

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ МАГНИЯ В РАСШИРЕННОМ ДИАПАЗОНЕ ПАРАМЕТРОВ

А. В. Фёдоров, Д. А. Тропин

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

Предложена математическая модель воспламенения частицы магния с учетом гетерогенной химической реакции, позволяющая найти конечную температуру частицы после воспламенения и учитывающая область теплового влияния частицы на газ. Найдено решение задачи в стационарном случае, что позволило дать классификацию тепловой истории системы частица + газ. Математическая модель согласована с экспериментальными данными по зависимости времени задержки воспламенения от давления газа и радиуса и зависимости предельной температуры от радиуса частицы и давления окружающего газа. В рамках данной математической модели выявлено также влияние размера газового слоя вблизи частицы на интегральные параметры воспламенения.

Ключевые слова: воспламенение мелких частиц, математическое моделирование, время задержки воспламенения.

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Проблема физико-математического моделирования воспламенения и горения образцов металлов представляет значительный интерес для различных отраслей промышленности. В работе [1] представлены математические модели процесса воспламенения мелких металлических частиц, когда низкотемпературное окисление проходит на поверхности частицы и не учитывается тепло, рассеиваемое в газовую фазу. Это означает, что толщина так называемой «приведенной пленки» пренебрежимо мала. Представлялось интересным изучить влияние на тепловую историю реагирующей частицы данного фактора (см. [2]). В настоящей работе результаты, полученные в [2], обобщаются на случай математической модели, позволяющей получить реалистичную температуру частицы после воспламенения. Обусловлено это использованием представлений о торможении части гетерогенных реакций, протекающих на поверхности частицы, при достижении некоторой предельной температуры T_m [1]. Ниже мы будем рассматривать воспламенение образцов магния размером $15 \div 60$ мкм и $300 \div 600$ мкм в воздухе с температурой $1000 \div 1500$ К.

Физико-математическая модель

Рассмотрим задачу о воспламенении об-

разцов магния, покрытых оксидным слоем. В качестве таких образцов взяты магниевая пластина, цилиндрическая нить и сферически-симметричная частица с характерными размерами $r_p = 15 \div 60$ мкм и $r_p = 300 \div 600$ мкм, окруженные слоем газа толщиной L .

Уравнения сохранения энергии, записанные для конденсированной и газовой фаз и описывающие воспламенение образцов металла, имеют следующий вид:

$$\rho_2 c_2 \frac{\partial T_2}{\partial t} = \lambda_2 \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\nu \frac{\partial T_2}{\partial r} \right), \quad 0 \leq r \leq r_p, \quad (1)$$

$$\rho_1 c_1 \frac{\partial T_1}{\partial t} = \lambda_1 \frac{1}{r^\nu} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\nu \frac{\partial T_1}{\partial r} \right), \quad r_p \leq r \leq L, \quad (2)$$

где ν — показатель симметрии, равный 0, 1, 2 для плоского, цилиндрического и сферического случаев соответственно, ρ_i , λ_i , c_i ($i = 1, 2$) — плотности, теплопроводности и теплоемкости фаз, индексами 1 и 2 отмечены параметры газа и частицы.

Уравнения (1), (2) должны удовлетворять следующим крайевым и начальным условиям:

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

$$r = L: \quad \lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial r} = -\alpha(T_1 - T_{air}), \quad (3)$$

$$r = r_p: \quad T_1 = T_2, \quad \lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial r} + q_0 \rho_3 \frac{dh}{dt} = \lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial r},$$

$$\frac{dh}{dt} = K(T_m - T) \exp\left(-\frac{E}{RT}\right).$$

Здесь q_0 — удельное тепловыделение на единицу массы оксида, ρ_3, ρ_1, ρ_2 — плотности оксида, газа и образца соответственно, h — толщина оксидной пленки, dh/dt — скорость изменения толщины оксидной пленки, K — предэкспонент в законе окисления, E — энергия активации низкотемпературного окисления, R — универсальная газовая постоянная, $\alpha = \text{Nu}/2$ — коэффициент теплообмена, Nu — число Нуссельта, T_{air}, T_m — соответственно температуры на границе газовой области (пленки) и образца после воспламенения. Функция $h(t)$ есть зависимость толщины оксидной пленки от времени. Поскольку для магния скорость изменения толщины пленки не зависит от $h(t)$, то задача расщепляется и становится полностью тепловой. При этом можно пренебречь изменениями функции $h(t)$, что позволяет ставить нелинейное краевое условие на уже неподвижной границе частицы.

Значения физико-химических параметров таковы: $\rho_1 = 1.29 \text{ кг/м}^3$, $\rho_2 = 1740 \text{ кг/м}^3$, $\rho_3 = 3600 \text{ кг/м}^3$, $c_1 = 1000 \text{ Дж/(кг} \cdot \text{К)}$, $c_2 = 1100 \text{ Дж/(кг} \cdot \text{К)}$, $\lambda_1 = 2.47 \cdot 10^{-2} \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}$, $\lambda_2 = 156 \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}$, $E = 4.3 \cdot 10^6 \text{ Дж/кг}$, $R = 284 \text{ (кг} \cdot \text{К)/Дж}$, $T_0 = 300 \text{ К}$, $T_m = 2200 \text{ К}$.

Введем безразмерные величины:

$$\bar{r} = \frac{r}{r_p}, \quad \bar{L} = \frac{L}{r_p}, \quad \bar{T}_i = \frac{T_i}{T_0}, \quad \bar{t} = t \frac{\lambda_2}{\rho_2 c_2 r_p^2} = \frac{t}{t_0},$$

$$t_0 = \frac{\rho_2 c_2 r_p^2}{\lambda_2}, \quad \bar{q}_0 = \frac{q_0 \rho_3 K r_p}{\lambda_1}, \quad \bar{E} = \frac{E}{RT_0},$$

$$\bar{\lambda} = \frac{\lambda_2}{\lambda_1}, \quad \bar{C}_1 = \frac{\lambda_1 \rho_2 c_2}{\lambda_2 \rho_1 c_1},$$

и далее будем считать уравнения (1), (2) безразмерными.

Стационарная задача

Дадим предварительно решение сформулированной сопряженной задачи в стационарном случае плоской, цилиндрической и сферической симметрии образца.

Плоский образец. Используя методы элементарной теории катастроф [1], в предположении стационарности температуры образца T'_2 получаем нелинейное уравнение, определяющее

многообразие катастроф/воспламенений в виде

$$\beta = \beta(\alpha, L, q_0, \nu, E, T_{air}) = \frac{\alpha L^\nu / q_0}{1 + \frac{\alpha L}{\nu - 1} - \frac{\alpha L^\nu}{\nu - 1}} = \frac{(T_m - T'_2) \exp(-E/T'_2)}{T'_2 - T_{air}}. \quad (4)$$

Это соотношение определяет типы тепловой динамики образцов, о которых будет сказано ниже. Отметим, что в отличие от [2] в уравнение (4) входит предельная температура T_m . После определения температуры на контакте между ядром частицы и оксидной пленкой, которую мы обозначили через T'_2 , можно найти коэффициенты a_1, b_1 по формулам

$$a_1 = -\frac{\alpha L^\nu (T'_2 - T_{air})}{1 - \frac{\alpha L}{\nu - 1} + \frac{\alpha L^\nu}{\nu - 1}}, \quad (5)$$

$$b_1 = T'_2 - \frac{\alpha L^\nu (T'_2 - T_{air})}{\nu - 1 - \alpha L(1 - L^{\nu-1})},$$

а следовательно, и температуру газа, окружающего частицу, используя представление $T_1 = -a_1 + b_1$.

Цилиндрическая нить. В случае $\nu = 1$ уравнение для многообразия катастроф можно записать в виде

$$\beta = \frac{(T_m - T'_2) \exp(-E/T'_2)}{T'_2 - T_{air}} = \frac{\alpha L / q_0}{1 + \alpha L \ln L}.$$

Сферическая частица. При $\nu = 2$ аналогично получаем

$$\beta = \frac{(T_m - T'_2) \exp(-E/T'_2)}{T'_2 - T_{air}} = \frac{\alpha L^2 / q_0}{1 + \alpha L(1 - L)}.$$

Данные многообразия представляют собой некоторые кривые в плоскости (β, T'_2) , где T'_2 — температура образца после завершения реакции. Для всех трех образцов кривая универсальна. Отличия проявляются лишь при переходе к конкретным значениям β, T'_2 . Структурный вид данного многообразия показан на рис. 1. Можно легко рассчитать точки разворота многообразия:

$$T_{\pm} = \frac{E(T_m + T_{air})}{2(T_m + E - T_{air})} \times \left[1 \pm \sqrt{1 - \frac{4T_m T_{air} (T_m + E - T_{air})}{E(T_m + T_{air})^2}} \right].$$

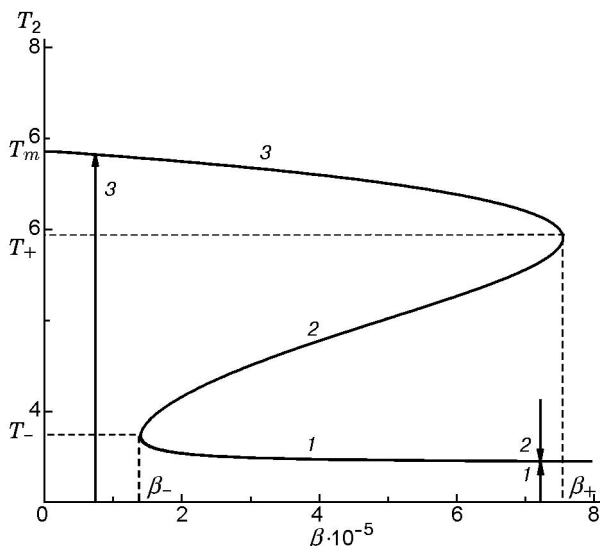


Рис. 1. Многообразие катастроф/воспламенений

Значения параметра β в этих точках:

$$\beta_{\pm} = \frac{T_m - T_{\pm}}{T_{\pm} - T_{air}} \exp\left(-\frac{E}{T_{\pm}}\right).$$

Очевидно, что данное многообразие имеет три ветви, которые определяют типы тепловой динамики образца: 1 — регулярный нагрев частицы, 2 — режим с погасанием частицы, 3 — воспламенение частицы, которое осуществляется при переходе на верхнюю ветвь многообразия.

Нестационарная задача

О методе расчета. После решения нелинейной краевой задачи (1)–(3) в стационарном приближении использовалась консервативная разностная схема с весами [3] для определения тепловой истории системы в нестационарном случае. После дискретизации получена система алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей, решение которой проведено методом прогонки.

Тестовые расчеты. Результаты реализации вышеизложенного численного метода для решения нелинейной краевой задачи для трех тестовых случаев приведены ниже. Были рассмотрены те же упомянутые выше типы тепловой истории частицы, что и в стационарном приближении, и показано, что в зависимости от начальных значений β и T_2 образец либо нагревается, либо охлаждается, либо воспламеняется (рис. 2).

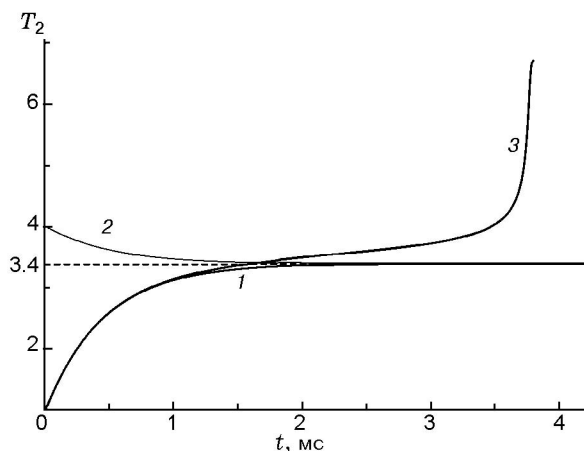


Рис. 2. Типы тепловой динамики образцов:

1 — режим регулярного нагрева, 2 — режим с погасанием, 3 — режим воспламенения

Проиллюстрируем возможные варианты тепловой истории частицы в приведенной пленке. Рассмотрим первый случай (1 на рис. 2). Выберем значения $\beta = 8.16 \cdot 10^{-5}$, $T_2 = 300$ К. Тогда решение краевой задачи выйдет на первую ветвь многообразия, т. е. произойдет нагрев частицы до температуры, значение которой принадлежит первой ветви. Это соответствует первому типу тепловой динамики образца — регулярный нагрев.

Во втором случае выберем значение β точно таким же, как и в первом, однако начальное значение температуры возьмем больше, чем на первой ветви: $T_2 = 1200$ К. В этом случае температура частицы при больших временах расчета будет приближаться к значению, определяемому ветвью 1 многообразия воспламенений. Это соответствует режиму с погасанием. То есть горящий образец перестает получать тепло от химической реакции в достаточном количестве и остывает до температуры, близкой к температуре окружающего газа (2 на рис. 2).

В третьем случае возьмем значения $\beta = 8.16 \cdot 10^{-6}$, $T_2 = 300$ К. Тогда температура образца будет стремиться к значению, лежащему на третьей ветви, что соответствует случаю воспламенения образца (3 на рис. 2). Время задержки воспламенения в данном случае и ниже определяется по критерию $\frac{dT}{dt} \rightarrow \infty$. Отметим, что вторая ветвь, как известно, является неустойчивой.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ РАСЧЕТОВ

Далее будем рассматривать только такой тип тепловой динамики частицы, как воспламенение. Полезным здесь оказывается определение экспериментально наблюдаемых величин: времени задержки воспламенения и предельной температуры воспламенения образца.

Время задержки воспламенения

Перейдем к анализу первого экспериментально наблюдаемого параметра — времени задержки воспламенения в зависимости от симметрии задачи. На рис. 3 представлены зависимости времени задержки воспламенения от характерного размера образца в случае мелких частиц (15 ÷ 60 мкм). Зависимости получены для всех трех видов симметрии образцов при различных значениях температуры окружающего газа.

Видно, что при уменьшении радиуса и увеличении температуры окружающего газа время задержки воспламенения уменьшается. В некоторых точках зависимости обрываются. Это означает, что при данной температуре окружающего газа при уменьшении размера частицы воспламенение не происходит. Для этого размера частицы, на котором происходит обрыв графика, температура газа предельна. Видно также, что при уменьшении размера предельная температура растет. Объяснение этого роста будет дано ниже, при рассмотрении предельной температуры воспламенения.

Такие же зависимости были рассчитаны и для крупных частиц размером 300 ÷ 600 мкм (рис. 4). Предельные температуры крупных частиц меньше, чем у мелких. Представленные на рис. 4 зависимости, как и в случае мелких частиц, монотонно убывают с уменьшением размера. При этом времена задержки воспламенения уменьшаются при увеличении температуры окружающей среды.

Если сравнивать зависимости для различных образцов, то видно, что наименьшие времена задержки воспламенения характерны для сферической частицы, наибольшие — для плоской частицы.

Для объяснения этого факта рассмотрим точечную модель в виде

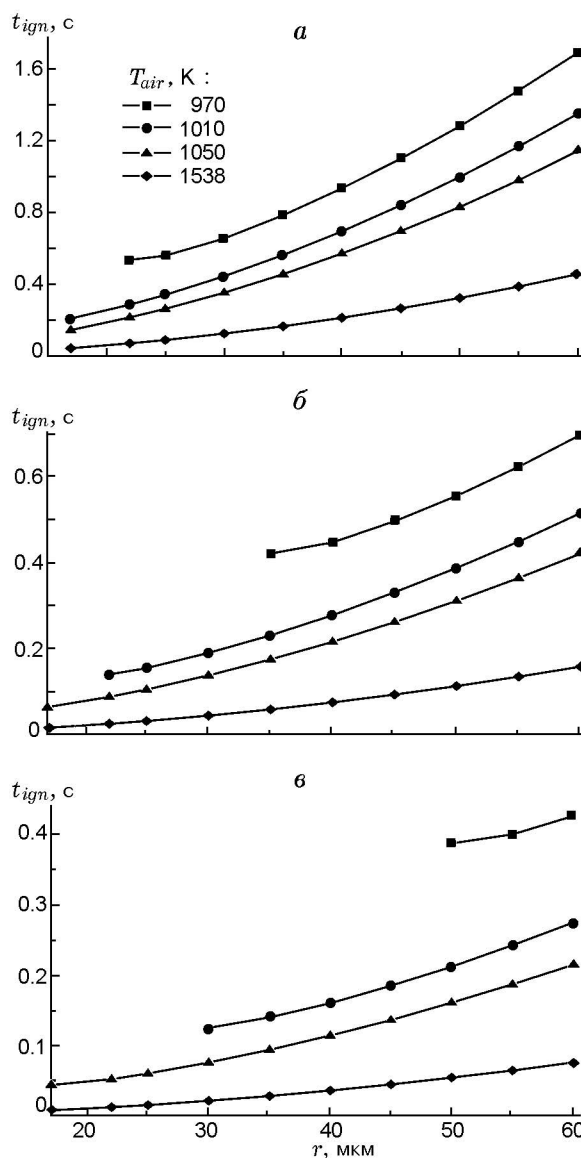


Рис. 3. Время задержки воспламенения частицы в зависимости от ее размера. Мелкие частицы:

a — пластина, *б* — нить, *в* — частица

$$c_s \rho_s \frac{dT}{dt} = -\alpha \frac{S}{V} (T - T_{air}) + \frac{S}{V} q \rho k \exp\left(-\frac{E}{RT}\right).$$

Для разных видов симметрии образцов это уравнение отличается только отношением площади к объему S/V . Определим это отношение для трех видов симметрии:

$$\nu = 0: \quad V = 2r_p l^2, \quad S = l^2, \quad \frac{S}{V} = \frac{1}{2r_p},$$

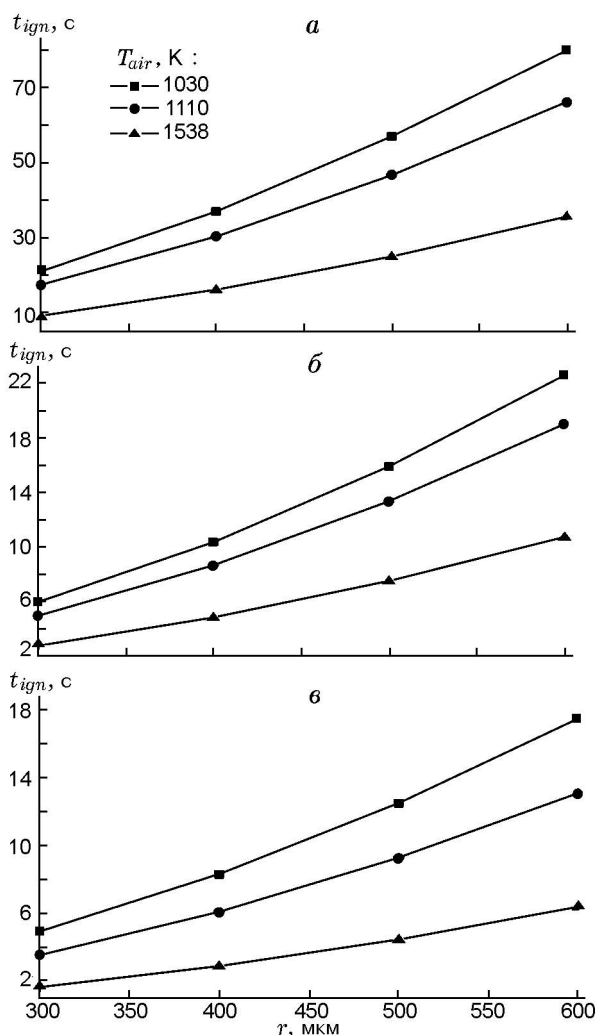


Рис. 4. Время задержки воспламенения. Крупные частицы:

a — пластина, *б* — нить, *в* — частица

$$\nu = 1: \quad V = \pi r_p^2 l, \quad S = 2\pi r_p l, \quad \frac{S}{V} = \frac{2}{r_p},$$

$$\nu = 2: \quad V = \frac{4}{3} \pi r_p^3, \quad S = 4\pi r_p^2, \quad \frac{S}{V} = \frac{3}{r_p}.$$

Уравнение точечной модели, которое определяет время задержки воспламенения, имеет вид автономного обыкновенного дифференциального уравнения с масштабом для времени задержки воспламенения $\tau = 1/f'(T_2')$. Очевидно, что стационарное значение температуры T_2' , определяемое из уравнения катастроф/воспламенений, одинаково для всех видов образцов. Теперь оценим время задержки воспламенения t_{ign} :

$$-\frac{\alpha}{c_s \rho_s} \frac{S}{V} + \frac{qk}{c_s} \frac{S}{V} \exp\left(-\frac{E}{RT_2'}\right) \frac{E}{RT_2'^2} = \frac{1}{t_{ign}},$$

$$\frac{S}{V} \left[-\frac{\alpha}{c_s \rho_s} + \frac{qkE}{c_s R T_2'^2} \exp\left(-\frac{E}{RT_2'}\right) \right] = \frac{1}{t_{ign}}.$$

Для всех трех видов образцов выражение в квадратных скобках одинаково, следовательно, $t_{ign} \sim V/S$ и

$$\nu = 2: \quad t_{ign} \sim \frac{r_p}{3},$$

$$\nu = 1: \quad t_{ign} \sim \frac{r_p}{2},$$

$$\nu = 0: \quad t_{ign} \sim 2r_p.$$

Отсюда видно, что действительно время задержки воспламенения является наименьшим для сферически-симметричного образца и наибольшим для плоского.

Исследуем далее влияние температуры окружающего газа T_{air} на время задержки воспламенения t_{ign} для всех типов образцов. На рис. 5 представлены данные расчетов t_{ign} в зависимости от T_{air} для частиц различных размеров. Видно, что при увеличении температуры окружающего газа время задержки воспламенения меняется все меньше и затем выходит на стационарное значение. Это можно объяснить следующим образом. Весь процесс нагрева образца условно можно разбить на две стадии. На первой стадии нагрев происходит за счет подвода тепла из окружающей среды, во второй, высокотемпературной — за счет химической реакции низкотемпературного окисления. При увеличении температуры окружающего газа увеличивается теплоподвод к частице. Это уменьшает продолжительность первой стадии и оказывает слабое влияние на продолжительность второй [3, 4]. Учтем также, что продолжительность первой стадии мала по сравнению со всем временем нагрева (рис. 6). Таким образом, увеличение температуры окружающей среды начиная с $T_0 = 1200$ К для частиц размером 60 мкм и с $T_0 = 1500$ К для частиц размером 30 мкм незначительно влияет на уменьшение продолжительности первой стадии. Следовательно, слабо будет меняться и продолжительность всего нагрева. То есть время задержки воспламенения при возрастании температуры будет меняться все меньше и в итоге выйдет на стационарное значение.

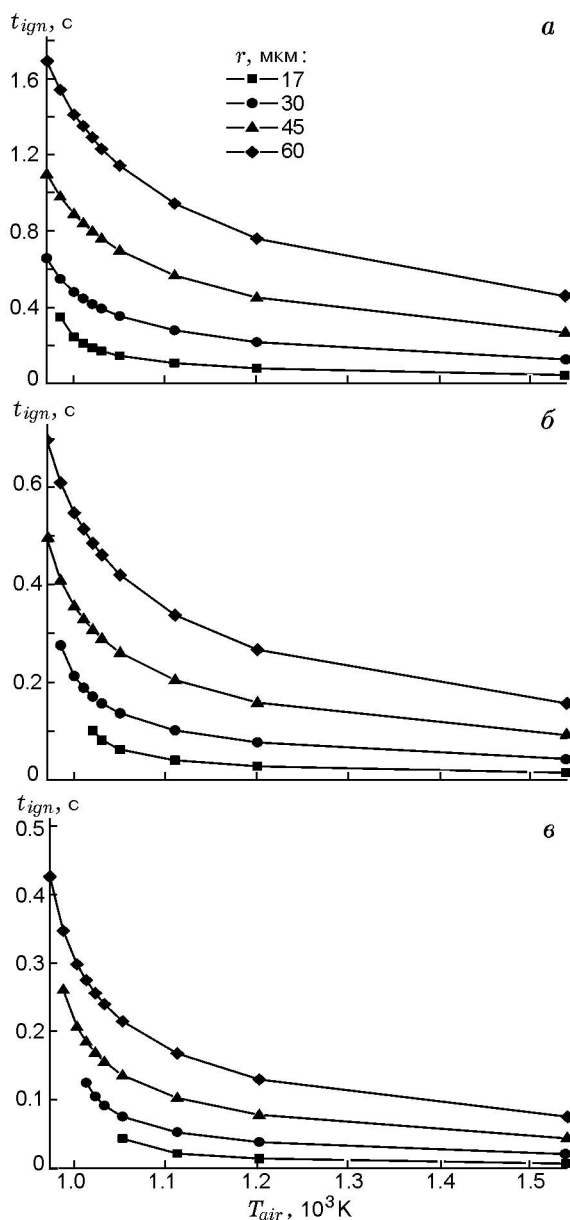


Рис. 5. Время задержки воспламенения в зависимости от температуры окружающего газа: *a* — пластина, *b* — нить, *v* — частица

Для крупных частиц в том же диапазоне температур (1030 ÷ 1500 К) не наблюдалось выхода на стационарное значение (рис. 7). Для этого в данном случае требуются более высокие температуры окружающего газа. Это означает, что если продолжить изучаемые зависимости в область температур $T > 1500$ К, то время задержки воспламенения также выйдет на стационарное значение.

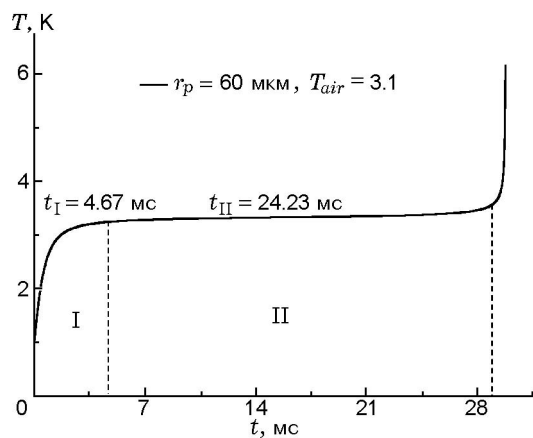


Рис. 6. Изменение температуры образца со временем

Предельная температура воспламенения

Перейдем к описанию второго экспериментально наблюдаемого параметра — к предельной температуре воспламенения T_{lim} в зависимости от изменения радиуса частицы. Как известно, T_{lim} — это минимальная температура окружающего газа, при которой еще возможно воспламенение.

На рис. 8 приведены зависимости предельной температуры воспламенения от размера образца. Экспериментальная зависимость взята из [5]. Вертикальными отрезками прямых обозначен разброс экспериментальных данных. Видно, что расчетные данные удовлетворительно описывают экспериментальные в указанном диапазоне размеров частиц (15 ÷ 90 мкм).

На рис. 9 представлена обобщенная характеристика в виде зависимости предельной температуры воспламенения от размеров частиц, лежащих в диапазонах 15 ÷ 60 мкм и 300 ÷ 600 мкм, для образцов сферической, цилиндрической и плоской симметрии. Видно, что предельная температура воспламенения увеличивается с уменьшением радиуса, что соответствует экспериментам [5], как это было показано выше.

Влияние давления окружающей среды

Расширим область описания параметров воспламенения частицы в зависимости от давления газа. Пусть предэкспонент в законе окисления линейным образом зависит от давления: $K(p) = 0.0146 + 0.0774p$. С таким образом опре-

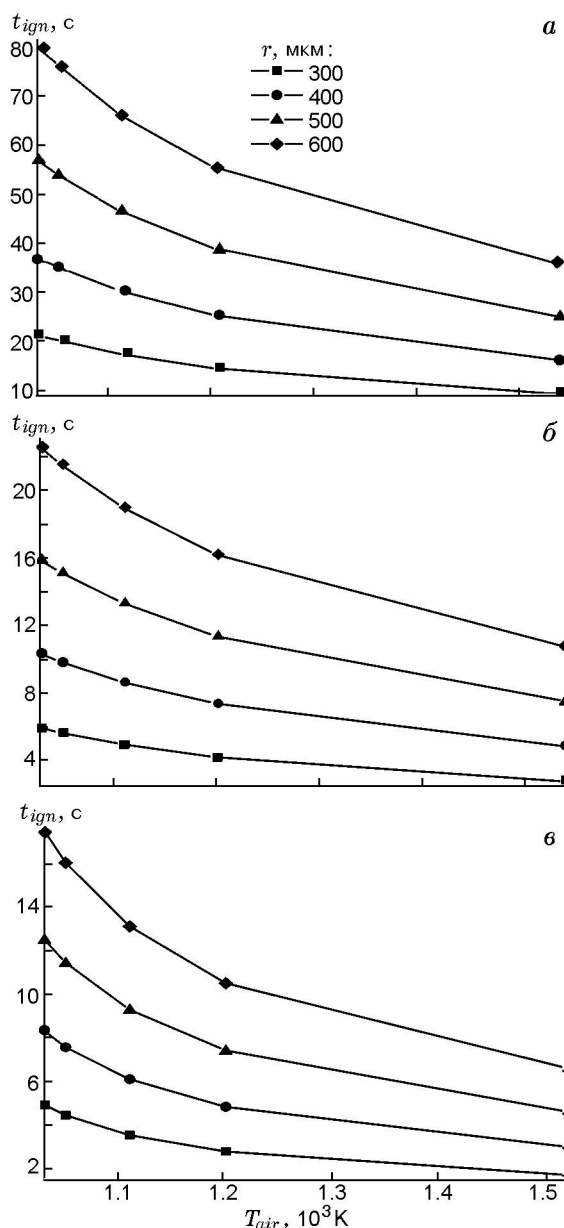


Рис. 7. Время задержки воспламенения в зависимости от температуры окружающего газа. Крупные частицы:

a — пластина, *б* — нить, *в* — частица

деленной функцией $K(p)$ были построены зависимости предельной температуры от размера частиц при различных давлениях окружающего газа (рис. 10).

Видно, что при увеличении давления расчетная предельная температура уменьшается. В момент воспламенения теплоподвод к частице за счет химической реакции должен быть близок к теплоотводу в окружающую среду.

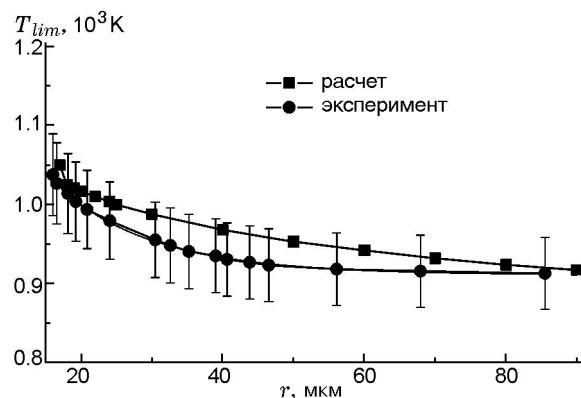


Рис. 8. Предельная температура воспламенения

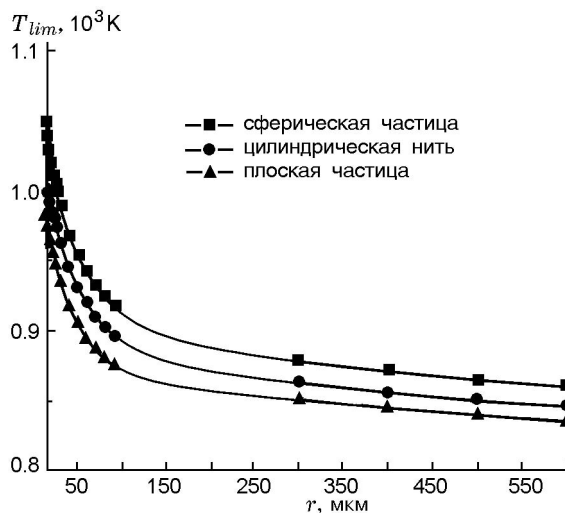


Рис. 9. Обобщенная характеристика

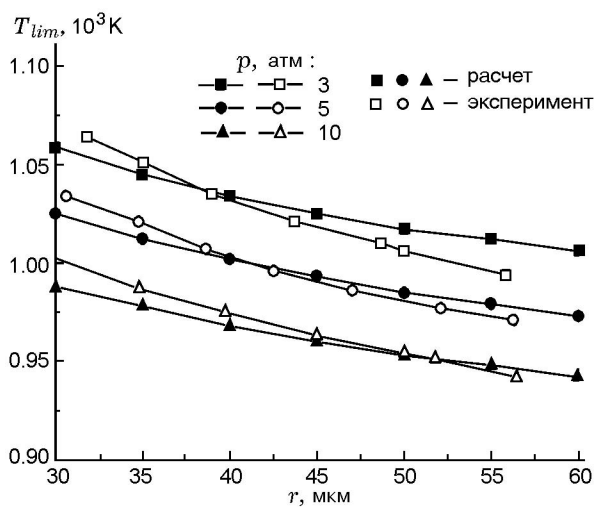


Рис. 10. Зависимость предельной температуры воспламенения от радиуса и давления окружающей среды

Так как температура частицы в момент воспламенения слабо зависит от изменения параметров среды, рост давления приводит к увеличению тепловыделения за счет гетерогенной химической реакции, что обуславливает снижение предельной температуры воспламенения [3, 4].

Заметим, что углы наклона рассчитанных и экспериментальных зависимостей слегка различаются. Это обусловлено тем обстоятельством, что предэкспонент $K(p)$ зависит, вообще говоря, еще и от размера частиц. Но мы, тем не менее, подбирали одно значение предэкспонента для всех размеров образцов: оно соответствует образцу размером 45 мкм. При увеличении радиуса предэкспонент будет расти, что приведет к уменьшению предельной температуры. При уменьшении размера эффект будет обратным. Следовательно, если учитывать изменение предэкспонента при изменении радиуса, то можно ожидать, что рассчитанные значения предельной температуры будут в большей мере соответствовать экспериментальным данным.

ВЫВОДЫ

• Впервые в сопряженной постановке предложена математическая модель воспламенения образцов, определяющая конечную температуру образца после воспламенения.

• На основе методов элементарной теории катастроф построены многообразия катастроф/воспламенений, определяющие условие воспламенения и типы тепловой динамики образцов магния.

• Численно показано, что данная модель удовлетворительно описывает экспериментально наблюдаемые параметры $t_{ign}(r, T_{air})$ и $T_{lim}(r, p_0)$ в широком диапазоне радиусов частицы (15 ÷ 600 мкм) и давлений (1 ÷ 10 атм) окружающей среды.

ЛИТЕРАТУРА

1. Федоров А. В., Фомин В. М., Гостев Ю. А. Динамика и воспламенение газозвесей. Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2006.
2. Федоров А. В., Шульгин А. В. Сопряженная математическая модель воспламенения образцов магния // Физика горения и взрыва. 2006. Т. 42, № 3. С. 57–63.
3. Калиткин Н. Н. Численные методы. М.: Наука, 1978.
4. Кудрявцев В. М., Сухов А. В., Воронцовский А. В. Исследование воспламенения частиц магния в воздухе // Изв. вузов. Машиностроение. 1977. № 5. С. 81–84.
5. Cassel H. M., Liebman I. Combustion of magnesium particles – 2. Ignition temperatures and thermal conductivities of ambient atmospheres // Combust. Flame. 1963. V. 7, N 1. P. 79–81.

Поступила в редакцию 12/ХІІ 2007 г.