

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
ПЛЕНОЧНОГО ХИМИЧЕСКОГО РЕАГИРОВАНИЯ  
КОНДЕНСИРОВАННОЙ ФАЗЫ ОКСИДОВ МЕТАЛЛОВ  
С ТЕПЛОЗАЩИТНЫМИ МАТЕРИАЛАМИ**

УДК 536.422

**В. А. Бураков**

**НИИ прикладной математики и механики, 634050 Томск**

В [1–5] развивается физико-математическая теория теплофизических процессов взаимодействия высокотемпературных двухфазных потоков с разрушающимися (аблирующими) теплозащитными материалами (ТЗМ) в условиях теплового, химического и механического воздействия частиц конденсированной фазы (К-фазы) оксидов металлов. Однако не все механизмы воздействия частиц К-фазы на разрушающиеся ТЗМ изучены достаточно полно. Это прежде всего относится к механизмам очагового и пленочного химического реагирования, что не позволяет проводить обоснованное прогнозирование ряда возможных аномальных режимов функционирования энергоустановок.

Цель данной работы — математическое моделирование пленочного химического реагирования осаждающихся инерционно из высокотемпературного двухфазного потока частиц К-фазы оксидов металлов с углеграфитовыми ТЗМ.

Рассматривается взаимодействие высокотемпературных двухфазных потоков с углеграфитовыми ТЗМ многосоставных стенок в окрестности лобовой точки растекания плоских или затупленных тел при небольших скоростях соударения и значительных массовых потоках осаждающихся инерционно полидисперсных жидких частиц К-фазы. В условиях интенсивного комбинированного нагрева на поверхности углеграфитового ТЗМ появляется жидкая пленка К-фазы, которая химически активна и вступает в реакцию восстановления углеродом, сопровождающуюся образованием конденсированных и газообразных продуктов. При прямом пленочном химическом реагировании конденсированные компоненты гарантируют смачиваемость поверхности, а газообразные продукты при транспирации через слой расплава охлаждают его. Жидкая пленка К-фазы является дополнительным термическим сопротивлением падающему суммарному тепловому потоку, обеспечивая уровень относительно невысоких и умеренных температур контакта, а также оказывает демпфирующее влияние ударом жидких частиц. Толщина жидкой пленки определяется конкуренцией процессов массопереноса: инерционным осаждением частиц К-фазы, растеканием и разбрызгиванием расплава, его диспергированием (механическим разрушением при транспирации газообразных продуктов) и отсосом вследствие протекания химической реакции восстановления.

Физическая схема прямого пленочного химического реагирования расплава К-фазы оксидов металлов с углеграфитовыми ТЗМ многосоставных стенок показана на рис. 1.

При математическом моделировании взаимодействия высокотемпературных двухфазных потоков с углеграфитовыми ТЗМ многосоставных стенок по механизму прямого пленочного химического реагирования в условиях инерционного осаждения полидисперсных частиц К-фазы оксидов металлов в окрестности лобовой точки растекания вводятся следующие основные допущения.

1. Гидродинамика и тепломассоперенос в относительно тонкой реагирующей пленке

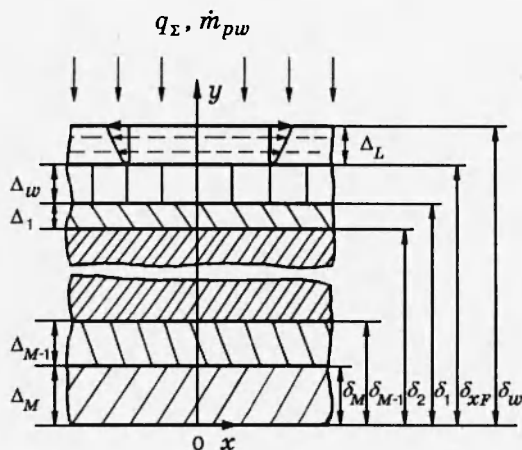
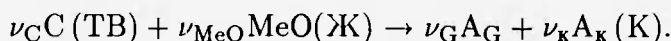


Рис. 1

К-фазы описываются моделью ламинарного несжимаемого пограничного слоя двухфазной однотемпературной двухкомпонентной «замороженной» газожидкостной среды. Инерционным и конвективным членами в уравнении количества движения пренебрегается. Коэффициент динамической вязкости жидкой фазы принимается постоянным.

2. Унос массы углеродистых ТЗМ происходит по суммарной гетерогенной реакции восстановления в контакте углерод — расплав оксида металла, описываемой эффективной кинетикой и стехиометрическим уравнением



Здесь  $\nu_C$ ,  $\nu_{MeO}$ ,  $\nu_G$ ,  $\nu_K$  — стехиометрические коэффициенты; MeO,  $A_G$ ,  $A_K$  — условные химические символы оксидов металлов, газообразных и конденсированных продуктов.

3. Газообразный продукт гетерогенной реакции восстановления беспрепятственно проходит через жидкую пленку К-фазы преимущественно в нормальном направлении. Объемное газосодержание рассматривается в качестве параметра модели.

4. Задача нестационарной теплопроводности решается в одномерном приближении для плоской многосоставной стенки.

5. Между слоями разнородных материалов и жидким расплавом К-фазы выполняются условия идеального теплового контакта.

6. Распределение частиц К-фазы по размерам аппроксимируется распределением частиц по конечному числу групп, в каждой из которых содержатся частицы одного размера.

В соответствии с принятыми допущениями нестационарные уравнения тепломассопереноса при прямом пленочном химическом реагировании расплава К-фазы оксидов металлов с углеродистыми ТЗМ многосоставных стенок в окрестности лобовой точки растекания имеют вид (см. рис. 1)

$$(1 - \Phi) \rho_L c_L \left( \frac{\partial T}{\partial t} + v_L \frac{\partial T}{\partial y} \right) = \frac{\partial}{\partial y} \left( \lambda_\Sigma \frac{\partial T}{\partial y} \right) - \dot{m}_G c_{pG} \frac{\partial T}{\partial y}, \quad (1)$$

$$\delta_{xF}(t) < y < \delta_{xF}(t) + \Delta_L, \quad t > 0;$$

$$(\rho c)_{yGM} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y} \left( \lambda_{yGM} \frac{\partial T}{\partial y} \right), \quad \delta_1 < y < \delta_{xF}(t), \quad t > 0; \quad (2)$$

$$(\rho c)_m \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y} \left( \lambda_m \frac{\partial T}{\partial y} \right), \quad \delta_{m+1} < y < \delta_m, \quad t > 0, \quad m = \overline{1, M}, \quad (3)$$

где  $v_L$  — нормальная составляющая скорости жидкой пленки;  $\rho_L$  — плотность жидкой фазы;  $T$  — температура;  $\Phi$  — объемная доля газовой фазы;  $\dot{m}_G$  — массовая скорость транспирации газовой фазы;  $\mu$  — коэффициент динамической вязкости;  $\rho$  — плотность;  $c$  — удельная теплоемкость;  $\lambda$  — коэффициент теплопроводности;  $t$  — время;  $M$  — число разнородных материалов многосоставной стенки; индексы  $L, G, \Sigma, \text{угм}, m$  относятся к жидкой и газовой фазам, эффективным характеристикам газожидкостной смеси, углеграфитовому ТЗМ и разнородным материалам многосоставной стенки соответственно.

Нелинейная система уравнений (1)–(3) в инерциальной (неподвижной) системе координат решается при граничных условиях на свободной поверхности жидкой пленки К-фазы  $y = \delta_w(t)$ , во фронте пленочного термохимического разрушения  $y = \delta_{xF}(t)$ , в контактах и на наружной поверхности многосоставной стенки:

$$\begin{aligned} \lambda_\Sigma \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{\delta_w-0} + \dot{m}_G h_w &= q_\Sigma + \dot{m}_G h_G, & \lambda_\Sigma \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{\delta_{xF}+0} &= \lambda_{\text{угм}} \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{\delta_{xF}-0} + \dot{m}_{xF} \Delta H_{xF}, \\ T|_{\delta_{xF}+0} &= T|_{\delta_{xF}-0} = T_k(t), & \lambda_{\text{угм}} \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{\delta_1+0} &= \lambda_1 \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{\delta_1-0}, \\ T|_{\delta_1+0} &= T|_{\delta_1-0} = T_{k,1}(t), & \lambda_m \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{\delta_{m+1}+0} &= \lambda_{m+1} \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{\delta_{m+1}-0}, \\ T|_{\delta_{m+1}+0} &= T|_{\delta_{m+1}-0} = T_{k,m+1}(t), & \lambda_M \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{+0} &= q_M, \quad m = \overline{1, M-1}, \quad M > 1. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь  $q_\Sigma$  — суммарный тепловой поток;  $h$  — энтальпия;  $\dot{m}_{xF}, \Delta H_{xF}$  — массовая скорость и удельный тепловой эффект прямого пленочного химического реагирования;  $q_M$  — суммарный тепловой поток на наружной поверхности многосоставной стенки; индексы  $w$  и  $k$  относятся к границе раздела сред и условиям в контактах, включая фронт пленочного термохимического разрушения.

Начальные условия при  $t = 0$  задаются в виде

$$T = T_{L,0}, \quad \delta_0 \leq y \leq \delta_{w,0}, \quad T = T_n, \quad 0 \leq y < \delta_0, \quad (5)$$

где  $T_{L,0}$  — начальная температура жидкого слоя К-фазы;  $T_n$  — начальная температура углеграфитового ТЗМ и многосоставной стенки;  $\delta_{w,0}$  — начальное положение жидкого слоя К-фазы.

Компоненты скорости газожидкостной пленки К-фазы в окрестности лобовой точки растекания можно представить как

$$\begin{aligned} u_L &= \frac{\tau_\Sigma \Delta_L \eta_L}{(1-\Phi) \mu_\Sigma} - \frac{\Delta_L^2}{\mu_\Sigma} \frac{dP_e}{dx} \left( \eta_L - \frac{\eta_L^2}{2} \right), \quad 0 < \eta_L < 1, \\ v_L &= v_{L,k} - \Delta_L \left[ \frac{\Delta_L^2}{\mu_\Sigma} \left( \eta_L^2 - \frac{\eta_L^3}{3} \right) C_1 + \frac{\Delta_L \eta_L^2 C_2}{(1-\Phi) \mu_\Sigma} \right], \\ C_1 &= \rho_\infty \left( \frac{du_e}{dx} \right)_s^2, \quad C_2 = \rho_\infty V_{\infty} \text{St} \left( \frac{du_e}{dx} \right)_s \text{Pr}^{2/3}, \quad \eta_L = \frac{y - \delta_{xF}(t)}{\Delta_L}. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь  $u_L$  — продольная составляющая скорости жидкой пленки;  $(dP_e/dx)_s, (du_e/dx)_s$  — градиент давления и скорости невязкого потока в окрестности лобовой точки растекания;  $\rho_\infty, V_\infty$  — плотность и скорость набегающего потока;  $\text{St}$  — число Стантона;  $\text{Pr}$  — число Прандтля.

Массовая скорость транспирации газовой фазы через жидкую пленку К-фазы определяется соотношением

$$\dot{m}_G = \left( \frac{\nu_G m_{A_G}}{\nu_C m_C} \right) \dot{m}_{xF} \quad (7)$$

( $m$  — молекулярная масса).

Для практического использования представленной математической модели (1)–(7) необходимы замыкающие соотношения, определяющие текущее положение фронта пленочного термохимического разрушения и толщину реагирующей газожидкостной пленки К-фазы.

Линейная скорость и текущее положение фронта пленочного термохимического разрушения углеродистых ТЗМ находятся по соотношениям

$$\frac{d\delta_{xF}}{dt} = -\frac{\dot{m}_{xF}}{\rho_{угм}}, \quad \delta_{xF}(t) = \delta_0 - \int_0^t \frac{\dot{m}_{xF}}{\rho_{угм}} dt. \quad (8)$$

Текущая толщина газожидкостной пленки К-фазы в случае осесимметричного течения в окрестности лобовой точки растекания находится из решения уравнения макроскопического баланса массы:

$$\begin{aligned} & \frac{d\Delta_L}{dt} + \left( \frac{2\Delta_L^3}{3\mu_\Sigma} \right) C_1 + \frac{\Delta_L^2 C_2}{(1-\Phi)\mu_\Sigma} = \\ & = \frac{1}{(1-\Phi)\rho_L} \left[ \sum_j \dot{m}_{pw,j} (1 - G_{sh}) - \left( \frac{\nu_{MeO} m_{MeO}}{\nu_C m_C} \right) \dot{m}_{xF} - \dot{m}_d \right], \quad \Delta_L(0) = \Delta_{L,0}, \end{aligned} \quad (9)$$

где  $\Delta_L$ ,  $\Delta_{L,0}$  — текущая и начальная толщина пленки;  $\dot{m}_{pw,j}$  — массовый поток осаждающихся инерционно-жидких частиц К-фазы  $j$ -й фракции ( $j = 1, N_{pw}$ );  $N_{pw}$  — число фракций полидисперсных частиц К-фазы.

Массовая скорость пленочного термохимического разрушения углеродистых ТЗМ в условиях непрерывного фазового контакта с расплавом оксидов металлов определяется кинетическим уравнением химической реакции нулевого порядка в форме закона Аррениуса:

$$\dot{m}_{xF} = k_{xF} P_k^{\omega_1} T_k^{-\omega_2} \exp \left( -\frac{E_{xF}}{RT_k} \right). \quad (10)$$

Здесь  $k_{xF}$ ,  $E_{xF}$  — эффективные термокинетические константы прямого пленочного химического реагирования, которые должны находиться из согласования (10) с экспериментальными данными;  $\omega_1$ ,  $\omega_2$  — константы.

Массовая скорость механического уноса жидкой пленки К-фазы за счет разбрызгивания падающими частицами (процесс ударного брызгоуноса [6]) имеет вид

$$\dot{m}_{sh} = G_{sh} \sum_j \dot{m}_{pw,j} \quad (11)$$

( $G_{sh}$  — коэффициент интенсивности разбрызгивания [7]).

Массовая скорость механического уноса жидкой пленки К-фазы за счет диспергирования при транспирации газообразных продуктов гетерогенной реакции восстановления (пузырьковый брызгоунос [6]) определяется по формуле

$$\dot{m}_d = G_d \dot{m}_G \quad (12)$$

( $G_d$  — коэффициент интенсивности диспергирования).

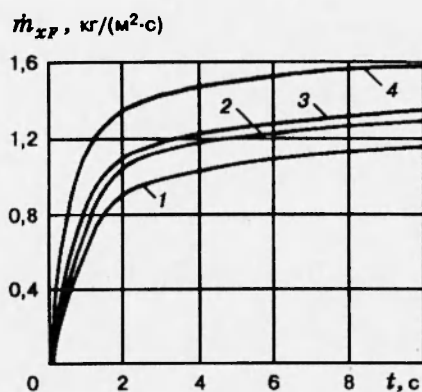


Рис. 2

Таким образом, разработанная новая математическая модель (1)–(12) позволяет найти важнейшие гидродинамические и теплофизические параметры взаимодействия высокотемпературных двухфазных потоков с углеграфитовыми ТЗМ многосоставных стенок по механизму прямого пленочного химического реагирования в условиях инерционного осаждения полидисперсных частиц К-фазы оксидов металлов в окрестности лобовой точки растекания.

По разработанной на основе [8] вычислительной программе AGMFILM, реализующей модель (1)–(12), проводилось численное исследование прямого пленочного химического реагирования газожидкостной пленки К-фазы оксида алюминия с графитом с использованием следующих основных входных параметров:  $P_\infty = 4,0$  МПа,  $T_\infty = 3260$  К,  $V_\infty = 200$  м/с,  $(du_e/dx)_s = 2,35 \cdot 10^4$  1/с,  $\rho_\infty V_\infty St_0 = 2,27$  кг/(м<sup>2</sup> · с),  $Pr = 0,72$ ,  $\rho_L = 2400$  кг/м<sup>3</sup>,  $\mu_L = 0,02$  Па · с,  $\Phi = 0,3$ ,  $G_{sh} = 0,32$ ,  $\Delta_0 = 4 \cdot 10^{-2}$  м,  $T_n = 300$  К,  $q_M = 0$ ,  $t_d = 10$  с.

Зависимость массовой скорости пленочного химического реагирования от различных параметров модели представлена на рис. 2, где 1 — опорный расчет, 2 — коэффициент динамической вязкости 0,01 Па · с, 3 — без учета газовой фазы, 4 — отсутствие разбрызгивания. Наиболее значимым параметром оказывается коэффициент интенсивности разбрызгивания — величина, известная с большой неопределенностью. Пренебрежение разбрызгиванием, вызывающим охлаждение газожидкостной пленки К-фазы, повышает массовую скорость пленочного химического реагирования на 37% за счет более интенсивного подвода тепла к фронту термохимического разрушения, несмотря на небольшое увеличение  $\Delta_L$  и  $\dot{m}_G$ .

Установленная в результате численных расчетов сильная зависимость  $\dot{m}_{xF} = \dot{m}_{xF}(G_{sh})$  косвенно отражает факт влияния скорости набегающего двухфазного потока на механизм пленочного химического реагирования, тогда как при капельном химическом реагировании такая связь является явной [2, 3]. Неучет влияния газовой фазы на изменение физических параметров, а также ее конвекции в жидком слое вызывает увеличение температуры  $T_k$  и массовой скорости пленочного химического реагирования в пределах 16% при снижении величины  $\Delta_L$ . Уменьшение в 2 раза коэффициента динамической вязкости жидкого алюминия приводит к заметному (на 30%) утоньшению газожидкостной пленки К-фазы и возрастанию на 11%  $\dot{m}_{xF}$ . Изменение газосодержания от  $\Phi = 0,3$  до  $\Phi = 0,15$  вызывает за счет снижения толщины пленки небольшое повышение  $\dot{m}_{xF}$  (на 4,4%). Увеличение коэффициента диспергирования газожидкостной пленки К-фазы при транспирации газообразных продуктов от  $G_d = 0$  до  $G_d = 1,0$  влияет на массовую скорость  $\dot{m}_{xF}$  только

в пределах 3 %, что объясняется малой ролью этого механизма уноса массы.

Таким образом, проведенное численное исследование выявило основной круг параметров, оказывающих влияние на процесс пленочного химического реагирования осаждающихся инерционно из высокотемпературного двухфазного потока частиц К-фазы оксидов металлов с углеродистыми ТЗМ.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Бураков В. А. Классификация механизмов и физические модели взаимодействия частиц конденсированной фазы с разрушающимися теплозащитными материалами // Теплофизика высоких температур. 1992. Т. 30, № 3. С. 533–542.
2. Бураков В. А., Санду С. Ф. Термохимическое разрушение углепластиковых теплозащитных материалов в высокотемпературном двухфазном потоке // Физика горения и взрыва. 1992. Т. 28, № 6. С. 51–60.
3. Бураков В. А., Обухов Н. А., Файзуллин Р. К. и др. Комплексное математическое моделирование взаимодействия высокотемпературных двухфазных потоков с углеродистыми теплозащитными материалами // Теплофизика высоких температур. 1992. Т. 30, № 5. С. 992–1001.
4. Бураков В. А., Санду С. Ф. Теплоперенос при шлаковании поверхности углепластиковых теплозащитных материалов в высокотемпературном двухфазном потоке // Сиб. физ.-техн. журн. 1993. Вып. 2. С. 98–103.
5. Бураков В. А., Санду С. Ф., Краскова С. И. Термоэрозийное разрушение коксующихся теплозащитных материалов в сверхзвуковых двухфазных потоках // Теплофизика высоких температур. 1992. Т. 30, № 4. С. 790–798.
6. Нигматулин Р. И. Динамика многофазных сред. М.: Наука, 1987. Т. 1.
7. Ивановская В. И., Маркович Э. Э., Васильев Н. И., Гугочкин В. В. Влияние разбрызгивания пленки жидкости, стекающей по внутренней стенке центробежного патрубка, на эффективность сепарации // Изв. вузов. Энергетика. 1989. Вып. 11. С. 70–76.
8. Бураков В. А., Санду С. Ф. Численное решение задач нестационарной теплопроводности и уноса теплозащитных материалов при осаждении частиц конденсированной фазы // Всесоюзная выставка программных комплексов по численному решению задач термомеханики: Тез. докл. М.: Изд-во МГТУ им. Баумана, 1990.

*Поступила в редакцию 10/VI 1994 г.,  
в окончательном варианте — 9/I 1995 г.*