

文章编号:1000-8055(2013)05-1187-05

基于细观颗粒夹杂模型的固体推进剂 导热系数预测

职世君, 孙冰, 张建伟

(北京航空航天大学 宇航学院, 北京 100191)

摘 要: 为准确预测固体推进剂的导热系数, 采用了分子动力学方法对高填充比固体推进剂细观模型进行建模. 利用有限元理论对固体推进剂细观模型稳态热传导进行计算, 结合计算细观力学均匀化方法, 计算了固体推进剂细观模型的均匀温度和热流密度. 根据计算所得的平均温度和平均热流密度值求解稳态热传导方程, 得到了两相和三相固体推进剂的宏观等效导热系数. 其中, 两相固体推进剂的仿真结果与试验结果的误差只有 3.63%. 结果表明: 在预测固体推进剂导热系数时, 采用固体推进剂的颗粒夹杂模型可以充分考虑粒径大小、颗粒随机分布的影响, 更真实地反映固体推进剂的微结构特征, 计算结果准确可靠.

关 键 词: 固体推进剂; 细观力学; 导热系数; 数值模拟; 分子动力学

中图分类号: V435

文献标志码: A

Estimation of thermal conductivity of solid propellants based on particle packing model

ZHI Shi-jun, SUN Bing, ZHANG Jian-wei

(School of Astronautics,

Beijing University of Aeronautics and Astronautics, Beijing 100191, China)

Abstract: To better estimate the thermal conductivity of solid propellants, the molecular dynamics method was adopted to match the size distribution and volume fraction of solid propellants. The finite element method was employed to compute the steady heat conduction of solid propellant meso-scale models. According to the homogenization method, the mean temperature and mean heat flux were calculated. Based on the mean temperature, mean heat flux and steady heat conduction equation, the effective thermal conductivities of two- and three-phase solid propellants were obtained. The error between the simulation result and test data of two-phase solid propellants is only 3.63%. The results show that the effects of particle size and random distribution of particles can be fully considered when the particle packing model is employed in the process of estimating the thermal conductivity of solid propellants. The particle packing model is more consistent with the micro-structural features of real solid propellant, and the results are accurate and reliable.

Key words: solid propellant; mesomechanics; thermal conductivity; numerical simulations; molecular dynamics

收稿日期: 2012-05-31

网络出版地址: http://www.cnki.net/kcms/detail/11.2297.V.20130508.0949.201305.1187_031.html

基金项目: 航天科技创新基金(CASC201103)

作者简介: 职世君(1983-), 男, 河南温县人, 博士生, 主要从事固体推进剂细观力学性能及燃烧研究.

固体推进剂是固体火箭发动机的重要组成部分,其性能在很大程度上决定了固体火箭发动机的性能.近些年来,复合固体推进剂及高能推进剂应用广泛,该类型推进剂多数是由基体、固体颗粒(氧化剂颗粒和金属颗粒)及界面相组成.固体推进剂的导热系数是对固体推进剂进行燃烧计算或结构完整性分析时不可或缺的参数.而导热系数往往取决于固体推进剂组分材料的性质及其微观结构特征,这些特征包括增强相的体积分数、分布规律、形状以及界面相的性质等.随着计算细观力学的发展,从细观尺度出发预测固体推进剂的导热系数已成为一种极其有效的途径.

复合固体推进剂属于颗粒填充复合材料一类.关于这一类复合材料的导热系数预测,国内外的研究者做了大量的试验及理论研究,并提出了一系列的半经验公式.早在20世纪50年代,Maxwell等人^[1]假设填充颗粒为球形并且互相并不接触地随机分布在基体之中,根据导热和导电的相似性,提出了一种求解颗粒复合材料导热系数的数学表达式.该表达式对颗粒体积分数低的复合材料预测结果良好,但当颗粒体积分数比较高时,由于颗粒之间的互相影响,预测结果与试验差别较大.为了研究颗粒复合材料微观结构特征的影响,Tsao和Cheng等人^[2-3]在预测颗粒复合材料时引入了多参数颗粒随机分布函数,Lewis和Agari等人^[4-6]则考虑了颗粒形状的影响.随着计算机的发展,国内一些学者^[7-9]利用有限元方法建立单元体预测了颗粒填充复合材料的有效导热系数.李友云等^[10-11]结合多尺度有限元法,针对区域内颗粒随机分布复合材料的热传导问题给出了一种均匀化理论计算温度场.这些方法大多是只针对两相复合材料,对于多相复合材料以及高体积分数的固体推进剂并不太合适.

本文建立了高体积分数固体推进剂的颗粒随机分布模型,结合有限元法对其稳态热传导进行计算,根据有限元均匀化方法及稳态热传导理论解,可有效预测两相或多相复合固体推进剂的导热系数.

1 物理模型和计算方法

1.1 固体推进剂细观模型及材料属性

分别对不含铝颗粒及含铝颗粒的固体推进剂进行计算.其中,不含铝颗粒的固体推进剂的颗粒体积分数为79%,由高氯酸铵(AP)和基体组成,AP的平均粒径为150 μm;含铝颗粒的固体推进

剂主要由AP,铝(Al)和基体组成,AP颗粒平均粒径为70 μm,体积分数为69.45%,Al颗粒平均粒径为24 μm,体积分数为5.43%.为模拟固体推进剂的真实填充结构,根据分子动力学方法^[12-13]对这两种固体推进剂进行建模,如图1所示.

固体推进剂各组分热物理性质^[14-15]如表1所示.

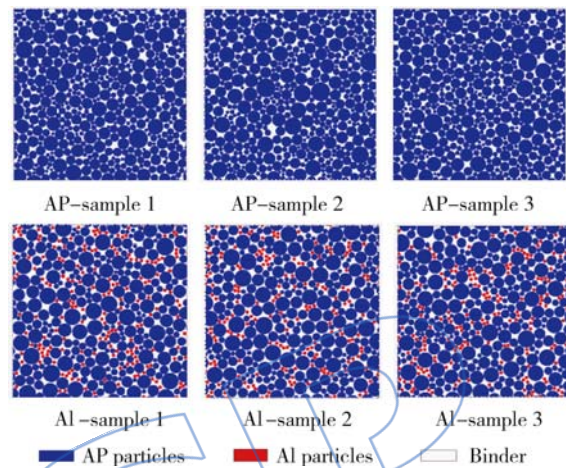


图1 固体推进剂细观夹杂模型

Fig. 1 Particle packing models of solid propellant

表1 固体推进剂各组分热物理性质

Table 1 Thermophysical properties of each component of solid propellant

性质	AP	Al	基体
$\rho / (\text{kg}/\text{m}^3)$	1900	2700	950
$\lambda / (\text{W}/(\text{m}\cdot\text{K}))$	0.405	205.71	0.276
$c_p / (\text{J}/(\text{kg}\cdot\text{K}))$	1460	878.64	2860

1.2 计算方法

假设1个由均匀材料构成的单元,边长等于 δ ,上下边分别维持均匀一致的温度 t_{w1} 和 t_{w2} .设单元材料的导热系数在此温度范围内视为常数,且单元内无内热源,则根据稳态热传导公式可得单元内部的温度和热流密度分布.

$$t(x) = t_{w1} - \frac{t_{w1} - t_{w2}}{\delta}x \quad (1)$$

$$q = \frac{\lambda}{\delta}(t_{w1} - t_{w2}) \quad (2)$$

热流密度不是 x 的函数,即通过单元内 x 方向任何一个等温面的热流密度相等.由式(2)可知,求解导热系数需计算固体推进剂细观模型的均匀热流密度.

固体推进剂细观模型采用三角形单元和四边形单元进行网格划分.单元的积分点分布如图2所示.

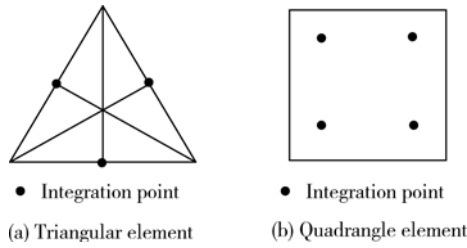


图 2 三角形和四边形单元的积分点分布
Fig. 2 Integration points distribution of triangular and quadrangle elements

固体推进剂细观模型的平均热流密度可根据每个单元的平均热流密度来计算.

$$\bar{q}_{ij} = \sum_{m=1}^{N_{tri}} \bar{q}_m^{tri} \frac{S_m^{tri}}{S_{rve}} + \sum_{n=1}^{N_{quad}} \bar{q}_n^{quad} \frac{S_n^{quad}}{S_{rve}} \quad (3)$$

其中 N_{tri} 和 N_{quad} 分别是三角形单元及四边形单元的数目; \bar{q}_m^{tri} 和 \bar{q}_n^{quad} 分别是第 m 个三角形单元及第 n 个四边形单元的平均热流密度; S_m^{tri} 和 S_n^{quad} 是第 m 个三角形单元和第 n 个四边形单元的面积; S_{rve} 是整个细观模型的面积.

根据有限元计算理论, 单个三角形单元的平均热流密度为

$$\bar{q}_m^{tri} = \frac{1}{3}(q_i + q_j + q_k) \quad (4)$$

其中 q_i, q_j, q_k 分别为三角形单元节点的热流密度.

单个四边形单元的平均热流密度为

$$\bar{q}_n^{quad} = \int_S q_{ij} dS = \sum_I q_{ij}^I |J(D)| W(D) \quad (5)$$

其中 $W(D)=1, J(D)$ 为雅可比矩阵.

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial \xi} & \frac{\partial N_2}{\partial \xi} & \dots & \frac{\partial N_m}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_1}{\partial \eta} & \frac{\partial N_2}{\partial \eta} & & \frac{\partial N_m}{\partial \eta} \\ \frac{\partial N_1}{\partial \zeta} & \frac{\partial N_2}{\partial \zeta} & \dots & \frac{\partial N_m}{\partial \zeta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 & y_1 & z_1 \\ x_2 & y_2 & z_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ x_m & y_m & z_m \end{bmatrix} \quad (6)$$

对应的形函数为

$$\begin{aligned} N_1 &= \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 + \eta) \\ N_2 &= \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 + \eta) \\ N_3 &= \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 - \eta) \\ N_4 &= \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 - \eta) \end{aligned} \quad (7)$$

为解决一些颗粒间距太小, 不利于网格划分的问题, 在利用分子动力学方法进行计算时, 可适当增大各个颗粒的粒径, 计算结束后将各颗粒粒径恢复为初始粒径, 使得各个颗粒之间存在一定的空隙, 从而有利于网格的划分.

2 计算结果与讨论

根据表 1 中固体推进剂各组分的热物理性质, 设置温度边界条件 $t_{w1}=1^\circ\text{C}$ 和 $t_{w2}=0^\circ\text{C}$, 利用有限元方法对固体推进剂细观模型的瞬态热传导进行计算. 图 3 和图 4 分别为不含 Al 固体推进剂和含 Al 固体推进剂的温度和热流密度分布.

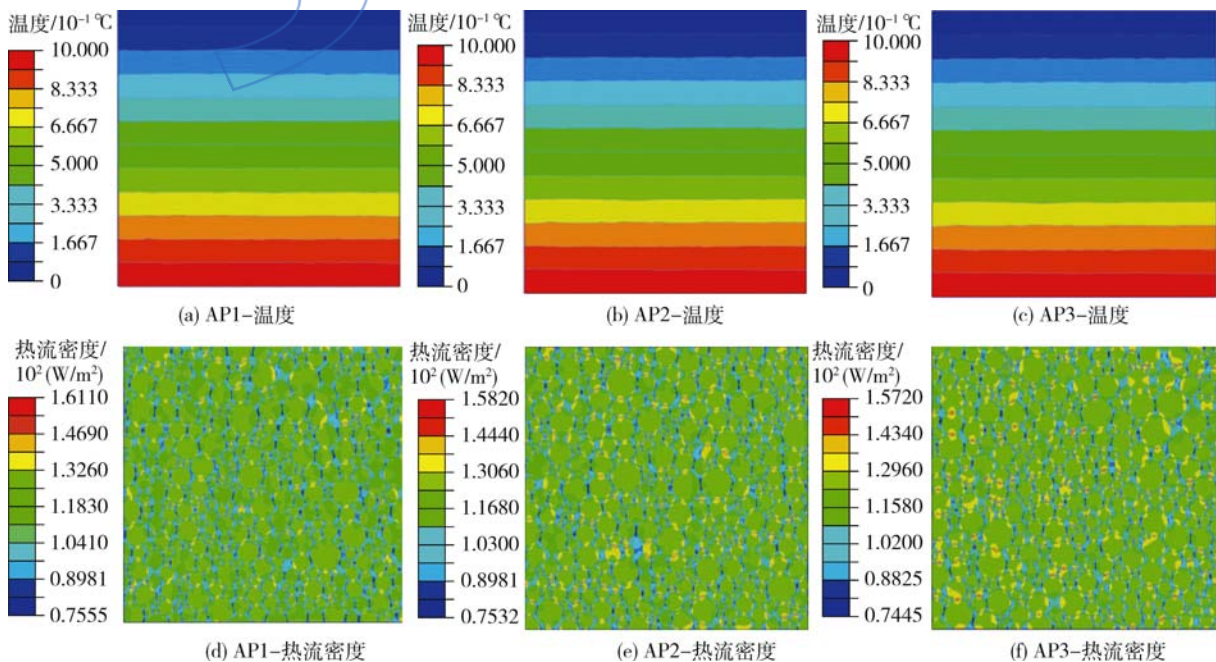


图 3 不含 Al 固体推进剂温度及热流密度分布

Fig. 3 Temperature and heat flux distribution of solid propellant without Al particles

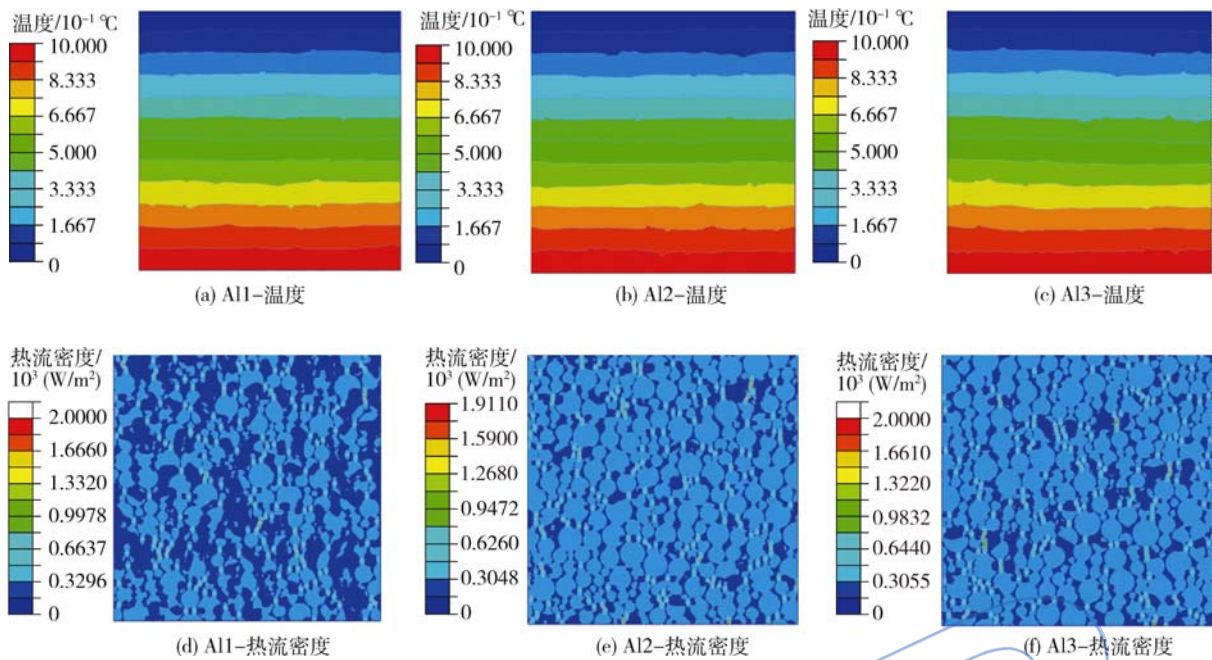


图 4 含 Al 固体推进剂温度及热流密度分布

Fig. 4 Temperature and heat flux distribution of solid propellant with Al particles

从图 3 中可以看出,仅含 AP 固体颗粒的固体推进剂细观模型的温度分层明显,热流密度整体分布仍比较均匀.等温线虽有曲折,但比较平滑,与均质材料的等温线分布十分相似.从图 4 中可以看出,添加 Al 颗粒后,细观模型的等温线更加曲折,热流密度的分布不均匀,在 Al 颗粒聚集的位置热流密度明显较大.根据有限元均匀化方法,求得各个细观模型的平均温度和热流密度,结合一维稳态热传导公式可预测固体推进剂的导热系数,具体结果如表 2 和表 3 所示.

从表 2 和表 3 可以看出,不含 Al 颗粒的固体推进剂细观模型的平均温度场较含 Al 颗粒的固体推进剂平均温度场更接近理论值 $0.50\text{ }^{\circ}\text{C}$. 3 个不含 Al 颗粒的固体推进剂细观模型预测的有效导热系数非常接近,这主要是因为对于高填充比体积分数的固体推进剂,颗粒密度较大,颗粒之间的空隙较小,因此颗粒分布的随机性影响比较小;而由于 Al 的热物理性质与 AP 和基体相差很大以及 Al 颗粒随机分布不均匀的影响,使得 3 个含 Al 固体推进剂细观模型预测的有效导热系数略有差别,但误差很小.分别取表 2 和表 3 中各个模型所预测的导热系数的均值为所研究固体推进剂的有效导热系数.其中,不含 Al 固体推进剂的有效导热系数为 $0.373\ 06\ \text{W}/(\text{m}\cdot\text{K})$,与试验数据 $0.36\ \text{W}/(\text{m}\cdot\text{K})$ 相比,误差为 3.63% ;含 Al 固体推进剂的有效导热系数为 $0.405\ 25\ \text{W}/(\text{m}\cdot\text{K})$.

可见,本文所提出的方法可以较准确地预测固体推进剂的有效导热系数.

表 2 不含 Al 固体推进剂计算结果

Table 2 Results of solid propellant without Al particles

模型	平均温度/ $^{\circ}\text{C}$	平均热流密度/ (W/m^2)	导热系数/ $(\text{W}/(\text{m}\cdot\text{K}))$
AP1	0.50058	121.80088	0.37308
AP2	0.49989	121.78126	0.37302
AP3	0.49993	121.80286	0.37309

表 3 含 Al 固体推进剂计算结果

Table 3 Results of solid propellant with Al particles

模型	平均温度/ $^{\circ}\text{C}$	平均热流密度/ (W/m^2)	导热系数/ $(\text{W}/(\text{m}\cdot\text{K}))$
A11	0.49851	334.72839	0.40483
A12	0.49906	335.31814	0.40554
A13	0.50260	335.18374	0.40538

3 结 论

1) 结合有限元均匀化方法及固体推进剂细观颗粒夹杂模型,可以较准确地预测两相或多相固体推进剂的有效导热系数.该方法考虑了固体推进剂细观颗粒径及位置随机分布的细观结构特

征,更符合实际情况,因此预测结果比较准确.该方法同样也适用于其他颗粒夹杂复合材料的有效导热系数的预测.

2) 不含金属颗粒的固体推进剂,当 AP 颗粒体积分数较高时,由于颗粒密度较大,颗粒之间的空隙较小,使得其细观模型的平均温度及热流密度受颗粒的随机性分布影响较小.对于含 Al 固体推进剂,由于 Al 颗粒热物理性质与 AP 及基体差别较大以及铝颗粒的随机不均匀分布,使得细观模型的预测结果略有差异,但误差很小.

参考文献:

- [1] Maxwell J C, Thompson J J. A treatise on electricity and magnetism[M]. New York: Dover Publications, 1954.
- [2] Tsao T N G. Thermal conductivity of two phase materials [J]. Industrial and Engineering Chemistry, 1961, 53(5): 395-397.
- [3] Cheng S C, Vachon R I. The prediction of the thermal conductivity of two and three phase solid heterogeneous mixtures[J]. International Journal of Heat Mass Transfer, 1969, 12(3): 249-264.
- [4] Lewis T, Nielsen L. Dynamic mechanical properties of particulate-filled polymers [J]. Journal of Applied Polymer Science, 1970, 14(6): 1449-1471.
- [5] Agari Y, Uno T. Estimation on thermal conductivities of filled polymers[J]. Journal of Applied Polymer Science, 1986, 32(7): 5705-5712.
- [6] Agari Y, Ueda A, Nagai S. Thermal conductivity of polyethylene filled with disoriented short-cut carbon fibers[J]. Journal of Applied Polymer Composite Science, 1991, 43(6): 1117-1124.
- [7] 梁基照,李锋华. NR/中空微球复合材料传热的有限元分析[J]. 橡胶工业, 2004, 51(10): 586-589.
LIANG Jizhao, LI Fenghua. FEA of heat transfer in NR/hollow bead composite[J]. China Rubber Industry, 2004, 51(10): 586-589. (in Chinese)
- [8] 叶宏,徐斌,王军,等. 陶瓷微球填充型隔热涂料的有效导热系数[J]. 中国科学技术大学学报:自然科学版, 2006, 36(4): 361-363.
- YE Hong, XU Bin, WANG Jun, et al. The effective thermal conductivity of the thermal insulation coatings incorporated with ceramic microspheres[J]. Journal of University of Science and Technology of China: Natural Sciences, 2006, 36(4): 361-363. (in Chinese)
- [9] 刘祥宽, Salomon M, 胡献国. 基于球型填充相复合材料有效导热系数的计算[J]. 合肥工业大学学报:自然科学版, 2008, 31(9): 1378-1381.
LIU Xiangkuan, Salomon M, HU Xianguo. Effective thermal conductivity calculation models of the composites with spherical fillings[J]. Journal of Hefei University of Technology: Natural Sciences, 2008, 31(9): 1378-1381. (in Chinese)
- [10] 李友云,龙述尧,崔俊芝. 一类随机复合材料等效热传导参数的有限元计算[J]. 湖南大学学报:自然科学版, 2008, 35(7): 55-58.
LI Youyun, LONG Shuyao, CUI Junzhi. Finite element computation of equivalent heat transfer parameters of composite material with random grains[J]. Journal of Hunan University: Natural Sciences, 2008, 35(7): 55-58. (in Chinese)
- [11] 李友云,向子权,郑健龙,等. 颗粒随机分布复合材料热传导问题均匀化方法的理论分析[J]. 应用数学学报, 2010, 33(4): 652-661.
LI Youyun, XIANG Ziquan, ZHENG Jianlong, et al. Homogenous method of heat transfer problem of composite materials with random grains[J]. Acta Mathematicae Applicatae Sinica, 2010, 33(4): 652-661. (in Chinese)
- [12] Knott G M, Jackson T L, Buckmaster J. Random packing of heterogeneous propellants[J]. AIAA Journal, 2001, 39(4): 678-687.
- [13] Kochevets S, Buckmaster J, Jackson T L, et al. Random packs and their use in modeling heterogeneous solid propellant combustion[J]. Journal of Propulsion and Power, 2001, 17(4): 883-890.
- [14] Jackson T L, Buckmaster J. Heterogeneous propellant combustion[J]. AIAA Journal, 2002, 40(6): 1122-1130.
- [15] Cai W D, 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.