g D_{fuel} \frac{\partial Y_{fuel}}{\partial r} \Big|_{r=R_S} \right) / (1 - G_S), \quad (9)$$

$$Y_{i,S} = \left(\rho_g D_i \frac{\partial Y_i}{\partial r} \Big|_{r=R_S} \right) / G_S. \quad (10)$$

假设凝胶推进剂是非理想正规溶液, 则可在某温度 T_a 活度系数 γ_a 已知的条件下, 利用正规溶液活度系数关系式求解其他温度 T 对应的活度系数 $\gamma(T)$, 然后求解拉乌尔定律 (Raoult) 所建立的气相中推进剂组分分压 P_{fuel} 与纯推进剂组分饱和蒸气压 P_{saut} 之间的非线性系式 (12), 即可得到液滴表面温度 T_S .

$$\gamma(T) = \exp \left(\frac{T_a \ln \gamma_a}{T} \right), \quad (11)$$

$$P_{\text{fuel}} = P_{\text{saut}}(T_S) \gamma(T_S) \times \left(1 - \frac{Y_{\text{gel,S}} MW_{\text{fuel}}}{Y_{\text{gel,S}} MW_{\text{fuel}} + (1 - Y_{\text{gel,S}}) MW_{\text{gel}}} \right), \quad (12)$$

(12) 式中, MW_{fuel} , MW_{gel} 分别为液滴内推进剂组分和胶凝剂摩尔质量; $P_{\text{saut}}(T_S)$ 为纯推进剂组分饱和蒸气压与液滴表面温度的函数关系式; $\gamma(T_S)$ 为活度系数与液滴表面温度的函数关系式; P_{fuel} 可根据液滴表面气相环境中各组分质量分数进行计算.

若胶凝剂膜在液滴表面温度达到沸点后都还未形成, 则应首先根据文献 [17] 中的沸腾蒸发模型 (13) 式及能量守恒关系 (7) 式计算液滴表面温度, 然后利用 (13) 式计算液滴表面蒸发流率.

$$G_S = J_e (T_S - T_{\text{saut}}), \quad (13)$$

(13) 式中, T_{saut} 为推进剂组分沸点, J_e 为沸腾蒸发系数.

根据液滴表面蒸发流率 G_S 及该时刻和上时刻液滴平均密度 ρ_{avg} , ρ_{avg}^0 , 由下式可以得出该时刻液滴半径变化率

$$dR/dt = \frac{G_S}{\rho_{\text{avg}}} - \frac{R_S (\rho_{\text{avg}} - \rho_{\text{avg}}^0)}{3\Delta t \rho_{\text{avg}}}. \quad (14)$$

3.3 胶凝剂膜膨胀阶段

凝胶液滴在胶凝剂膜形成后还会持续升温, 当液滴内部温度超过沸点后, 液滴内部开始出现结核沸腾蒸发, 由于所产生的蒸气不能穿透胶凝剂膜, 导致液滴出现持续膨胀现象. 假设胶凝剂膜初始厚度 $\delta_{X,0}$ 为液滴内部胶凝剂质量分数等于 95% 的节点至凝胶液滴表面的厚度, 并认为该层胶凝剂膜体积在液滴膨胀阶段保持不变.

胶凝剂膜形成后, 推进剂蒸气不能穿透该弹性凝胶膜, 则液滴表面质量流率 G_S 等于 0, 气相各组分质量分数在液滴表面处的梯度等于 0.

根据凝胶液滴内部第 N 个计算节点的半径 r_N , 凝胶推进剂密度 ρ_N , 上一时刻胶凝剂质量分数 $Y_{\text{gel,N}}^0$, 可得出该计算节点所包含的推进剂质量 m_N 和胶凝剂质量 $m_{N,\text{gel}}$ 分别为

$$m_N = \frac{4\pi}{3} \rho_N (r_N^3 - r_{N-1}^3) (1 - Y_{\text{gel,N}}^0), \quad (15)$$

$$m_{N,\text{gel}} = \frac{4\pi}{3} \rho_N (r_N^3 - r_{N-1}^3) Y_{\text{gel,N}}^0. \quad (16)$$

当液滴内部某计算节点 N 的温度超过沸点后, 液滴内部才开始产生蒸气, 此时液滴内部各节点沸腾蒸发质量

$$m_{\text{Boil},N} = 4\pi r_N^2 J_e (T_N - T_{\text{saut}}) \Delta t. \quad (17)$$

若计算节点 N 的沸腾蒸发质量 $m_{\text{Boil},N}$ 大于该节点所包含的推进剂质量 m_N , 则该节点蒸发质量 $m_{\text{Eva},N}$ 等于 m_N , 下一时刻胶凝剂质量分数 $Y_{\text{gel},N}$ 等于 1. 反之, 则该节点蒸发质量 $m_{\text{Eva},N}$ 等于 $m_{\text{Boil},N}$, 下一时刻胶凝剂质量分数

$$Y_{\text{gel},N} = \frac{m_{N,\text{gel}}}{(m_{N,\text{gel}} + m_N - m_{\text{Boil},N})}. \quad (18)$$

当求出液滴内部各节点蒸发质量后, 除去液滴升温所消耗的能量都完全用于蒸发这些推进剂, 根据下面能量守恒关系即可求出液滴表面温度

$$4\pi R_S^2 \Delta t \left(k_g \frac{\partial T_g}{\partial r} \Big|_{r=R_S} - k_L \frac{\partial T_L}{\partial r} \Big|_{r=R_S} \right) = \sum_{i=1}^{N_L} m_{\text{Eva},i} H_{\text{Eva},i}, \quad (19)$$

(19) 式中, N_L 为液滴内部节点数量, $H_{\text{Eva},N}$ 为节点 N 处的推进剂组分蒸发焓.

根据液滴内部推进剂组分总蒸发质量, 膨胀后的液滴半径为

$$R_S = \left(\frac{3}{4\pi} \frac{\left(\sum_{i=1}^{N_L} m_{\text{Eva},i} \right) R_{\text{fuel}} T_{\text{saut}}}{P} + R_S^3 \right)^{\frac{1}{3}}, \quad (20)$$

(20) 式中, P 为环境压力, R_{fuel} 为推进剂组分气体常数.

由该时刻凝胶喷雾液滴半径 R_S 和初始凝胶剂膜对应的液滴半径 R_S^0 , 根据初始胶凝剂膜体积保持不变的基本假设, 可得该时刻胶凝剂膜厚度.

$$\delta_X = \left(\frac{R_S}{R_S^0} \right)^2 \delta_{X,0}. \quad (21)$$

3.4 胶凝剂膜破裂阶段

在凝胶液滴表面张力作用下, 弹性胶凝剂膜内外两侧产生了压力差, 当该压力差对该胶凝剂外壳施加的应力大于其屈服应力时就认为胶凝剂膜发生破裂.

假设液滴在膨胀过程中保持为球形, 根据凝胶液滴张力系数 γ 及 Young-Laplace 方程, 球形液滴

表面张力在液滴表面处产生的压差

$$\Delta P = \frac{2\gamma}{R_S}. \quad (22)$$

在计算胶凝剂外壳承受的应力时, 认为该外壳为球形刚性外壳, 则厚度为 δ_X 的胶凝剂外壳承受的应力

$$\sigma = \frac{R\Delta P}{2\delta_X} = \frac{\gamma}{\delta_X}. \quad (23)$$

胶凝剂膜的屈服应力 σ_{yield} 会随胶凝剂膜的温度和胶凝剂含量发生变化, 通常要通过实验方法才能准确测量, 本文假设其屈服应力 σ_{yield} 保持为常值.

根据凝胶剂膜破裂时的液滴尺寸 R_S 和液滴膨胀阶段推进剂组分蒸发总量 M_{Eva} , 胶凝剂膜破裂后的液滴半径

$$R_S = \left(-\frac{3}{4\pi} \frac{M_{\text{Eva}} R_{\text{fuel}} T_{\text{saut}}}{P} + R_S^3 \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (24)$$

当胶凝剂膜破裂后, 根据胶凝剂质量分数等于 95% 的节点对应的位置重新更新胶凝剂膜初始厚度 $\delta_{X,0}$, 并再次开始进行第二阶段蒸发.

4 物理属性及模型参数

4.1 物理属性

本文单滴蒸发燃烧实验研究所采用的自燃凝胶推进剂主要成分为 UDMH 和某有机高分子材料, 考虑到高分子材料聚合程度的不可控性, 设该高分子胶凝剂的平均分子量 MW_{gel} 等于 300000. 由于液滴内部温度在蒸发过程中的变化范围比较有限, 因此假设胶凝剂密度 ρ_{gel} , 比热 ρ_{gel} , 热传导系数 k_{gel} , 扩散系数 D_L 分别等于常数 1500 kg/m³, 3500 J/kg, 0.1 W·m⁻¹·k⁻¹, 10⁻⁹ m²·s⁻¹. 文献 [18] 详细给出了液体推进剂组分 UDMH 的密度、比热、热传导系数、蒸发热等物理参数随温度变化的函数关系. 根据上述凝胶推进剂中各组分的物理属性, 液体凝胶混合物的物理属性采用各组分质量分数加权平均方法进行计算. 气相混合物各物理属性采用文献 [19] 所给的低压理想气体方法进行计算.

4.2 模型参数

本文建立的凝胶喷雾液滴蒸发模型中包含的一些模型参数可通过实验手段进行直接测量, 而

另一部分参数则需根据单液滴蒸发燃烧实验结果进行修正. 表 1 给出了下面仿真计算所选用的模型参数.

表 1 凝胶喷雾液滴蒸发模型参数

模型参数	$Y_{\text{gel},0}$	T_a/K	γ_a	J_e	$\delta_{\text{yield}}/\text{Pa}$
数值	0.02	288.0	0.904	0.25	1.465×10^6

5 数值计算方法

5.1 坐标变换

若在物理平面中直接离散和计算多组分液滴蒸发流动控制方程, 需要根据气液界面在每个时间步内移后的界面位置重新生成计算网格. 现采用下面的坐标变换方法, 则可把物理平面流动控制方程转换到界面位置固定不变的计算平面中.

两坐标系的空间位置转换:

$$\zeta = r/R. \quad (25)$$

两坐标系中的速度转换:

$$w = v - \zeta \dot{R}. \quad (26)$$

(25) 和 (26) 式中, R, \dot{R} 分别为 t 时刻液滴半径及其变化率; r, ζ 分别为物理平面和计算平面的位置坐标; v, w 分别为物理平面和计算平面的速度.

5.2 数值离散方法

计算平面中的多组分液滴蒸发流动控制方程均为非稳态对流 - 扩散方程, 因此, 时间导数采用全隐一阶差分格式进行离散, 对流 - 扩散项采用具有二阶精度的乘方格式进行离散, 液相中心及气相远场的 Neumann 边界条件采用一阶差分格式离散. 对于液滴表面边界条件, 采用二阶分离离散格式对凝胶喷雾液滴不同阶段蒸发模型中包含的空间导数项进行离散, 然后求解离散后的代数方程即可得到液滴表面 Dirichlet 边界条件数值.

5.3 计算流程

在一个时间步内, 首先由上一时刻的初始流场参数求解各离散的气相及液相流动控制方程, 然后根据液滴表面胶凝剂含量及液滴表面应力判断凝

胶液滴所处的蒸发阶段, 并采用相应的模型求解和更新液滴表面边界条件, 接着进行下一轮流动控制方程求解、蒸发状态判断及边界条件更新, 直至液滴质量流率及表面温度在相邻两次迭代间的误差满足 (27) 式和 (28) 式时, 开始下一新时间步的计算. 当液滴半径与初始半径平方比值 $(R_S/R_0)^2 < 0.1$ 时, 认为液滴蒸发结束.

$$|G_S - G_S^{\text{last}}|/G_S^{\text{last}} < 1.0 \times 10^{-5}, \quad (27)$$

$$|T_S^{\text{last}} - T_S| < 1.0 \times 10^{-3}. \quad (28)$$

6 仿真结果及分析

下面针对初始直径 $D_0 = 100 \mu\text{m}$ 、初始温度 $T_0 = 300 \text{ K}$ 的凝胶及常规 UDMH 自燃推进剂单液滴在环境温度 $T_{\text{amb}} = 1000 \text{ K}$ 的高温空气中的蒸发过程进行了仿真研究及对比分析, 证实了该模型能够合理地描述凝胶单液滴蒸发燃烧过程实验现象.

图 3 给出了凝胶单液滴在胶凝剂膜形成前, 液

滴半径、液滴表面 UDMH 蒸气质量分数、液滴表面温度、液滴表面质量流率及液滴表面胶凝剂含量等液滴表面参数随时间的变化曲线. 由图 3(a)—(d) 可知, 液滴表面的胶凝剂含量在蒸发初期增加比较缓慢, 但 10 ms 后的胶凝剂含量随蒸发过程而迅速上升, 并在 12.06 ms 时达到形成胶凝剂膜的临界质量分数 95%. 在液滴表面胶凝剂含量快速增加阶段, 特别在胶凝剂膜快速形成阶段的非常有限时间范围内, 液滴表面质量流率及表面 UDMH 质量分数显著下降, 而表面温度和液滴半径则表现出了明显的上升趋势.

液滴蒸发质量流率显著减小的原因是胶凝剂挥发性远小于 UDMH 推进剂, 而液滴表面 UDMH 蒸气质量分数迅速减小则是因为胶凝剂含量及活度系数共同影响了液滴表面的 UDMH 推进剂逸度. 液滴表面温度在胶凝剂膜形成 0.04 ms 后就迅速达到了 UDMH 推进剂沸点 335.5 K, 会在液滴内部形成结核沸腾, 所以大量内部蒸气不能穿透液滴表面的胶凝剂膜, 导致液滴半径此时出现了显著膨胀.

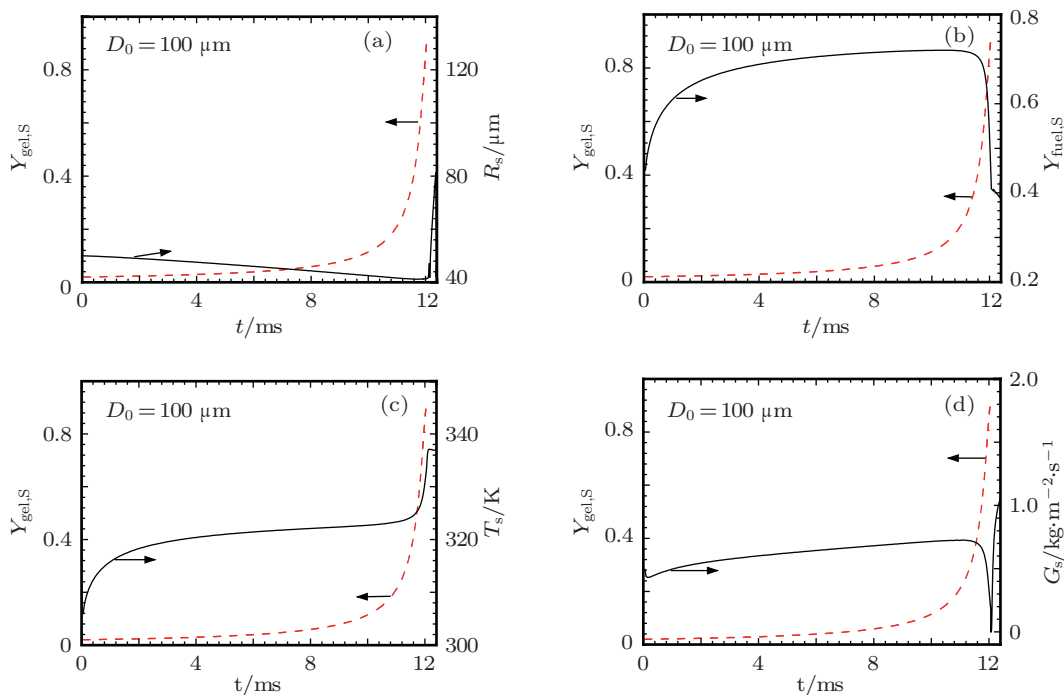


图 3 胶凝剂膜形成前液滴表面参数随时间变化曲线 (a) 液滴半径; (b) 液滴表面 UDMH 蒸气; (c) 液滴表面温度; (d) 液滴蒸发质量流率

图 4 比较了凝胶及常规单液滴的半径和温度随时间变化. 由图 4(a) 可知, 凝胶单液滴的生存时间为 20.54 ms, 小于常规单液滴蒸发完毕所需时

间 29.5 ms. 蒸发初期的凝胶液滴半径变化与常规液滴非常一致, 但随着胶凝剂膜的形成, 液滴半径出现了反复的增大 - 缩小, 胶凝剂膜形成后的初始

阶段和蒸发末期的半径变化幅值较小,而这之间时间段的半径变化幅度比较剧烈,这与实验观察的膨胀-破裂现象及规律非常吻合.

由图 4(b)可知,常规单液滴的表面及中心温度会逐渐趋于稳态,而凝胶液滴表面温度会在达到最高温度 337.08 K 后逐渐缓慢下降,但始终大于 UDMH 的沸点温度以维持液滴内部沸腾蒸发,这也与实验中所观察到的长时间喷射燃烧相吻合.

图 5 比较了凝胶及常规单液滴的质量流率和表面 UDMH 质量分数随时间变化.由图 5(a)可知,

凝胶液滴在胶凝剂膜形成前的表面质量流率与常规液滴非常一致,而在胶凝剂膜形成后,凝胶液滴的内部沸腾蒸发效果明显强于常规液滴的表面准稳态蒸发质量流率,这也解释了凝胶液滴生存时间反而小于常规液滴的原因.

由图 5(b)可知,常规液滴表面 UDMH 蒸气质量分数随着液滴表面温度趋于稳态而基本保持不变,但凝胶液滴表面 UDMH 蒸气质量分数则会由于胶凝剂膜的反复膨胀-破裂而出现震荡现象,虽然总体趋势是逐渐增大的,但一直小于常规液滴的稳态质量分数.

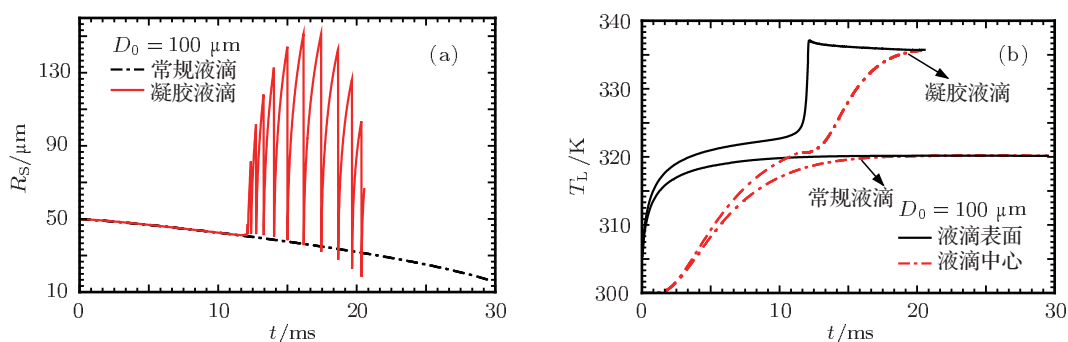


图 4 液滴半径及温度随时间变化 (a) 液滴半径; (b) 液滴表面及中心温度

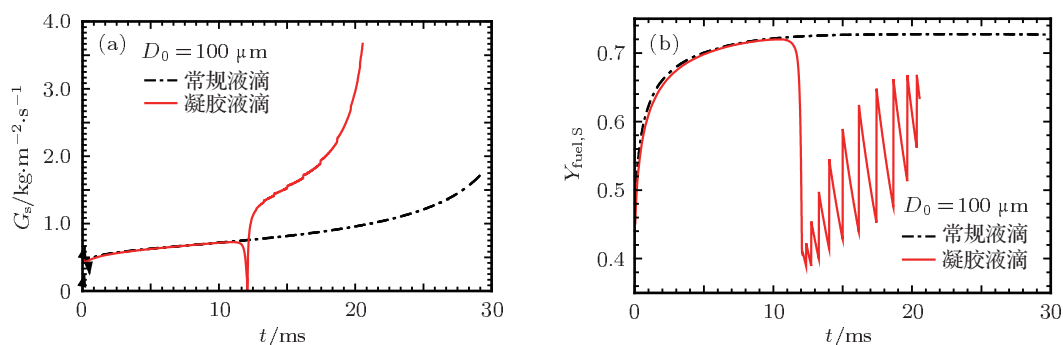


图 5 质量流率及表面蒸气质量分数随时间变化 (a) 质量流率; (b) UDMH 蒸气质量分数

7 结论

本文首先根据某型有机凝胶 UDMH 单液滴在 NTO 环境中的蒸发自燃燃烧过程的实验现象,进一步深入分析了该型凝胶单液滴蒸发燃烧机理;然后针对实验现象中的胶凝剂膜形成、胶凝剂膜反复膨胀-破裂阶段的蒸发特性,建立了凝胶单液滴多组分蒸发模型,通过仿真计算及与常规推进剂

蒸发过程仿真结果进行对比分析,得出了下面主要结论.

- 1) 液滴表面胶凝剂含量在蒸发初期变化比较缓慢,但超过某临界时刻后,胶凝剂含量会迅速上升,即液滴表面的胶凝剂膜会在某临界时刻后极短时间内迅速形成.
- 2) 胶凝剂膜快速形成的时间范围内,凝胶液滴表面质量流率及表面 UDMH 质量分数出现了剧烈

下降, 而表面温度则迅速上升至 UDMH 沸点, 由液滴内部结核沸腾产生的蒸气促使液滴尺寸出现了明显膨胀.

3) 凝胶液滴半径及表面 UDMH 质量分数在胶凝剂膜形成后的反复膨胀 - 破裂阶段出现了震荡.

4) 常规推进剂液滴表面及中心温度、UDMH 质量分数都逐渐趋于稳态, 进入准稳态蒸发阶段; 而凝胶液滴表面温度在迅速上升至超过沸点后就会保持在略高于沸点的某温度范围内, 其液滴中心则一直处于非稳态加热.

5) 胶凝剂膜形成后, 凝胶液滴内部的结核沸腾蒸发明显强于常规液滴准稳态表面蒸发流率, 使得凝胶液滴生存时间小于常规液滴.

该凝胶喷雾液滴蒸发模型合理地描述了实验中各蒸发燃烧阶段的实验现象. 下一阶段将通过实验测量等手段获取物理属性参数、修正模型参数, 并进一步在流动控制方程中加入自燃推进剂多组分气相化学反应动力学源项^[20], 完成该型有机凝胶自燃单液滴非稳态蒸发自燃燃烧数值仿真.

- [1] Rahimi S, Hasan D, Peretz A 2004 *J. Propul. Power* **20** 93
- [2] Yasuhara W K, Finato S R, Olson A M 1993 *2nd Annual AIAA SDIO Interceptor Technology Conference* (Albuquerque: American Institute of Aeronautics and Astronautics)
- [3] Palaszewski B, Powell R 1994 *J. Propul. Power* **10** 828
- [4] Feng S J, He B, Nie W S 2009 *J. Rocket Propul.* **35** 1 (in Chinese) [丰松江, 何博, 聂万胜 2009 火箭推进 **35** 1]
- [5] Wang L, Li J, Yang Y J 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 160 (in Chinese) [王理, 李黎, 杨亚江 2004 物理学报 **53** 160]
- [6] Han W, Shan S Q, Du Z G, Yu J, Yang C, Wu J 2009 *Chem. Propul. & Polymeric Mater.* **7** 38 (in Chinese) [韩伟, 单世群, 杜宗罡, 于君, 杨超, 吴金 2009 化学推进剂与高分子材料 **7** 38]
- [7] Yang W D, Zhang M Z 2006 *J. Rocket Propul.* **32** 12 (in Chinese) [杨伟东, 张蒙正 2006 火箭推进 **32** 12]
- [8] Zhang M Z, Yang W D, Wang M 2008 *J. Propul. Technol.* **29** 22 (in Chinese) [张蒙正, 杨伟东, 王玫 2008 推进技术 **29** 22]
- [9] Solomon Y, Natan B, Cohen Y 2009 *Combust Flame* **156** 261
- [10] Desyatkov A, Madlener K, Ciezki H K 2008 *44th AIAA/ASME /SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit* (Hartford: American Institute of Aeronautics and Astronautics)
- [11] Weiser V, Gläser S, Kelzenberg S, Eisenreich N, Roth E 2005 *41st AIAA/ASME /SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit* (Tucson: American Institute of Aeronautics and Astronautics)
- [12] Mueller D C 1997 *Ph. D. Dissertation* (Pennsylvania: The Pennsylvania State University)
- [13] Kunin A, Natan B, Greenberg J B 2009 *Progress in Propulsion Physics* **1** 225
- [14] Zhang M Z 2010 *J. Rocket Propul.* **36** 1 (in Chinese) [张蒙正 2010 火箭推进 **36** 1]
- [15] Catoire L, Chaumeix N, Pichon S, Paillard C 2006 *J. Propul. Power* **22** 120
- [16] Li Y Q, He P 2008 *Transactions of Csice* **26** 56 (in Chinese) [李云清, 何鹏 2008 内燃机学报 **26** 56]
- [17] Hardt S, Wondra F 2008 *J. Comput. Phys.* **227** 5871
- [18] Arnold S L http://www.gentoogeek.org/steves_world/hypergol-properties.pdf [2011-9-25]
- [19] He B, Xiao Q, Nie W S, Feng S J 2011 *Journal of the Academy of Equipment Command & Technology* **22** 55 (in Chinese) [何博, 肖强, 聂万胜, 丰松江 2011 装备指挥技术学院学报 **22** 55]
- [20] He B, Nie W S, Feng S J, Li G Q 2011 *Adv. Mater. Res.* **297** 2333

Model and simulation of liquid rocket organic gel spray droplet evaporation*

He Bo^{1)†} He Hao-Bo²⁾ Feng Song-Jiang²⁾ Nie Wan-Sheng²⁾

1) (*Company of Postgraduate Management, the Academy of Equipment, Beijing 101416, China*)

2) (*Department of Space Equipment, the Academy of Equipment, Beijing 101416, China*)

(Received 27 October 2011; revised manuscript received 6 December 2011)

Abstract

Gel propellant has the advantage of controllable flux as liquid propellant and long-term reservation as solid propellant, however, the evaporation and combustion problem of gel spray droplet bores with the gel propellant development and combustor design all the time, and hampers gel propellant practical engineering applications. In this paper, the gel single droplet combustion experiment system is designed and constructed, and then the evaporation and combustion mechanism is explored deeply based on the experimental phenomena of organic gel unsymmetrical dimethylhydrazine (UDMH) single droplet burning in nitrogen tetroxide. The organic gel spray droplet multi-component evaporation model is developed for three different evaporation phases of the gel layer, i.e. the forming, expanding and bursting of the gel layer based on the single droplet evaporation characteristics in experiment, and then the gel single droplet vaporization in high temperature gas phase is numerically simulated and compared with the result of conventional liquid droplet using the elementary model parameters and physic property parameters. The result shows that the gel content on the droplet surface increases slowly at the beginning of evaporation, however it would increase rapidly to a mass fraction of 95% and form the gel layer in a limited time after exceeding a critical evaporation time, which results in surface mass flux dropping to 0 and surface temperature reaching the UDMH boil point rapidly. After the gel layer forming, the droplet radius and surface UDMH vapor mass fraction exhibit oscillation as the swelling-bursting phenomena in experiment. The gel droplet surface temperature holds above the boil point and the mass flux of gel droplet inner boiling evaporation is stronger than the conventional liquid droplet surface steady evaporation which makes the life time of gel droplet much shorter.

Keywords: gel propellant, spray droplet, gel layer, evaporation model

PACS: 82.70.Gg, 68.03.Fg, 47.55.D-, 44.05.+e

* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. 6131020301), and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51076168).

† E-mail: drhebo@163.com