

УЧЕТ ДЕФЕКТНОСТИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ УГЛЕРОДНОГО КОМПОНЕНТА ПОРОШКООБРАЗНОГО ТОПЛИВА В КАМЕРЕ СГОРАНИЯ ГЕНЕРАТОРА ПЛАЗМЫ

Представлены физико-математическая модель и результаты численных исследований температуры газа, электропроводности плазмы, температуры микропламени вокруг частиц алюминия, а также неполноты сгорания углеродного компонента порошкообразного топлива в поли- и монодисперсном приближении при движении двухфазной смеси в камере сгорания генератора плазмы. Установлена степень влияния учета дефектности кристаллической структуры углеродных частиц на изменение этих величин, а также показано, что в условиях генератора плазмы полидисперсная модель в отличие от монодисперсной менее чувствительна к выбору моделей горения частиц углерода.

Опытные значения эффективной энергии активации углерода при его взаимодействии с агрессивными средами, как правило, меньше определяемых с помощью стандартного анализа. Ряд исследователей (например, [1]) объясняет этот факт наличием примесей в углеродных материалах и диффузионным торможением, но некоторыми авторами (например, [2]) установлено отсутствие влияния на величину эффективной энергии активации $E_{\text{эф}}$ значительного уменьшения содержания золы в углеродном материале. Влияние структуры углеродных материалов на их химическую активность обсуждалось, например, в [3—7]. Однако вопрос о роли дефектности кристаллической структуры углеродных частиц при движении двухфазного потока в условиях генератора плазмы в литературе не рассматривался.

Течение в газодинамическом тракте камеры сгорания импульсного геофизического генератора плазмы на порошкообразном топливе типа «Памир-2Ф» (рис. 1) рассматривалось в рамках модели многофазной многокомпонентной среды [8]. Основные характеристики генератора: массовый состав горючего 0,75 C — 0,15 Al — 0,10 K₂CO₃, окислитель O₂, коэффициент избытка окислителя 0,9, давление в камере сгорания 60 атм, общий расход 25 кг/с, температура зоны зажигания 3000 К.

Принималось, что в каждой точке расчетной области двухфазный поток характеризуется плотностями, скоростями, температурами, внутренними энергиями, а состояние первой (газовой) среды — и давлением. Между газом и частицами алюминия, углерода (электродного угля), карбоната калия и окиси алюминия (2—5 среды соответственно) существуют силовое и тепловое взаимодействия, определяющиеся диссипативными механизмами вязкости и теплопроводности [9]. Эффекты вязкости и теплопроводности учитываются только в процессе взаимодействия сред; в самом газе эти эффекты не рассматриваются. Считается, что в камере сгорания отсутствуют процессы коагуляции, дробления и вращения частиц. Пренебрегается потоком лучистой энергии от горящих частиц и газовых компонентов.

Поскольку оценки, сделанные авторами, показали, что времена сгорания и испарения частиц одного порядка со временем их пребывания в камере, считается, что между первой и второй и третьей средами идут неравновесные химические реакции. В одномерной постановке ансамбли частиц характеризуются функциями распределения частиц по размерам $f_i(x, r, t)$, где $i = м, у, п, о$ — индекс, обозначающий среды 2—5 соответственно; x — координата вдоль оси камеры сгорания. Функции распределения описывались усеченным логнормальным законом [10]

$$f(r) = \frac{\lg e}{\sqrt{2\pi} r \lg \sigma_0} \exp \left[- \left(\frac{\lg r - \lg r_0}{\sqrt{2} \lg \sigma_0} \right)^2 \right],$$

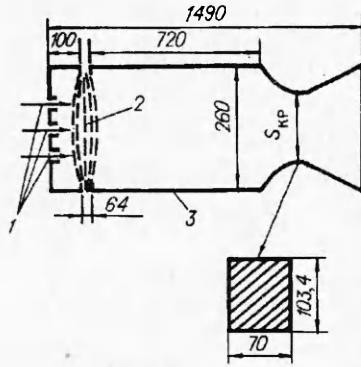
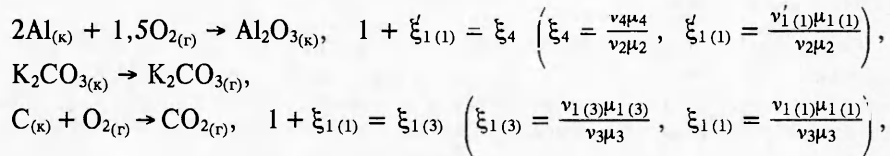


Рис. 1. Генератор плазмы «Памир-2Ф»
1 — форсунки; 2 — зона зажигания (водный раствор ацетона (60 % ацетона + 40 % воды) — 34 %, O₂ — 66 %); 3 — корпус.

где r_0 и $\lg \sigma_0$ — математическое ожидание и среднее квадратичное отклонение логарифмов радиусов частиц. Принималось $\sigma_0 = 1,5$, $r_0 = 50, 30$ и 50 мкм для ансамблей частиц алюминия, углерода и ионизирующей присадки K₂CO₃, в то время как соответствующие максимальные размеры составляли 160, 160 и 200 мкм. Считалось, что горение (испа-

рение) частиц начинается сразу на выходе из зоны зажигания, а в камере сгорания протекают следующие реакции:



индексы к и г означают конденсат и газ; v_i и μ_i — стехиометрические коэффициенты и молекулярные массы; $\xi_{1(3)}$, ξ_4 , $\xi'_{1(1)}$, $\xi_{1(1)}$ определяют массовые расходы компонентов в химической реакции горения. Горение отдельных частиц алюминия и углерода происходит в парофазном режиме, т. е. вокруг частицы существует тонкая зона реакции F (F-фаза [9]), в которой сгорают пары топлива и окислитель.

Система уравнений сохранения, описывающая процессы в камере сгорания (КС) генератора плазмы на порошкообразном топливе, в безразмерном виде выглядит следующим образом [11, 12].

Уравнения неразрывности для кислорода

$$\frac{\partial \rho_{1(1)}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_{1(1)} \mu_1}{\partial x} = -\xi'_{1(1)} I_2 - \xi_{1(1)} I_3,$$

для газовых компонентов K₂CO₃ и CO₂

$$\frac{\partial \rho_{1(2)}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_{1(2)} \mu_1}{\partial x} = I_4,$$

$$\frac{\partial \rho_{1(3)}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_{1(3)} \mu_1}{\partial x} = \xi_{1(3)} I_3;$$

эволюционные уравнения для полидисперсных ансамблей частиц алюминия, углерода, присадки и окиси:

$$\frac{df_i}{dt} + \frac{\partial f_i v_i}{\partial x} - \frac{\partial f_i v_i}{\partial r} = 0, \quad i = 2 \div 5;$$

уравнения импульсов для газовой среды

$$\rho \frac{du_1}{dt} + \frac{\alpha_1}{k} \frac{\partial p}{\partial x} = \alpha_1 \left(-\sum_{i=2}^5 \int_0^{\infty} F_i f_i dr + \int_0^{\infty} I_4 f_4 (u_4 - u_1) dr + \int_0^{\infty} I_3 f_3 (u_3 - u_1) dr - \xi'_{1(1)} \int_0^{\infty} I_2 f_2 (u_2 - u_1) dr \right),$$

для фракций частиц дисперсных фаз

$$\rho_{i,j} \frac{du_{i,j}}{dt} = \int_a^b (\alpha_1 F_{i,j} f_{i,j} + \alpha_{2(i,j)} I_i (u_i - u_1)) dr, \quad i = 2 \div 5;$$

уравнения энергии для газовой фазы

$$\rho_1 \frac{dE_1}{dt} = \frac{\alpha_1 p M_1}{\rho_1} \frac{d\rho_1^0}{dt} + k \left(-\alpha_1 \sum_{i=2}^5 \int_0^\infty F_i f_i (u_i - u_1) dr + \int_0^\infty I_4 f_4 \frac{(u_4 - u_1)^2}{2} dr + \int_0^\infty I_3 f_3 \frac{(u_3 - u_1)^2}{2} dr - \xi_{1(1)} \int_0^\infty I_2 f_2 \frac{(u_2 - u_1)^2}{2} dr \right) + \sum_{i=2,3} \int_0^\infty f_i q_{Fi} dr + \sum_{i=4,5} \int_0^\infty f_i q_{\Sigma i} dr + \xi_4 \int_0^\infty I_2 f_2 X_{15} dr,$$

для фракций частиц дисперсных фаз

$$\rho_{i,j} \frac{dE_{i,j}}{dt} = \int_a^b I_{i,j} f_{i,j} X_i dr + \int_a^b f_{i,j} q_{mi,j} dr, \quad m = \begin{cases} F, & i = 2, 3, \\ \Sigma, & i = 4, 5; \end{cases}$$

уравнение баланса энергии при горении частиц алюминия и углерода

$$\int_a^b I_{i,j} f_{i,j} X_{Fi} dr - \int_a^b f_{i,j} (q_{Fi,j} + q_{F1}) dr = 0, \quad i = 2, 3;$$

уравнение состояния газовой фазы

$$p = \rho_1 R_1 T_1,$$

$$\rho_1 R_1 = \sum_{i=1}^3 \rho_{1(i)} R_{1(i)}, \quad \alpha_k = \sum_{i=2}^5 \sum_{j=1}^{N_k} \alpha_{i,j}, \quad \alpha_1 = 1 - \alpha_k,$$

$$\rho_1 = \sum_{i=1}^3 \rho_{1(i)}, \quad I_{i,j} = 4\pi r_{i,j}^2 \rho_i^0 v_{i,j}, \quad i = 2-5, \quad j = 1 - N_k,$$

$$I_i = 4\pi \rho_i^0 \int_0^\infty r_i^2 f_i v_i dr, \quad q_{mi} = 4\pi a_m^2 \beta_{mi} (T_m - T_i),$$

$$a = r_i - \frac{\Delta r}{2}, \quad b = r_i + \frac{\Delta r}{2}, \quad m = \begin{cases} F, & i = 2, 3, \\ \Sigma, & i = 4, 5. \end{cases}$$

В системе уравнений приняты обозначения: p , T , ρ , u , E — давление, температура, плотность, скорость и удельная внутренняя энергия соответственно; v_i — линейная скорость изменения размера частиц i -го вещества; q_{mi} — поток тепла из фазы m в фазу i ; F_i — сила аэродинамического сопротивления частиц i -го вещества; M_1 — молярная масса газа; X_i — тепловые эффекты реакций; k — показатель адиабаты; N_k — число разбиваний функции распределения; α_1 , α_k — объемные доли газовой и дисперсной фаз; β_{mi} — коэффициент теплоотдачи из фазы m в фазу i [9]; a_m — радиус тонкого сферического слоя пламени, окружающего частицу радиуса r ($a_m > r$) [9]; Σ — индекс Σ -фазы (Σ — поверхность частицы, в которой существенны силы поверхностного натяжения). Индексы в скобках (1, 2, 3) обозначают компоненты газовой фазы (O_2 , K_2CO_3 , CO_2 соответственно).

Данная система уравнений численно реализована итерационным методом, согласно идее авторов [13], причем нестационарное уравнение импульсов для газа решалось по явной конечно-разностной схеме Мак-Кормака типа предиктор — корректор, а остальные стационарные уравнения подсистемы для газа — по схеме бегущего счета. Для эволюционных уравнений использовалась безусловно устойчивая схема «неявный уголок» (выбор «правый» или «левый» диктовался направлением характеристик).

Граничные условия на левой границе КС: $T_1(0, t) = 3000$ К, общий расход $G(0, t) = 25$ кг/с; на правой границе: число Маха $M(l, t) = \text{const}$.

Скорости и температуры частиц на левой границе принимались равными скорости и температуре газа.

Для вычисления времени сгорания частиц алюминия τ_r при высоких давлениях и температурах традиционно используется формула [14]

$$\tau_r = 0,67 \frac{d^{1,5}}{\alpha^{0,9}}, \text{ мс,}$$

d — диаметр частицы, мкм; α — окислительный потенциал, %.

Горение частиц углерода в условиях КС хорошо описывается аррениусовской зависимостью при энергии активации $E_a = 21,5$ ккал/моль и порядке реакции $n = 0,35$ [15]. Электропроводность плазмы как интегральная характеристика двухфазного потока (зависящая от p и T_1) в настоящей работе рассчитывалась по упрощенной методике Фроста [16]. Дефектность кристаллической структуры (ДКС) углеродного материала учитывалась при помощи зависимости, предложенной в [17]:

$$E_a = E_0 - f \ln \frac{D_0}{D},$$

где E_0 — энергия активации реакции окисления бездефектного поликристаллического графита; f — постоянная; D_0 и D — диаметр кристаллитов до и после термообработки.

В настоящей работе при расчетах принималось, что кристаллическая структура углеродного материала претерпевает изменения при попадании частиц в высокотемпературную зону (зону зажигания), снижая энергию активации.

На рис. 2 представлены результаты численного исследования неполноты сгорания (т. е. количества топлива в данной точке тракта КС, отнесенного к исходному количеству данного компонента) углеродного топлива, относительных значений электропроводности плазмы σ , температуры газа T_1 и температуры зоны F T_F вдоль КС в моносферном приближении (радиусы частиц алюминия и углерода 35 и 10 мкм соответственно). Расчеты проводились для графита марки ГМЗ. Видно, что учет ДКС частиц углерода более чем в 1,5 раза сокращает время сгорания частиц. При этом более интенсивно растут σ и T_1 . Относительно T_F можно сказать следующее. Наблюдающееся схождение линий T_F объясняется тем, что при полном сгорании топлива все характеристики потока по мере приближения к выходу КС в конечном счете выравниваются в обоих рассматриваемых случаях. Абсолютное же значение T_F при учете ДКС несколько меньше, поскольку

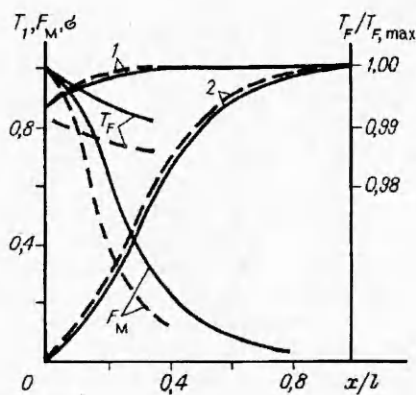


Рис. 2. Изменение вдоль КС неполноты сгорания моносферного углеродного топлива F_M , σ , T_1 и T_F при учете ДКС частиц углерода (----) и без учета ДКС (—).

$l = T_1/T_{1, \text{max}}$; $\sigma = \sigma/\sigma_{\text{max}}$ (l — длина камеры сгорания).

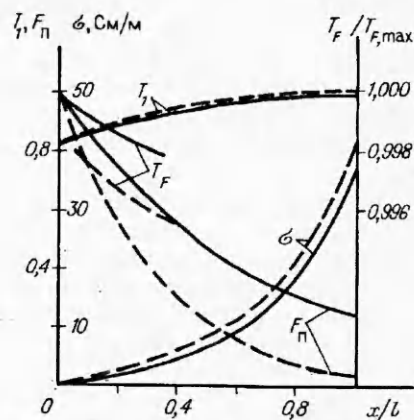
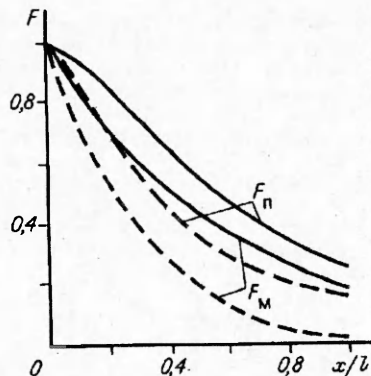


Рис. 3. Изменение вдоль КС неполноты сгорания полидисперсного углеродного топлива F_n , а также σ , T_1 и T_F с учетом (----) и без учета ДКС (—).

Рис. 4. Изменение вдоль КС величин F_M и F_n при использовании разных моделей горения частиц углерода. Время горения частиц алюминия определялось по [14], а углерода — по [20] (—) и [15] (-----).



из-за меньшего количества окислителя (углерод сгорает быстрее) частицы алюминия горят медленнее. Поэтому и тепла, подводимого к ним от зоны F , должно быть меньше [18].

В полидисперсном приближении (рис. 3) в процессе счета отслеживалась величина T_F для фракции ансамбля частиц алюминия с начальным радиусом 35 мкм с целью сравнения с результатами расчета по монодисперсной модели (см. рис. 2). Из рис. 3 следует, что учет ДКС частиц углерода существенно влияет на величину неполноты сгорания углеродного топлива, что соответствующим образом сказывается на T_1 и σ . Выделенная из полидисперсного ансамбля фракция частиц алюминия с начальным радиусом 35 мкм горит несколько дольше, чем при монодисперсном подходе (см. рис. 2) вследствие меньшего количества окислителя, поскольку самые мелкие фракции полидисперсных ансамблей частиц топлива сгорают практически сразу, значительно понижая окислительный потенциал. Не наблюдается также и схождения линий для T_F — свидетельство того, что полидисперсный ансамбль частиц гораздо менее чувствителен к изменению внешних условий горения, а также к выбору моделей горения частиц. Этот факт впервые отмечен в [19] при исследовании горения частиц металла в гетерогенном химическом реакторе.

Результаты расчетов, проведенных авторами настоящей статьи, представленные на рис. 4, позволяют заключить, что консервативность полидисперсного ансамбля частиц к выбору модели горения характерна также и для углерода. Рассматривались описанная выше модель горения углеродной частицы и диффузионная модель Шорина [20]

$$\tau_0 = \rho^0 \frac{4,25 \cdot 10^6}{T^{0,75}} \frac{\ln \frac{1-\alpha}{\alpha}}{1 - \exp\left(-\ln \frac{1-\alpha}{\alpha}\right)} d^2,$$

где d — диаметр частицы, м; T — температура среды, К; ρ^0 — истинная плотность частицы, кг/м³; α — окислительный потенциал; τ_0 — время сгорания, с. Расчеты проводились для полидисперсных ($r_0 = 50$ и 20 мкм) и монодисперсных ($r_0 = 50$ и 15 мкм) ансамблей частиц алюминия и углерода соответственно. Из рис. 4 видно, что для различных моделей горения разница в неполноте сгорания на выходе из КС монодисперсного углеродного топлива в ~ 2 раза больше, чем в полидисперсном приближении.

На основании представленных результатов численных исследований сгорания металлизированного порошкообразного углеродного топлива в камере сгорания генератора плазмы можно заключить, что учет дефектности кристаллической структуры частиц углеродного компонента, вызванной высокими температурами, значительно снижает неполноту сгорания углерода. Кроме того, установлено, что в условиях генератора плазмы полидисперсная модель в отличие от монодисперсной менее чувствительна к выбору моделей горения частиц углерода.

ЛИТЕРАТУРА

1. Lewis J. B. Modern Aspects of Graphite Technology. — L.; N. Y., 1970.
2. Бабий В. И., Куваев Ю. Ф. Горение угольной пыли и расчет пылеугольного факела. — М.: Энергоатомиздат, 1986.
3. Франк-Каменецкий Д. А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. — М.: Наука, 1987.

4. Канцнельсон Б. Д. Горение угольной пыли под давлением // Тр. ЦКТИ. — Кн. 26 «Топочные устройства». — М.; Л.: Машгиз, 1954.
5. Уолкер П. Л., Русинко Ф., Остин Л. Г. // Реакции углерода с газами. — М.: ИЛ, 1963.
6. Коньков Е. А. К способу определения кинетических свойств пылевидного энергетического топлива // Изв. Томского политехн. ин-та. — 1965. — Т. 139. — с. 264.
7. Островский В. С., Смолякова В. К. Изменение пористости и прочности графита при окислении // ХТТ. — 1976. — № 4. — с. 103.
8. Дурнев В. Н. Многофазная и многокомпонентная модель сплошной среды // Математическое моделирование в науке и технике. — Пермь, 1986. — с. 126.
9. Нигматулин Р. И. Динамика многофазных сред. — М.: Наука, 1987.
10. Стернин Л. Е. Основы газодинамики двухфазных течений в соплах. — М.: Машиностроение, 1974.
11. Vlasov V. S., Durnev V. N., Novikov V. A. The Mathematical Model and Process Numerical Study Results in Metallized Carbon Fuel Combustor of Geophysical MHD Generator // Proc. of 1st Asian — Pacific Int. Symp. on Carbon and Energy Utilization. — Beijing, China, October 15—18, 1990. — P. 348.
12. Дурнев В. Н., Власов В. С. Влияние учета полидисперсности углеродного топлива на электропроводность продуктов сгорания импульсного геофизического МГД-генератора. — Деп. в ТВТ 19.06.91, № 2567.
13. Бутов В. Г., Халимов С. Б. Расчет непотенциальных течений идеального газа в осесимметричных соплах методом приближенной факторизации // ЖВМ и МФ. — 1987. — № 12. — с. 1861.
14. Похил П. Ф., Беляев А. Ф., Фролов Ю. В. и др. Горение порошкообразных металлов в активных средах. — М.: Наука, 1972.
15. Ubhayakar S. K., Williams F. A. // Fall Meeting Paper № 15, Eastern State Section, the Combustion Institute. — Maryland, November 12—13, 1974.
16. Гапонов И. М., Недоспасов А. В., Побережский Л. П. и др. К расчету электропроводности продуктов сгорания // Письма в ЖТФ. — 1975. — № 1. — с. 502.
17. Виргильев Ю. С., Чередник Е. М., Островский В. М. Реакционная способность и ее связь со структурой углеродных материалов // ХТТ. — 1974. — № 3. — с. 123.
18. Дурнев В. Н., Власов В. С. Зависимость температуры микропламени вокруг алюминиевых частиц от выбора моделей горения частиц алюминия и углерода в генераторе плазмы // ТВТ. — 1991. — № 3. — с. 613.
19. Дурнев В. Н., Терзи Е. Д. Эволюция горящих частиц в гетерогенном химическом реакторе // Материалы IX Всесоюзного симпозиума по горению и взрыву. — Черногловка, ОИФХ АН СССР. — 1989. — с. 97.
20. Шорин С. Н. Динамика сгорания твердых топлив во взвешенном состоянии // Изв. ВТИ. — 1935. — № 2. — с. 16.

634050, г. Томск,
НИИПММ при ТГУ

Поступила в редакцию 9/IX 1992,
после доработки — 19/III 1993

УДК 536.46:621.762

В. К. Смоляков

СТРУКТУРНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ ПРИ ГОРЕНИИ БЕЗГАЗОВОЙ СМЕСИ В ПРОТОЧНОМ РЕАКТОРЕ

Построена математическая модель СВС при вынужденной фильтрации инертного газа навстречу фронту безгазового горения. Анализируются структурные превращения пористой шихты, связанные с жидкофазным спеканием, силовым действием фильтрующегося газа и изменением объема конденсированной фазы при химическом взаимодействии. Определены условия трещинообразования и условия получения однородной по длине продуктов структуры. Получены формулы для пористости продукта и скорости горения.

Использование для самораспространяющегося высокотемпературного синтеза реакторов с принудительной фильтрацией инертного газа позволяет путем изменения направления и скорости газового потока регулировать теплоперенос во фронте и менять параметры горения [1, 2]. При теоретическом описании такого процесса игнорируются структурные изменения шихты, связанные с силовым действием фильтрующегося газа, спеканием и объемными изменениями к-фазы при химическом взаимодействии. Поэтому результаты [1, 2] применимы к системам, в которых структурные превращения незначительны, например взаимодействующим исключительно в твердой фазе. В большинстве же практически важных систем в ходе реакции плавится