

УДК 536.46

## ТЕРМОКАПИЛЛЯРНАЯ КОНВЕКЦИЯ В ВОЛНЕ БЕЗГАЗОВОГО ГОРЕНИЯ

В. Г. Прокофьев<sup>1,2</sup>, В. К. Смоляков<sup>1,2</sup><sup>1</sup>Томский государственный университет, 634050 Томск, pvg@ftf.tsu.ru<sup>2</sup>Томский научный центр СО РАН, 634021 Томск

Аналитически и численно исследуется влияние термокапиллярной конвекции на теплопередачу в волне безгазового горения с плавящимся реагентом. Приведены оценки скорости конвекции. Получены формулы для скорости горения при кондуктивной и конвективной теплопередаче. Численные расчеты подтвердили выводы аналитического анализа. Получены расчетные зависимости скорости горения от пористости и параметров фазового перехода. Обнаружено развитие неустойчивости распространения волны горения в автоколебательных режимах, вызванное действием термокапиллярной конвекции.

Ключевые слова: плавление реагента, термокапиллярная конвекция, кондуктивный и конвективный режимы горения, приближенный анализ, численное моделирование.

DOI 10.15372/FGV20190110

## ВВЕДЕНИЕ

Горение безгазовых систем сопровождается фазовыми превращениями: плавлением компонентов и эвтектик. Появление расплава и его растекание в порах образца и по поверхности тугоплавкого реагента увеличивают реакционную поверхность, скорость химического превращения, тепловыделение и температуру. Расплав реагента в волне горения существует в диапазоне от температуры плавления до температуры горения, при которой он исчерпывается в реакции образования тугоплавкого продукта. Существование расплава сопровождается термокапиллярным течением, вызванным зависимостью поверхностного натяжения от температуры. С увеличением температуры оно уменьшается и жидкость течет в более холодную часть смеси, где поверхностное натяжение больше. Течение жидкости в направлении исходной смеси сопровождается конвективным теплопереносом.

В настоящей работе рассматриваются вклад конвекции в теплопередачу и влияние этого процесса на характеристики горения. Механизм реализации термокапиллярной конвекции — эффекта Марангони — представляется следующим образом. Плавление реагента и смачивание расплавом более тугоплавкого ком-

понента смеси увеличивают скорость тепловыделения и повышают температуру во фронте горения. Одновременно увеличиваются скорость термокапиллярного течения и конвективный теплоперенос. Масштаб конвективного теплопереноса тем больше, чем больше разница между температурами горения и плавления. В случае близости этих величин конвективный теплоперенос мал.

Рассмотрим бинарную смесь, один из компонентов которой легкоплавкий. В рамках механики многофазных сред [1] исходную смесь представим тремя взаимопроникающими континуумами — тугоплавким реагентом А, легкоплавким реагентом В и порами. Согласно этим представлениям каждая из фаз занимает весь объем, т. е. в любой точке среды определены скорость, плотность, температура и другие характеристики каждой из фаз, для которых можно записать уравнения сохранения вещества импульса и энергии, пропорциональные их объемным долям.

Для упрощения задачи примем следующие допущения и пояснения.

1. Инертный газ в порах не оказывает влияния на процессы в конденсированной фазе. То есть не рассматриваются уравнения фильтрации и теплопроводности в газе. В экспериментальной практике это допущение можно реализовать, снижая давление инертного газа в реакционном сосуде.

2. Реакция тугоплавкого реагента А и легкоплавкого В проходит с образованием одного

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках государственного задания V.44.3.4.

© Прокофьев В. Г., Смоляков В. К., 2019.

тугоплавкого продукта F и описывается простой брутто-схемой  $A + B = F$ . Течение жидкого реагента не влияет на кинетику синтеза F.

3. Теплоемкости и теплопроводности смеси, продукта и жидкого реагента предполагаются равными.

4. Плотности реагентов, смеси и продукта предполагаются равными и не зависят от температуры. В таком случае химическое превращение не меняет объема конденсированной фазы и не нужно рассматривать уравнение ее движения.

5. Фильтрация расплава изменяет распределение объемов пор и расплава в зоне химического превращения. Пористость уменьшается вблизи температуры плавления и увеличивается в окрестности температуры горения. Влиянием этого фактора при анализе теплопередачи будем пренебрегать.

6. Перераспределение реагентов в результате течения изменяет длину массопереноса реагентов друг к другу, т. е. меняет кинетические параметры реакции. Действие этого фактора не учитывается, и кинетический закон полагается неизменным.

7. Течение расплава в пористых каналах ограничено температурой плавления. При уменьшении температуры расплава ниже температуры плавления жидкость кристаллизуется и течение в порах прекращается.

8. Размеры образца и общая пористость в силу допущения 4 не меняются.

Изменяется характер пористости: появляются поры разного размера. Это явление — следствие течения расплава. Оно подобно появлению пор большего размера в местах первоначального расположения более крупных легкоплавких частиц, что фиксируется экспериментально [2]. Описание такого процесса выходит за рамки макроскопического подхода и в работе не рассматривается. В силу допущений 4 и 5 плотность плавящегося реагента B и пористость образца не меняются. Течение расплава полагается безынерционным, и уравнение неразрывности для жидкой фазы можно не рассматривать. Образующийся в процессе движения межфазной границы свободный объем жидкости движется под действием капиллярных сил со скоростью, пропорциональной градиенту температуры в направлении исходной смеси. Можно провести аналогию с безынерционным течением жидкости в пористой среде, скорость фильтрации которой в соответствии с за-

коном Дарси пропорциональна градиенту давления. В установившемся режиме горения скорости движения межфазной границы, фильтрации расплава и распространения фронта реакции согласованы.

При принятых упрощениях математическая модель включает в себя уравнение теплопроводности с учетом конвективного теплопереноса, кинетическое уравнение, начальные и граничные условия.

Уравнение теплопроводности с учетом плавления реагента B и принятых упрощений в адиабатическом одностепенном приближении имеет вид [3, 4]

$$\begin{aligned} & \rho(1 - m)[c + c_0(1 - \alpha)L\delta(T - T_L)]\frac{\partial T}{\partial t} + \\ & + m_1\rho v[c + c_0(1 - \alpha)L\delta(T - T_L)]\frac{\partial T}{\partial x} = \\ & = \lambda\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \rho(1 - m)[Q + c_0Le(T - T_L)]\frac{\partial \alpha}{\partial t}, \quad (1) \end{aligned}$$

где  $x$  — координата;  $v$  — скорость течения расплава;  $T$  — температура;  $\rho$  — плотность;  $c$  — теплоемкость;  $\lambda$  — теплопроводность;  $m$  — пористость;  $c_0$  — массовая доля реагента B (в силу допущения 2 она равна объемной  $m_1$ , т. е.  $m_1 = c_0$ );  $Q$  — тепловой эффект реакции;  $T_L$ ,  $L$  — температура и теплота плавления;  $\alpha$  — глубина превращения (массовая доля продукта по отношению к общей массе вещества). В (1) использованы дельта-функция Дирака и единичная функция Хевисайда:

$$\begin{aligned} \delta(T - T_L) &= \begin{cases} 0, & T \neq T_L, \\ \infty, & T = T_L, \end{cases} \\ \epsilon(T - T_L) &= \begin{cases} 0, & T < T_L, \\ 1, & T > T_L. \end{cases} \end{aligned}$$

Скорость реакции представлена в виде

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = f(\alpha)k \exp\left(-\frac{E}{RT}\right), \quad (2)$$

где  $R$  — газовая постоянная,  $k$  — предэкспонент,  $E$  — энергия активации,  $f(\alpha)$  — кинетический закон.

Начальные и граничные условия имеют вид:

$$t = 0: \quad T = T_0, \quad \alpha = 0;$$

$$x = 0: \quad T = T_w, \quad t \leq t_w; \quad \frac{\partial T}{\partial x} = 0, \quad t > t_w; \quad (3)$$

$$x = \infty: \quad T = T_0, \quad \alpha = 0,$$

где  $T_0, T_w$  — начальная температура и температура поджигающей поверхности,  $t_w$  — время действия нагревателя.

Скорость термокапиллярного течения в неравномерно нагретых капиллярах [5] определяется по формуле

$$v_{tc} \approx \frac{d_c}{2\mu} \frac{d\sigma}{dT} \nabla T, \quad (4)$$

где  $\sigma$  — поверхностное натяжение,  $\mu = \mu_0 \exp(E_\mu/RT)$  — вязкость,  $\mu_0$  — предэкспонент,  $E_\mu$  — энергия активации вязкого течения,  $d_c$  — диаметр капилляра. Зависимость поверхностного натяжения от температуры удовлетворительно описывается формулой Этвеша [6]

$$\sigma \approx K(T_{cr} - T)(M/\rho_1)^{-2/3}, \quad (5)$$

где  $T_{cr}$  — критическая температура, при которой  $\sigma = 0$ ;  $M$  — молекулярная масса;  $K \approx 2.1 \cdot 10^{-7}$  Дж/(К · моль<sup>2/3</sup>) — константа. Для чистых металлов константа меньше в  $2 \div 3$  раза [7]. При получении оценок можно использовать приближенную формулу

$$\sigma = \sigma_0 - K(T - T_0), \quad (6)$$

где значение  $\sigma_0$  соответствует температуре  $T_0$ ,  $K \approx 10^{-4}$  Дж/(м<sup>2</sup> · К) [8]. В дальнейшем анализе и в проведении оценок будем ориентироваться на систему Ni—Al, в которой изучали капиллярные гидродинамические явления [2]. Для жидкого алюминия при температуре  $T_L$  вязкость  $\mu \approx 3 \cdot 10^{-3}$  Па · с [7].

Сравним скорости капиллярного и термокапиллярного течений. Проведем оценки для жидкого алюминия. В [9] приведены экспериментальное значение  $\frac{d\sigma}{dT} = |3.5 \cdot 10^{-4}|$  Дж/(К · м<sup>2</sup>) и коэффициент поверхностного натяжения при температуре плавления ( $T_L = 933$  К)  $\sigma = 0.914$  Дж/м<sup>2</sup>. Отметим, что для тугоплавких металлов экспериментально определить поверхностное натяжение и его зависимость от температуры трудно. Поэтому для оценки этих величин следует использовать приближенные формулы (5), (6). При перепаде температуры в волне горения  $\Delta T \approx 2000$  К и

ширине фронта  $\Delta x = 10^{-3}$  м градиент температуры составляет

$$|\nabla T| \approx \frac{\Delta T}{\Delta x} = 2 \cdot 10^6 \text{ К/м}. \quad (7)$$

Примем следующую оценку диаметра капилляра:  $d_c = 10^{-5}$  м. Здесь предполагается, что средний диаметр капилляра, равный примерно размеру тугоплавкой частицы, в 100 раз меньше ширины фронта.

Оценим скорость капиллярного течения. Она определяется формулой [10]

$$v_c \approx \frac{\sigma d_c}{8\mu l} \cos \psi, \quad (8)$$

где  $\psi$  — угол смачивания. В качестве длины капиллярного растекания  $l$  примем размер реакционной ячейки, примерно равный диаметру легкоплавкого реагента [3]. Для определенности положим  $l \approx 10^{-4}$  м. Для принятых оценок максимальная скорость капиллярного течения (в случае  $\psi = 0$ ) составляет  $v_c \approx 3.8$  м/с, а термокапиллярного —  $v_{tc} \approx 1.2$  м/с.

Отметим, что угол  $\psi$  зависит от свойств пары стенка капилляра — расплав и растет с уменьшением ее химической активности. При этом скорость капиллярного течения падает.

Наконец, следующее. Длина капиллярного растекания, определенная по формуле (8), не превышает размера реакционной ячейки — минимальной области, в которой находятся оба реагента в соответствии с исходным соотношением. Обычно в практике безгазового горения размер частиц составляет  $10^{-6} \div 10^{-5}$  м. Во фронте горения реакционных ячеек много и масштаб капиллярного растекания мал. Поэтому, за исключением крупных легкоплавких частиц и большой пористости, капиллярное растекание не оказывает существенного влияния на теплоперенос [11].

В расчетах в качестве скорости конвективного переноса  $v$  будем принимать  $v_{tc}$ , ограничивая ее значение 1 м/с.

## РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ И АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ

### Приближенный анализ

Рассмотрим стационарную задачу и будем считать  $v$  параметром. Такое допущение позволяет исключить нелинейность в конвективном члене (1). В системе координат, движущейся со

скоростью горения  $u$  в направлении  $-\infty$ , уравнения (1), (2) имеют вид

$$\begin{aligned} & u\rho(1-m)[c+c_0(1-\alpha)L\delta(T-T_L)]\frac{dT}{dx} + \\ & + c_0\rho v[c+c_0(1-\alpha)L\delta(T-T_L)]\frac{dT}{dx} = \\ & = \lambda\frac{d^2T}{dx^2} + u\rho(1-m)[Q+c_0Le(T-T_L)]\frac{d\alpha}{dx}, \quad (9) \end{aligned}$$

$$u\frac{d\alpha}{dx} = f(\alpha)k \exp\left(-\frac{E}{RT}\right). \quad (10)$$

Температура горения находится интегрированием (9) от  $-\infty$  до  $\infty$  с учетом определения  $v$ :

$$x = \pm\infty, \quad v = 0:$$

$$T_b = T_0 + \frac{Q}{c}. \quad (11)$$

Граничные условия к (9), (10):

$$\begin{aligned} x = +\infty: \quad & \frac{\partial T}{\partial x} = 0, \quad \alpha = 1; \\ x = -\infty: \quad & T = T_0, \quad \alpha = 0. \end{aligned} \quad (12)$$

Интегрируя (9) от  $x = -\infty$  до  $x$ , получаем

$$\begin{aligned} \lambda\frac{dT}{dx} = & \rho\{[c(T-T_0) + \\ & + c_0(1-\alpha)Le(T-T_L)][u(1-m) + c_0v] - \\ & - \alpha(1-m)u[Q+c_0Le(T-T_L)]\}. \quad (13) \end{aligned}$$

В стационарном режиме горения плавление компонента стехиометрической смеси проходит в режиме Стефана [12]. Интегрируя результат деления (13) на (10) в приближении узкой зоны реакции ( $RT_b/E \ll 1$ ) [13], после несложных, но громоздких преобразований запишем формулу для оценки скорости горения при кондуктивной ( $v = 0$ ) теплопроводности:

$$\begin{aligned} u_t^2 = & \lambda k(T_b)\frac{RT_b^2}{E} \left\{ \rho(1-m)(Q+c_0L) \times \right. \\ & \left. \times \int_0^1 (1-\alpha)f^{-1}(\alpha)d\alpha \right\}^{-1}. \quad (14) \end{aligned}$$

В случае только конвективной теплопроводности ( $\lambda = 0$ ) из (9) следует

$$\begin{aligned} & [u(1-m) + c_0v][c+c_0(1-\alpha)L\delta(T-T_L)]\frac{dT}{dx} = \\ & = u(1-m)[Q+c_0Le(T-T_L)]\frac{d\alpha}{dx}. \quad (15) \end{aligned}$$

Проинтегрировав (15) от  $x = 0: T = T_L, \alpha = 0$  до  $x = \infty: T = T_b, \alpha = 1$ , получим скорость горения при конвективной теплопроводности:

$$u_c = \frac{c_0v[c(T_b-T_L) + c_0L]}{(1-m)[Q-c(T_b-T_L)]}. \quad (16)$$

Отметим, что до температуры плавления теплопередача осуществляется кондуктивной теплопроводностью.

Как следует из (16), скорость горения пропорциональна скорости конвективного течения. Этот результат соответствует известным представлениям о конвективном режиме горения [14]. В отличие от вынужденной фильтрации внешнего теплоносителя, в рассматриваемом случае температура горения неизменна, так как система замкнута и нет массо- и теплообмена с окружающей средой. Уменьшение интервала  $T_b \div T_L$  снижает действие конвекции. В предельном случае  $T_b = T_L$  градиент температуры в зоне расплава  $\nabla T = 0$ , в соответствии с (4)  $v_{tc} = 0$ .

Условие преобладающего действия конвективной теплопередачи можно найти, сравнивая кондуктивный и конвективный члены в (1). Если  $c_0v \left[1 + \frac{c_0}{c}(1-\alpha)L\delta(T-T_L)\right] \frac{\partial T}{\partial x} > \frac{\lambda}{c\rho} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$ , то преобладает конвективная теплопередача. Используя оценки  $\Delta x \approx 10^{-3}$  м,  $|\nabla T| \approx \Delta T/\Delta x = 2 \cdot 10^6$  К/м,  $c_0 = 0.2$ ,  $a = \lambda/c\rho \approx 10^{-5}$  м<sup>2</sup>/с для всей зоны химических превращений ( $0 \leq \alpha \leq 1$ ), получим искомое условие  $v > 10^{-1}$  м/с. Качественный вид зависимости скорости горения в соответствии с формулами (14), (16) представлен в безразмерных координатах на рис. 1.

### Численное моделирование

Численное исследование задачи (1)–(3) удобно проводить в безразмерной форме. Для этого введем следующие безразмерные переменные и параметры:

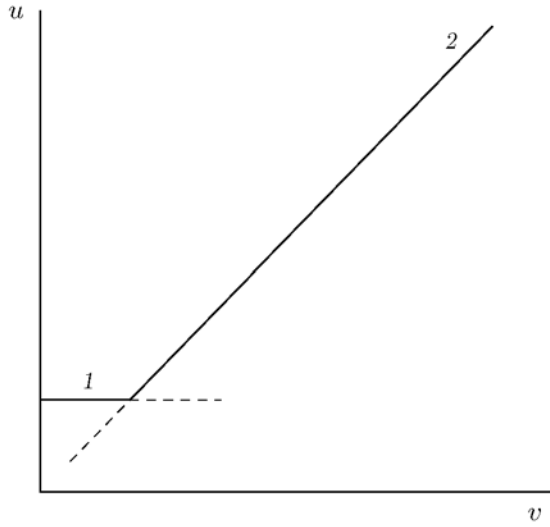


Рис. 1. Кондуктивный (1) и конвективный (2) режимы горения

$$\text{Td} = \frac{cRT_*^2}{QE}, \quad \theta = \frac{(T - T_*)E}{RT_*^2},$$

$$\theta_L = \frac{(T_L - T_*)E}{RT_*^2}, \quad \theta_0 = \frac{(T_0 - T_*)E}{RT_*^2},$$

$$\text{Ar} = \frac{RT_*}{E}, \quad \xi = \frac{x}{x_*}, \quad x_* = \sqrt{\frac{\lambda t_*}{c\rho}},$$

$$K(T_*) = k_0 \exp\left(-\frac{E}{RT_*}\right), \quad \tau = \frac{t}{t_*}, \quad \tau_w = \frac{t_w}{t_*},$$

$$\text{Ph} = \frac{c_0 Q_L}{Q \text{Td}}, \quad \zeta = \frac{E_\mu}{E}, \quad \omega = \frac{m_1 c \rho d_c K R T_*^2}{2\lambda_0 \mu (T_*) E},$$

$$\lambda = \lambda_0 (1 - m)^n,$$

где  $T_* = T_b$  — адиабатическая температура горения.

В безразмерных переменных задача (1)–(3) принимает вид:

$$c_{eff}(\alpha, \theta) \frac{\partial \theta}{\partial \tau} + \frac{\omega}{1 - m} c_{eff}(\alpha, \theta) \varphi(\alpha, \theta) \left| \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right| \frac{\partial \theta}{\partial \xi} =$$

$$= (1 - m)^{n-1} \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} + \psi(\theta) \frac{1}{\gamma} \frac{\partial \alpha}{\partial \tau}, \quad (17)$$

$$\varphi(\alpha, \theta) = \exp\left(\frac{\zeta \theta}{1 + \text{Ar} \theta}\right) e(\theta - \theta_L),$$

$$c_{eff}(\alpha, \theta) = 1 + (1 - \alpha) \text{Ph} \delta(\theta - \theta_L),$$

$$\psi(\theta) = 1 + \text{Phe}(\theta - \theta_L),$$

$$\frac{\partial \alpha}{\partial \tau} = \gamma(1 - \alpha) \exp\left(\frac{\theta}{1 + \text{Ar} \theta}\right), \quad (18)$$

$$\tau = 0: \quad \theta = \theta_0, \quad \alpha = 0;$$

$$\xi = 0: \quad \theta = \theta_w \quad (\tau < \tau_w), \quad \frac{\partial \theta}{\partial \xi} = 0 \quad (\tau > \tau_w); \quad (19)$$

$$\xi = \infty: \quad \frac{\partial \theta}{\partial \xi} = 0.$$

Главной особенностью решения задачи (17)–(19) является нелинейность уравнений. Помимо экспоненциальной зависимости функции тепловыделения от температуры, традиционной для горения, имеет место конвективный перенос тепла с квадратичной зависимостью от градиента температуры — особенность термокапиллярного течения. Безразмерные функции вязкости расплава  $\varphi(\alpha, \theta)$  и эффективной теплоемкости  $c_{eff}(\alpha, \theta)$  также нелинейно зависят от температуры. Направление течения в одномерной постановке определяет знак производной  $\frac{\partial \theta}{\partial \xi}$ . Для нестационарных режимов горения, когда в момент вспышки профиль температуры немонотонный, возможно течение расплава от точки максимума в направлении, противоположном направлению распространения волны горения. Однако этот участок течения меньше характерной толщины зоны реакций, так как ограничен областью твердофазных продуктов горения. Для стационарных режимов течение расплава всегда совпадает по направлению с распространением волны горения.

Задача (17)–(19) решена конечно-разностным методом с использованием неявной схемы и аппроксимацией конвективного члена разностями против потока с постоянными шагами по координате и времени. Для решения разностного аналога уравнения (17) использовался метод прогонки в комбинации с итерационным процессом. При численном решении уравнения (17) применялось сглаживание дельта-функции [15]. Выбор шагов интегрирования  $h = 0.25$  и  $\Delta \tau = 0.005$  обеспечивал устойчивость численных расчетов в выбранном диапазоне значений параметров задачи. Верификация результатов численного решения включала в себя тестирование

выбранного метода на решении классической задачи безгазового горения [16] и проверку на сеточную сходимость. Скорость горения в численных расчетах определяли по перемещению точек фронта горения с глубиной превращения  $\alpha = 0.5$  с первым порядком аппроксимации. В расчетах параметры задачи, отвечающие за термокапиллярную конвекцию, варьировались в следующих интервалах:  $0.2 < m < 0.8$ ,  $0.1 \leq \text{Ph} \leq 0.2$ ,  $-4 \leq \theta_L \leq 0$ ,  $0.1 \leq \zeta \leq 1$ ,  $0 \leq \omega \leq 0.1$ .

Термокапиллярное течение расплава развивается, в соответствии с принятыми предположениями, в сравнительно узкой зоне волны горения, ограниченной с одной стороны температурой плавления, а с другой — зоной твердых продуктов горения. Тем не менее, конвективный перенос тепла расплавом приводит к существенному росту скорости горения при определенных значениях параметров задачи, например, при низкой температуре плавления и высокой пористости среды. При температуре плавления, близкой к адиабатической температуре горения, вклад термокапиллярного течения в увеличение скорости горения незначителен, и, наоборот, при низкой температуре плавления глубина течения сравнима с толщиной прогретого слоя и скорость горения заметно возрастает (рис. 2). Вязкие характеристики расплава также влияют на конвективный пе-

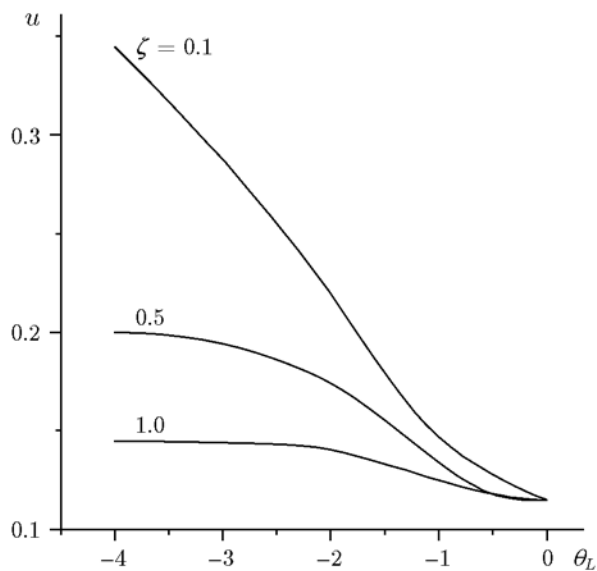


Рис. 2. Скорость горения в зависимости от температуры плавления и энергии активации вязкого течения расплава ( $\theta_0 = -7$ ,  $\text{Ar} = 0.12$ ,  $\text{Ph} = 0.2$ ,  $\omega = 0.02$ ,  $m = 0.5$ ,  $n = 1$ )

ренос тепла. Энергия активации вязкого течения расплава металлов  $E_\mu$  [17], как правило, в несколько раз меньше, чем энергия активации химической реакции  $E$  для безгазовых систем [18]. При  $\zeta = E_\mu/E = 1$  скорость течения жидкой фазы мала и увеличение скорости горения за счет конвекции не превышает 20 % даже при достаточно низкой температуре плавления  $\theta_L = -4$ .

Пористость образца  $m$  является одним из основных параметров задачи, который относительно просто можно менять в экспериментах. Изменение пористости приводит к изменению соотношения между кондуктивным и конвективным механизмами теплопередачи. С увеличением пористости уменьшается коэффициент теплопроводности  $\lambda \sim (1 - m)^n$  и растет относительный конвективный поток тепла. Все это приводит к смене режима горения: от механизма кондуктивной теплопроводности к механизму конвективной теплопередачи (рис. 3, верхняя кривая). При высокой температуре плавления  $\theta_L = -1$ , близкой к температуре горения, скорость и масштаб конвективного течения малы; соответственно, теплопередача в реагирующей системе обеспечивается кондукцией и скорость горения падает с увеличением пористости.

Течение жидкой фазы оказывает влияние не только на скорость горения, но и на устойчивость распространения волны горения. Так,

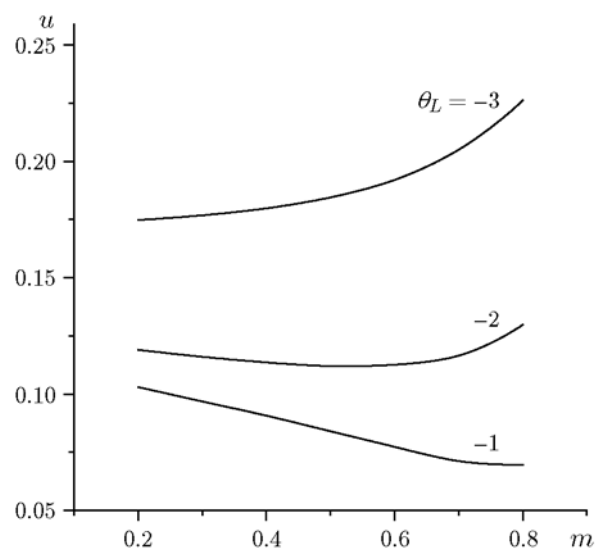


Рис. 3. Скорость горения в зависимости от пористости ( $\theta_0 = -7$ ,  $\text{Ar} = 0.12$ ,  $\text{Ph} = 0.2$ ,  $\omega = 0.005$ ,  $\zeta = 0.5$ ,  $n = 2$ )

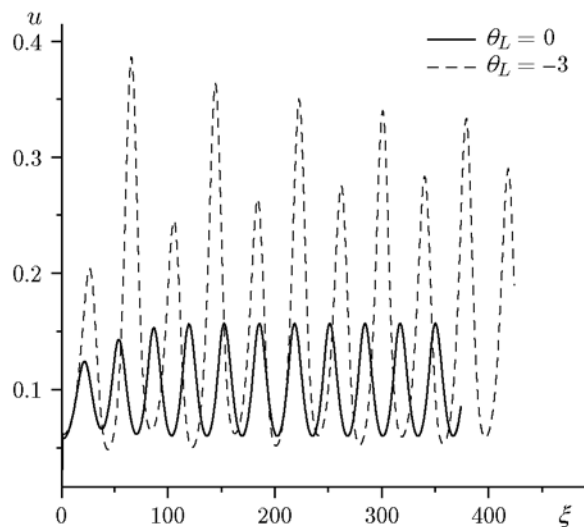


Рис. 4. Зависимость скорости горения от координаты в кондуктивном и конвективном режимах ( $\theta_0 = -7$ ,  $Ag = 0.12$ ,  $Ph = 0.2$ ,  $\omega = 0.05$ ,  $m = 0.4$ ,  $\zeta = 0.5$ ,  $n = 2$ )

в области неустойчивости распространения одномерной волны горения  $9.1Td - 2.5Ag < 1$  со снижением температуры фазового перехода  $\theta_L$  растет не только средняя скорость горения, но и амплитуда и период колебаний (рис. 4). Развитие неустойчивости связано с особенностью течения расплава в окрестности максимума распределения температуры. Аналогичная дестабилизация волны горения наблюдается с изменением констант реакции при твердофазном и жидкофазном реагировании при переходе через точку плавления [19]. В отсутствие капиллярного течения при  $\omega = 0$  проявляется стабилизирующее действие высокотемпературного  $\theta_L \approx 0$  фазового перехода [20].

## ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Провести непосредственное сравнение полученных результатов с экспериментальными данными практически невозможно. Дело в том, что анализируемое явление — термокапиллярная конвекция — непреложный атрибут горения безгазовых систем, образующих расплавы, и организовать горение в одной и той же смеси без этого фактора нельзя. Это принципиально отличает рассматриваемый процесс от управления горением путем организации внешнего потока теплоносителя [14, 21], когда можно менять его параметры.

В соответствии с формулой (4) конвекция

возрастает с размером капилляра:  $v_{tc} \sim d_c$ . Однако экспериментально проследить действие этого параметра трудно. Дело в том, что скорость химического превращения в гетерогенной среде уменьшается с ростом размера частиц:  $k(T_b) \approx D(T_b)/r^2$  (где  $D(T_b)$ ,  $r$  — коэффициент и масштаб диффузии). Так как  $d_c \sim r$ , то изменение скорости конвекции компенсируется изменением скорости химической реакции.

Степень влияния термокапиллярной конвекции на горение зависит от температурного интервала существования расплава — от температуры плавления  $T_L$  до температуры горения  $T_b$ . Чем больше этот интервал, тем больше конвекция влияет на теплоперенос (см. (16)). Так как дополнительный теплоперенос увеличивает скорость горения, то высокие скорости фронта в системах с большой разницей  $T_b - T_L$  косвенно свидетельствуют о существенной роли в них конвекции. К таковым можно отнести системы, в которых велико значение  $T_b - T_L$ . Например, это системы из переходного металла IV группы (Ti, Zr, Hf) и C, V, скорости горения в которых после предварительной термовакуумной обработки превышают 0.1 м/с [22]. К таким системам можно отнести также некоторые интерметаллические системы, характеризующиеся существенным различием температур горения и появления расплава [23], в которых  $u > 0.1$  м/с.

Для наиболее быстрой кинетики гетерогенной реакции — жидкофазной диффузии — оценка скорости горения  $u \sim \sqrt{aD(T_b)}/r$  при  $D(T_b) \approx 10^{-8}$  м<sup>2</sup>/с и  $a = \lambda/c\rho \approx 10^{-5}$  м<sup>2</sup>/с даже для мелких частиц ( $r \approx 10^{-5}$  м) не превышает 0.05 м/с. Эта величина меньше приведенных значений.

О проявлении термокапиллярной конвекции в процессах безгазового горения свидетельствуют эксперименты [8], в которых обнаружена «фильтрационная транспортировка расплава в низкотемпературную часть волны горения». Таким путем проявляются действие конвективной теплопередачи и формирование структуры волны горения. Без учета конвекции распределение жидкого компонента определяется только изменением глубины превращения в зоне реакции. Для узких зон реакции [13] основное реагирование проходит вблизи температуры горения. Перераспределение расплава смещает зону реакции в область меньших температур.

## ВЫВОДЫ

1. Проведена оценка теплопереноса в волне безгазового горения, вызванного термокапиллярной конвекцией. Показано, что ее влияние может быть значительным.

2. Построена и исследована аналитической и численным методами математическая модель, учитывающая термокапиллярную конвекцию.

3. Получены приближенная формула для расчета скорости горения при конвективном теплопереносе и условие реализации такого режима. Выявлено, что конвекция существенно проявляется в системах с большой разницей между температурами горения и плавления компонента в образцах с высокой пористостью.

4. В рамках полной модели получены численными расчетами зависимости скорости горения от параметров фазового перехода и пористости. Показано качественное соответствие аналитических оценок расчетным результатам.

5. Обнаружено развитие неустойчивости распространения волны горения в автоколебательных режимах, вызванное действием термокапиллярной конвекции. В преимущественно конвективном режиме теплопередачи с уменьшением температуры плавления средняя скорость горения увеличивается и дестабилизация волны горения (рост амплитуды и периода колебаний) становится существенно заметней, чем в кондуктивном режиме.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Нигматулин Р. И. Основы механики гетерогенных сред. — М.: Мир, 1978.
2. Кирдяшкин А. И., Китлер В. Д., Саламатов В. Г., Юсупов Р. А., Максимов Ю. М. Капиллярные гидродинамические явления в процессе безгазового горения // Физика горения и взрыва. — 2007. — Т. 43, № 6. — С. 31–39.
3. Смоляков В. К., Максимов Ю. М., Прокофьев В. Г. Динамика формирования макроструктуры продукта при горении безгазовых систем // Математическое моделирование горения и взрыва высокоэнергетических систем / под ред. И. М. Васенина. — Томск: Изд-во Том. ун-та, 2006. — С. 204–315.
4. Прокофьев В. Г., Смоляков В. Г. Формирование макроструктуры продукта в нестационарном СВС-процессе // Вестн. Том. гос. ун-та. Математика и механика. — 2012. — № 1. — С. 103–114.
5. Левич В. Г. Физико-химическая гидродинамика. — М.: Гос. изд-во физ.-мат. лит., 1959.
6. Френкель Я. И. Кинетическая теория жидкостей. — Л.: Наука, 1975.
7. Вилсон Д. Р. Структура жидких металлов и сплавов. — М.: Металлургия, 1972.
8. Химическая энциклопедия. — М.: Большая Рос. энцикл., 1992. — Т. 3. — С. 588.
9. Еременко В. Н. Поверхностное натяжение жидких металлов при температуре плавления // Укр. хим. журн. — 1962. — Т. XXVIII, вып. 4. — С. 341–345.
10. Хейфиц Л. И., Неймарк А. В. Многофазные процессы в пористых средах. — М.: Химия, 1982.
11. Смоляков В. К. О «шероховатости» фронта безгазового горения // Физика горения и взрыва. — 2001. — Т. 37, № 3. — С. 33–44.
12. Алдушин А. П., Мержанов А. Г. Безгазовое горение с фазовыми превращениями // Докл. АН СССР. — 1977. — Т. 236, № 5. — С. 1133–1136.
13. Зельдович Я. Б., Баренблатт Г. И. и др. Математическая теория горения и взрыва. — М.: Наука, 1980.
14. Алдушин А. П. Теплопроводный и конвективный режимы горения пористых систем при фильтрации теплоносителя // Физика горения и взрыва. — 1990. — Т. 26, № 2. — С. 60–68.
15. Прокофьев В. Г., Смоляков В. К. Влияние фазового перехода на трехмерные неустойчивые режимы безгазового горения // Физика горения и взрыва. — 2016. — Т. 52, № 3. — С. 65–71.
16. Шкадинский К. Г., Хайкин Б. И., Мержанов А. Г. Распространение пульсирующего фронта экзотермической реакции в конденсированной фазе // Физика горения и взрыва. — 1971. — Т. 7, № 1. — С. 19–28.
17. Шпильрайн Э. Э., Фомин В. А., Скородько С. Н., Сокол Т. Ф. Исследование вязкости жидких металлов. — М.: Наука, 1983.
18. Мержанов А. Г., Мукасян А. С. Твердопламенное горение. — М.: Изд-во Торус пресс, 2007.
19. Прокофьев В. Г., Смоляков В. К. Нестационарные режимы горения бинарной безгазовой смеси при зажигании накаливаемой стенкой // Физика горения и взрыва. — 2005. — Т. 41, № 2. — С. 45–50.
20. Прокофьев В. Г., Смоляков В. К. Особенности зажигания и неустойчивые режимы безгазового горения образца в форме диска // Физика горения и взрыва. — 2017. — Т. 53, № 1. — С. 43–47.
21. Маханьков А. В., Смоляков В. К. Особенности горения безгазовых систем в потоке инертного газа // Изв. СО РАН. Сер. техн. наук. — 1990. — Вып. 2. — С. 25–28.



22. **Найбороденко Ю. С., Касацкий Н. Г., Лавренчук Г. В. и др.** Влияние термической обработки в вакууме на горение безгазовых систем // Химическая физика горения и взрыва. Горение конденсированных и гетерогенных систем. — Черногловка, 1980. — С. 74–77.
23. **Итин В. И., Найбороденко Ю. С.** Высокотемпературный синтез интерметаллидов. — Томск: Изд-во ТГУ, 1987.

*Поступила в редакцию 8/XII 2017 г.*

---