

УДК 662.612.32

## ПОЛУЭМПИРИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ОЦЕНКИ ПАРАМЕТРОВ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ ЧАСТИЦ ЖЕЛЕЗА

А. В. Фёдоров, А. В. Шульгин

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

Предложена точечная полуэмпирическая математическая модель, удовлетворительно описывающая экспериментальные данные по зависимости времени задержки воспламенения частиц железа от температуры окружающей среды с учетом зависимости предельных температур воспламенения от давления.

Ключевые слова: мелкие частицы металла, насыпка, время задержки воспламенения, математическое моделирование.

### ВВЕДЕНИЕ

В работах [1–4] описаны эксперименты по воспламенению мелких частиц железа в устройстве быстрого сжатия, в котором достигаются высокие термодинамические параметры газовой среды, способствующие воспламенению и сгоранию частиц. Там же дан краткий обзор литературы и представлена физико-химическая математическая модель для описания самовоспламенения в рамках точечного подхода. Ниже мы расширим параметры описания данного явления за счет использования модифицированной модели, в которой учитываются некоторые новые экспериментальные данные по критическим условиям и времени задержки воспламенения микропорошков железа [5]. В экспериментах [5] исследовали частицы железа, помещенные в небольшие керамические чашки, установленные в испытательную камеру устройства быстрого сжатия. Масса образца во всех экспериментах была 0.05 г. Цель настоящей работы — моделирование воспламенения порошка железа, находящегося в условиях экспериментов [5], как процесса воспламенения «приведенного» сферического объема, под которым мы понимаем частицу, полученную осреднением по массе всех частиц, засыпанных в кювету [5]. Оценка радиуса такой «приведенной» частицы дала значение  $r_p = 1.148 \cdot 10^{-3}$  м. Поскольку масса насыпки во всех экспериментах одинакова, радиус «приведенной» частицы также будет одинаков во всех экспериментах. Различается лишь количество частиц  $n_p$  в насыпке. Так, для насыпки частиц размером

20 ÷ 40 мкм (в среднем 30 мкм)  $n_p \approx 56\,150$ , а для частиц размером 1 ÷ 3 мкм (в среднем 2 мкм)  $n_p \approx 18 \cdot 10^7$ .

### ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Уравнения математической модели для описания процесса воспламенения «приведенной» частицы в рамках точечного подхода предложены в [2]:

$$\frac{d\bar{T}_p}{d\bar{t}} = -\frac{3}{2} \text{Nu}(\bar{T}_p - \bar{T}_c) + 3 \frac{q\rho_3}{\lambda_1 T_n} \frac{K}{\bar{h}} (\bar{T}_b - \bar{T}_p) \exp\left(-\frac{\bar{E}}{\bar{T}_p}\right), \quad (1)$$

$$\frac{d\bar{h}}{d\bar{t}} = \frac{\rho_2 c_2}{\lambda_1} \frac{K}{\bar{h}} \exp\left(-\frac{\bar{E}}{\bar{T}_p}\right), \quad (2)$$

$$\bar{T}_p(0) = 1, \quad \bar{h}(0) = \bar{h}_0,$$

где

$$\bar{t} = \frac{t}{t_0}, \quad \bar{T}_p = \frac{T_p}{T_n}, \quad \bar{h} = \frac{h}{r_p}, \quad \bar{E} = \frac{E}{RT_n},$$

$T_p$ ,  $T_c$ ,  $T_b$ ,  $T_n$  — температуры соответственно «приведенной» частицы, кислорода, кипения железа, нормальная,  $\text{Nu}$  — число Нуссельта,  $q$  — тепловой эффект реакции, отнесенный к массе оксида,  $\rho_2$ ,  $\rho_3$  — плотности железа и оксидной пленки,  $h$  — толщина оксидной пленки,  $\lambda_1$  — теплопроводность кислорода,  $c_2$  — удельная теплоемкость железа,  $E$  — энергия активации,  $K$  — предэкспоненциальный множитель,  $R$  — универсальная газовая

постоянная,  $t_0 = \rho_2 c_2 r_p^2 / \lambda_1$  — временной масштаб. Энергия активации взята равной  $E = 3.1 \cdot 10^6$  Дж/кг [2], тепловой эффект реакции — равным  $q = 3 \cdot 10^6$  Дж/кг [6].

Задача (1), (2) решалась численно методом, реализующим формулы обратного дифференцирования (backward differentiation formulae), с переменным шагом и порядком, предназначенным для решения жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка [7].

Будем считать, что предэкспоненциальный множитель  $K$  является функцией температуры кислорода  $T_c$ , отражающей опосредованно его зависимость от плотности кислорода. Эта функция неизвестна и определяется на основе экспериментальных данных путем решения последовательности прямых задач, дающих близкие к экспериментальным значения времени задержки воспламенения  $t_{ign}$ . Экспериментальные значения  $t_{ign}$  получены на основе линейной аппроксимации зависимостей логарифма времени задержки воспламенения от температуры окружающей среды [5].

### ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Экспериментальные [5] и рассчитанные времена задержки воспламенения  $t_{ign}$  и значения предэкспонента  $K$  в зависимости от температуры кислорода  $T_c$  приведены в табл. 1.

В результате численных расчетов получены значения функции  $K(T_c)$  при фиксированном радиусе частиц и давлении в устройстве быстрого сжатия, при котором экспериментальные и расчетные данные по времени задержки воспламенения совпадают с высокой точностью.

Для решения соответствующих задач Коши в промежуточных по температуре кислорода точках находим предэкспонент по формуле

$$K = a_K \exp\left(-\frac{b_K}{T_c}\right). \quad (3)$$

Здесь  $a_K$  и  $b_K$  определяются по предельным значениям функции  $K$  и ее аргумента на основе данных табл. 1. Величины  $a_K$ ,  $b_K$  приведены в табл. 2.

Таблица 1

Значения времени задержки воспламенения и предэкспонента при различных температурах

$T_c$ , К	$t_{ign}$ , мкс		$K$ , м <sup>2</sup> /с
	эксперимент [5]	расчет	
Радиус частиц 20 ÷ 40 мкм, $p = 3.2 \div 4.2$ МПа			
1049.48	390.52	391.22	113 950
991.03	1 708.36	1 709.02	33 250
936.87	7 851.64	7 850.65	9 780
898.71	26 053.2	26 019.1	2 425
866.65	99 508.4	99 490.2	773
Радиус частиц 20 ÷ 40 мкм, $p = 19.4 \div 28.8$ МПа			
877.09	115.06	116.06	382 400
838.34	372.24	371.63	121 000
798.26	1 231.20	1 237.31	42 500
769.24	3 311.62	3 311.35	20 293.5
739.17	10 000.0	10 007.0	7 850
711.46	30 196.7	30 187.7	2 752
Радиус частиц 1 ÷ 3 мкм, $p = 2 \div 2.9$ МПа			
722.06	1 478.22	1 478.78	37 500
692.07	4 576.36	4 572.99	15 600
669.24	11 212.9	11 250.0	7 050
648.68	25 706.9	25 777.6	3 210
Радиус частиц 1 ÷ 3 мкм, $p = 6.3 \div 11.3$ МПа			
655.50	1 413.16	1 417.01	38 474
635.80	4 072.21	4 073.20	17 250
622.11	9 780.93	9 741.24	8 050
614.53	16 603.5	16 687.8	4 875

Таблица 2

Значения коэффициентов  $a_K$ ,  $b_K$  в аппроксимации предэкспонента (3)

Радиус частиц, мкм	$p$ , МПа	$a_K$	$b_K$
20 ÷ 40	3.2 ÷ 4.2	$1\,178\,315\,524 \cdot 10^6$	24 201.25
20 ÷ 40	19.4 ÷ 28.8	$8\,630\,520\,001 \cdot 10^5$	18 890.19
1 ÷ 3	2 ÷ 2.9	$1\,026\,538\,333 \cdot 10^5$	15 690.53
6.3 ÷ 11.3	6.3 ÷ 11.3	$1\,102\,057\,198 \cdot 10^9$	20 311.21

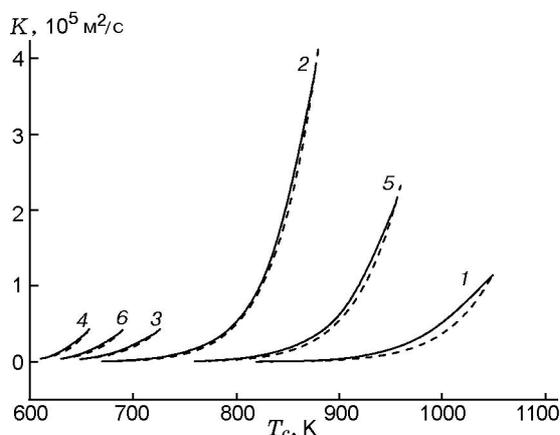


Рис. 1. Вычисленные и аппроксимирующие значения предэкспонента:

сплошные линии — расчет (см. табл. 1), штриховые — экспоненциальная аппроксимация (3); 1 —  $r_p = 20 \div 40$  мкм,  $p = 3.2 \div 4.2$  МПа, 2 —  $20 \div 40$  мкм,  $19.4 \div 28.8$  МПа, 3 —  $1 \div 3$  мкм,  $2 \div 2.9$  МПа, 4 —  $1 \div 3$  мкм,  $6.3 \div 11.3$  МПа, 5 —  $20 \div 40$  мкм,  $13.9$  МПа, 6 —  $1 \div 3$  мкм,  $5.625$  МПа

Аппроксимация (3) позволяет экспоненциальный член в уравнении (1) представить в виде

$$a_K \exp \left[ - \left( \frac{b_K}{T_c} + \frac{E}{RT_p} \right) \right], \quad (4)$$

что удобно при численной реализации. Результаты аппроксимации численных значений  $K$  приведены на рис. 1. Использование данной формулы дает удовлетворительное описание численных значений  $K(T_c)$ .

Расчеты времени задержки воспламенения с численным (см. табл. 1) и аппроксимированным экспоненциальной функцией (3) предэкспонентом показали, что в крайних точках температурных интервалов значения  $t_{ign}$  совпадают полностью (что и должно быть, поскольку по этим точкам и строилась аппроксимация (3)), а в промежуточных точках незначительно отличаются при различных давлениях окружающей среды.

Следующий шаг в разработке модели заключается во внесении в зависимость  $K(T_c)$  давления окружающей среды. Для примера рассмотрим диапазон давлений  $p = 3.7 \div 24$  МПа. Ввиду отсутствия экспериментальных данных в этом интервале воспользуемся предположением о линейной зависимости времени задержки воспламенения в координатах ( $x \equiv 1000/T_c$ ,  $y \equiv \log(t_{ign})$ ) от давления.

## АППРОКСИМАЦИЯ ЗАВИСИМОСТИ $t_{ign}(T_c)$ ПРИ ПРОМЕЖУТОЧНЫХ ЗНАЧЕНИЯХ ДАВЛЕНИЯ

Проведем численный эксперимент по определению времени задержки воспламенения частиц среднего радиуса 2 и 30 мкм при различных давлениях окружающей среды. В [5] представлены линейные зависимости экспериментальных данных  $\log(t_{ign})$  для порошка с радиусом частиц  $20 \div 40$  мкм при  $p = 3.2 \div 4.2$  МПа (в среднем 3.7 МПа, рис. 2, прямая 1) и  $p = 19.4 \div 28.8$  МПа (в среднем 24.1 МПа, рис. 2, прямая 2) от величины  $1000/T_c$ . Поставим задачу определить подобную промежуточную прямую на плоскости ( $x \equiv 1000/T_c$ ,  $y \equiv \log(t_{ign})$ ), соответствующую промежуточному давлению  $(3.7 + 24.1)/2 = 13.9$  МПа. Для этого найдем предельные температуры воспламенения засыпки в предположении простейшей линейной интерполяции по давлению.

Отметим, что если бы значения предельных температур  $T_c(p_c)$  мы получили при изменении давления с малым шагом  $\Delta p_c$ , то точность определения предельных температур была бы достаточно высокой.

Процедура проведена для прямых 3 ( $r_p = 1 \div 3$  мкм при  $p = 2 \div 2.9$  МПа, в среднем 2 мкм при 2.45 МПа) и 4 ( $r_p = 1 \div 3$  мкм при  $p =$

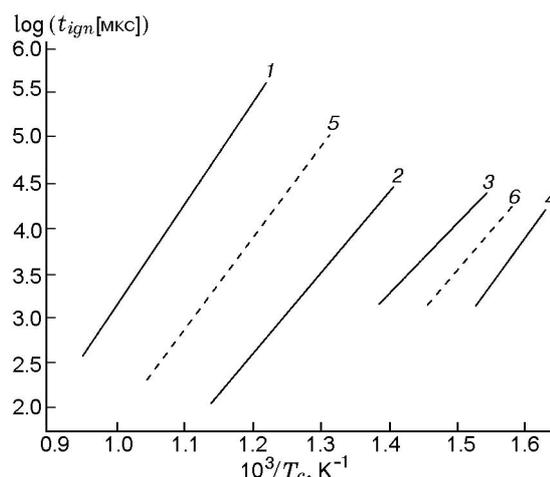


Рис. 2. Экспериментальные [5] (сплошные линии) и численно-экспериментальные (штриховые линии) данные по времени задержки воспламенения:

1 —  $r_p = 20 \div 40$  мкм,  $p = 3.2 \div 4.2$  МПа, 2 —  $20 \div 40$  мкм,  $19.4 \div 28.8$  МПа, 3 —  $1 \div 3$  мкм,  $2 \div 2.9$  МПа, 4 —  $1 \div 3$  мкм,  $6.3 \div 11.3$  МПа, 5 —  $20 \div 40$  мкм,  $13.9$  МПа, 6 —  $1 \div 3$  мкм,  $5.625$  МПа

6.3 ÷ 11.3 МПа, в среднем 2 мкм при 8.8 МПа) при промежуточном давлении  $(2.45 + 8.8)/2 = 5.625$  МПа. Данные расчетов по определенной таким образом математической модели представлены на рис. 2 (штриховые линии). Видно, что расчетные характеристики лежат между экспериментальными значениями, которые являются верхней и нижней границами.

Значения предэкспонента  $K(T_c)$ , соответствующие времени задержки воспламенения при промежуточных давлениях, находим численным расчетом. Затем полученные значения аппроксимируем по формуле (3). Для насыпки частиц среднего радиуса 30 мкм при среднем давлении 13.9 МПа получены коэффициенты  $b_K = 21241.58$ ,  $a_K = 9421613036 \cdot 10^5$ , для частиц среднего радиуса 2 мкм при среднем давлении 5.625 МПа —  $b_K = 17434.28$ ,  $a_K = 3939796530 \cdot 10^6$ . Видно, что вновь найденные постоянные примерно соответствуют среднеарифметическому значению от базовых (см. табл. 2). Соответствующие зависимости приведены на рис. 1.

Таким образом, используя линейную интерполяцию зависимости логарифма времени задержки воспламенения от температуры окружающей среды и предельные значения давления, можно найти зависимость предэкспонента от текущей температуры окружающей среды, т. е. полностью определить параметры полуэмпирической математической модели. При этом зависимость от давления является параметрической.

### ПРЕДЕЛЬНЫЕ ДАВЛЕНИЕ И ТЕМПЕРАТУРА

В [5] экспериментально получены критические условия воспламенения микропорошков железа, а именно зависимость предельного давления кислорода  $p_{lim}$  от предельной температуры кислорода  $T_{lim}$ , которая в плоскости  $(T, p)$  определяет границу области воспламенения. Будем аппроксимировать предельные температуры выражением вида

$$T_{lim} = c \exp\left(-\frac{d}{p_{lim}}\right). \quad (5)$$

Значения  $c$  и  $d$ , полученные в результате аппроксимации экспериментальных данных, приведены в табл. 3, а соответствующие кривые — на рис. 3. Для частиц радиусом 20 ÷ 40 мкм аппроксимация разбита на два интервала по предельным значениям давления и по температуре, которая имеет два участка: один со слабым

Таблица 3  
Параметры  $c$  и  $d$  для аппроксимации (5)

Радиус частиц, мкм	$c$	$d$
1 ÷ 3	610.34	-0.14
20 ÷ 40	651.17 (835 < T ≤ 690 К, 4 < p ≤ 30 МПа)	-1.43 (835 < T ≤ 690 К, 4 < p ≤ 30 МПа)
	471.74 (835 ≤ T ≤ 1030 К, 3.1 ≤ p ≤ 4 МПа)	-2.43, (835 ≤ T ≤ 1030 К, 3.1 ≤ p ≤ 4 МПа)
60 ÷ 90	582.91	-3.16
100 ÷ 140	577.75	-5.23

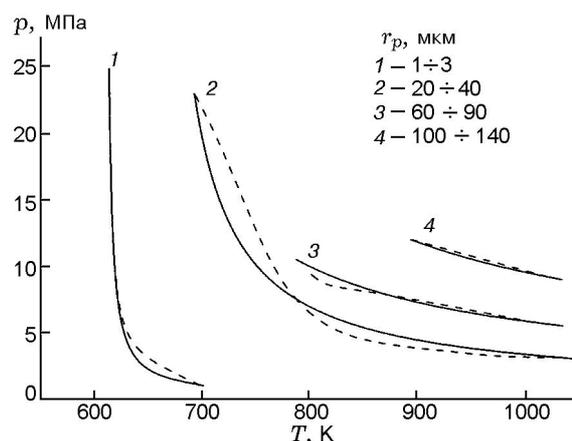


Рис. 3. Предельные кривые воспламенения: штриховые линии — эксперименты [5], сплошные — аппроксимация (5)

изменением предельного давления от температуры, второй — с резким.

Модифицируем выражение для предэкспоненциального множителя следующим образом [8]:

$$K(T_c, p_c) = \begin{cases} K(T_c), & T_c \geq T_{lim}, \\ 0, & T_c < T_{lim}. \end{cases} \quad (6)$$

Здесь  $K(T_c)$  — экспоненциальная зависимость (3), приведенная выше для различных значений  $p_c$ . Таким образом, если при фиксированном давлении кислорода его температура  $T_c$  меньше предельной температуры воспламенения  $T_{lim}$ , то химическая реакция окисления незначительна и не учитывается в математической модели. То есть вклад тепловыделения химической реакции не приводит систему к

Таблица 4  
Время задержки воспламенения в зависимости  
от температуры окружающей среды  
при различных давлениях

$p$ , МПа	$T_{lim}$ , К	$T_c$ , К	$t_{ign}$ , мкс	
			расчет	эксперимент
Радиус частиц 20 ÷ 40 мкм				
24	691	650	—	—
		700	50 939.4	49 930.4
		711.46	30 187.7	30 196.7
		739.17	10 007	10 000
		750	7 708.39	7 632.03
		769.24	3 311.35	3 311.62
		798.26	1 237.31	1 231.2
		800	1 065.1	1 054.0
		838.34	371.631	372.24
		850	228.37	236.66
877.09	116.056	115.06		
4	865	850	—	—
		866.65	99 490.2	99 508.4
		898.71	26 019.1	26 053.2
		900	25 342.2	24 914.7
		936.87	7 850.65	7 851.64
		950	5 514	5 364.8
		991.03	1 709.02	1 708.36
		1 000	1 324	1 346.9
		1 049.49	399.22	398.52
		1 050	388	385.7
Радиус частиц 1 ÷ 3 мкм				
2.5	645	600	—	—
		648.68	25 777.6	25 706.9
		650	25 318	24 281.8
		669.24	11 250	11 212.9
		675	5 650	5 593.26
		692.07	4 572.99	4 576.36
		700	2 346	2 275.35
		722.06	1 478.78	1 479.22
8.5	620	600	—	—
		614.526	16 687.8	16 603.5
		622.111	9 741.24	9 780.93
		625	9 297	9 325.1
		635.801	4 073.2	4 072.21
		650	2 012	1 991.54
		655.50	1 417.01	1 413.16
		675	481	485.86

воспламенению. Условно можно полагать, что толщина оксидной пленки не изменяется, разогрев частицы осуществляется только за счет конвективного теплообмена с окружающей средой и в пределе температура совокупности ча-

стиц стремится к температуре окружающей среды  $T_c$ . То есть в этом случае воспламенения частицы не происходит.

Привлекает внимание построение аналитической зависимости предэкспонента от  $T_c$ ,  $p_c$ . Предлагаем следующий алгоритм такого построения. Фиксируется предельное давление, по формуле (5) определяется соответствующая предельная температура и по известной прямой в плоскости ( $1000/T_c$ ,  $\log(t_{ign})$ ) проводится прямая воспламенения. Затем можно определить и вид  $K(T_c)$ .

В табл. 4 приведены результаты расчета по модифицированной модели и полученные выше данные (без корректировки (6)). Экспериментальные значения времени задержки воспламенения получены линейной интерполяцией данных [5].

При температуре среды, близкой к предельной, время задержки воспламенения на порядки больше по сравнению с его значением при более высоких температурах кислорода.

Выше путем линейной интерполяции были определены предельные температуры воспламенения при промежуточных значениях давления. Эти предельные температуры можно найти, аппроксимируя экспериментальные данные по формуле (5). Результаты приведены на рис. 4 вместе с экспериментальными предельными кривыми воспламенения частиц радиусом 20 ÷ 40 мкм. Как видим, для более мелких частиц оба подхода аппроксимации близки, а

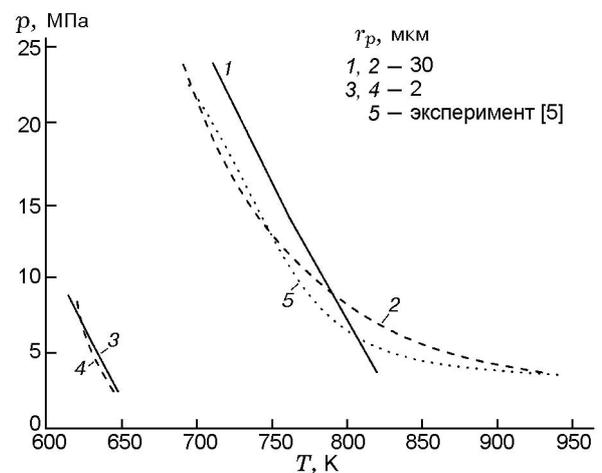


Рис. 4. Зависимость предельной температуры от давления окружающей среды:

линии 1, 3 — линейная интерполяция, 2, 4 — экспоненциальная интерполяция по формуле (5)

для крупных частиц линейная аппроксимация неудовлетворительна. Поэтому мы проводили расчеты по экспоненциальной зависимости.

### ВЫВОДЫ

В работе предложена и верифицирована полуэмпирическая физико-химическая точечная математическая модель для описания воспламенения частиц железа, в которой учитывается зависимость предельных температур воспламенения от давления в диапазонах  $p = 2 \div 25$  МПа и  $T = 600 \div 1100$  К.

### ЛИТЕРАТУРА

1. **Федоров А. В., Шульгин А. В.** О воспламенении железной насыпки в устройстве быстрого сжигания // Физика горения и взрыва. — 2011. — Т. 47, № 6. — С. 98–100.
2. **Leschevich V. V., Penyazkov O. G., Rostaing J.-C.** Autoignition domains of metal micro particles in oxygen atmosphere // Proc. 8th ISHPMIE, September 5–10, 2010, Yokohama, Japan. — N ISH-094. — P. 1–6.
3. **Лещевич В. В., Пенязьков О. Г., Федоров А. В., Шульгин А. В.** Условия и время задержки самовоспламенения микрочастиц железа в кислороде // Инж.-физ. журн. — 2012. — Т. 85, № 1. — С. 139–144.
4. **Лещевич В. В., Пенязьков О. Г., Федоров А. В., Шульгин А. В.** Самовоспламенение порошков микрочастиц железа в кислородной среде // Взаимодействие высококонцентрированных потоков энергии с материалами в перспективных технологиях и медицине: докл. IV Всеросс. конф. (Россия, Новосибирск, 22–25 марта 2011 г.). — Новосибирск: Нонпарель, 2011. — С. 163–167.
5. **Лещевич В. В., Пенязьков О. Г., Каспаров К. Н., Белозерова Л. И.** Критические условия и время самовоспламенения микрочастиц железа в адиабатически нагретом кислороде // Тепло- и массоперенос — 2011. — Минск: ИТМО им. А. В. Лыкова НАН Беларуси, 2011. — С. 249–254.
6. **Болобов В. И., Подлевских Н. А.** Расчетный анализ условий воспламенения металлических компактных образцов фольги в кислороде // Физика горения и взрыва. — 2001. — Т. 37, № 6. — С. 46–55.
7. **Hall G., Watt J. M.** Modern Numerical Methods for Ordinary Differential Equations. — Oxford Univ. Press, 1976.
8. **Федоров А. В., Харламова Ю. В.** Воспламенение частицы алюминия // Физика горения и взрыва. — 2003. — Т. 39, № 5. — С. 65–68.

*Поступила в редакцию 10/VIII 2011 г.*