

文章编号: 1006-9941(2009)03-0357-04

## 化学微推冲阵列传热过程数值模拟

刘 建, 叶迎华, 沈瑞琪, 胡 艳

(南京理工大学化工学院, 江苏 南京 210094)

**摘要:**根据燃烧传热原理,建立了阵列单元燃烧传热过程的一维有限差分模型,运用此模型对装填斯蒂酚酸铅的 7740 玻璃、环氧树脂、微晶玻璃和硅药室单元燃烧 40~80 ms 过程中室壁温度成长和温度分布进行了数值模拟。结果表明,药室材料的导热系数和单元燃烧时间是影响温度成长和推冲单元分布的主要因素。低导热系数和短燃烧时间有利于提高相同面积上推冲单元的分布数。其中单元燃烧时间影响更大,导热系数增加 100~1000 倍时,热量传导的临界距离增加 3.3~6.3 倍,而燃烧时间增加一倍时,临界距离增加 3~5 倍,但都在微米级,硅药室为 150~450  $\mu\text{m}$ ,其余三种为 20~160  $\mu\text{m}$ 。

**关键词:**军事化学; 化学微推冲; 阵列; 传热; 燃烧时间; 数值模拟

**中图分类号:** TJ45; O69

**文献标识码:** A

**DOI:** 10.3969/j.issn.1006-9941.2009.03.025

### 1 引言

随着近年来航天器的微型化,出现了纳卫星,皮卫星等微型卫星,航天器的姿态控制和定向精度取决于它的质量和推进系统,因此当卫星质量很小时就要求有一种高精度的姿态调整 and 高度控制的推冲器,而且要求推冲器本身的质量也很小,因此,微小型化学推冲器得到了快速发展<sup>[1]</sup>。为了满足多脉冲输出的需要,通常采用阵列的设计方式<sup>[2]</sup>设计推冲器。为了提高推冲阵列的利用效率,节约资源,弥补冲量不足,在设计中要求阵列在有效的面积上排布尽量多的药室但应避免因药室太近引起殉爆。因此,阵列中集成的推冲单元数是化学微推冲器设计的重点。

近年来国内外对微推冲阵列进行了大量研究,Evgenii 等<sup>[3]</sup>提出了阵列单元之间距离主要受相互热干扰的限制,Rossi 等<sup>[4]</sup>在此基础上考虑了单元结构形变对温度的影响。本文主要以目前国内外研究中常用的几种药室材料如硅、7740 玻璃、微晶玻璃<sup>[5]</sup>等为对象,从阵列药室单元之间的传热角度建立阵列单元的传热模型,并依据微尺度的特殊条件对模型进行简化,通过数值模拟的方式探讨微推冲器阵列的单元分布。

### 2 模型的建立

化学微推冲器通常由三部分构成,即点火层、药室

层和喷孔层。化学微推冲器单元分布涉及到单元药室燃烧传热<sup>[6]</sup>问题。本研究以任一药室单元为对象,其物理模型如图 1。推冲器单元的作用过程为:点火桥膜通电,桥膜电阻生热,点燃药剂,经喷孔形成一个微小的推冲量。在此过程中,因为化学反应使药柱的温度不断升高,同时热传导使管壁温度不断升高<sup>[7]</sup>,所以,分别以药剂和管壁为参考对象建立数学模型。

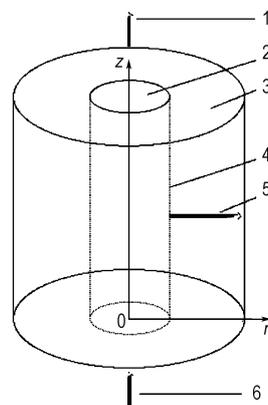


图 1 单元药室中的热量传递

1—出口燃气热损失, 2—药柱, 3—管壁,

4—药柱与管壁界面, 5—管壁热传导, 6—点火桥生热

Fig. 1 Sketch map of heat transfer in chamber unit

1—heat loss of outlet gas - fired, 2—grain, 3—tube wall,

4—grain - tube wall interface, 5—heat conduction of tube wall,

6—heat release of firing bridged - film

#### 2.1 药柱传热方程

由图 1 所示,只以药柱为研究对象,其能量主要由药剂化学反应放热、点火桥膜生热、出口燃气热损失和

收稿日期:2008-08-26; 修回日期:2009-02-12

作者简介:刘建(1983-),男,博士研究生,研究方向为微尺度燃烧理论。

通讯联系人:叶迎华(1962-),女,博士,副研究员,主要从事含能材料应用技术研究。e-mail: yyinghua@mail.njust.edu.cn

管壁热传导构成<sup>[3,8-9]</sup>:

$$\rho dV C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \dot{m} q_r - \dot{m}_{out} q_{out} - \lambda_1 S_1 \frac{\partial T}{\partial r} + I^2 R \quad (1)$$

由于药量少,燃烧时间非常短,忽略出口燃气热损失  $\dot{m}_{out} q_{out}$ ; 而且因为数值模拟时间步长以纳秒级划分,假设在单个时间步长内燃烧产生的热量来不及向管壁传导,因此在计算单个时间步长时忽略管壁传热损失  $-\lambda_1 S_1 \frac{\partial T}{\partial r}$ 。

同时由于电阻桥点火时间相对药柱燃烧时间很小,所以将电阻桥通电发热量换算为初始温度  $T_0$  带入能量方程,从而略去点火桥生热  $I^2 R$ 。所以能量方程简化为:

$$\rho dV C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \dot{m} q_r \quad (2)$$

初始条件:

$$t = 0 \text{ 时}, T = T_0$$

式中,  $\rho$  为药柱密度,  $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ;  $dV$  为反应体积,  $\text{m}^3$ ;  $\dot{m}$  为质量燃速,  $\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}$ ;  $\dot{m}_{out}$  为尾流质量速率,  $\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}$ ;  $q_r$  为单位质量药剂反应热,  $\text{J}$ ;  $q_{out}$  为单位质量燃气能量,  $\text{J}$ ;  $C_p$  为药剂热容,  $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ;  $T$  为药柱温度,  $\text{K}$ ;  $\lambda_1$  为药剂导热系数,  $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ;  $S_1$  为药柱边界传热面积,  $\text{m}^2$ ;  $I$  为点火桥通电电流,  $\text{A}$ ;  $R$  为点火桥电阻,  $\Omega$ ;  $t$  为燃烧时间,  $\text{s}$ ;  $T_0$  为药柱的初温(包括点火桥生热),  $\text{K}$ 。

## 2.2 管壁传热方程

由于药剂燃烧放出的热量在热传导的作用下引起管壁的温度升高,因此,可以采用弗朗克-卡米涅茨基理论<sup>[8]</sup>来描述管壁的能量平衡。

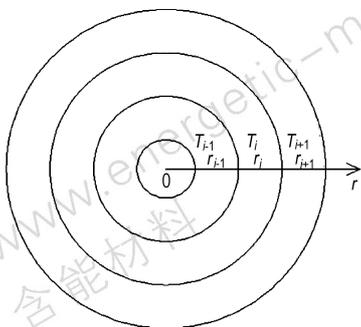


图2 管壁径向温度分布示意图

Fig. 2 Sketch map of temperature distributing along the tube wall

假设:(1)忽略轴向的传热;(2)考虑药柱与药室壁是理想接触;则,管壁能量方程<sup>[10]</sup>为:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{1}{a} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (3)$$

初始条件:  $T(r, 0) = T_0$

边界条件:  $r = r_0$  时,  $T = T_{药}$

$r = \infty$  时,  $\frac{\partial T}{\partial r} = 0$

式中,  $r_0$  为药室直径,  $\text{m}$ ;  $r$  为距圆心的距离,  $\text{m}$ ;  $a$  为管壁热扩散系数,  $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ;  $T_{药}$  为界面处药柱温度,  $\text{K}$ 。

## 2.3 有限差分模型

采用向前差分格式<sup>[11]</sup>对方程(2)、(3)进行差分变换得到方程(4)和(5)。

对方程(2)进行差分变换:

$$T_i^{j+1} = T_i^j + \frac{q_r k}{c_p} \quad (4)$$

对方程(3)进行差分变换,以药室直径为  $0.7 \text{mm}$  为例,则:  $r = 3.5 \times 10^{-4} + (i-1)h$

$$T_i^j = (1 - h/(2((3.5 \times 10^{-4}) + (i-1)h))) \times K \times T_{i-1}^{j-1} + (1 - 2K) \times T_i^{j-1} + (1 + h/(2((3.5 \times 10^{-4}) + (i-1)h))) \times K \times T_{i+1}^{j-1} \quad (5)$$

式中,  $K = \frac{\alpha k}{h^2}$ ;  $k$  为时间步长,  $\text{s}$ ;  $h$  为距离步长,  $\text{m}$ 。

## 3 数值模拟与结果分析

运用上述模型对以环氧树脂、7740 玻璃、微晶玻璃和硅为药室,装填斯蒂酚酸铅的化学微推冲器单元的燃烧传热过程进行数值模拟。

斯蒂酚酸铅和管壁材料的物理、热力学参数分别见表1。运用 MATLAB 编程对上述方程(4)和方程(5)进行数值计算,计算燃烧时间分别取 40, 50, 60, 70, 80 ms, 得到不同管壳材料不同时间时沿径向温度分布曲线。

表1 斯蒂酚酸铅和几种药室材料热力学参数<sup>[5,12-13]</sup>

Table 1 Thermodynamics parameters of lead styphnate and several materials

	$\rho$ / $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	$C_p$ / $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$	$\lambda$ / $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$	$q$ / $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1}$	$T_d$ / $\text{K}$
lead styphnate	1500	688	0.077	$5.254 \times 10^6$	567
epoxy resin	980	535	0.15 ~ 0.25	-	-
7740 <sup>#</sup> glass	2230	753	1.13	-	-
microcrystal glass	2300 ~ 2600	830	1.62	-	-
silicon	2300	700	150	-	-

Note:  $\rho$  is density,  $C_p$  is heat capacity,  $\lambda$  is heat conductivity,  $q$  is heat of reaction,  $T_d$  is deflagration point.

由图 3 ~ 图 6 可以看出,不同药室材料呈现出不同的温度变化趋势。在燃烧时间 40 ms 时距界面 0.5 mm 管壁处,硅温度为 414 K,而环氧树脂、7740 玻璃、微晶玻璃分别为 300, 301, 307 K, 温度相差近 100 K。这主要是由于各材料热力学性质不同,其中导热系数是温度变化快慢的主要因素,硅的导热系数最大,热量在管壁中传递速度较快,可见在相同燃烧时间时管壁各点温度升高相对较快,而其它几种材料导热系数较小,它们管壁各点温度升高就相对较小。

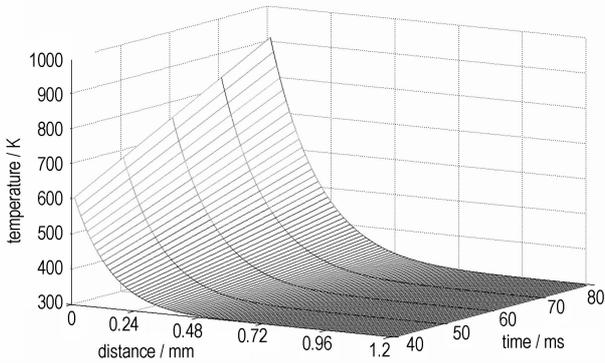


图 3 环氧树脂管材温度分布

Fig. 3 Temperature distribution of epoxy resin tube

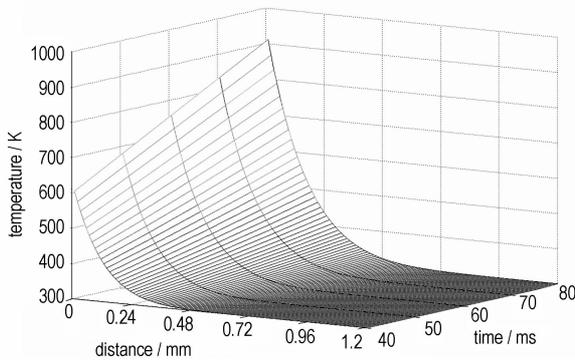


图 4 7740<sup>#</sup>玻璃管材温度分布

Fig. 4 Temperature distribution of 7740<sup>#</sup> glass tube

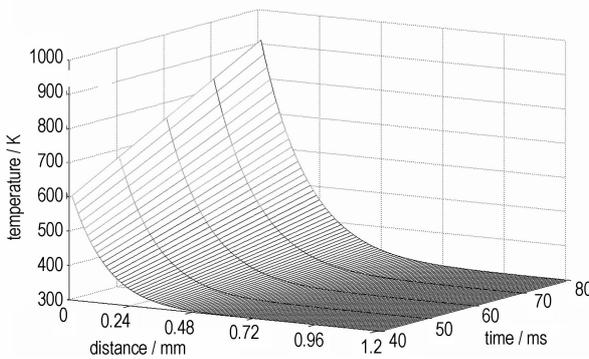


图 5 微晶玻璃管材温度分布

Fig. 5 Temperature distribution of microcrystalline glass tube

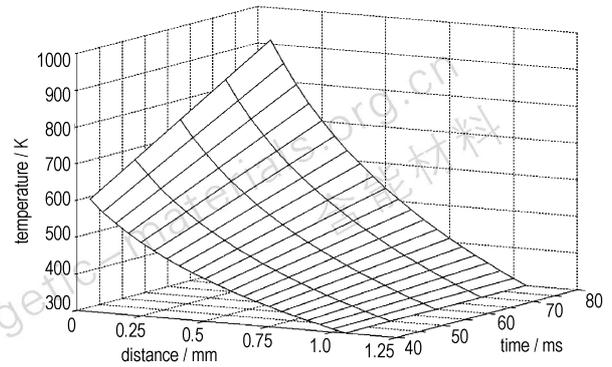


图 6 硅管材温度分布

Fig. 6 Temperature distribution of silicon tube

因此,微推冲器阵列相邻药室间距应视材料不同而不同,材料的导热系数越大,间距越大,阵列单元数量越少;反之则反。所以选择一些导热系数较低的材料作为化学微推冲阵列药室,对提高阵列单元分布是一个比较关键的因素。

由图 3 ~ 图 6 可以看出,燃烧时间不同对药室壁温的分布影响较大。与图 3 数据相对应,图 7 是环氧树脂药室在不同燃烧时间下的管壁温度随距离分布情况。参照斯蒂酚酸铅的爆点 567 K,由图 7 可知,对应燃烧时间分别为 40, 50, 60, 70, 80 ms 时,当相邻药室单元距离分别为 24, 48, 72, 84, 108  $\mu\text{m}$  时,某一个单元作用不会引起相邻单元的意外作用,此传导距离定义为临界安全距离,在设计微推冲器阵列的药室分布时可参考此临界距离。同理,将其他三种材料的计算结果列于表 2 中。

由表 2 可以看出,这些临界距离都在微米量级,非常小。但从结果可以看出导热系数和燃烧时间对临界距离的影响,硅的导热系数分别是环氧树脂、7740 玻璃、微晶玻璃的 1000、132 和 92 倍,在相同燃烧时间时,热量在硅药室中传导的临界距离分别是环氧树脂、7740 玻璃、微晶玻璃的 4.1 ~ 6.3、3.3 ~ 4.1 和 2.8 ~ 4.2 倍,且倍数随着燃烧时间的增加在不断减小。

而对同一种药室材料来说,燃烧时间不同,临界距离不同。随着时间的增加,临界距离增大。当然在燃烧时间非常小时,根据非傅里叶传热理论<sup>[14]</sup>,各种材料的热量传递都有一个松弛时间,如果燃烧时间比松弛时间还短,热量就来不及传至管壁,这时可以忽略药室之间的相互影响。模拟结果表明:当燃烧时间增加一倍时,热量在环氧树脂、7740 玻璃、微晶玻璃和硅四种药室中的临界距离分别增加了 4.5、3.6、4.3 和 3 倍。可见,燃

烧时间对临界距离的影响比导热系数更大。因此,应综合考虑药室材料导热系数和燃烧时间两种因素来指导阵列单元分布的设计,药室材料导热系数越低,燃烧时间越短,相同面积上阵列单元的分布数就越多。

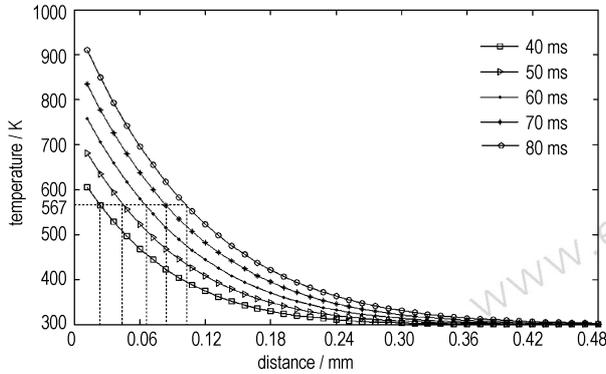


图7 不同作用时间时环氧树脂管壁温度分布

Fig. 7 Temperature distribution of epoxy resin tube wall at different combustion times

表2 不同燃烧时间下几种材料的临界距离

materials	combustion time/ms				
	40	50	60	70	80
epoxy resin	24	48	72	84	108
7740 <sup>#</sup> glass	36	60	96	120	132
microcrystal glass	36	72	96	132	156
silicon	150	250	350	400	450

考虑到模型建立中的一些假设,以及阵列制作工艺性要求,在阵列单元分布设计时药室间的距离应大于计算结果。选用环氧树脂、微晶玻璃为药室材料,在  $8\text{ mm} \times 8\text{ mm}$  的面积上集成 24 个药室,最小药室间隔为  $0.5\text{ mm}$ ,装填斯蒂酚酸铅进行实验,均未发生殉爆。

## 4 结论

建立了化学微推冲器阵列单元燃烧传热过程的数学物理模型,并根据微尺度的特点进行了模型简化,计算结果证明,所建模型可以指导化学微推冲器阵列设计。

模拟表明,药室材料的导热系数和单元燃烧时间是影响阵列单元分布的主要因素,其中单元燃烧时间影响更大,导热系数增加  $100 \sim 1000$  倍时,临界距离增加  $3.3 \sim 6.3$  倍,而燃烧时间增加一倍时,临界距离增加  $3 \sim 5$  倍。但临界距离都在微米级,硅为  $150 \sim 450\ \mu\text{m}$ ,环氧树脂、7740 玻璃和微晶玻璃为  $20 \sim 160\ \mu\text{m}$ ,所以选用低导热系数的药室材料和缩短单元燃烧时间是提

高阵列单元分布的主要途径。

## 参考文献:

- [1] 陈旭鹏,李勇,周兆英. 微小型化学能推进器的研究[J]. 微纳电子技术, 2003(7): 456 - 460.  
CHEN Xu-peng, LI Yong, ZHOU Zhao-ying. Research into micro-chemical thrusters [J]. *Micronanoelectronic Technology*, 2003 (7): 456 - 460.
- [2] 张高飞,尤政,胡松启,等. 基于 MEMS 的固体推进器阵列[J]. 清华大学学报(自然科学版), 2004,44(11): 1489 - 1492.  
ZHANG Gao-fei, YOU Zheng, HU Song-qi, et al. MEMS-based propulsion arrays with solid propellant [J]. *J Tsinghua Univ (Sci & Tech)*, 2004,44(11): 1489 - 1492.
- [3] Evgenii B, Rudnyi, Tamara Bechtold and Jan G. Solid propellant microthruster: Theory of operation and modeling strategy [C] // Nanotech 2002-at the edge of revolution AIAA paper 2002-5735, Houston, USA, 2002.
- [4] Rossi C, Esteve D. Micropyrotechnics, a new technology for marking energetic microsystems: review and prospective [J]. *Sensors and Actuators A*, 2005, 120: 297 - 310.
- [5] Makino E, Shibata T, Yamada Y. Micromachining of fine ceramics by photolithography [J]. *Sensors and Actuators A*, 1999, 75(3): 278 - 288.
- [6] 贾力,方肇洪,钱兴华. 高等传热学 [M]. 北京: 高等教育出版社, 2003.
- [7] Tamara Bechtold, Evgenii B, Rudnyi, et al. Automatic order reduction of thermo-electric module for micro-ignition unit [C] // Simulation of Semiconductor Processes and Devices, 2002.
- [8] 陈义良,张孝春,孙慈,等. 燃烧原理 [M]. 北京: 航空工业出版社, 1992.
- [9] Orioux S, Rossi C, Esteve D. Compact model based on a lumped parameter approach for the prediction of solid propellant micro-rocket performance [J]. *Sensors and Actuators A*, 2002, 101: 383 - 391.
- [10] 王伯羲,冯增国,杨荣杰. 火药燃烧理论 [M]. 北京: 北京理工大学出版社, 1997.
- [11] 周霖,刘鸿明,徐更光. 炸药激光起爆过程的准三维有限差分数值模拟 [J]. 火炸药学报, 2004, 27(1): 16 - 19.  
ZHOU lin, LIU Hong-ming, XU Geng-guang. Three-dimensional finite difference model of simulating the process of laser ignition of explosive [J]. *Chinese Journal of Explosives and Propellants*, 2004, 27(1): 16 - 19.
- [12] 张杏芬. 国外火炸药用原材料性能手册 [M]. 北京: 兵器工业出版社, 1991.
- [13] 何赞. 微推进器结构与制作工艺研究 [D]. 南京: 南京理工大学, 2008.
- [14] 刘国栋,罗福,王贵兵. 飞秒激光辐射下硅薄膜的非傅里叶能量输运研究 [J]. 高压物理学报, 2007, 21(2): 183 - 187.  
LIU Guo-dong, LUO Fu, WAN Gui-bing. Non-fourier energy transport in silicon thin films during femtosecond laser heating [J]. *Chinese Journal of High Pressure physics*, 2007, 21(2): 183 - 187.

(下转 364 页)

## Elman Model in Prediction of COD Removal Rate of Booster Explosive Wastewater

LIU Yu-cun<sup>1</sup>, YU Guo-qiang<sup>1</sup>, WANG Shao-hua<sup>2</sup>, CHANG Shuang-jun<sup>1</sup>

(1. College of Chemical Engineering and Environment, North University of China, Taiyuan 030051, China;

2. China North Vehicle Research Institute, Beijing 100072, China)

**Abstract:** In order to predict the chemical oxygen demand (COD) removal rate of the diazodinitrophenol (DDNP) wastewater treated by supercritical water oxidation (SCWO), the HXDK-01-A intermittence type supercritical water oxidation device was used to dispose the actual industrial production wastewater, and the effects of reaction temperature, reaction pressure, residence time, oxygen excess on COD removal rate were studied. A single hidden layer Elman prediction model was established by using the reaction temperature, reaction pressure, residence time, oxygen excess as input variables, and using the COD removal rate as output. The MSE of the Elman model is 0.0418, the biggest error is -0.3231, and the least error is 0.0296, the MSE of the multiple regression is 0.3149, the biggest error is 0.8830, and the least error is 0.2200. The Elman neural network prediction results are better than that of multiple regression analysis. Results show that the Elman model can be adopted to predict the COD removal rate of the wastewater treated by SCWO.

**Key words:** environmental science; supercritical water oxidation; diazodinitrophenol (DDNP); Elman neural network; wastewater treatment

(上接 360 页)

## Numerical Simulation of Array Heat Transfer of Chemical Microthruster

LIU Jian, YE Ying-hua, SHEN Rui-qi, HU Yan

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

**Abstract:** Based on the mechanism of heat transfer, a one-dimensional finite difference model describing combustion process and array heat transfer of chemical microthruster was established. With this model, the temperature growth process and temperature distribution of unit wall of epoxy resin, 7740<sup>#</sup> glass, microcrystal glass and silicon units filled with lead styphnate were obtained by numerical simulation. Results show that heat conductivity and combustion time of microthruster unit are the main factors affecting growth of temperature and integration level. Larger heat conductivity and longer combustion time lead to less microthruster unit on a same area. When heat conductivity increases by 100 - 1000 times, critical distance increases by 3.3 - 3.6 times, and when combustion time increases by 1 time, critical distance increases by 3 - 5 times. And critical distance is limited only in micron-size; silicon unit is 150 - 450  $\mu\text{m}$ , and the other three types are 20 - 160  $\mu\text{m}$ .

**Key words:** military chemistry; chemical microthruster; array; heat transfer; combustion time; numerical simulation