

固体推进剂能量特性优化设计

田德余 杨 斌

摘要 本文在最小自由能法精确计算固体火箭推进剂能量特性程序的基础上,运用模式搜索优化方法^[3],编制了电子计算机程序,用该程序能算出已知组分在最高比冲或最高特征速度下的最佳配方。优化计算结果和图象法(或精确计算)所得的结果是一致的^[5]。这证明固体推进剂能量特性的优化设计是成功的,为固体推进剂配方设计提供了一种有效的计算方法。

一、前言

近年来,国内外对固体推进剂能量特性的优化设计很重视。1978年 Swaminathan 采用平衡常数公式和梯度投影优化理论确定含金属铝固体推进剂的组分最佳配比^[1],1982年他又采用罚函数优化理论,优化含金属固体推进剂的比冲^[2]。同年台湾省龙潭中山大学两位学者^[3]采用直接搜索法并与 CEC71 程序^[4]相结合,获得了使固体推进剂具有最高比冲的最佳配比。也可用快速回归处理,得到性能与组分的回归方程,再利用回归方程绘制一系列等性能三角图,从中选择最佳配比^[5]。

最优化理论和方法是近二、三十年随着电子计算机的普遍应用而发展起来的。各种优化方法很多,但基本上可分为二类。

一类是间接法(梯度法),如 Swaminathan^[2]所采用的方法。但该方法数学上比较复杂,采用平衡常数法求平衡组成有一定的缺陷,同时组分和性能参数的初始值必须分别满足质量守恒方程。

另一类是直接方法,直接使用目标性质的计算和所给目标函数的约束方程,再运用系统循环法得到最优解。网络搜索是最简单的直接法,Swaminathan^[7]采用这个方法,运用最小自由能法计算了推进剂燃烧产物的平衡组成。但这一方法对含多独立变量的目标函数,不尽合适。模式搜索方法是运用最广泛的直接法,它是通过探测搜索和模式移动达到最优点的。有人对众多的优化方法进行了比较^[8],认为模式搜索法优于梯度法;它的原理简单,容易与目标函数的求解程序结合,而且可以优化多独立变量的目标函数。

本文用模式搜索法,结合能量特性精确计算程序,探索了优化的具体方法,编制了程序,在 DPS-6 机上调试通过,优化结果与文献值^[5]一致。

二、数学分析

1. 目标函数及其约束条件

比冲又称比推力。在火箭发动机里，燃烧一公斤固体推进剂时，发动机产生的冲量称为固体推进剂的比冲量。根据火箭推进原理，比冲可由下式计算：

$$I_{sp} = \left[\frac{2J}{g} (H_c - H_e) \right]^{1/2} \quad (1)$$

这就是本文要优化的目标函数，

这里
$$H_c = \sum_{i=1}^m N_i H_{ci} \quad (2)$$

$$H_e = \sum_{i=1}^m N_i H_{ei} \quad (3)$$

$$H_i = RT(a_{i1} + a_{i2}T/2 + a_{i3}T^2/3 + a_{i4}T^3/4 + a_{i5}T^4/5 + a_{i6}/T) \quad (4)$$

上面的目标函数必须受到以下的条件约束：

a. 质量守恒方程

$$\sum_{i=1}^m \alpha_{ik} n_i - b_k = 0 \quad (5)$$

b. 能量守恒方程

$$H_c = H_p \quad (6)$$

c. 熵守恒方程

$$S_c = S_e \quad (7)$$

式中
$$S_c = \sum_{i=1}^m N_i S_i \quad (8)$$

$$S_e = \sum_{i=1}^m N_i S_i \quad (9)$$

而
$$S_i = R(a_{i1} \cdot \ln(T) + a_{i2}T + a_{i3}T^2/2 + a_{i4}T^3/3 + a_{i5}T^4/4 + a_{i7}) \quad (10)$$

d. 化学平衡

我们采用吉氏自由能作为化学平衡判据，于是

$$G_f = \sum_{i=1}^m \mu_i n_i \quad (11)$$

在满足质量守恒条件(5)下求出 G_f 的极小值，使 G_f 与方程(5)联系起来。定义

$$G = G_f + \sum_{k=1}^4 \lambda_k (b_k - \sum_{i=1}^m \alpha_{ik} n_i) = 0 \quad (12)$$

求 n_i ，并使 G 为最小值的一套方法就是最小自由能法。

本文采用了 DYKS 程序来求目标函数的值。

2. 优化方法

从方程(1)一(12)得知，目标函数可写成下面的形式：

$$I_{sp} = f(x_j) \quad j = 1, 2, \dots, l \quad (13)$$

这里 x_j 是组分 j 的重量百分数，满足条件

$$\sum_{j=1}^L x_j = 1 \quad (14)$$

利用方程(13)和(14)可以绘制如图1所示的等比冲三角图。从图中可见，等比冲线是连续的，互不交叉。

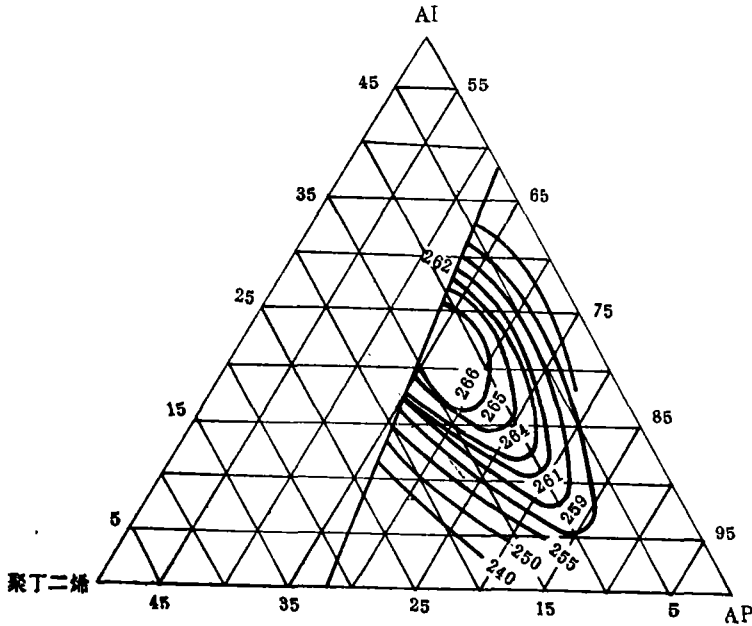


图1 聚丁二烯/过氯酸铵/铝推进剂成份—理论比冲图 (Pc/Pe = 70/1, 最佳膨胀, 0°半角)

本文就是采用优化方法确定一组成份 (x_1, x_2, \dots, x_l) 值, 使比冲 (I_{sp}) 为最高。

模式搜索法优化具体步骤如下:

- (1) 选择优化目标 I_{sp}
- (2) 选择步长 r 、初始组分配比 (x_1, x_2, x_3) 和循环次数 n 。
置 $i = 1, j = 1, m = 1$
- (3) 调用 DYKS 程序计算比冲 I_{sp}
- (4) 如果 $j = 1$, 进到(5)
如果 $j \neq 1$, 进到(6)
- (5) 置 $I_{sp}^* = I_{sp}, x_K^* = x_K (K = 1, 2, 3)$ 进到(8)
- (6) 如果 $I_{sp} > I_{sp}^*$, 回到(5)
如果 $I_{sp} < I_{sp}^*$, 进到(7)
- (7) 如果 $j = 2$, 置 $r = -r$, 进到(8)
如果 $j \neq 2$
(i) 若 $i < 3$, 置 $i = i + 1, j = 1$, 回到(5)。
(ii) 若 $i > 3$, 进到(9)。
- (8) 计算 $x_i = x_i^* + r$ 和

$$x_k = x_k^* (1 - x_i) (1 - x_l^*)$$

$$x_l = 1 - x_i - x_k$$

k, i, l 互不相等。

$j = j + 1$, 回到(3)

(9) 置 $m = m + 1$

如果 $m \leq n$, 置 $i = 1, j = 1$ 回到(8)

如果 $m > n$, 结束循环, 获得最佳配比 (x_1^*, x_2^*, x_3^*) , 此时比冲 (I_{sp}^*) 为最高比冲。

上述步骤可用框图表示, 见图 2。

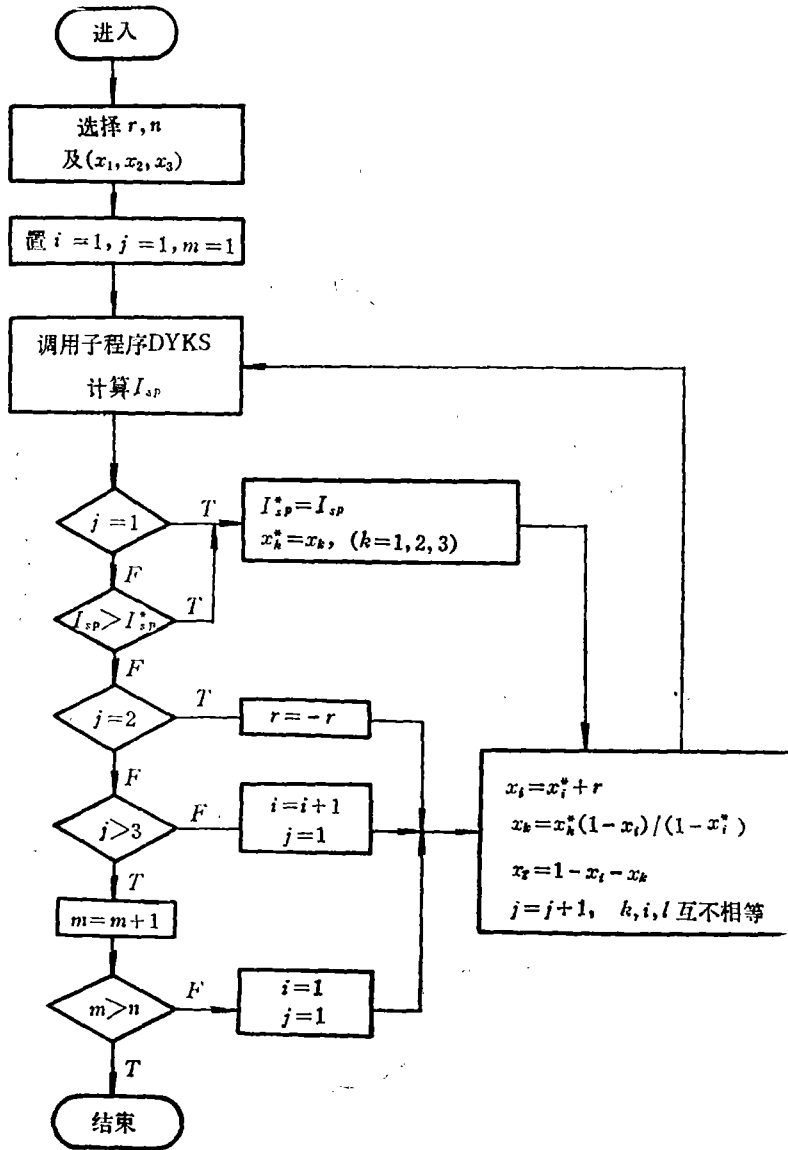


图 2 采用模式搜索法对推进剂能量特性优化的框图

三、优化结果与讨论

本文对两种不同类型的固体推进剂,着重进行了比冲的优化运算。还对 TN/HTPB/HMX 无烟固体推进剂体系进行了特征速度的优化。

1. TN/HTPB/HMX 无烟固体推进剂能量特性参数 (I_p 和 C^*) 的优化结果与比较

本文着重对 TN/HTPB/HMX 无烟固体推进剂体系进行了优化计算。

图 3 的 TN/HTPB/HMX 等比冲三角图是在 DYKS 程序大量计算结果的基础上绘制的。由该图可以看出,优化法通过计算机一次获得的最优点与图象法给出的最优范围是一致的。为了进一步证明程序运行的可靠性,本文选择了不同的优化起点,分别进行了优化运算。从图 3 及表 1 的两组优化结果对照表明 YHP 程序是成功的。

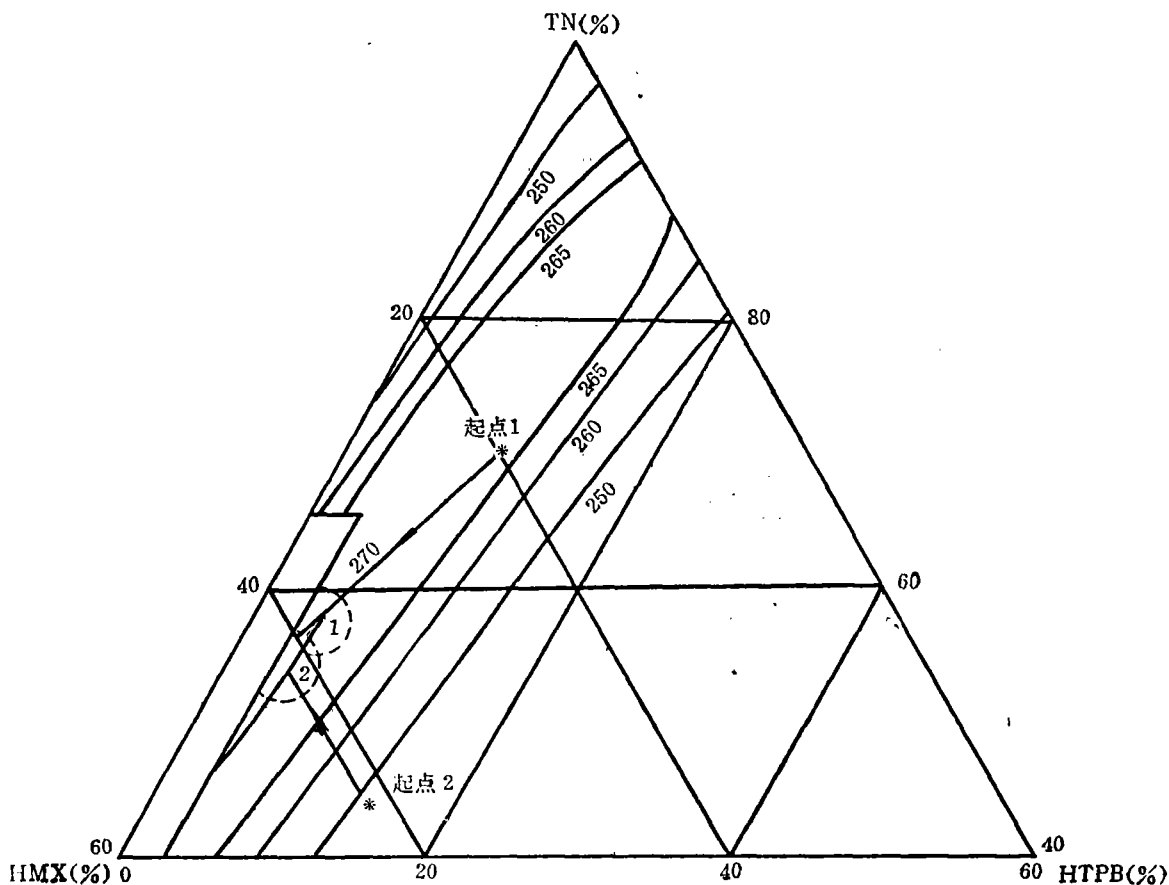


图 3 TN/HTPB/HMX 等比冲三角图

箭头所指的点: 由模式搜索法得到的最优点

表 1 TN/HTPB/HMX推进剂不同起点下比冲优化结果对照
Pc/Pe: 70.0/1.033(以下同)

输入初始组分配比		TN/HTPB/HMX 70/10/20	TN/HTPB/HMX 45/15/40
燃烧室 主要 燃烧 产物 (mol/kg)	H	0.4463	0.4427
	O	0.2684	0.2688
	CO	7.7950	7.6454
	CO ₂	6.2564	6.2106
	H ₂	1.2636	1.2745
	H ₂ O	8.3075	8.3459
	OH	1.3356	1.3388
	O	0.6829	0.6920
	NO	0.5197	0.5267
	N ₂	10.3211	10.4988
最优 配比 (%)	TN	57.23	54.44
	HTPB	4.77	4.25
	HMX	38.00	41.31
最高比冲 Isp(s)		270.08	270.14
Tc (K)		3457.4	3455.4
Te (K)		2074.8	2076.4
Q (kcal/kg)		1162.5	1162.0
C* (m/sec)		1616.8	1617.1

本文还通过程序的目标选择法,对特征速度 C^* 进行了优化,并和在大量计算数据的基础上绘制的等特征速度三角图(见图4)进行比较;在图上标出各自的优化点,表2中列出各自优化结果的详细对照。本程序不但能对比冲优化,还能对特征速度等任意参数进行优化。

表 2 特征速度 C^* 的优化结果

输入初始组分配比		TN/HTPB/HMX 70/10/20	TN/HTPB/HMX 45/15/40
燃烧室 主要 燃烧 产物 (mol/kg)	H	0.5194	0.5198
	O	0.1261	0.1280
	CO	9.2430	9.2781
	CO ₂	4.7052	4.7476
	H ₂	2.2465	2.2278
	H ₂ O	9.1146	9.0894
	OH	0.9383	0.9449
	O ₂	0.2016	0.2058
	NO	0.2850	0.2873
	N ₂	11.8438	11.7469

续表2

输入初始组分配比		TN/HTPB/HMX 70/10/20	TN/HTPB/HMX 45/15/40
最优配 比 (%)	TN	29.00	30.59
	HTPB	2.70	2.93
	HMX	68.30	66.47
最高特征速度 $C^*(m/s)$		1625.41	1625.18
T_c (K)		3392.5	3394.6
T_e (K)		1788.6	1773.1
Q(kcal/kg)		1168.8	1168.9
$I_{sp}(sec)$		268.3	268.3

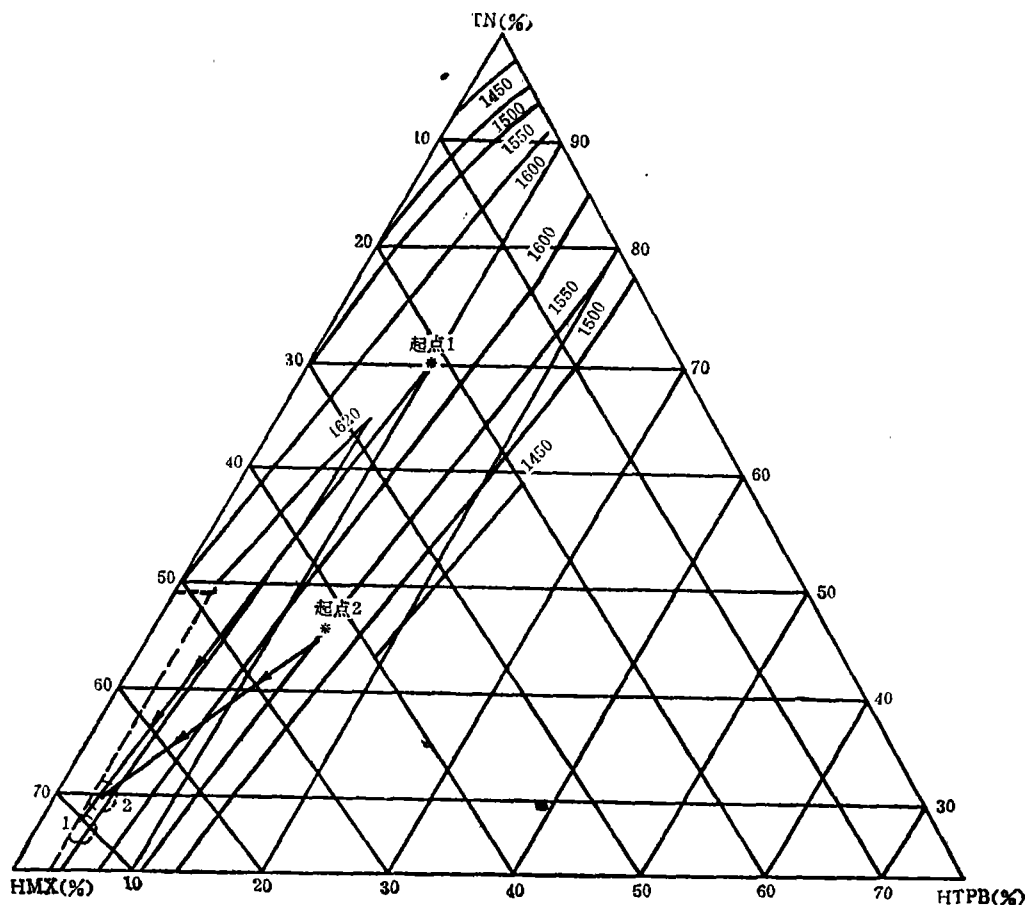


图4 TN/HTPB/HMX等特征速度三角图
箭头所指的点：最优点

2. AP/HTPB/AL 固体推进剂比冲的优化结果与比较

我们通过大量计算绘制出了 AP/HTPB/AL 复合固体推进剂的等比冲三角图(见图5)。并对 AP/HTPB/AL 推进剂进行了优化计算, 在图5上标出了不同起点下的优化点,

表 3 列出了各自优化结果详细对照。

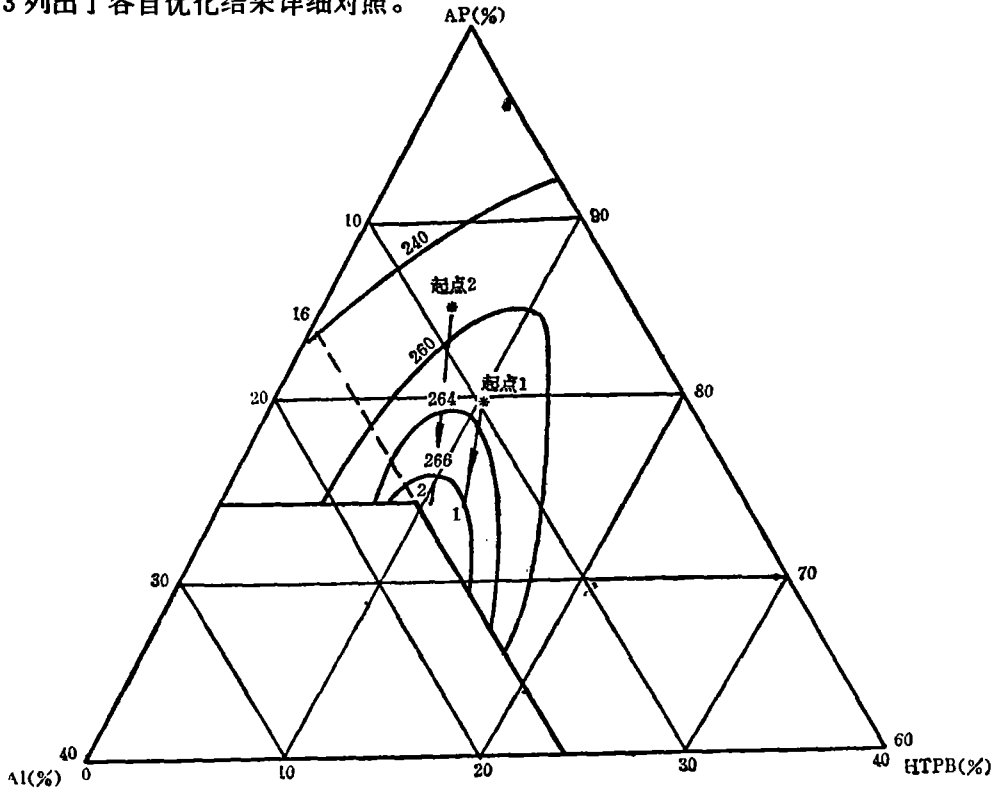


图 5 HTPB/AP/AL 等比冲三角图
箭头所指的点: 最优点

表 3 AP/HTPB/AL (<15%) 推进剂不同起点下优化结果对照

输入初始组分配比		AP/HTPB/AL 80/10/10	AP/HTPB/AL 85/7/8
燃烧室 主要 燃烧 产物 (mol/kg)	H	1.440	1.5194
	O	0.0629	0.1141
	Cl	0.6572	0.8181
	CO	7.8039	6.7108
	CO ₂	0.8347	0.9200
	HCl	5.5845	5.4939
	H ₂	8.0869	6.7837
	H ₂ O	7.118	7.718
	OH	0.6267	0.8913
	O ₂	0.022	0.0508
	NO	0.0569	0.0924
	N ₂	3.1061	3.1313
	AlCl	0.0400	0.0361
	Al ₂ O ₃	2.8324	2.700
最优 配比 (%)	AP	73.67	74.67
	HTPB	12.00	10.67
	AL	14.33	14.73

续表 3

输入初始组分配比	AP/HTPB/AL 80/10/10	AP/HTPB/AL 85/7/8
最高比冲 $I_{sp}(s)$	266.29	266.48
$T_c(K)$	3580.1	3655.1
$T_e(K)$	2097.9	2244.1
$Q(kcal/kg)$	1372.0	1389.0
$C^*(m/sec)$	1603.9	1599.6

3. 结合能量‘特性’参数简化计算法，对 HTPB/AP/AL 体系比冲的优化

用 YH 程序，调用比冲简化计算程序 YB，对 HTPB/AP/AL 推进剂体系进行优化运算。表 4 列出了优化程序调用不同的目标函数求解子程序 (YB 和 DYKS) 的优化结果。其值说明模式搜索法与目标函数的求解方法无关，是十分方便的一种优化方法。

表 4 YHP 调用不同目标函数求解子程序的优化结果对照
AP/HTPB/AL 的初始配比：85/7/8

优化结果		YHP 调用	
		YB	DYKS
最优组分配比 (%)	AP	74.63	74.67
	HTPB	10.51	10.60
	AL	14.86	14.73
最高比冲 $I_{sp}(sec)$		265.8	266.5

四、结束语

本文采用模式搜索法，结合固体推进剂能量特性计算编制了优化程序，在 DPS-6 机上调试通过，优化结果和图象法一致；该程序可以根据需要选择优化目标（或调用其他目标函数求解子程序），实现固体推进剂各种能量特性参数的优化。

符号表

A	推进剂所含元素总数
a	热力学函数温度系数
b	一公斤推进剂含某元素摩尔原子数 mol/kg
f	函数
G_f	吉布斯自由能
g	重力加速度 9.8m/sec ²
H	焓 kcal/kg
I_{sp}	比冲, sec

J	热功当量, $426.7\text{kg}\cdot\text{m}/\text{cal}$
L	推进剂组分总数
m	产物总数
n	产物摩尔数
R	通用气功常数
r	模式搜索法的步长
S	熵 $\text{cal}/\text{mol}\cdot\text{K}$
T	温度, K
x	重量分数
λ	拉格朗日乘数
α	一摩尔产物的原子数
μ	化学势 kcal/mol
C^*	推进剂特征速度 m/sec
Q	推进剂爆热 kcal/kg
	下标
c	燃烧室
e	喷出口
i	产物
j	推进剂组分
P	原始推进剂
K	元素种类

参 考 文 献

- [1] V. Swaminathan et al
Propellants, Explos. 3, 150-155(1978)
- [2] V. Swaminathan et al
Propellants, Explos. pyrotech. 7, 96~99(1982)
- [3] C.W.Chang and C.C.Tao, AIAA, 82-1190
- [4] S.Gordon and B. J. McBride, NASA, sp 273 (1971)
- [5] 田德余, 兵工学报, NO.4, 36-46 (1980)
- [6] 田德余, 化学推进剂能量学, 国防科大, 1983
- [7] V. Swaminathan et al,
propellants, Explos. 2, 94-97(1977)
- [8] E.D.Eason et al,
A Comparison of Numerical Optimization Methods for Engineering
Design, Trans. of ASME. Feb. 1974
- [9] 张 炜、田德余, 宇航学报, NO. 2, 84~90(1984)

An Optimisation Design of Energy Characteristic of Solid Propellants

Tian Deyu Yang Bin

Abstract

This paper adopts the free energy minimization technique for The calculation of theoretical rocket performance under equilibrium flow condition. According to the analysis of optimization theory, the direct search method is employed in combination with computer program. A solid propellant ingredient is obtained for maximum specific impulse and maximum characteristic velocity.

The numerical results obtained agree fairly well with the results obtained by graphical method for calculating the performance from the literature[5]. It is useful for determining the optimum composition of solid propellant systems.