

ВОСПЛАМЕНЕНИЕ ЧАСТИЦЫ МАГНИЯ (РАСПРЕДЕЛЕННАЯ МОДЕЛЬ)

УДК 534.222.2;662.612.32

Ю. А. Гостеев, А. В. Федоров

Институт теоретической и прикладной механики СО РАН,
630090 Новосибирск

На основе распределенной модели тепловой динамики частицы магния, учитывающей гетерогенную химическую реакцию низкотемпературного окисления, изучены постановка и существование решения задачи Коши для ее асимптотического варианта (промежуточная точечная модель), сводящегося к системе трех автономных дифференциальных уравнений. Прямыми расчетами в рамках распределенной модели показана малость градиента температуры вдоль радиуса частицы, что обосновывает возможность применения точечной и промежуточной точечной моделей для расчета тепловой динамики (для частиц с радиусом ≤ 600 мкм). Времена задержки воспламенения при этом могут отличаться на 8%. Показана возможность погасания мелкой нагретой частицы магния под действием высокоскоростного потока газа.

В [1, 2] методами элементарной теории катастроф и численно изучался процесс воспламенения частицы Mg в рамках точечной модели теплового взрыва, предложенной в работе [3]. Данная работа посвящена получению уравнений точечной модели из математической, принимающей во внимание распределение температуры частицы по радиусу, и выявление ее применимости в некотором диапазоне изменения радиуса частиц от 15 до 600 мкм.

1. ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ О ВОСПЛАМЕНЕНИИ ЧАСТИЦЫ МЕТАЛЛА В РАСПРЕДЕЛЕННОЙ МОДЕЛИ

1.1. НЕЛИНЕЙНАЯ КРАЕВАЯ ЗАДАЧА ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

Рассмотрим сферическую частицу, помещенную в высокотемпературный поток газа с температурой \bar{T} . Под действием температуры на поверхности частицы магния в тонком по сравнению с радиусом частицы слое (несколько ангстрем) протекает гетерогенная реакция низкотемпературного окисления. В результате температура частицы T растет, что может привести к последующему воспламенению. Уравнение, описывающее рост температуры частицы, имеет известный вид

$$c_s \rho_s \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \lambda_s \frac{\partial T}{\partial r} \right), \quad r \in (0, r_s), \quad t \in (0, \infty). \quad (1)$$

Начальные и граничные условия:

$$\begin{aligned} t = 0 : \quad T &= T_0; \\ r = 0 : \quad \frac{\partial T}{\partial r} &= 0; \\ r = r_s : \quad -\lambda_s \frac{\partial T}{\partial r} &= \tilde{\alpha}(T - \tilde{T}) - B_g \exp\left(-\frac{E}{RT}\right). \end{aligned} \quad (2)$$

Отметим, что близкая постановка задачи о гетерогенном зажигании к-фазы рассматривалась в [4]. В (1), (2) c_s , ρ_s , λ_s соответственно удельная теплоемкость, плотность, теплопроводность материала частицы. Последнее краевое условие описывает конвективный теплообмен частицы с окружающей средой (первое слагаемое в правой части) и выделение тепла за счет гетерогенной химической реакции; здесь B_g , E — кинетические константы эмпирического закона воспламенения, R — универсальная газовая постоянная. Для коэффициента теплоотдачи $\tilde{\alpha}$ имеем

$$\tilde{\alpha} = \frac{\lambda Nu}{2r_s}, \quad Nu = 2 + 0,5Re^{0,5}, \quad Re = \frac{U\rho 2r_s}{\mu},$$

где λ , Nu , Re , U , ρ , μ — теплопроводность газа, числа Нуссельта и Рейнольдса, скорость обдува частицы газом, плотность, динамическая вязкость газа. В статических условиях $U = 0$, $Nu = 2$. Для константы B_g имеем выражение $B_g = q\rho_{ox}k_0$, где q — теплота химической реакции, k_0 — предэкспонент в законе роста окисной пленки, ρ_{ox} — плотность окисла.

Таким образом, задача о воспламенении частицы магния в высокотемпературном потоке газа свелась к определению функции $T(r, t)$ в области $r \in [0, r_s]$, $t \in [0, \infty)$, где она удовлетворяет уравнению (1) и начально-краевым условиям (2).

Стационарное решение уравнения (1) имеет вид $T = \text{const}$, который получаем из второго из условий (2). Подставляя его в последнее условие из (2), имеем критерий Семёнова, описывающий воспламенение частицы. Добавлением к нему уравнений для определения дважды и трижды вырожденных критических точек аналогично [1, 2] выстраивается поверхность катастроф/воспламенения. Тогда при $\tilde{\alpha} \leq \tilde{\alpha}_-$ частица воспламенится; при $\tilde{\alpha} \in (\tilde{\alpha}_-, \infty)$ реализуется выход температуры частицы на устойчивое стационарное значение, превосходящее \tilde{T} .

1.2. ПОЛУЧЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ МОДЕЛИ НА ОСНОВЕ МЕТОДА ПРЯМЫХ

Получение модели. Здесь предлагается некоторая промежуточная (между точечной и распределенной) модель теплового состояния мелкой частицы, основанная на методе прямых [5] и том факте, что радиус последней много меньше характерного линейного масштаба:

$$L_m = \frac{\sqrt{RT_m}}{k_0} r_s \equiv \tau_{ch} \bar{U}_m,$$

где $\tau_{ch} = r_s/k_0$ и $U_m = \sqrt{RT_m}$ — характерное время химической реакции и характерная скорость. Отсюда для мелкой частицы

$$\frac{r_s}{L_m} = \frac{k_0}{\sqrt{RT_m}} \approx 3 \cdot 10^{-3} \ll 1.$$

Это позволяет при дискретизации по пространственной переменной ограничиться малым числом прямых. Аппроксимируя уравнение (1) и граничные условия (2) со вторым порядком точности, взяв три прямые, приходим к следующей задаче Коши для трех искомых функций T_i , $i = 1, 2, 3$:

$$\begin{aligned} \frac{dT_1}{dt} &= 24 \delta(T_2 - T_1) \equiv a(T_i), & \frac{dT_2}{dt} &= 8 \delta(T_3 - T_2) \equiv b(T_i), \\ \frac{dT_3}{dt} &= 6 \delta f(T_3) - 8 \delta(T_3 - T_2) \equiv c(T_i), \end{aligned} \quad (3)$$

$$T_i = T_0, \quad t = 0 \quad (i = 1, 2, 3). \quad (4)$$

Здесь T_1, T_2, T_3 — безразмерная (отнесенная к T_m) температура в точках $r = 0, r_s/2, r_s$, а

$$\begin{aligned} f(T) &= B \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right) - A(T - \bar{T}), & T_a &= \frac{E}{RT_m} \equiv \frac{1}{\beta}, \\ A &= \frac{\tilde{\alpha} r_s}{\lambda_s} \equiv c_{Nu}, & B &= \frac{R_y r_s}{\lambda_s T_m}, & \delta &= \frac{\lambda_s t_m}{c_s \rho_s r_s^2}, \end{aligned}$$

где $T_m = 300$ К, $t_m = 1 \cdot 10^{-3}$ с — характерные температура и время.

Исследование типа стационарных точек. Исследуем тип стационарных точек системы уравнений (4), т. е. решений уравнений $a(T_i) = b(T_i) = c(T_i) = 0$. Они имеют вид $T_1 = T_2 = T_3 = T$, где T удовлетворяет уравнению

$$f(T) = 0.$$

Как видим, нулевая изоклина для математической модели из [1, 2] совпадает с нулевой поверхностью уравнений (3).

Изучим далее тип стационарных точек (3). Для этого следует найти собственные числа соответствующей матрицы Якоби. Их можно определить в явном виде:

$$\lambda_1 = -24 \delta, \quad \lambda_{2,3} = -(8 - 3 \dot{f}) \pm \sqrt{(8 - 3 \dot{f})^2 + 48 \dot{f}}, \quad (5)$$

где $\dot{f} = \left(\frac{df}{dT}\right)\Big|_{T_3=T}$. Качественное поведение функций \dot{f} , f в зависимости от бифуркационного параметра $\alpha = A/B$ описано в [2] и приведено на рис. 1. Дискриминант (4) имеет вид $D = 64 + 9 \dot{f}^2 > 0$, и при $\dot{f} < 0$ (устойчивые части многообразия воспламенения I, II) легко видеть, что $\lambda_{2,3} < 0$. Если же $\dot{f} > 0$, то $\lambda_2 > 0$, $\lambda_3 < 0$. Отсюда можно сформулировать

Утверждение. Если на нулевой поверхности $f(T) = 0$

1) $\dot{f} < 0$, то стационарная точка является узлом;

2) $\dot{f} > 0$, то стационарная точка является седлом;

3) $\dot{f} = 0$, то состояние равновесия сложное, с двумя отрицательными собственными значениями и одним нулевым.

На основе этого утверждения можно дать классификацию решений задачи Коши (3).

Классификация типов динамики температуры частицы. Укажем характерные области D_i на плоскости (α, T) и тип поведения траекторий с начальными данными из этих областей (см. рис. 1).

1. Область $D_1 = \{(\alpha, T) : \alpha \in (\alpha_-, \infty), T \in (0, T_1(\alpha))\}$.

Выход температуры частицы на нижнее устойчивое состояние равновесия $T_1(\alpha)$, если $(\alpha, T_0) \in D_1$.

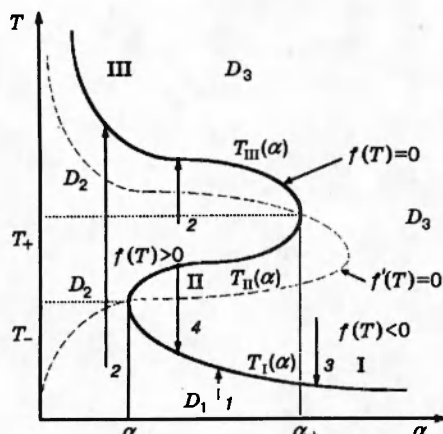


Рис. 1. Бифуркационная диаграмма на плоскости (α, T)

2. Область $D_2 = \{(\alpha, T) : \alpha \in (0, \alpha_-), T \in (0, T_{III}(\alpha))\} \cup \{(\alpha, T) : \alpha \in (\alpha_-, \alpha_+), T \in (T_{II}(\alpha), T_{III}(\alpha))\}$. Воспламенение частицы — переход на верхнее устойчивое состояние равновесия $T_{III}(\alpha)$, если $(\alpha, T_0) \in D_2$. «Дисперсионное» воспламенение при $T_0 = T_{II}(\alpha)$.

3. Область D_3 — дополнение областей D_1 и D_2 до полной плоскости $\{(\alpha, T) : \alpha > 0, T > 0\}$.

3.1. Погасание частицы — переход в нижнее устойчивое состояние $T_I(\alpha)$, если:

а) $\alpha > \alpha_+, T_0 > T_I(\alpha)$,

б) $\alpha \in (\alpha_-, \alpha_+), T \in (T_I(\alpha), T_{II}(\alpha))$; при $T_0 = T_{II}(\alpha)$ — случай «дисперсионного» погасания.

3.2. Стабилизация на $T_{III}(\alpha)$, если $\alpha \in (0, \alpha_+), T_0 > T_{III}(\alpha)$.

2. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ РАСЧЕТОВ В ЗАДАЧАХ (1), (2) И (3), (4)

2.1. МЕТОД РЕШЕНИЯ

Для исследования задачи (1), (2) в рамках распределенной модели использовался численный конечно-разностный метод. Дискретизация осуществлялась на равномерной сетке с использованием двухслойной чисто неявной схемы [6], причем для упрощения в (1), (2) производился переход к новым безразмерным переменным $\vartheta = \xi\theta$ и τ, ξ с поверхностным источником тепла $g(\theta)$, где

$$\theta = \frac{E}{RT_m} (T - T_m), \quad \tau = \frac{t}{t_m}, \quad \xi = \frac{r}{r_s}, \quad g(\theta) = c_{Nu} \left[\tilde{\theta} - \theta + A_g \exp \left(\frac{\theta}{1 + \beta\theta} \right) \right],$$

$$\tilde{\theta} = \frac{E}{RT_m} (\tilde{T} - T_m), \quad A_g = \frac{B_g}{\tilde{\alpha} T_m \beta} \exp \left(-\frac{1}{\beta} \right).$$

Полученная нелинейная система алгебраических уравнений решалась методом Ньютона, при этом на каждой итерации с помощью алгоритма прогонки решалась система алгебраических уравнений трехдиагонального вида. Критерием окончания итерационного процесса являлась относительная невязка выполнения интегрального тождества

$$\int_0^1 \xi^2 \theta(\xi, \tau) d\xi = \delta \int_0^\tau g(\theta(1, \tau)) d\tau.$$

Обычно достаточно 1–2 итераций, чтобы уменьшить невязку до 2%.

Численное моделирование для промежуточной модели (3), (4) проводилось жестко-устойчивым пакетом программ метода Гира.

2.2. ОБСУЖДЕНИЕ ЧИСЛЕННЫХ ДАННЫХ

Физико-химические постоянные и размеры частиц магния: $r_s = 15, 22, 30, 60$ мкм; $k_0 = 0,103$ м/с; $E/R = 12427,7$ К; $r_s = 300, 400, 500, 600$ мкм; $k_0 = 8,036 \cdot 10^5$ м/с; $E/R = 30000$ К; $\bar{T} \in [1123, 1538$ К]; $q = 4 \cdot 10^7$ Дж/кг; $R = 345$ Дж/кг; $\rho_{ox} = 3600$ кг/м³; $\rho_s = 1740$ кг/м³; $\lambda = 2,57 \cdot 10^{-2}$ Вт/(м · К); $\lambda_s = 100$ Вт/(м · К).

Результаты для распределенной и промежуточной моделей. При проведении численного эксперимента исследовались три описанных выше режима динамики температуры частицы и влияние типа модели на определение времени задержки воспламенения.

Безвзрывной нагрев частицы происходил при $\alpha > \alpha_-$ и соответствовал выходу системы на нижнюю ветвь I стационарных состояний (см. рис. 1, линии 1).

Воспламенение наблюдалось в системе при $\alpha \leq \alpha_-$. Этот случай соответствовал приходу системы к высокотемпературному равновесию на верхней ветви III стационарных состояний (см. рис. 1, линии 2). Временем задержки воспламенения считалась величина t_{ign} , определяемая согласно критерию

$$\left. \frac{\partial^2 T_w}{\partial t^2} \right|_{t=t_{ign}} = 0, \quad \left. \frac{\partial T_w}{\partial t} \right|_{t=t_{ign}} \rightarrow \max,$$

где $T_w(t) = T(r_s, t) \equiv T_3(t)$ — температура поверхности частицы, т. е. за t_{ign} принималась вторая точка перегиба профиля температуры $T_3(t)$.

Далее рассмотрим специфичный для гетерогенной системы режим динамики — режим погасания — и два его типа: «низкотемпературный» и «дисперсионный». Такие режимы тепловой эволюции частицы могут иметь место.

В области сравнительно невысоких начальных температур, имеющих физический смысл, наблюдалось «низкотемпературное» погасание частицы. Качественно этот тип погасания характеризуется линией 3 на бифуркационной диаграмме (см. рис. 1).

Также представляло интерес моделирование «дисперсионного» погасания, т. е. перехода $T_{II}(\alpha) \rightarrow T_I(\alpha)$ со средней неустойчивой ветви II на нижнюю устойчивую ветвь I стационарных решений (см. рис. 1). Подобного рода ситуация возникает при вбрасывании частицы, нагретой до температуры $T_{II}(\alpha)$, в поток газа. Естественно, малейшие температурные флуктуации, которые в тепловой системе всегда присутствуют, обязательно выведут температуру частицы из равновесия, т. е. в зависимости от своего знака вызовут либо самоускоряющийся нагрев — тепловой взрыв, либо медленное «дисперсионное» погасание. Качественная картина последнего описана линией 4 на рис. 1.

Результаты расчетов для этих двух режимов погасания иллюстрирует рис. 2. Здесь изображено поведение безразмерной температуры $T_3(t)$ поверхности мелкой частицы ($r_s = 15, 30, 60$ мкм). Три нижние кривые с $T_0 = T_- = 4,161$ соответствуют решению задачи Коши (3), (4) при $t > 0$. Три верхние кривые являются приближенным решением задачи (3), (4) с точно заданными начальными данными $T_0 = T_{II}(\alpha)$, описывающей при $t \in (-\infty, \infty)$ режим «дисперсионного» погасания.

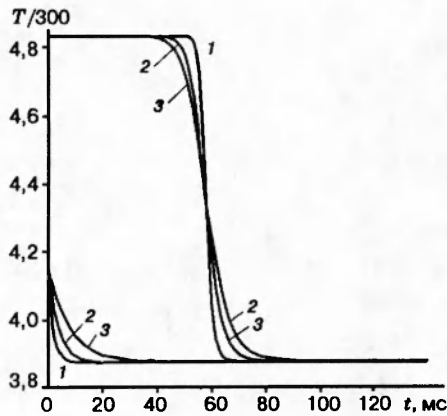


Рис. 2

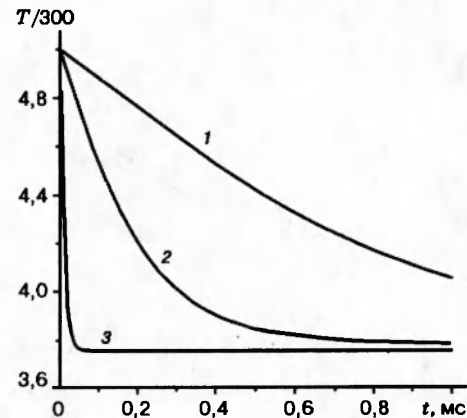


Рис. 3

Рис. 2. Погасание мелких частиц ($\bar{T} = 1123$ К):

вверху «дисперсионное», $T_0 = T_{II}(\alpha)$, внизу «низкотемпературное», $T_0 = T_-$; r_s , мкм: 1 — 15, 2 — 30, 3 — 60

Рис. 3. «Низкотемпературное» погасание мелких частиц:

1 — $r_s = 1$ мкм, $\langle Nu \rangle = 5$; 2 — $r_s = 5$ мкм, $\langle Nu \rangle = 9$; 3 — $r_s = 10$ мкм, $\langle Nu \rangle = 12,25$

После определения типов динамики температуры частицы и расчетов по промежуточной модели было также проведено исследование воспламенения и погасания в рамках распределенной модели. В этом случае исследовалось «низкотемпературное» погасание предварительно нагретой частицы, что обеспечивалось условием $\alpha > \alpha_-$. Для расчетов брали константы мелких частиц, начальную температуру 1500 К и температуру газовой фазы 1123 К.

Сравнение времени τ_1 выхода температуры частицы на стационарное значение $T = T_I(\alpha)$ и времени стоковой релаксации

$$\tau_{St} = \frac{2\rho_s r_s^2}{9\mu}$$

показало, что $\tau_{St} < \tau_1$, и поэтому число Нуссельта является переменной величиной. Была проведена операция осреднения по отрезку времени $[0, \tau_{St}]$:

$$\langle Nu \rangle = \frac{1}{\tau_{St}} \int_0^{\tau_{St}} Nu(t) dt,$$

где

$$Nu(t) = 2 + 0,5\{Re(t)\}^{0,5}, \quad Re(t) = \frac{U_0 \exp(-t/\tau_{St}) \cdot \rho_2 r_s}{\mu}.$$

Таким образом, при скорости обдува $U_0 = 1000$ м/с для частиц Mg радиусом 1, 5 и 10 мкм осредненное число Нуссельта равно 5, 9 и 12,25, а соответствующая эволюция гаснущей частицы во времени иллюстрирована рис. 3. Как видно, мелкие частицы погасают значительно быстрее, чем более крупные. Отсюда можно заключить, что требуется осторожность при высказывании достаточно распространенного мнения о главенствующей роли

Модель воспламенения	Время задержки воспламенения, мс							
	r_s , мкм							
	15	22	30	60	300	400	500	600
Точечная	22,0	39,6	64,0	200,0	2200	3800	6000	8500
Промежуточная	22,0	40,5	65,0	205,2	—	—	—	—
Распределенная	22,2	40,2	65,0	205,9	2360	4110	6460	9200

мелких частиц в зажигании полидисперсного облака.

Сравнение данных расчетов трех моделей воспламенения (точечной, промежуточной, распределенной). Результаты расчетов для моделей (1), (2) и (3), (4) равным образом свидетельствуют о том, что градиент температуры внутри частицы пренебрежимо мал и профиль температуры по радиусу всегда остается монотонным как для мелких ($r_s = 15 \div 60$ мкм), так и для крупных ($r_s = 300 \div 600$ мкм) частиц на всех режимах тепловой динамики. Это аналогично режиму гетерогенного «самовоспламенения» в неоднородной температурной системе [4, 7].

Проводилось сравнение времени задержки воспламенения, полученного по точечной [1], промежуточной (3), (4) и распределенной (1), (2) моделям воспламенения (см. таблицу). Как видно, для мелких частиц с точностью 3% можно использовать точечную модель для определения времени задержки воспламенения. С ростом радиуса частицы до 600 мкм ошибка может составить до 8%.

ВЫВОДЫ

На основе распределенной модели тепловой динамики частицы магния, учитывающей гетерогенную химическую реакцию низкотемпературного окисления:

— изучены постановка и существование решения задачи Коши для ее асимптотического варианта (промежуточная точечная модель), сводящегося к системе трех автономных дифференциальных уравнений;

— прямыми расчетами в рамках распределенной модели показано, что градиент температуры вдоль радиуса частицы весьма мал, что обосновывает возможность применения при $r_s \leq 600$ точечной и промежуточной точечной моделей к расчету тепловой динамики, времена задержки воспламенения при этом могут отличаться на 8%;

— показана возможность погасания мелкой нагретой частицы магния под действием высокоскоростного потока газа.

ЛИТЕРАТУРА

1. Федоров А. В. Физико-математическое моделирование воспламенения мелких частиц магния. Новосибирск, 1993. (Препр. / РАН. Сиб. отд-ние. ИТПМ; № 12-94).
2. Федоров А. В. Численно-аналитическое исследование воспламенения частиц магния // Физика горения и взрыва. 1996. Т. 32, № 1. С. 75-84.
3. Хайкин Б. И., Блошенко В. И., Мержанов А. Г. О воспламенении частиц металлов // Физика горения и взрыва. 1970. Т. 6, № 4. С. 474-488.

4. Виллюнов В. Н. Теория зажигания конденсированных веществ. Новосибирск: Наука, 1984.
5. Березин И. С., Жидков Н. С. Методы вычислений. Т. 1. Изд. 3-е. М.: Наука, 1966; Т. 2. Изд. 2-е. М.: Физматгиз, 1962.
6. Флетчер К. Вычислительные методы в динамике жидкостей. Т. 1. М.: Мир, 1991.
7. Аверсон А. Е., Барзыкин В. В., Мартемьянова Т. М. К тепловой теории гетерогенного воспламенения // Физика горения и взрыва. 1974. Т. 10, № 4. С. 498–512.

Поступила в редакцию 15/1 1996 г.
