

МОДЕЛИРОВАНИЕ ГОРЕНИЯ ЧАСТИЦЫ МАГНИЯ (ЗАДАЧА СТЕФАНА)

А. В. Фёдоров, А. В. Шульгин

Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН, 630090 Новосибирск
fedorov@itam.nsc.ru, shulgin@itam.nsc.ru

Предложена сопряженная распределенная математическая модель для описания воспламенения и горения частицы магния с учетом окружающей ее газовой области. Процесс горения моделируется в рамках однофазной задачи Стефана. Проведена верификация модели по известным экспериментальным значениям времен воспламенения и горения в различных условиях.

Ключевые слова: воспламенение, горение, гетерогенная химическая реакция, математическое моделирование, свободная граница.

ВВЕДЕНИЕ

Проблема физико-математического моделирования воспламенения и горения частиц металлов в стационарных условиях неподвижной атмосферы представляет значительный интерес для различных отраслей промышленности. В работе [1] представлены в основном точечные и частично одномерные нестационарные модели воспламенения мелких металлических частиц, когда процесс низкотемпературного окисления проходит на поверхности частицы. В работах [2–4] начато исследование процессов воспламенения в условиях неоднородных тепловых нагрузок, в частности, предложены распределенные математические модели воспламенения частицы магния с учетом гетерогенной химической реакции и области теплового влияния частицы на газ в одно- и двумерных постановках механики реагирующих сред. В [4] построена сопряженная математическая модель, учитывающая как воспламенение, так и горение частицы металла. При этом процесс горения частицы моделировался на основе закона d^2 (закона Срезневского), т. е. граница фронта горения считалась изменяющейся по эмпирическому закону вида $d^2 - d_0^2 = -\alpha t$, где d , d_0 — текущий и начальный диаметры капли, α — коэффициент теплообмена, t — время испарения. Данная работа посвящена исследованию описываемых процессов в рамках более общей постановки однофазной модели Стефана, когда в частице на этапе горения ищется граница фронта горения, при

этом температура частицы равна температуре горения.

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Построение математических моделей физико-химических превращений мелких частиц металлов под действием высоких температур окружающей среды в основном рассматривалось в рамках подходов, позволяющих описывать либо только воспламенение частиц, либо только их горение. Сопряженных математических моделей, одновременно учитывающих оба процесса, не так много.

Имеется, впрочем, подход к описанию данных явлений на основе математической модели механики реагирующей гетерогенной среды, когда данные процессы рассматриваются в рамках модели, не делающей различия между фазами протекания химических реакций [5]. При этом используются законы сохранения для фаз и компонентов, дополненные соответствующими уравнениями с той или иной степенью полноты описания кинетики химических превращений.

Однако и здесь встает вопрос о выделении стадии воспламенения, поскольку в эксперименте наблюдаемыми параметрами явлений служат время задержки воспламенения, предельная температура окружающей среды и др. Это означает, что необходимы некоторые критерии определения этих величин, т. е. вновь вводится разделение на две фазы протекания химической реакции.

Отметим, что в экспериментах наблюдаемым параметром является, например, время горения частиц; на стадии воспламенения мы

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 06-01-00299-а).

останавливались подробно ранее [1]. Все это позволяет, не отказываясь от использования полных кинетических схем химических превращений, применять сопряженные приведенные математические модели для изучения воспламенения и горения твердых частиц, когда процессы химического превращения описываются в две стадии.

Действительно, рассмотрим частицу магния в высокотемпературном газе. Не будем здесь останавливаться на стадии воспламенения, она получила определенное описание в [1]. Приведем ниже лишь некоторые элементарные, сложившиеся в литературе представления о горении, которые помогут нам выбрать наиболее существенные параметры порядка в разрабатываемой математической модели. При анализе комплексного процесса горения часто предполагается, что под действием высокой температуры окружающей среды на поверхности частиц протекает гетерогенная химическая реакция окисления. В то же время в некотором объеме вблизи ее поверхности имеются и пары горючего, поступившие от частицы, которые могут вступать с окислителем в гомогенные химические реакции окисления.

Существуют разные мнения о важности той или иной реакции в описании горения частицы магния [6–8]. В [6], например, утверждается, что в продуктах горения пироксилина во всем диапазоне давлений окружающей среды — от нормального до 100 атм — влиятельным процессом является гомогенная реакция окисления. Позднее в [7] на основе анализа конденсированных продуктов, образующихся при горении, например осколков полых сфер оксида, чешуек, агломератов, высказано суждение, что при давлениях меньше 20 атм режим горения существенно отличается от парофазного. Авторы [7] обстоятельно исследовали горение частицы магния при атмосферном давлении и пришли к выводу, что весь металл частицы окисляется в процессе ее раздувания. После возникающей в конце процесса световой вспышки оставались такие продукты горения, как полая сфера оксида и «ничтожное количество субмикронной окиси магния», налипшей на кварцевую трубочку, в которой проводились исследования. Такие очень мелкие частицы появляются от крайне малого количества паров металла, прорвавшегося из оболочки через трещины. По нашему мнению, вслед за высказанным ранее мнением авторов работы [7], это сви-

детельствует о ключевой роли механизма гетерогенного окисления магния при нормальном давлении. В работе [7] также приведены данные по времени горения частиц магния разных размеров при двух температурах окружающей среды, которые могут быть описаны законом Срезневского. Отметим, что в [8] уже указывалось на существование двух подходов к описанию горения магниевых частиц, в которых, помимо гетерогенных реакций окисления, принимают или нет во внимание гомогенные реакции паров и продуктов горения магния в газовом компоненте вблизи поверхности частицы.

На основе вышеизложенного рассмотрим частицу магния радиусом r_p , окруженную слоем газа толщиной r_g , моделирующим газовую составляющую продуктов горения и паров металла и т. п. Вообще говоря, величина r_g является бесконечно большой, так как при $r = r_g$ температура совпадает с температурой окружающей среды либо происходит теплообмен с окружающей средой (см. [2, 3]). Будем предполагать, что на поверхности частицы протекает химическая реакция окисления со ступенчатым тепловыделением. Тепловыделение зависит от того, какая стадия окисления рассматривается, воспламенение или горение. Таким образом, приходим к тепловой математической модели воспламенения и горения частицы магния, окруженной слоем газообразных продуктов химических гетерогенных реакций, моделируемых на основе приведенной кинетики. При этом на первом этапе исследования будем принимать во внимание параметры, описывающие продукты горения, лишь на уровне теплофизических параметров газа, окружающего частицу. Тем самым уравнения, определяющие поля температур частицы T_2 и газовой области T_1 , в безразмерном виде записываются следующим образом:

$$\frac{\partial T_2}{\partial t} = \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\nu \frac{\partial T_2}{\partial r} \right), \quad 0 \leq r \leq 1, \quad (1)$$

$$\frac{\partial T_1}{\partial t} = \frac{C_1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\nu \frac{\partial T_1}{\partial r} \right), \quad 1 \leq r \leq L, \quad (2)$$

где $C_1 = (\lambda_1 \rho_2 c_2) / (\lambda_2 \rho_1 c_1)$; $L = 1 + r_g / r_p$; ρ_i , λ_i , c_i , $i = 1, 2$, — плотности, теплопроводности и теплоемкости фаз ($i = 1$ — газовой, $i = 2$ — конденсированной); $\nu = 0, 1, 2$ — показатель симметрии для декартовых, полярных и сферических координат соответственно. Безразмерные величины определяются при помощи характерного времени $t_0 = \rho_2 c_2 r_p^2 / \lambda_2$, радиуса

частицы r_p , температуры газа и частицы T_0 при нормальных условиях. Уравнения (1), (2) должны удовлетворять начальному условию

$$T_1(0, r) = T_2(0, r) = 1 \quad (3)$$

и граничным условиям

$$r = 0 : \quad \frac{\partial T_2}{\partial r} = 0, \quad (4)$$

$$r = L : \quad \frac{\partial T_1}{\partial r} = -\alpha(T_1 - T_c), \quad (5)$$

где $\alpha = r_p \alpha_0 / \lambda_1$ — коэффициент теплообмена, $\alpha_0 = \text{Nu}/2$, Nu — число Нуссельта, T_c — температура на границе газовой области, представляющая собой температуру невозмущенного газа.

Кроме того, необходимо еще сформулировать контактное условие на границе раздела фаз, которое зависит от тепловой истории системы. Тепловой процесс разбивается на три стадии: воспламенение частицы, ее разогрев до температуры горения и собственно горение частицы. Соответственно этому записывается условие на границе раздела фаз. На 1-м этапе — воспламенение частицы — оно имеет вид:

$$r = 1 : \quad T_1 = T_2, \quad (6)$$

$$\frac{\partial T_1}{\partial r} + q_0(T_m - T_2) \exp\left(-\frac{E}{T_2}\right) = \lambda \frac{\partial T_2}{\partial r},$$

где $q_0 = q^0 \rho_3 K r_p / (\lambda_1 T_0)$, $E = E_a / (RT_0)$, $\lambda = \lambda_2 / \lambda_1$, q^0 — тепловыделение на единицу массы оксидной пленки, ρ_3 — плотность оксидной пленки, K — предэкспонент в эмпирическом законе окисления $dh/dt = K \exp(-E/T_2)$, h — толщина оксидной пленки, E_a — энергия активации процесса окисления, R — универсальная газовая постоянная, T_m — некоторая предельная температура, в качестве которой брали температуру, близкую к температуре кипения магния ($T_m = 0.95T_b$). На 2-м этапе происходит прогрев материала частицы до температуры горения $T_b > T_m$, а условие воспламенения (6) заменяется на первое из условий горения:

$$r = 1 : \quad T_1 = T_2,$$

$$\frac{\partial T_1}{\partial r} + q_b(T_b - T_2) \exp\left(-\frac{E}{T_2}\right) = \lambda \frac{\partial T_2}{\partial r}, \quad (7)$$

$$q_b > q_0.$$

Как было показано в работах [2–4], в рамках предложенной распределенной математической модели процесс воспламенения (горения) начинается на границе частицы, после чего температурное поле частицы очень быстро становится равномерным: $T_2 = T_m$ ($T_2 = T_b$) (время его выравнивания составляет доли процента от времени задержки воспламенения). Это обстоятельство дает возможность моделировать стадию горения частицы как однофазную задачу Стефана, а именно считая, что $T_2 = T_b = \text{const}$, а распределение температуры T_1 на момент начала горения определяется из решения задачи (1)–(7), далее будем решать краевую задачу для уравнения (2) в области $\xi(t) \leq r \leq L$ с граничным условием (5) и следующим условием на движущемся фронте:

$$T_1(\xi(t)) = T_b, \quad \gamma(T_b - T_c) \frac{d\xi}{dt} = \frac{\partial T_1}{\partial r}, \quad (8)$$

$$\gamma = \frac{\lambda_2 Q \rho_{22} k}{c_2 \lambda_1 T_0}, \quad r = \xi(t).$$

Здесь Q — удельное тепловыделение химической реакции горения на единицу массы металла, ρ_{22} — истинная плотность металла, k — предэкспонент в законе горения, зависящий, вообще говоря, от плотности окислителя, а возможно, и от других параметров системы, $\xi = \xi(t)$ — функция, определяющая радиус частицы в процессе ее выгорания, при этом в начальный момент горения $\xi = 1$.

Поставленная задача решалась численно, при этом для нахождения теплового поля системы на стадиях воспламенения и прогрева до температуры горения применялся ранее разработанный авторами численный конечно-разностный метод [2], а однофазная задача Стефана решалась методом ловли фазового фронта в узел сетки [9].

ОБСУЖДЕНИЕ ЧИСЛЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

Результаты расчетов по воспламенению частиц в рамках распределенной математической модели подробно обсуждались в предыдущих работах авторов [2–4], поэтому остановимся здесь на полученных результатах решения комплексной задачи воспламенения и горения в постановке (1)–(8).

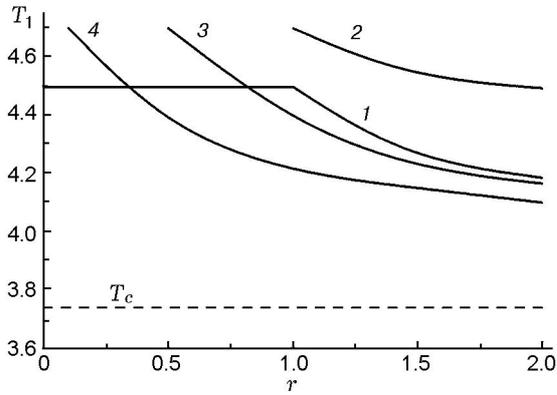


Рис. 1. Распределение температуры в системе частица + газ при $L = 2$

Пусть для определенности $r_p = 17$ мкм, $T_c = 1122$ К, $T_m = 1350$ К, $T_b = 1410$ К (температура кипения магния [1]). На рис. 1 показано распределение температуры в системе частица + газ при $L = 2$ в различные моменты времени горения частицы и в конечный момент, который определялся по условию $\xi \leq 0.1$. Кривая 1 показывает распределение температуры в системе частица + газ в момент воспламенения, 2 — распределение температуры в газовой области после прогрева частицы до температуры горения T_b на момент начала горения (температура в частице постоянна), 3, 4 — динамика поля температур в газовой области в процессе выгорания частицы до конечного момента процесса горения. Видно, что температура в точке L газовой области по мере выгорания частицы уменьшается, оставаясь больше входной температуры воздействия T_c . Этот факт можно объяснить увеличением доли объема газа в системе частица + газ и тем, что тепло, выделяемое при горении частицы, идет на прогрев этой все возрастающей области. Верификация модели горения проводилась так, чтобы при $L = 2$ время горения частицы совпадало с экспериментальными данными работы [10]. Оказывается, что зависимость температуры газа от величины L не критична для описания.

Действительно, на рис. 2 приведено распределение температуры в газовой области при изменении размера газовой области, окружающей частицу. Кривые 1 и 3 показывают распределение T_1 в начальный момент горения, 2 и 4 — в конечный момент, в обоих случаях для $L = 2$ и 4 соответственно.

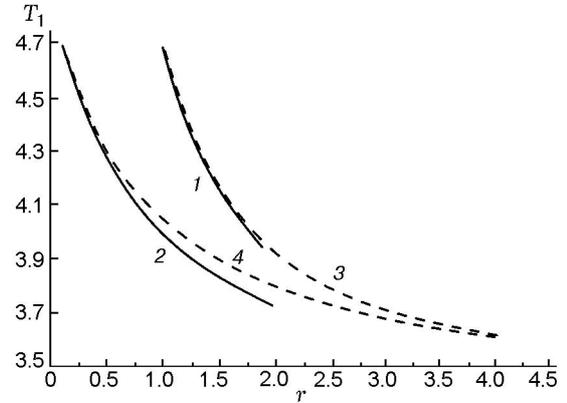


Рис. 2. Распределение температуры газовой области при $L = 2$ и 4

Видно, что при $L = 4$ температура на границе газовой области уже практически не меняется в процессе выгорания частицы, что согласуется с ранее полученным результатом по воспламенению частиц [2]: область влияния газовой области на температурную историю системы частица + газ оценивается четырьмя радиусами частицы. Отметим также, что время горения частицы увеличивается от $t_b = 1.3$ мс при $L = 2$ до $t_b = 1.48$ мс при $L = 8$. Это свидетельствует о том, что область в четыре радиуса дает неплохую аппроксимацию «бесконечности».

Как известно, времена задержки воспламенения и горения зависят от концентрации кислорода n_{ox} в воздухе [11, 12]. Для вычисления зависимости времени задержки воспламенения от концентрации кислорода граничное условие (6) модифицируем к виду:

$$r = 1 : \quad T_1 = T_2,$$

$$\frac{\partial T_1}{\partial r} + n_{ox} q_0 (T_m - T_2) \exp\left(-\frac{E}{T_2}\right) = \lambda \frac{\partial T_2}{\partial r}, \quad (9)$$

$$n_{ox} \leq 1.$$

На рис. 3 приведена рассчитанная зависимость времени задержки воспламенения от концентрации кислорода для частицы радиусом 17 мкм. Качественно эта кривая совпадает с экспериментальной зависимостью [11] для частиц магния диаметром 3 мм, а именно: незначительное изменение времени задержки воспламенения при концентрации кислорода $\approx 20 \div 100$ % и резкое его увеличение при уменьшении концентрации кислорода до 15 % и ниже.

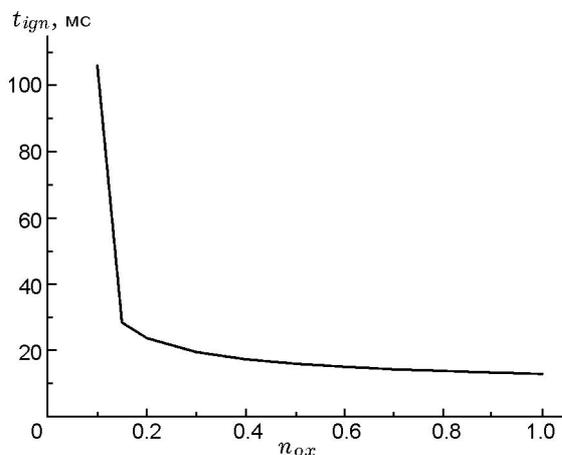


Рис. 3. Зависимость времени задержки воспламенения от концентрации кислорода для частицы радиусом 17 мкм

Сравнение результатов расчетов времени задержки воспламенения (сплошная линия) с экспериментальными данными [11] (квадраты) для частиц радиусом 3 мкм приведено на рис. 4. Выбор значения энергии активации $E_a = 1.51 \cdot 10^6$ Дж/кг позволил удовлетворительно описать расчетные и экспериментальные данные при $n_{ox} = 0.7$. Отметим, что в литературе бытует мнение, что должна быть некоторая «универсальная» величина энергии активации для описания данных различных экспериментов. Различие энергий активации в различных работах выдается за дефект экспериментального исследования или математической моде-

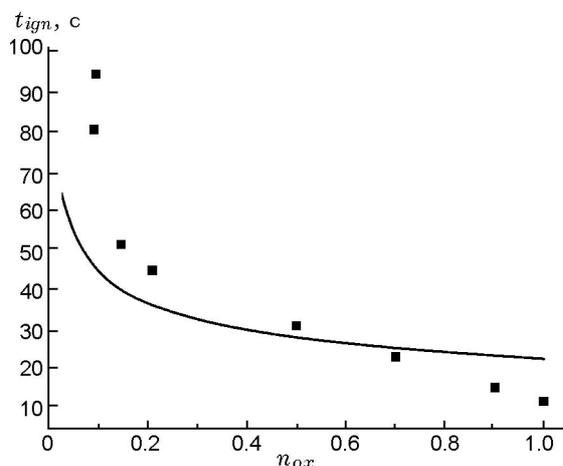


Рис. 4. Рассчитанные и экспериментальные [11] времена задержки воспламенения для частицы радиусом 3 мкм

ли, несправедливость заложенных в них предположений. Не оспаривая полностью подобного мнения, заметим, что в попытках описания комплексной кинетики окисления магния исследователи часто отказываются от полных кинетических моделей, сводя всё к нескольким соотношениям типа аррениусовского. Это существенно ограничивает возможности математически корректного описания наблюдаемых интегральных параметров и приводит, как видим, к разбросу определяемых значений энергии активации. В то же время эти полуэмпирические подходы позволяют описать один или два интегральных параметра и качественно верно описать поведение других при изменении входных параметров системы, таких как радиус частицы, температура окружающей среды. По нашему мнению, перспективным здесь является построение сопряженных математических моделей, которые могут корректно описывать несколько интегральных параметров в рамках подобных единых подходов [2–4].

Была рассчитана также зависимость времени горения от концентрации кислорода для мелкой частицы радиусом 17 мкм (рис. 5). Качественно эти результаты совпадают с экспериментальной зависимостью [12] для частиц магния диаметром 3 мкм. Для верификации математической модели горения были проведены расчеты времени горения частиц в зависимости от радиуса. Данные расчетов для частиц радиусом $40 \div 200$ мкм приведены на рис. 6 (сплошная линия — расчет, квадраты — эксперимент [12], имеющий определенный разброс).

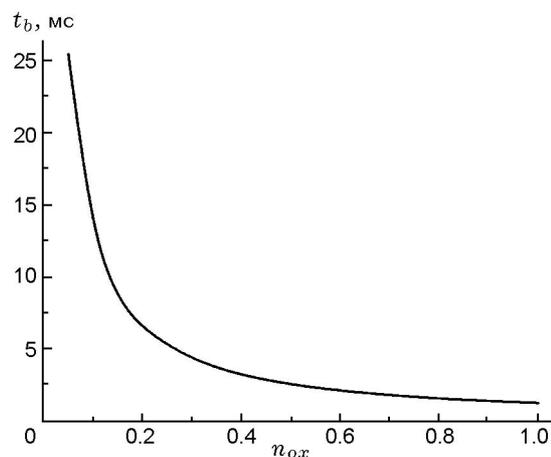


Рис. 5. Зависимость времени горения для частицы радиусом 17 мкм от концентрации кислорода

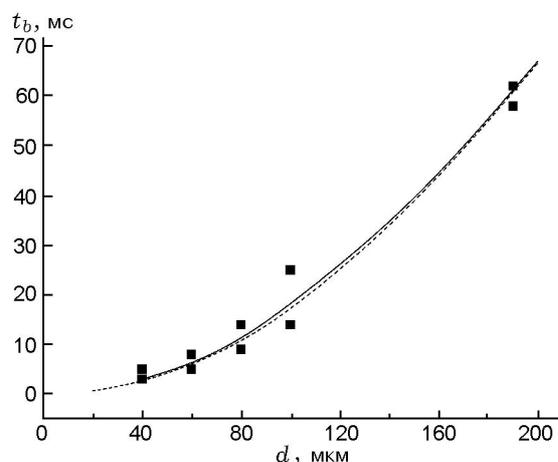


Рис. 6. Рассчитанные и экспериментальные [12] времена горения частиц различных радиусов

Видно, что расчетная кривая лежит внутри области разброса экспериментальных данных.

В ряде работ, например в [5], отмечается, что время горения частиц уменьшается с увеличением температуры окружающего газа, однако влияние температуры среды незначительно. Предложенная модель горения также описывает этот экспериментальный факт. Расчет показывает, что если температура на границе газовой области $T_c = 1122$ К и остается неизменной в процессе горения, то время горения составляет 1.3 мс. Если же после возгорания частицы температуру T_c уменьшить до нормальной, то время горения увеличится всего на 1 %.

ВЫВОДЫ

Предложена сопряженная математическая модель воспламенения и горения частицы магния с учетом окружающей ее газовой области в рамках однофазного подхода задачи Стефана. Для ее реализации разработана соответствующая математическая технология.

Данная математическая модель верифицирована по зависимостям времени горения частицы в воздухе от ее радиуса и по зависимостям времени воспламенения и горения в кислороде от его концентрации и радиуса частицы при нормальном давлении окружающего газа.

Установлена универсальность «закона» четырех радиусов как на стадии воспламенения, так и в процессе и горения, т. е. показано, что область влияния частицы на окружающую

ее среду оценивается четырьмя радиусами частицы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Фёдоров А. В., Фомин В. М., Гостеев Ю. А. Динамика и воспламенение газозвесей. — Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2006.
2. Фёдоров А. В., Шульгин А. В. Сопряженная математическая модель воспламенения образцов магния // Физика горения и взрыва. — 2006. — Т. 42, № 3. — С. 57–63.
3. Попов В. Н., Фёдоров А. В., Шульгин А. В. Численное моделирование воспламенения частицы магния в неоднородном тепловом поле // Матем. моделирование. — 2007. — Т. 19, № 6. — С. 109–117.
4. Фёдоров А. В., Шульгин А. В. Воспламенение и горение частиц магния в неоднородном тепловом поле // Физика горения и взрыва. — 2009. — Т. 45, № 2. — С. 48–57.
5. Бекстед М. В. Анализ данных по времени горения частиц алюминия // Физика горения и взрыва. — 2005. — Т. 41, № 5. — С. 55–69.
6. Гусаченко Е. И., Стесик Л. Н., Фурсов В. П., Шевцов В. И. Исследование конденсированных продуктов горения магниевых порошков. I. Зависимость от давления // Физика горения и взрыва. — 1974. — Т. 10, № 4. — С. 548–554.
7. Шевцов В. И., Фурсов В. П., Стесик Л. Н. К вопросу о механизме горения одиночных частиц магния // Физика горения и взрыва. — 1976. — Т. 12, № 6. — С. 859–865.
8. Гольдшлегер У. И., Амосов С. Д. Режимы горения и механизмы высокотемпературного окисления магния в кислороде // Физика горения и взрыва. — 2004. — Т. 40, № 3. — С. 28–39.
9. Васильев В. И., Максимов А. М., Петров Е. Е., Цыпкин Г. Г. Теплоперенос в промерзающих и протаивающих грунтах. — М.: Наука, 1996.
10. Грачухо В. П., Озеров Е. С., Юринов А. А. Горение частицы магния в водяном паре // Физика горения и взрыва. — 1971. — Т. 7, № 2. — С. 232–236.
11. Деревяга М. Е., Стесик Л. Н., Федорин Э. А. Экспериментальное исследование критических условий воспламенения магния // Физика горения и взрыва. — 1978. — Т. 14, № 6. — С. 44–49.
12. Деревяга М. Е., Стесик Л. Н., Федорин Э. А. Режимы горения магния // Физика горения и взрыва. — 1978. — Т. 14, № 5. — С. 3–10.

Поступила в редакцию 6/Х 2008 г.,
в окончательном варианте — 18/ХП 2008 г.