

## ВОСПЛАМЕНЕНИЕ ЧАСТИЦЫ АЛЮМИНИЯ

А. В. Федоров<sup>1,2</sup>, Ю. В. Харламова<sup>1</sup><sup>1</sup>Институт теоретической и прикладной механики СО РАН, 630090 Новосибирск  
fedorov@itam.nsc.ru<sup>2</sup>Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет, 630112 Новосибирск

В рамках теории теплового взрыва Семенова разработана математическая модель процесса воспламенения одиночной частицы алюминия в стационарных условиях. На ее основе описаны экспериментальные зависимости времени задержки воспламенения от радиуса и предельной температуры воспламенения. Определена зависимость предэкспоненциального множителя в эмпирическом законе окисления от размера частиц, температуры окружающей среды и содержания в ней окислителя.

Ключевые слова: воспламенение, гетерогенные среды, ударные волны, математическое моделирование.

## ВВЕДЕНИЕ

Дисперсные среды нашли широкое применение в производстве. В этой связи возник интерес к процессам воспламенения и горения газозвесей с точки зрения предотвращения промышленных взрывов. Кроме того, известно, что в камерах сгорания энергетических устройств и двигателей твердое и жидкое топливо часто сжигаются в диспергированном виде. В этом случае именно закономерности воспламенения, а также горения и погасания каждой отдельной частицы топлива определяют процесс горения их совокупности.

При математическом и физическом описании распространения детонационноподобных волн горения в смесях газа и твердых горючих частиц в данном явлении часто выделяют воспламенительный период, когда за счет интенсивного теплообмена с газом, а также тепла, выделяемого при медленном низкотемпературном окислении, радиационных потерь, потерь на плавление и испарение происходит разогрев частицы. Учет изменения энергии частицы на этом этапе важен при определении критерия ее воспламенения, и, кроме того, изменение энергии частицы влияет на дальнейшее развитие процесса детонации.

Воспламенение частиц металла подробно изучалось как экспериментально, так и теоретически [1–13]. Значительный практический интерес представляет алюминий, сочетающий такие полезные качества, как высокая энергоемкость и высокая плотность.

Как известно, при нормальной температуре окружающей среды поверхность алюминия покрыта оксидной пленкой, которая обладает защитными свойствами (затрудняет диффузию кислорода к металлу). Процесс высокотемпературного окисления существенно зависит от толщины этой пленки.

Экспериментально установлены различные законы окисления. Процессы с быстрым ростом оксидной пленки [1, 2] описываются экспоненциальным законом окисления:

$$\frac{dh}{dt} = K C_{ox}^m \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \exp\left(-\frac{h}{h_0}\right), \quad (1)$$

где  $h$  — толщина оксидной пленки,  $h_0$  — толщина в начальный момент времени,  $E$  — энергия активации,  $R$  — универсальная газовая постоянная,  $K$  — предэкспоненциальный множитель в законе окисления,  $C_{ox}$  — концентрация окислителя у поверхности частицы,  $m$  — порядок реакции по окислителю.

Другое часто используемое уравнение кинетики окисления имеет вид

$$\frac{dh}{dt} = \frac{K C_{ox}^m}{h^n} \exp\left(-\frac{E}{RT}\right). \quad (2)$$

Показатель  $n$  определяет зависимость скорости окисления от толщины оксидной пленки.

В работе [3] исследовалась модель воспламенения (2) при  $n = 0$ . Методами элементарной теории катастроф были определены кинетические константы и исследованы условия разрешимости трансцендентных уравнений, моделирующих воспламенение частицы магния. В рабо-

те [4] также исследовалась модель воспламенения магния при линейном законе окисления, но с учетом испарения с поверхности частицы.

В [5, 6] считалось, что скорость окисления алюминия определяется кинетикой гетерогенной реакции и не зависит от толщины оксидной пленки, а реакция взаимодействия происходит только на поверхности частицы, не покрытой кристаллами оксида. В [6] было принято  $n = 1$  (параболический закон окисления, который выполняется в случае, когда скорость окисления лимитируется диффузией через оксидную пленку) и к уравнению теплового баланса добавилось уравнение, отвечающее за рост доли поверхности, свободной от кристаллического оксида. Авторы [6] полагали, что необходимо учитывать ненулевую скорость окисления металла, покрытого кристаллическим оксидом, при этом с ростом размера частиц влияние процесса кристаллизации должно ослабевать. В [7] рассматривалось параболическое уравнение кинетики роста оксидной пленки для алюминия, а в уравнении теплового баланса учитывались потери на испарение, плавление и радиационные потери частицы. Анализ расчетных данных позволил авторам работы [7] сформулировать некоторый механизм воспламенения частиц и определить влияние начальных параметров.

В перечисленных работах для определения кинетических констант эмпирического закона воспламенения использовались различные подходы: в [3] применялись методы элементарной теории катастроф, в [7] — экспериментальные зависимости времени задержки воспламенения от числа Маха ударной волны, в [8] — условие максимума функции температуры частицы при достижении ею значения температуры плавления оксидной пленки. Из опытов [9–12] известно, что на время задержки воспламенения влияет не только температура окружающей среды, но и другие параметры, такие как радиус частицы и концентрация окислителя в среде. В большинстве работ сравнение экспериментальных и численных данных проводилось только по одному параметру порядка. Цель данной статьи — построить модель, результаты расчета по которой будут удовлетворительно соответствовать эксперименту по нескольким параметрам порядка.

## ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим сферическую частицу диа-

метром  $d$ , помещенную в неподвижный газ с температурой  $\tilde{T}$ , находящийся за отраженной ударной волной. Под действием температуры газа на поверхности частицы алюминия в тонком по сравнению с радиусом слое протекает гетерогенная реакция низкотемпературного окисления. В результате температура частицы  $T$  растет, что может привести к воспламенению. Уравнение кинетики окисления алюминия имеет вид

$$\frac{dh}{dt} = \frac{K C_{ox}}{h} \exp\left(-\frac{E}{RT}\right), \quad (3)$$

а уравнение теплового баланса частицы —

$$m_p c_p \frac{dT}{dt} = -Sk(T - \tilde{T}) + Sq\rho_{Al_2O_3} \frac{dh}{dt}. \quad (4)$$

Начальные условия для системы уравнений (3), (4):

$$t = 0: \quad T = T_0, \quad h = h_0. \quad (5)$$

В (3), (4)  $m_p$ ,  $S$ ,  $c_p$  — соответственно масса, площадь поверхности и теплоемкость частицы,  $\rho_{Al_2O_3}$  — плотность оксида,  $q$  — тепловой эффект реакции,  $k = \lambda Nu/d$  — коэффициент теплоотдачи,  $\lambda$  — коэффициент теплопроводности газа,  $Nu$  — число Нуссельта, индексом 0 обозначены начальные условия.

Таким образом, задача о воспламенении частицы алюминия в неподвижной среде газа свелась к определению функций  $T(t)$ ,  $h(t)$  в области  $[0, t_{ign}]$ , где они удовлетворяют уравнениям (3), (4) и начальным условиям (5).

Для построения математической модели воспламенения частицы в виде (3)–(5) требуется определение неизвестных параметров  $K$ ,  $E$ . Приведенные в литературе значения этих параметров сильно различаются ( $E = 17$  ккал/моль,  $K = 1,9 \cdot 10^{-9}$  м<sup>2</sup>/с,  $n = 1$  [13],  $E = 20$  ккал/моль,  $K = 18 \cdot 10^3$  м/с,  $n = 0$  [8]), хотя они и считаются физико-химическими константами процесса воспламенения. Впрочем, ожидать постоянства значений  $K$  и  $E$  не приходится. Связано это с трудностями моделирования воспламенения частицы алюминия с помощью полуэмпирических уравнений (3), (4). Поэтому мы ставим целью работы определение величины  $K$  как функции температуры окружающей среды и радиуса частицы, с тем чтобы описать с помощью данной модели экспериментальные зависимости времени задержки воспламенения  $t_{ign}$  и предельной температуры  $T_{lim}$  от радиуса частицы.

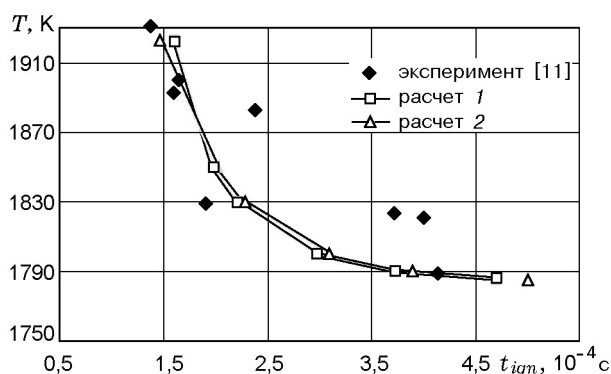


Рис. 1. Экспериментальная и расчетные зависимости времени задержки воспламенения от температуры окружающей среды:

расчет 1 —  $K = a\tilde{T} + b$ , расчет 2 —  $K = (a\tilde{T} + b)(T - T_{lim}(d, C_{ox}))$

### ОПРЕДЕЛЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ КОНСТАНТ

Итак, найдем такое значение  $K$ , чтобы расчетное время задержки воспламенения соответствовало экспериментальным данным [11] для различных значений температуры окружающей среды  $\tilde{T}$ . Для этого по значениям  $K$ , соответствующим двум экспериментальным точкам [11] ( $t_{ign1}, \tilde{T}_1$ ) и ( $t_{ign2}, \tilde{T}_2$ ) представим предэкспоненциальный множитель  $K$  линейной зависимостью  $f(\tilde{T})$ . При этом

$$K(\tilde{T}) = \begin{cases} f(\tilde{T}), & \tilde{T} \geq T_* \\ 0, & \tilde{T} \leq T_* \end{cases} \quad (6)$$

Здесь  $T_*$  — постоянная величина, соответствующая по физическому смыслу минимальной температуре, при которой еще возможно воспламенение частицы. При  $\tilde{T} < T_*$  температура частицы в силу (6) увеличивается только за счет конвективного теплообмена с окружающей средой и стремится в пределе к  $T_*$ . Полученная таким образом расчетная зависимость  $\tilde{T}(t_{ign})$  представлена на рис. 1 кривой 1 (среда — кислород, размер частицы  $d = 6$  мкм [11]). Видно, что экспериментальные данные [11] удовлетворительно согласуются с расчетом и при значениях температуры окружающей среды.

Согласно результатам экспериментальных работ [9, 10, 12 и др.] значение предельной температуры непостоянно и зависит от диаметра частиц  $d$ , концентрации кислорода в окружающей среде  $C_{ox}$  и температуры окружающей среды  $\tilde{T}$ . Чтобы учесть влияние этих параметров, представим величину  $T_*$  в формуле

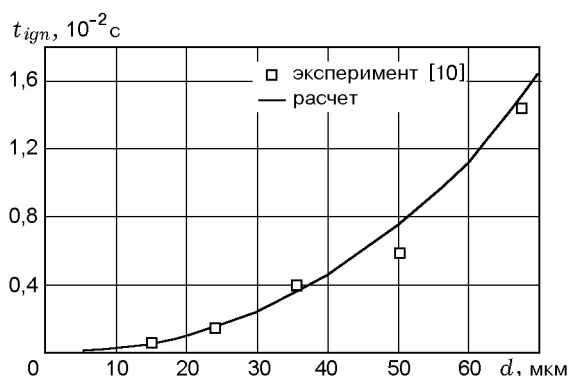


Рис. 2. Экспериментальная и расчетная зависимости времени задержки воспламенения от диаметра частицы

(6) в следующем виде:  $T_* = T_{lim}(d, C_{ox})$ . Эта зависимость получена аппроксимацией экспериментальных данных [12].

Исследуем влияние диаметра частиц на предэкспоненциальный множитель  $K$ , используя экспериментальные зависимости времени задержки воспламенения от диаметра частицы, приведенные в работах [9, 10] (полученные в них результаты близки между собой). Нами была проведена серия параметрических расчетов и в результате сравнения с экспериментом получено некоторое значение предэкспоненциального множителя при  $\tilde{T} = 2510$  К.

Попытаемся далее на основе формулы (6) описать экспериментальные данные по зависимости времени задержки воспламенения от диаметра частицы [10]. Для этого предэкспоненциальный множитель представим в виде

$$K = (a\tilde{T} + b)(\tilde{T} - T_{lim}(d, C_{ox})), \quad (7)$$

при этом при  $\tilde{T} = 2510$  К данная функция проходит через найденную ранее точку.

Таким образом, была найдена эмпирическая формула (7) для предэкспоненциального коэффициента.

Значение энергии активации  $E = 17$  ккал/моль принято согласно данным работы [13].

### ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Для решения системы уравнений (3)–(5) использовался неявный многоступенчатый метод [14], применяющийся для решения жестких систем обыкновенных дифференциальных

уравнений. При расчете были использованы следующие значения физических переменных: для алюминия  $\rho = 2689 \text{ кг/м}^3$ ,  $c_p = 1010 \text{ Дж/(кг}\cdot\text{К)}$ ,  $\rho_{\text{Al}_2\text{O}_3} = 3970 \text{ кг/м}^3$ , для кислорода  $\lambda = 2,4 \cdot 10^{-2} (T/T_0)^{0,75} \text{ Дж/(м}\cdot\text{с}\cdot\text{К)}$ ;  $\text{Nu} = 2$ ,  $q = 35,6 \cdot 10^6 \text{ Дж/кг}$ .

Результаты расчетов представлены на рис. 1 и 2. Кривые 1 и 2 на рис. 1 несколько различаются между собой, но тем не менее лежат в диапазоне разброса экспериментальных данных.

В целом, оба рисунка показывают, что с помощью данной модели воспламенения можно получить удовлетворительное совпадение расчетных и экспериментальных данных по двум зависимостям — времени задержки воспламенения от размера частиц и времени задержки воспламенения от температуры окружающей среды.

## ВЫВОДЫ

В статье разработана математическая модель воспламенения одиночной частицы алюминия в статических условиях, которая удовлетворительно описывает экспериментальные зависимости времени задержки воспламенения от размера частицы и температуры окружающей среды.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Merzhanov A. G. Thermal theory of metal particle ignition // AIAA Journal. 1975. V. 13, N 2. P. 209–214.
2. Григорьев Ю. М., Вакина З. Г. Критические условия воспламенения металлов при логарифмическом законе окисления // Физика горения и взрыва. 1979. Т. 15, № 1. С. 61–64.
3. Федоров А. В. Численно-аналитическое исследование воспламенения частиц магния // Физика горения и взрыва. 1996. Т. 32, № 1. С. 75–84.
4. Петухова Е. В., Федоров А. В. Воспламенение частиц магния вблизи торца ударной трубы // Физика горения и взрыва. 1991. Т. 27, № 6. С. 139–142.
5. Алексеева Т. И., Гуревич М. А., Озеров Е. С. Воспламенение частицы алюминия // Тр. ЛПИ им. М. И. Калинина. 1967. № 280. С. 98–106.
6. Гуревич М. А., Озеров Е. С., Юринов А. А. О влиянии пленки окисла на характеристики воспламенения алюминия // Физика горения и взрыва. 1978. Т. 14, № 4. С. 50–55.
7. Медведев А. Е., Федоров А. В., Фомин В. М. Математическое моделирование воспламенения частиц металла в высокотемпературном потоке за ударной волной // Физика горения и взрыва. 1982. Т. 18, № 3. С. 5–9.
8. Гуревич М. А., Озерова Г. Е., Степанов А. М. Гетерогенное воспламенение алюминиевой частицы в кислороде и водяном паре // Физика горения и взрыва. 1970. Т. 6, № 3. С. 326–335.
9. Friedman R., Macek A. Ignition and combustion of aluminum particles in hot ambient gases // Combust. Flame. 1962. V. 6. P. 9–19.
10. Горение порошкообразных металлов в активных средах / П. Ф. Похил, А. Ф. Беляев, Ю. В. Фролов и др. М.: Наука, 1972.
11. Бойко В. М., Лотов В. В., Папырин А. Н. Воспламенение газозвесей металлических порошков в отраженных УВ // Физика горения и взрыва. 1989. Т. 25, № 2. С. 67–74.
12. Гуревич М. А., Лапкина К. И., Озеров Е. С. Предельные условия воспламенения частицы алюминия // Физика горения и взрыва. 1970. Т. 6, № 2. С. 172–176.
13. Григорьев Ю. М., Гальченко Ю. А., Мержанов А. Г. Исследование кинетики высокотемпературного взаимодействия алюминия с кислородом методом воспламенения // Физика горения и взрыва. 1973. Т. 9, № 2. С. 191–199.
14. Gear C. W. The automatic integration of ordinary differential equations // Computer and Structures. 1985. V. 20, N 6. P. 915–920.

Поступила в редакцию 16/XII 2002 г.