

Mg在CO₂/Ar混合气体中的双反应区燃烧模型研究*

胡坤, 徐义华, 田乐, 王英鹏

(南昌航空大学 飞行器工程学院 江西省微小航空发动机重点实验室, 江西 南昌 330063)

摘要: Mg粉/CO₂是实现火星探测原位资源利用的理想推进剂。针对Mg颗粒在含CO₂混合大气中燃烧, 基于火焰层假设, 建立了Mg在CO₂/Ar混合气体中的双反应区燃烧模型, 分析了Mg在CO₂/Ar燃烧过程中各组分质量分数、各组分流量、颗粒和火焰层的温度分布, 研究了环境压强、CO₂质量分数、环境温度和颗粒粒径对燃烧特性的影响。结果表明: 环境压强增大, 颗粒温度增大、火焰层温度变化不大。在环境压强低于20 kPa时, 火焰层半径随环境压强升高快速增大, 颗粒燃烧时间随环境压强升高快速变短, 随后都基本保持不变; CO₂质量分数增大, 颗粒温度与火焰层温度升高、火焰层半径减小、颗粒燃烧时间缩短; 环境温度增大, 颗粒温度变化不大、火焰层温度升高、火焰层半径减小、颗粒燃烧时间延长; 颗粒粒径增大, 颗粒温度与火焰层半径变化不大、火焰层温度降低、颗粒燃烧时间延长。

关键词: 金属燃料; Mg/CO₂燃烧模型; 火焰层半径; 火焰层温度; 燃烧时间

中图分类号: TF053 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-4055 (2024) 05-2209036-10

DOI: 10.13675/j.cnki.tjjs.2209036

1 引言

火星与地球相距遥远, 火星探测器需长时间、多任务的工作。为满足这些要求, 发动机需携带大量推进剂, 在不考虑发动机结构情况下, 推进剂质量占整个发射时飞行器质量的60%~80%^[1]。如果只靠发射时的一次供给, 推进剂无疑会有很高的发射成本。为了降低火星探测器发射成本, 人们提出原位资源利用技术^[1-3] (In Situ Resource Utilization, 简称ISRU), 即利用被探索星球资源产生能量为推进系统提供动力, 以减少从地球上携带的推进剂质量。根据NASA海盗号探测器^[3]测量数据显示, 火星大气中含有95.32% CO₂。Shafirovich等^[4]对比多种粉末燃料与CO₂点火燃烧性能, 认为镁是最理想的粉末燃料。为实现Mg/CO₂粉末火箭发动机最大限度的原位资源利用, 必须深入了解Mg粉/CO₂的燃烧特性。

Valov等^[5]将单个粒径为70~350 μm的镁颗粒放在石英支架上, 用热电偶测量颗粒温度, 得到了镁颗粒着火温度随颗粒粒径增大而降低, 随CO₂浓度增大

而降低, 随压强增大而升高。Yuasa等^[6]采用气流可调的电热炉装置进行了试验, 发现镁在CO₂环境中的点火温度随着压强的增大而升高, 在CO₂/CO混合物中的点火温度随着CO₂浓度的增大而降低。在燃烧过程中, 被氧化层包裹并受热膨胀的颗粒表面出现了间歇性火焰, 火焰处有CO生成, 镁颗粒表面与扩散来的CO₂/CO反应生成MgO和C并以多孔状沉积在颗粒表面。Dreyer等^[7]采用激光诱导荧光(PLIF)技术研究了Mg/CO₂燃烧过程中产生的MgO的分布情况。MgO的荧光出现在远离熔融的镁颗粒表面处, 并且越靠近颗粒的表面, 其荧光强度越弱, 这表明Mg/CO₂燃烧主要为气相燃烧, 并在燃烧过程中发现了脉动燃烧现象。Fukuchi等^[8]在试验装置中增加了带有小孔的镁蒸汽发生器, 并在镁蒸汽和CO₂气流之间构造出了逆流扩散的火焰。通过对燃烧过程中的光谱观察, 发现了Mg/CO₂燃烧过程中同时存在明亮火焰和暗淡火焰, 明亮区为Mg+CO₂=MgO+CO, 暗淡区为Mg+CO=MgO+C。Derevyaga^[9]采用直径为6 mm的镁颗粒, 压力控制在0.1~2 MPa内, 发现镁颗粒燃

* 收稿日期: 2023-09-03; 修订日期: 2023-10-14。

基金项目: 国家自然科学基金(51666012)。

作者简介: 胡坤, 硕士生, 研究领域为金属颗粒点火燃烧。

通讯作者: 徐义华, 博士, 教授, 研究领域为发动机工作过程仿真。E-mail: xuyihua2003@163.com

引用格式: 胡坤, 徐义华, 田乐, 等. Mg在CO₂/Ar混合气体中的双反应区燃烧模型研究[J]. 推进技术, 2024, 45(5): 2209036. (HU K, XU Y H, TIAN L, et al. Combustion model of Mg in CO₂/Ar mixture based on double reaction zone[J]. Journal of Propulsion Technology, 2024, 45(5): 2209036.)

烧时,在火焰最明亮的区域形成外层氧化层,推断是由分散的氧化产物烧结形成;同时,镁颗粒表面也会形成另外一层氧化层,称为内层氧化层,燃烧产物近似为空心球壳状。Shafirovich 和 Goldshleger 等^[10-17]将镁样品悬挂在热电偶上,插入预热的燃烧室,通过加热氧化剂点燃特征尺度为 0.64~3 mm 直径和高度相等的圆柱形镁样品,观察到微粒表面积碳的形成、镁的过热和样品破碎。在 CO₂/CO 混合物中,发现 CO₂ 含量低于 75% 时 Mg 在反应动力学上的重大变化,认为这是表面反应和气相反应之间竞争的结果;在 CO₂/Ar 混合物中 Mg 的反应区和反应时间与在 CO₂/CO 混合物中相比有显著区别,表明 CO 不是惰性稀释剂,同时直径为 1 mm 的镁样品在燃烧过程中存在颗粒温度过热现象,燃烧温度高于镁的沸点 300~400 K。Legrand 等^[18]利用电磁悬浮装置将单个粒径为 50~10 μm 镁颗粒悬浮在压力为 0.1~2 MPa 的高压燃烧器内,用激光器进行加热点火,颗粒燃烧时间随环境压强增大而减小,随 CO₂ 质量分数增大而减小。得到颗粒粒径为 50 μm~2.5 mm 在纯 CO₂ 中的燃烧时间近似为 $t = kd^2$, 其中 $k \approx 0.5 \text{ s/mm}^2$ 。Abbud 等^[19]认为燃烧过程因强对流加大了燃烧反应速度,缩短燃烧时间。为避免浮力对燃烧过程的影响,在 NASA KC-135 飞机上做了长达 20 s 的微重力燃烧实验。将 2 mm, 3 mm, 4 mm 圆柱形镁样品固定在直径 0.13 mm 热电偶上,环境压强为 0.1 MPa 的纯 CO₂, 用氙灯进行加热,摄像机和聚光仪观察和判断样品着火燃烧过程。经过 28 次试验,发现样品融化后形成球形,2 mm 样品平均燃烧时间为 5 s, 4 mm 样品平均燃烧时间为 18 s, 并总结出镁颗粒纯 CO₂ 的微重力环境下燃烧时间近似为 $t = kd^2$, 其中 $k \approx 1.0 \text{ s/mm}^2$ 。

为了减少实验研究成本,便于数值理论计算,许多学者进行了 Mg/CO₂ 着火燃烧模型研究。Rosenband 等^[20-22]提出了基于塑性理论的着火模型,由于金属热膨胀系数大于氧化膜热膨胀系数,金属随温度升高的热膨胀速度大于氧化膜的膨胀速度,金属-氧化膜界面会产生机械力,当机械力超过氧化膜塑性极限时,氧化膜破裂,颗粒着火成功,该模型无法解释环境参数对着火温度的影响。Brzustowski 和 Glassman^[23]基于液滴燃烧模型提出了 Mg/O₂ 燃烧模型,如图 1 所示,AB 之间为镁蒸汽扩散区,BC 之间为氧化剂扩散区,假设燃烧是准定常的,镁蒸汽和 O₂ 按化学当量比扩散到火焰面处瞬间反应完全,浓度均降为零。King^[24]基于 Mg/CO₂ 反应机理提出了 Mg/CO₂ 燃烧

模型,如图 2 所示,AB 之间存在 Mg 蒸汽和 CO 气体,BC 之间存在 CO 和 CO₂ 气体,并假设火焰层内 CO 分压等于总压,Mg/CO 表面反应速度由化学动力学控制,Mg/CO₂ 气相反应速度由扩散控制,即镁蒸汽和 CO₂ 以化学当量比扩散至火焰层内瞬间反应完成。该模型计算结果相对较好,但只能计算镁颗粒在纯 CO₂ 气体中燃烧,而火星大气是含 CO₂ 为 95.32% 的混合气体,King 模型无法满足镁颗粒在火星大气燃烧数值仿真要求。Law^[25]为了研究固态燃烧产物,如图 3 所示,假设燃烧产物扩散至颗粒表面不发生凝聚,在颗粒表面瞬间凝华为固态产物,附着在颗粒表面,该模型燃烧机理较为复杂,计算量大,不利于工程仿真计算。

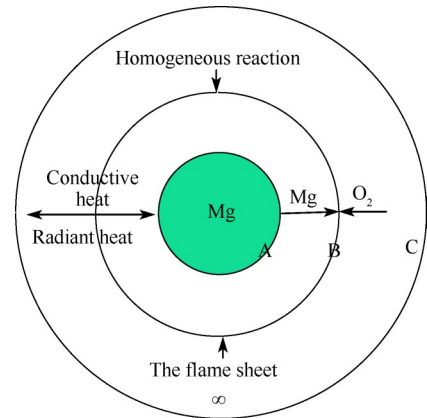


Fig. 1 B-G 燃烧模型机理示意图

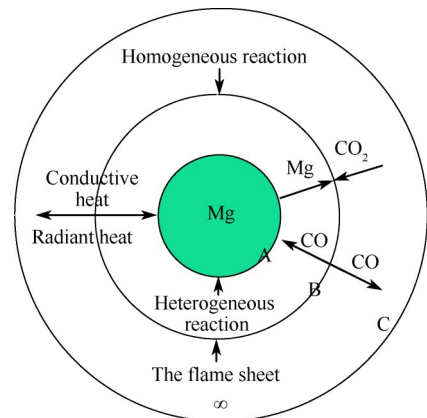


Fig. 2 King 燃烧模型机理示意图

综上所述,Mg/CO₂ 实验研究相对较多,理论模型研究相对较少,King 模型只能计算镁在纯 CO₂ 气体中燃烧,不适合模拟火星大气燃烧,基于 Law 模型计算量较大,不利于工程仿真计算。为更好数值计算镁颗粒在火星大气中燃烧,本文基于火焰层假设,建立 Mg 粉在含 Ar 气的 CO₂ 混合气氛中燃烧模型,通过组分守恒方程和能量守恒方程建立各组分质量分数、

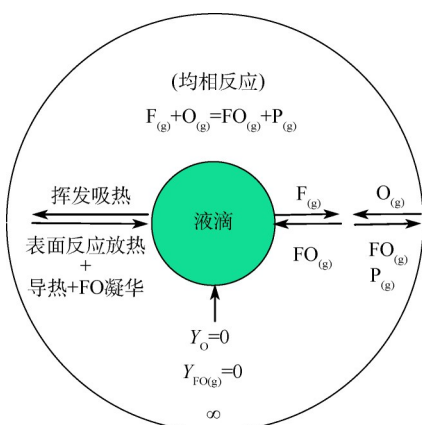


Fig. 3 Law 模型机理示意图

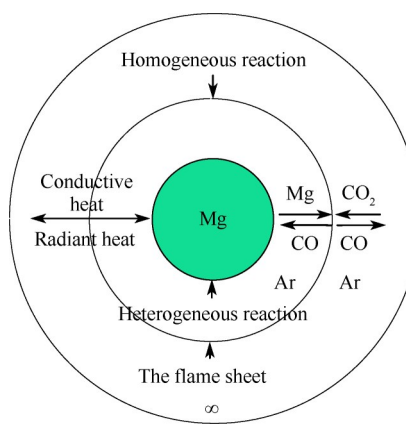


Fig. 4 火焰层燃烧机理示意图

流量和温度的关系式,计算空间各组分质量分数的分布规律、火焰层半径和温度、颗粒温度,并基于该模型研究环境压强、环境温度、颗粒粒径和 CO_2 质量分数对颗粒温度、火焰层半径和温度、燃烧时间的影响。

2 燃烧模型建立

2.1 模型假设

由于颗粒燃烧过程过于复杂,影响燃烧因素较多,为了简化燃烧模型,对整个燃烧过程做如下假设:

(1) 由于颗粒粒径小,认为颗粒呈球形且内部温度均匀。

(2) 整个环境空间被火焰层划分为两个区域,气相反应只发生在火焰层内,火焰层为无限薄的面。

(3) 燃料与氧化剂以化学当量比向火焰层扩散并在火焰层内瞬间反应完全。

2.2 模型机理

基于以上假设,环境空间被火焰层划分为内区和外区,内外区不发生气相反应,各气体均可自由扩散。如图 4 所示,火焰层内由内区扩散而来的气态 Mg 与环境空间扩散来的 CO_2 以化学当量比瞬间反应生成 CO 和 MgO,CO 分别向内外区扩散,MgO 沉淀不参与组分运输,Ar 分布在环境空间中,但不参加化学反应。在内区,镁液滴表面蒸发出的气态 Mg 向火焰层扩散,火焰层内化学反应生成的部分 CO 向颗粒表面扩散,CO 与镁表面反应生成 MgO 和 C,反应速度由化学反应动力学控制。在外区,环境空间中 CO_2 向火焰层扩散,火焰层内化学反应生成的部分 CO 向环境空间扩散,颗粒温度受火焰层导热、辐射换热、表面异相反应放热和蒸发吸热控制,火焰层受颗粒与环境空间导热、辐射换热和均相反应放热控制,颗粒与

火焰层均处于受热平衡。

2.3 模型控制方程

根据假设 2,内外区只存在对流扩散,根据各组分质量守恒,扩散项和对流项的和为零,得到各组分方程为

$$m_T \frac{dY_i}{dr} - \frac{d}{dr} \left(4\pi r^2 \rho D \frac{dY_i}{dr} \right) = 0 \quad (1)$$

式中,第一项为对流项,第二项为扩散项, m_T 为混合气体的总质量流量, Y_i 为组分 i 的质量分数, r 为空间点到球心的距离, ρ 为混合气体的密度, D 为分子扩散系数。

由于内外区不存在气相反应,根据能量守恒,扩散项和对流项的和为零,得到能量方程为

$$m_T c_p \frac{dT}{dr} - \frac{d}{dr} \left(4\pi r^2 \lambda \frac{dT}{dr} \right) = 0 \quad (2)$$

式中,第一项为对流项,第二项为扩散项, c_p 为混合气体的定压比热容, T 为该混合气体在该点的温度, λ 为混合气体的热导率。

根据假设 2,整个环境空间由火焰层分割分为内区和外区。

根据内区边界条件得到式(3)~(6)

当 $r = r_s$ 时

$$m_i = m_{T,i} Y_i^s - 4\pi r_s^2 \rho D \frac{dY_i^s}{dr} \quad (3)$$

式中 r_s 为镁颗粒半径, m_i 为组分 i 由颗粒表面向环境扩散的质量流量, $m_{T,i}$ 为内区混合气体由颗粒表面向环境扩散的总质量流量, Y_i^s 为组分 i 在颗粒表面的质量分数,字母上标 s 为颗粒表面。

由于整个过程属于准稳态,内区惰性气体不参加反应,则内区惰性气体由颗粒表面向火焰层扩散的质量流量为

$$m_{Ar,i} = 0 \quad (4)$$

当 $r = r_f$ 时

$$Y_{\text{CO}_2}^f = 0 \quad (5)$$

$$Y_{\text{Mg}}^f = 0 \quad (6)$$

式中 $Y_{\text{CO}_2}^f$ 为 CO₂ 在火焰层内的质量分数, Y_{Mg}^f 为镁蒸汽在火焰层内的质量分数。

根据外区边界条件得到式(7)~(10)

当 $r \rightarrow \infty$ 时

$$Y_{\text{CO}_2}^\infty = 1 - x_1 \quad (7)$$

$$Y_{\text{CO}}^\infty = 0 \quad (8)$$

$$Y_{\text{Ar}}^\infty = x_1 \quad (9)$$

式中 $Y_{\text{CO}_2}^\infty$ 为环境中 CO₂ 的质量分数, Y_{CO}^∞ 为环境中 CO 的质量分数, Y_{Ar}^∞ 为环境中惰性气体的质量分数。

由于整个过程属于准稳态, 惰性气体不参加反应, 外区惰性气体由火焰层向环境扩散的质量流量为

$$m_{\text{Ar},2} = 0 \quad (10)$$

根据组分方程(1)和边界方程(3), (6)得到镁蒸汽关系式为

$$\ln\left(\frac{-m_{\text{Mg}}}{m_{\text{T},1}Y_{\text{Mg}}^s - m_{\text{Mg}}}\right) = \frac{m_{\text{T},1}}{4\pi\rho D}\left(\frac{1}{r_s} - \frac{1}{r_f}\right) \quad (11)$$

式中 m_{Mg} 为镁蒸汽由颗粒表面向环境扩散的质量流量, Y_{Mg}^s 为镁蒸汽在颗粒表面的质量分数。

根据组分方程(1)和边界条件(3)得到内区 CO 关系式为

$$\ln\left(\frac{m_{\text{T},1}Y_{\text{CO}}^f - m_{\text{CO},1}}{m_{\text{T},1}Y_{\text{CO}}^s - m_{\text{CO},1}}\right) = \frac{m_{\text{T},1}}{4\pi\rho D}\left(\frac{1}{r_s} - \frac{1}{r_f}\right) \quad (12)$$

式中 Y_{CO}^f 为 CO 在火焰层的质量分数, $m_{\text{CO},1}$ 为内区 CO 由颗粒表面向环境扩散的质量流量, Y_{CO}^s 为 CO 在颗粒表面的质量分数。

根据组分方程(1)和边界条件(3), (4)得到内区惰性气体关系式为

$$\ln\left(\frac{Y_{\text{Ar}}^f}{Y_{\text{Ar}}^s}\right) = \frac{m_{\text{T},1}}{4\pi\rho D}\left(\frac{1}{r_s} - \frac{1}{r_f}\right) \quad (13)$$

式中 Y_{Ar}^f 为惰性气体在火焰层的质量分数, Y_{Ar}^s 为惰性气体在颗粒表面的质量分数。

根据道尔顿分压定律和克拉伯龙方程, 得到颗粒表面镁蒸汽的质量分数为

$$Y_{\text{Mg}}^s = \frac{M_{\text{Mg}}}{M} \frac{p_{\text{ref}}}{p} \exp\left(\frac{Q_{\text{va}}}{R}\left(\frac{1}{T_{\text{ref}}} - \frac{1}{T_s}\right)\right) \quad (14)$$

式中 M_{Mg} 为镁的相对分子质量, M 为混合气体的相对分子质量, p_{ref} 为参考气压, p 为环境压强, Q_{va} 为固态镁的蒸发潜热, R 为气体常数, T_{ref} 为参考气压下镁的沸点, T_s 为颗粒温度。

根据内区组分守恒, 即 CO 质量流量等于单位时间内颗粒表面 CO 反应消耗, 得到 CO 质量流量为

$$m_{\text{CO},1} = -4\pi r_s^2 \rho Y_{\text{CO}}^s A_2 \exp(-E_2/(RT_s)) \quad (15)$$

式中 Y_{CO}^s 为 CO 在颗粒表面的质量分数, A_2 为 CO 与镁发生化学反应的指前因子, E_2 为 CO 与镁发生化学反应的活化能。

由于内区气体总质量不变, 内区质量流量为

$$m_{\text{T},1} = m_{\text{Mg}} + m_{\text{CO},1} + m_{\text{Ar},1} \quad (16)$$

根据组分方程(1)和边界条件(5), (7)得到 CO₂ 关系式为

$$\ln\left(\frac{m_{\text{T},2}(1 - x_1) - m_{\text{CO}_2}}{-m_{\text{CO}_2}}\right) = \frac{m_{\text{T},2}}{4\pi\rho D} \frac{1}{r_f} \quad (17)$$

式中 $m_{\text{T},2}$ 为外区混合气体的总质量流量, m_{CO_2} 为外区 CO₂ 由火焰层向环境扩散的质量流量。

根据组分方程(1)和边界条件(8)得到外区 CO 关系式为

$$\ln\left(\frac{-m_{\text{CO},2}}{m_{\text{T},2}Y_{\text{CO}}^f - m_{\text{CO},2}}\right) = \frac{m_{\text{T},2}}{4\pi\rho D} \frac{1}{r_f} \quad (18)$$

式中 $m_{\text{CO},2}$ 为外区 CO 由火焰层向环境扩散的质量流量。

根据组分方程(1)和边界条件(9), (10)得到惰性气体关系式为

$$\ln\left(\frac{x_1}{Y_{\text{Ar}}^f}\right) = \frac{m_{\text{T},2}}{4\pi\rho D} \frac{1}{r_f} \quad (19)$$

由于外区气体总质量不变, 外区质量流量为

$$m_{\text{T},2} = m_{\text{CO}_2} + m_{\text{CO},2} + m_{\text{Ar},2} \quad (20)$$

根据火焰层内镁蒸汽摩尔流量等于 CO₂ 摩尔流量, 得到

$$\frac{m_{\text{Mg}}}{M_{\text{Mg}}} = -\frac{m_{\text{CO}_2}}{M_{\text{CO}_2}} \quad (21)$$

根据 CO 生成速度等于 CO₂ 消耗速度得到

$$\frac{(m_{\text{CO},1} - m_{\text{CO},2})}{M_{\text{CO}}} = \frac{m_{\text{CO}_2}}{M_{\text{CO}_2}} \quad (22)$$

式中 M_{CO_2} 为 CO₂ 的相对分子质量, M_{CO} 为 CO 的相对分子质量。

根据颗粒的能量守恒得到

$$m_{\text{Mg}}Q_{\text{va}} = -m_{\text{CO},1}Q_{\text{re2}} + 4\pi r_s^2 \varepsilon \sigma (T_f^4 - T_s^4) + \frac{c_p m_{\text{T},1} (T_f - T_s)}{\left(\exp\left(\frac{c_p m_{\text{T},1}}{4\pi\lambda}\left(\frac{1}{r_s} - \frac{1}{r_f}\right)\right) - 1\right)} \quad (23)$$

根据火焰层能量守恒得到

$$m_{Mg} Q_{re1} = 4\pi r_s^2 \varepsilon \sigma (T_f^4 - T_s^4) + 4\pi r_f^2 \varepsilon \sigma (T_f^4 - T_\infty^4) + \frac{c_p m_{T,1} (T_f - T_s)}{\left(1 - \exp\left(\frac{c_p m_{T,1}}{4\pi\lambda} \left(\frac{1}{r_f} - \frac{1}{r_s}\right)\right)\right)} + \frac{c_p m_{T,2} (T_f - T_\infty)}{\exp\left(\frac{c_p m_{T,2}}{4\pi r_f \lambda}\right) - 1} \quad (24)$$

式中 Q_{re1} 为镁蒸汽与 CO_2 化学反应放热量, Q_{re2} 为 CO 与液态镁化学反应放热量, ε 为颗粒表面发射率, σ 为黑体辐射常数。

镁颗粒因蒸发和表面反应而消耗的质量速率为

$$w_{Mg} = m_{Mg} - \frac{m_{CO,1} M_{Mg}}{M_{CO}} \quad (25)$$

镁颗粒因消耗而半径随反应时间变化关系为

$$4\pi r^2 \rho_{Mg} \frac{dr}{dt} = -w_{Mg} \quad (26)$$

2.4 镁在 CO_2 中反应数值计算方法

为了便于数值仿真计算,初始粒径 r_s ,环境温度 T_∞ ,环境压强 p_∞ 为已知数,颗粒初始时间 $t = 0$,镁颗粒在 CO_2 中燃烧共有 12 个控制方程, (11)~(12), (14)~(18)和(20)~(24),其中方程(12), (18)和(22)并不都独立,仅有两个方程独立,因此燃烧控制方程有 11 个独立的方程。方程中需要求解的未知数共有 11 个,即 $Y_{Mg}^s, Y_{CO}^s, m_{Mg}, m_{CO,1}, m_{CO,2}, m_{CO_2}, r_f, m_{T,1}, m_{T,2}, T_s, T_f$, 可通过牛顿法数值迭代求解非线性十一元方程组,得到各参数的值,通过方程(25)得到镁颗粒质量消耗速度,采用显式欧拉法求解一阶微分方程(26),得到镁颗粒半径随燃烧时间的关系,得到镁颗粒在预设工况下的燃烧时间。

2.5 镁在 CO_2/Ar 混合气体中反应数值计算方法

镁在 CO_2/Ar 混合气体反应与镁在 CO_2 中反应数值方法类似,但整个空间存在惰性气体,增加三个未知数,即 $Y_{Ar}^s, Y_{CO}^f, Y_{Ar}^f$, 此时方程(12), (18)和(22)相互独立,燃烧控制方程共有 14 个独立的方程,即式(11)~(24),需要求解的未知数共有 14 个,即 $Y_{Mg}^s, Y_{CO}^s, Y_{Ar}^s, m_{Mg}, m_{CO,1}, Y_{CO}^f, Y_{Ar}^f, m_{CO,2}, m_{CO_2}, r_f, m_{T,1}, m_{T,2}, T_s, T_f$, 可采用镁在 CO_2 中反应的数值计算方法对预设工况仿真计算。

2.6 模型精度校核

Legrand 等^[18]通过实验得到镁颗粒粒径在纯 CO_2 中的燃烧时间近似为 $t = kd^2$, 其中 $k \approx 0.5 \text{ s/mm}^2$ 。Abbud 等^[19]认为强对流加大了燃烧反应速度,缩短燃烧时间,并在微重力, 101 325 Pa 环境压强下进行了 Mg/CO_2 中实验,得到燃烧时间是常重力的两倍,总结

出镁颗粒在纯 CO_2 的微重力环境下燃烧时间近似为 $t = kd^2$, 其中 $k \approx 1.0 \text{ s/mm}^2$ 。

为了更好地验证模型精度,假设环境压强 $p_\infty = 101\ 325 \text{ Pa}$,环境温度 $T_\infty = 1\ 300 \text{ K}$, CO_2 质量分数 $x_1 = 0$,颗粒粒径 $d = 0.02 \sim 2 \text{ mm}$,化学动力学常数参考文献[19],计算了不同颗粒粒径的燃烧时间,因上述模型忽略重力对燃烧影响,为保证实验与模型一致性,经模型计算与 Abbud 总结规律对比得到如图 5 所示。

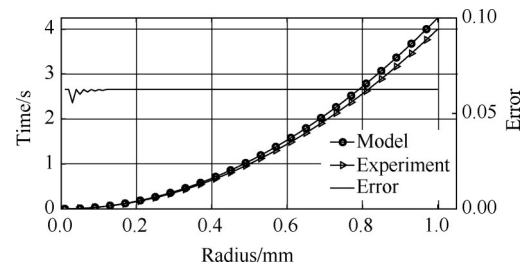


Fig. 5 基于模型计算的燃烧时间随粒径变化与实验结果的对比

由图 5 可知,模型计算燃烧时间与实验结果高度吻合,计算误差大致为 6.2%。

3 结果与讨论

3.1 燃烧过程参数分析

为更好地理解燃烧过程中各参数变化情况,假设环境压强 $p_\infty = 101\ 325 \text{ Pa}$,环境温度 $T_\infty = 1\ 300 \text{ K}$, CO_2 质量分数 $x_1 = 0$,颗粒粒径 $d = 2 \text{ mm}$, CO_2 质量分数 $x_1 = 0.1$,用上述燃烧模型计算颗粒燃烧过程,得到燃烧组分、总质量流、颗粒和火焰层半径及温度随反应时间的变化规律,分别如图 6~9 所示。

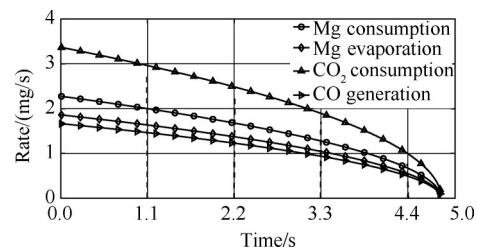


Fig. 6 各组分生成、消耗、蒸发速率随时间变化

CO 的生成速度为单位时间内 CO 向环境空间扩散的质量流量,由图 6 可知,随着反应时间延长,镁颗粒蒸发速度、 CO_2 消耗速度、镁颗粒消耗速度、CO 生成速度均减小。镁颗粒的消耗速度略微大于镁颗粒的蒸发速度,该现象的主要原因为均相反应生成的部分 CO 向颗粒表面扩散,与液态镁反应消耗镁的质

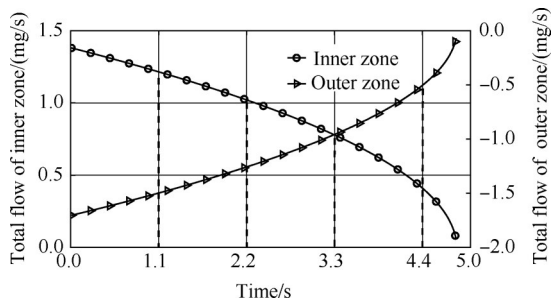


Fig. 7 内外区总流量随时间变化

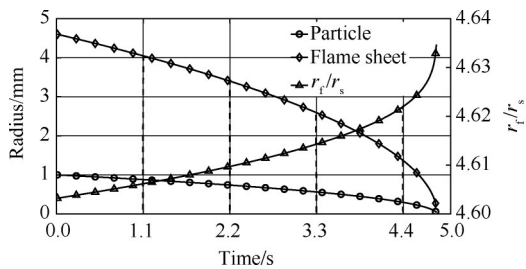


Fig. 8 颗粒、火焰层半径及其比值随反应时间变化

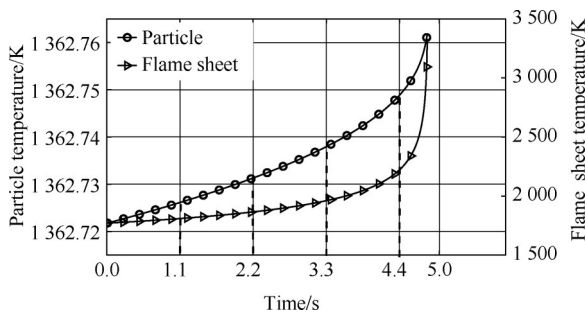


Fig. 9 颗粒、火焰层温度随反应时间变化

量,大部分 CO 向环境空间扩散。由图 7 可知,随着反应时间延长,内外区的总质量流量均减小,这主要由于颗粒粒径减小,内区镁颗粒蒸发速度减小,外区由环境向火焰层扩散的 CO₂ 流量也减小,内外区总质量流量减小。内区由颗粒表面向火焰层扩散,外区由环境空间向火焰层扩散,内区总质量扩散速度略大于外区总质量扩散速度,这主要由于 CO 与镁液滴的表面异相反应速率相对较低,火焰层内均相反应生成的 CO 少部分往颗粒表面扩散,大部分 CO 向环境空间扩散,从而导致外区的总质量流量减小。由图 8 可知,颗粒和火焰层半径均随着反应时间延长而减小,但火焰层半径与颗粒半径的比值随反应时间延长而略微增大。由图 9 可知,颗粒温度随反应时间影响不大,火焰层温度随反应时间延长而升高,且当颗粒燃烧结束前,火焰层温度快速升高,该现象主要因为颗粒随着反应时间延长,颗粒粒径减小,火焰层内反应速度由环境中 CO₂ 向火焰层的扩散速度决定,

CO₂ 的扩散速度随火焰层半径成反比关系。而火焰层的面积随火焰层半径成二次方减小。因此当颗粒粒径减小时,火焰层温度升高,且当颗粒较小时,火焰层温度会快速升高。

为更好理解该模型燃烧过程中各参数空间分布情况,选取 $t=1.1$ s 时刻空间各参数分布规律,如图 10 所示,在内区,镁蒸汽质量分数随空间距离与颗粒粒径的比值单调递减,直至为零,CO 和氩气质量分数随空间距离与颗粒粒径的比值单调递增;在外区,CO₂ 质量分数随空间距离与颗粒粒径的比值单调递增,CO 和氩气质量分数随空间距离与颗粒粒径的比值单调递减,该现象的主要原因为镁蒸汽和 CO₂ 向火焰层扩散,CO 向颗粒表面和环境空间扩散,虽然氩气流量为零,但是内外区总流量不为零,氩气质量分数存在浓度差时流量才能不变,内区总流量向火焰层流动,内区氩气质量分数随半径递增,外区总流量向火焰层扩散,外区氩气质量分数递减。

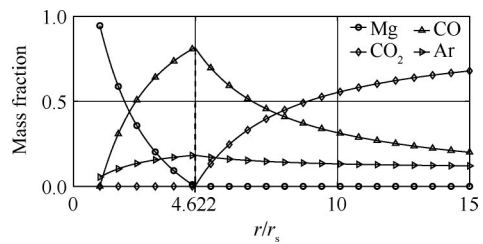


Fig. 10 $t=1.1$ s 时空间各组分质量分数随距离变化

3.2 环境压强

设环境温度 $T_{\infty} = 1300$ K, 颗粒粒径 $d = 20 \mu\text{m}$, CO₂ 质量分数 $x_1 = 0$, 环境压强 $p = 1000 \sim 101325$ Pa, 每隔 2 kPa 取一个工况, 得到各燃烧参数随环境压强变化规律如图 11~14 所示。

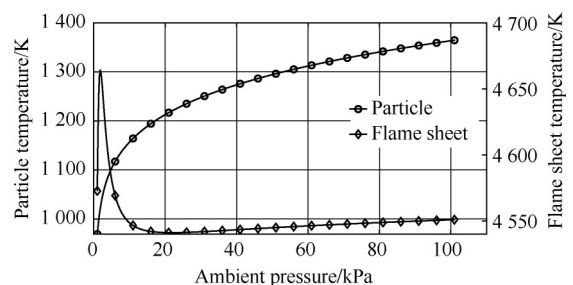


Fig. 11 颗粒温度、火焰层温度随环境压强变化

由图 11 可知,颗粒温度随环境压强升高而升高,该现象的主要原因为环境压强影响颗粒蒸发速度,环境压强升高,颗粒蒸发速度减小,颗粒蒸发吸热减小,温度升高;环境压强在低于 3 kPa 时,火焰层温度

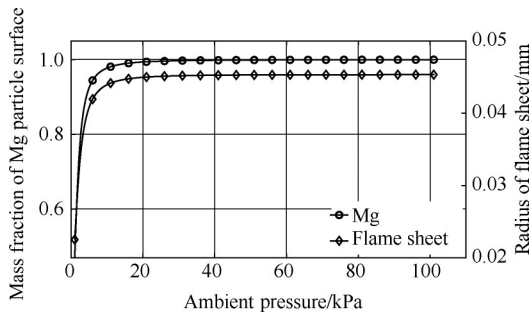


Fig. 12 颗粒表面镁蒸汽质量分数和火焰层半径随环境压强变化

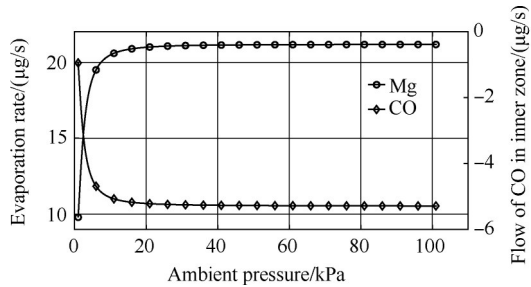


Fig. 13 镁蒸发速率和内区 CO 流量随环境压强变化

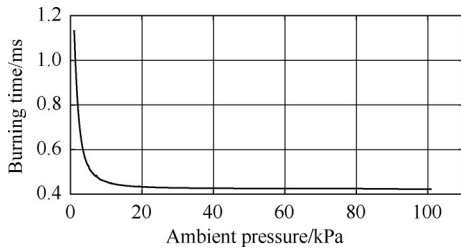


Fig. 14 燃烧时间随环境压强变化

随环境压强升高而增大,随后随环境压强增大减小,在 20 kPa 时火焰层温度最低,之后再略微增大,该现象的主要原因为环境压强较低时,火焰层温度主要由 CO_2 浓度控制,环境压强较大时,火焰层温度由火焰层半径控制,从火焰层温度变化范围可知,环境压强总体对火焰层温度影响较小。由图 12 可知,在环境压强低于 20 kPa 时,颗粒表面镁蒸汽质量分数和火焰层半径随环境压强升高增大,之后基本保持不变。由图 13 可知,颗粒蒸发速度和由火焰层向颗粒表面的 CO 流量随环境压强升高而先增大后基本保持不变。由图 14 可知,在环境压强低于 20 kPa 时,颗粒燃烧时间随环境压强升高快速减小,随后基本保持不变,该现象的主要原因为颗粒消耗速度等于镁颗粒蒸发速度和 CO 表面反应消耗速度总和,而颗粒蒸发速度和由火焰层向颗粒表面的 CO 流量随环境压强先增大后基本保持不变。

3.3 环境温度

设环境压强 $p = 101\,325\text{ Pa}$, 颗粒粒径 $d = 20\ \mu\text{m}$,

CO_2 质量分数 $x_1 = 0$, 环境温度为 $T_\infty = 850\sim 2\,000\text{ K}$, 通过上述模型计算,得到各燃烧参数随环境温度变化规律如图 15~18 所示。

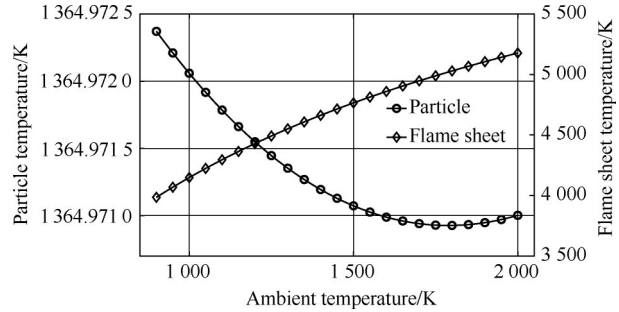


Fig. 15 颗粒温度、火焰层温度随环境温度变化

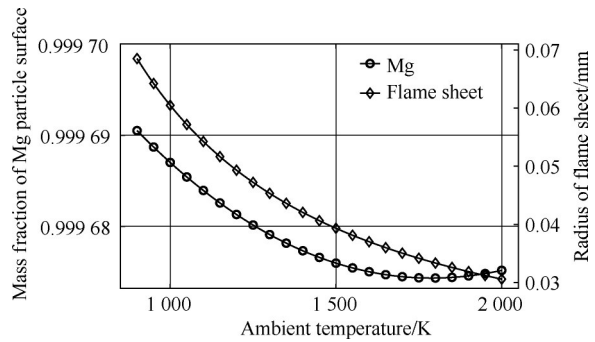


Fig. 16 颗粒表面镁蒸汽质量分数和火焰层半径随环境温度变化

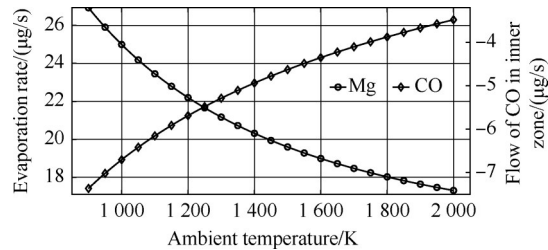


Fig. 17 镁蒸发速率和内区 CO 流量随环境温度变化

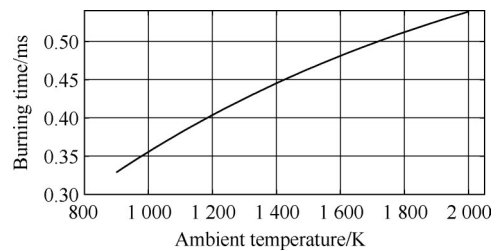


Fig. 18 燃烧时间随环境温度变化

由图 15 可知,环境温度升高,颗粒温度保持在约 1365 K 基本不变;火焰层温度随环境温度升高而升高。由图 16 可知,颗粒表面镁蒸汽质量分数随环境温度升高总体不变;火焰层半径随环境温度升高而减小。由图 17 可知,镁蒸发速度和内区由火焰层向

颗粒表面扩散的 CO 流量随环境温度升高而减小。由图 18 可知,颗粒燃烧时间随环境温度升高而增大。

3.4 颗粒粒径

设环境温度为 $T_{\infty}=1\ 300\ \text{K}$,环境压强 $p=101\ 325\ \text{Pa}$,CO₂质量分数 $x_1 = 0$,颗粒粒径 $d = 0.02\sim 3\ \text{mm}$,通过上述模型计算,得到各燃烧参数随颗粒粒径变化规律如图 19~22 所示。

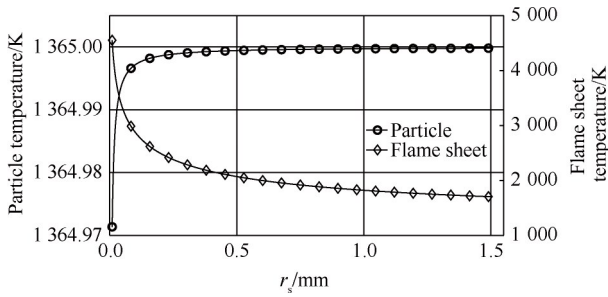


Fig. 19 颗粒温度、火焰层温度随颗粒粒径变化

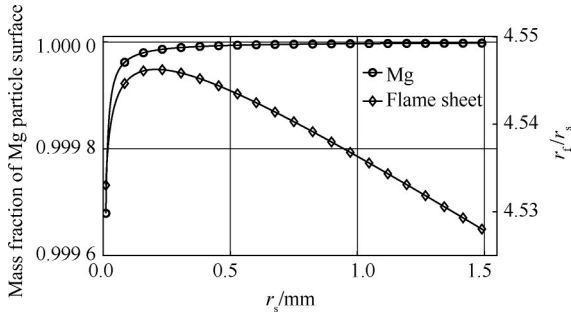


Fig. 20 颗粒表面镁蒸汽质量分数和火焰层半径随颗粒粒径变化

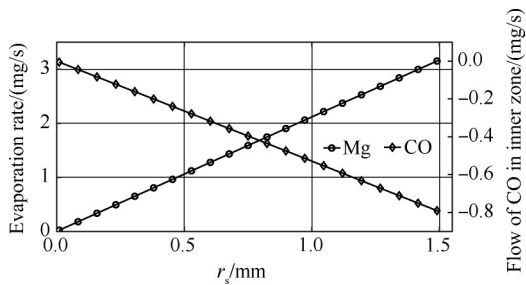


Fig. 21 镁蒸发速率和内区 CO 流量随颗粒粒径变化

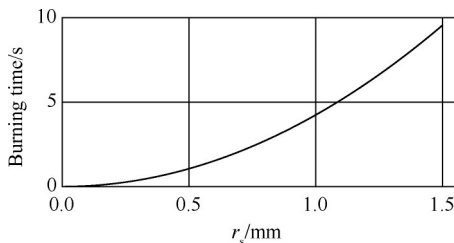


Fig. 22 燃烧时间随颗粒粒径变化

由图 19 可知,颗粒粒径增大,颗粒温度保持在约 1 365 K 基本不变;火焰层温度随颗粒粒径增大而减

小。由图 20 可知,颗粒表面镁蒸汽质量分数随颗粒粒径增大总体不变;火焰层半径与颗粒半径比值随颗粒粒径增大总体不变。由图 21 可知,镁颗粒蒸发速度和内区由火焰层向颗粒表面扩散的 CO 流量随颗粒粒径近似为线性增大。由图 22 可知,颗粒燃烧时间随颗粒粒径增大而延长,两者关系近似为抛物线,该现象的主要原因为颗粒质量随颗粒粒径呈三次方关系,颗粒消耗速度随颗粒粒径呈线性关系,因此镁颗粒的燃烧时间随颗粒粒径呈二次方关系,即颗粒燃烧时间随颗粒半径呈抛物线关系。

3.5 CO₂质量分数

设环境温度为 $T_{\infty}=1\ 300\ \text{K}$,环境压强 $p=101\ 325\ \text{Pa}$,颗粒粒径 $d = 20\ \mu\text{m}$,CO₂质量分数 $x_1 = 0.5\sim 0.98$,通过上述模型计算,得到各燃烧参数随 CO₂质量分数的变化规律如图 23~26 所示。

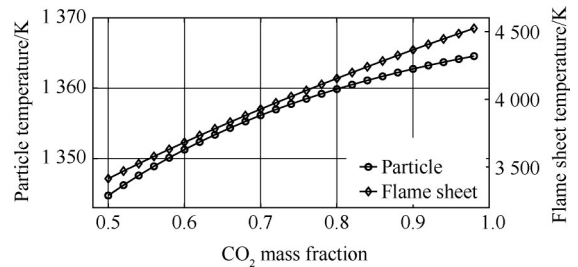


Fig. 23 颗粒温度、火焰层温度随 CO₂质量分数变化

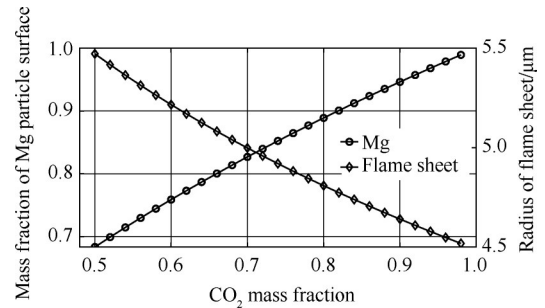


Fig. 24 颗粒表面镁蒸汽质量分数和火焰层半径随 CO₂质量分数变化

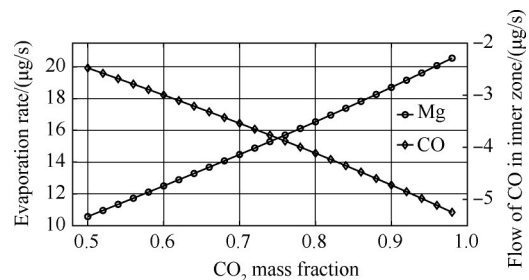


Fig. 25 镁蒸发速率和内区 CO 流量随 CO₂质量分数变化

由图 23 可知,颗粒、火焰层温度均随 CO₂质量分数增大而升高。由图 24 可知,颗粒表面镁蒸汽质量

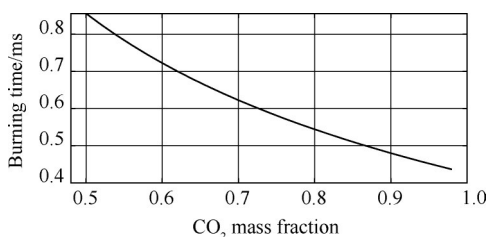


Fig. 26 燃烧时间随CO₂质量分数变化

分数随CO₂质量分数增大而增大;火焰层半径随CO₂质量分数增大而减小。由图25可知,镁颗粒蒸发速度和内区由火焰层向颗粒表面扩散的CO流量随CO₂质量分数增大而增大。由图26可知,颗粒燃烧时间随CO₂质量分数增大而减小。

4 结论

为研究Mg颗粒在CO₂混合气体中燃烧,扩充King模型数值应用范围基于火焰层假设,考虑了颗粒受导热、辐射、CO表面反应放热和蒸发吸热的影响,火焰层温度受均相反应放热、内外区导热和辐射的影响,建立了Mg粉与混合气体(Ar/CO₂)燃烧模型。采用预设工况,分析了燃烧过程中各参数随反应时间的变化规律,并研究了环境参数对燃烧过程的影响,得到如下结论:

(1)环境压强增大,颗粒温度增大、火焰层温度变化不大,在环境压强低于20 kPa时,火焰层半径随环境压强升高快速增大,颗粒燃烧时间随环境压强升高快速缩短,随后都基本保持不变。

(2)CO₂质量分数增大,颗粒温度与火焰层温度升高,火焰层半径减小,颗粒燃烧时间变短。

(3)环境温度增大,颗粒温度基本不变、火焰层温度升高、火焰层半径减小、颗粒燃烧时间延长。

(4)颗粒粒径增大,颗粒温度与火焰层半径基本不变、火焰层温度降低、颗粒燃烧时间延长。

致谢:感谢国家自然科学基金的资助。

参考文献

- [1] LANDIS G A, LINNE D L. Mars rocket vehicle using in situ propellants[J]. *Journal of Spacecraft and Rockets*, 2001, 38(5): 730-735.
- [2] ACCETTURA A G, BRUNO C, CASOTTO S, et al. Mission to Mars using integrated propulsion concepts: considerations, opportunities, and strategies[J]. *Acta Astronautica*, 2004, 54(7): 471-486.
- [3] FOOTE J P, LITCHFORD R J. Powdered magnesium: carbon dioxide combustion for Mars propulsion[C]. Tuc-

son: 41st AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit, 2005.

- [4] SHAFIROVICH E Y, GOLDSHLEGER U I. Comparison of potential fuels for martian rockets using CO[J]. *Journal of Propulsion and Power*, 1997, 13(3): 395-397.
- [5] VALOV A E, GUSACHENKO E I, SHEVTSOV V I. The effect of CO₂ pressure and concentration on the ignition of single Mg particles in C-Ar mixtures[J]. *Combustion Explosion and Shock Waves*, 1992, 28(1): 7-10.
- [6] YUASA S, FUKUCHI A. Ignition and combustion of magnesium in carbon dioxide streams[J]. *Symposium on Combustion*, 1994, 25(1): 1587-1594.
- [7] DREYER C B, DAILY J W, ABBUD-MADRID A, et al. Planar laser induced fluorescence measurements of magnesium oxide during combustion of magnesium with oxygen and carbon dioxide[C]. USA: 39th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, 2001.
- [8] FUKUCHI A, KAWASHIMA M, YUASA S. Combustion characteristics of Mg/CO₂ counterflow diffusion flame[J]. *Symposium on Combustion*, 1996, 26(2): 1945-1951.
- [9] DEREVYAGA M E. Effect of pressure on magnesium combustion[J]. *Combustion Explosion and Shock Waves*, 1983, 19(1): 31-35.
- [10] SHAFIROVICH E Y, GOLDSHLEGER U I. Ignition and burning of magnesium particles in gaseous oxides of carbon[J]. *Combustion, Explosion and Shock Waves*, 1990, 26(1): 1-7.
- [11] SHAFIROVICH E Y, GOLDSHLEGER U I. The superheat phenomenon in the combustion of magnesium particles[J]. *Combustion and Flame*, 1992, 88: 425-432.
- [12] SHAFIROVICH E Y, GOLDSHLEGER U I. Combustion of magnesium particles in CO₂/CO mixtures[J]. *Combustion Science and Technology*, 1992, 84: 33-43.
- [13] SHAFIROVICH E Y, SHIRYAEV A A, GOLDSHLEGER U I. Magnesium and carbon dioxide: a rocket propellant for Mars missions[J]. *Journal of Propulsion and Power*, 1993, 9(2): 197-203.
- [14] SHAFIROVICH E Y, GOLDSHLEGER U I. Combustion of magnesium particles in carbon dioxide and monoxide[C]. San Diego: 31st Joint Propulsion Conference and Exhibit, 1995.
- [15] SHAFIROVICH E Y, GOLDSHLEGER U I. Pulsating combustion of magnesium particles in CO[J]. *Combustion Science and Technology*, 1998, 135: 241-254.
- [16] GOLDSHLEGER U I, SHAFIROVICH E Y. Combustion regimes of magnesium in carbon oxides. 1. combustion in CO₂[J]. *Combustion, Explosion and Shock Waves*, 1999, 35(6): 637-644.
- [17] GOLDSHLEGER U I, SHAFIROVICH E Y. Combustion

- regimes of magnesium in carbon oxides. 2. combustion in CO [J]. *Combustion, Explosion and Shock Waves*, 2000, 36(2): 220–226.
- [18] LEGRAND B, SHAFIROVICH E. Ignition and combustion of levitated magnesium particles in carbon dioxide[J]. *Symposium on Combustion*, 1998, 27(2): 2413–2419.
- [19] ABBUD-MADRID A, MODAK A, BRANCH M C, et al. Combustion of magnesium with carbon dioxide and carbon monoxide at low gravity[J]. *Journal of Propulsion and Power*, 2015, 17(4): 852–859.
- [20] ROSENBAND V I, VAGANOVA N I. A strength model of heterogeneous ignition of metal particles[J]. *Combustion and Flame*, 1992, 88(1): 113–118.
- [21] ROSENBAND V I, GANY A, TIMNAT Y M. A model for low-temperature ignition of magnesium particles [J]. *Combustion Science and Technology*, 1995, 105(4/6): 279–294.
- [22] ROSENBAND V I. Thermo-mechanical aspects of the heterogeneous ignition of metals [J]. *Combustion and Flame*, 2004, 137(3): 366–375.
- [23] BRZUSTOWSKI T A, GLASSMAN I. Vapor-phase diffusion flames in the combustion of magnesium and aluminum: I. analytical developments[J]. *Progress in Astronautics and Rocketry*, 1964, 15: 75–115.
- [24] KING M K. A simplified two-reaction zone model of magnesium combustion in carbon dioxide[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2002, 29(2): 2931–2938.
- [25] LAW C K. A simplified theoretical model for the vapor-phase combustion of metal particles[J]. *Combustion Science and Technology*, 1973, 7(5): 197–212.

(编辑:白 鹭)

Combustion model of Mg in CO₂/Ar mixture based on double reaction zone

HU Kun, XU Yihua, TIAN Le, WANG Yingpeng

(Jiangxi Key Laboratory of Micro Aeroengine, School of Aircraft Engineering,
Nanchang Hangkong University, Nanchang 330063, China)

Abstract: Mg powder/CO₂ is an ideal propellant for in-situ resource utilization of the power plant for Mars exploration. For the combustion of Mg particles in CO₂ mixed atmosphere, a two-reaction zone combustion model for Mg in a CO₂/Ar mixture was developed based on the flame layer hypothesis, and the mass fraction and flow rate of each component, the particles and the flame layer temperature during the combustion of Mg in CO₂/Ar were analyzed, and the effects of ambient pressure, mass fraction of CO₂, ambient temperature and particle size on the combustion characteristics were investigated. The results show that the ambient pressure increases, the particle temperature increases, and the temperature of the flame layer changes little. When the ambient pressure is lower than 20 kPa, the radius of the flame layer increases rapidly with the increase of the ambient pressure, and the particle combustion time decreases rapidly with the increase of the ambient pressure, and then remains almost unchanged. With the increase of oxidant concentration, particle temperature and flame layer temperature increase, flame layer radius and particle combustion time decrease. With the increase of ambient temperature, the particle temperature changes little, the flame layer temperature increases, the flame layer radius decreases, and the particle combustion time increases. With the increase of particle size, the particle temperature and flame layer radius change little, the flame layer temperature decreases, and the particle combustion time increases.

Key words: Metal fuel; Mg/CO₂ combustion model; Flame layer radius; Flame layer temperature; Burning time

Received: 2023-09-03; Revised: 2023-10-14.

DOI: 10.13675/j.cnki. tjjs. 2209036

Foundation item: National Natural Science Foundation of China(51666012).

Corresponding author: XU Yihua, E-mail: xuyihua2003@163.com