

ФРОЛОВ Федор Сергеевич

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ  
ЧАСТИЦ МЕТАЛЛОВ  
И КАПЕЛЬ ЖИДКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ**

01.04.17 — Химическая физика,  
в том числе физика горения и взрыва

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

МОСКВА — 2008

Работа выполнена в Институте химической физики им. Н. Н. Семенова  
Российской академии наук

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,  
профессор Борисов А. А.

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук  
Марков В. В. (МИ РАН)

доктор физико-математических наук  
Слуцкий В. Г. (ИХФ РАН)

Ведущая организация: Объединенный институт высоких  
температур Российской академии наук

Защита состоится « \_\_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2008 г. в \_\_\_\_\_ часов на заседании  
Специализированного совета Д.002.012.02 при Институте химической физики  
им. Н. Н. Семенова РАН по адресу: 119991, Москва, ул. Косыгина, 4.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИХФ РАН.

Автореферат разослан « \_\_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2008 г.

Ученый секретарь Диссертационного совета  
доктор физико-математических наук

Фролов С. М.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность темы.** В настоящее время при моделировании самовоспламенения частиц или капель в различных энергопреобразующих устройствах, работающих на твердом или жидком топливе, а также в волнах гетерогенной детонации, как правило, используются эвристические критериальные соотношения, не учитывающие сложное тепловое, динамическое и химическое взаимодействие фаз в плотных струях и газовзвесах. Однако эти факторы могут существенно повлиять на время и место самовоспламенения, а также на объем смеси, охваченной вспышкой самовоспламенения. Поскольку самовоспламенение — одно из ключевых явлений, определяющих конструктивные особенности и габариты современных камер сгорания, необходимы адекватные физико-математические модели этого явления, допускающие применение в многомерных газодинамических расчетах. Этим обусловлена актуальность темы диссертационной работы.

**Цель работы.** Цель работы — создание и тестирование физико-математических моделей самовоспламенения частиц металлов и капель жидких углеводородов, учитывающих нестационарные и коллективные эффекты при межфазном взаимодействии, для использования в многомерных численных расчетах многофазных реагирующих течений.

**Научная новизна.** (1) Разработаны и проверены новые модели самовоспламенения частиц магния и алюминия, учитывающие нестационарный характер теплообмена между газом и частицей, а также отличие температуры поверхности частицы от средней температуры в течение периода индукции.

(2) Разработана и проверена новая модель прогрева и испарения капли жидкости, учитывающая нестационарный характер тепло- и массообмена между газом и каплей, неоднородное распределение температуры внутри и в окрестности капли, а также экранирующее влияние соседних капель в плотной капельной газовзвеси.

(3) На основе численного решения полных сопряженных задач испарения и самовоспламенения капель жидких углеводородов разработана и проверена прос-

тая модель, позволяющая приближенно рассчитывать задержку самовоспламенения капли по динамике ее испарения в капельной газозвеси.

**Практическая значимость.** Предложенные модели самовоспламенения твердых частиц и капель жидких углеводородов адекватно описывают физико-химические процессы в различных горелочных и энергопреобразующих устройствах — поршневых, ракетных, прямоточных и газотурбинных двигателях, а также в волнах гетерогенной детонации. Поэтому они могут быть использованы в многомерных численных расчетах при решении задач оптимизации параметров этих устройств и процессов. В частности, модели прогрева, испарения и самовоспламенения капель, разработанные с участием автора включены в вычислительный пакет FIRE (Австрия), используемый ведущими автомобилльными концернами для расчета рабочего процесса в дизеле.

**Основные результаты, представляемые к защите.** На защиту выносятся следующие результаты:

- (1) Новая модель прогрева твердой частицы в газе, учитывающая нестационарный характер межфазного теплообмена и отличие температуры поверхности частицы от ее средней температуры. Результаты сравнительных расчетов по новой, стандартной и полной моделям.
- (2) Новая модель прогрева и испарения капли жидкости, учитывающая нестационарный характер тепло- и массообмена между каплей и газом, неоднородное распределение температуры внутри и в окрестности капли, а также экранирующее влияние соседних капель в плотной капельной газозвеси. Результаты сравнительных расчетов по новой, стандартной и полной моделям.
- (3) Результаты параметрического численного исследования полных сопряженных задач испарения и самовоспламенения капель  $n$ -декана и  $n$ -тетрадекана в воздухе.
- (4) Новый критерий самовоспламенения капли, основанный на достижении фиксированных значений приведенной температуры и коэффициента избытка горючего на фиксированном приведенном расстоянии от поверхности капли (в точке воспламенения).

(5) Новая модель самовоспламенения (и диффузионного горения) частиц в капельной газозвеси, учитывающая экранирующие эффекты соседних капель. Результаты многомерных расчетов испарения и самовоспламенения (а также горения) капельного облака с использованием предложенной модели.

**Апробация работы.** Основные результаты диссертационной работы докладывались на семинарах и научных конференциях отдела горения и взрыва ИХФ РАН (2007, 2008, г. Москва); на II и III Международном симпозиуме по неравновесным процессам, горению и атмосферным явлениям (2005 и 2007, г. Сочи); на Всероссийской конференции молодых ученых, посвященной 75-летию ЦИАМ (2005, г. Москва); на XXX, XXXI и XXXII Академических чтениях по космонавтике (2006, 2007 и 2008, г. Москва); на V Международном коллоквиуме по импульсной и непрерывной детонации (2006, г. Москва); на V Международном симпозиуме по опасности, подавлению и предотвращению промышленных взрывов (2006, г. Галифакс, Канада), на IX Всероссийском съезде по теоретической и прикладной механике (2006, г. Нижний Новгород); на VI Международном симпозиуме по турбулентности, тепло- и массообмену (2006, г. Дубровник, Хорватия); на IX Всероссийской школе-конференции молодых ученых «Актуальные вопросы теплофизики и физической гидрогазодинамики» (2006, г. Новосибирск) и на XXIII Международной конференции «Уравнения состояния вещества» (2008, пос. Эльбрус).

**Публикации.** Основные результаты диссертации опубликованы в 23 работах, включая 9 статей и 14 тезисов докладов на тематических конференциях.

**Личный вклад автора.** Соискатель принимал непосредственное участие в постановке задач, разработке вычислительных программ, проведении расчетов, их обработке и анализе, а также подготовке статей и докладов на конференциях.

**Структура работы.** Работа состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы со 131 наименованием. Работа изложена на 144 страницах, включая 17 таблиц и 61 иллюстрацию.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Введение.** Во введении обоснована актуальность темы диссертации и практическая значимость проведенных исследований, сформулирована цель работы и пути ее достижения. Коротко описаны основные научные результаты и их научная новизна. Приведены основные положения, выносимые на защиту.

**Глава 1. Обзор литературы.** Обсуждаются классические представления о самовоспламенении твердых частиц и капель жидких углеводородов и представлен обзор литературы по теме диссертации.

**Глава 2. Нестационарный теплообмен твердых частиц с газом.** Рассмотрена задача о прогреве твердой сферической частицы. Предложена новая модель прогрева частицы. Проведено сравнение расчетов по (1) полной сопряженной, (2) стандартной и (3) новой моделям. Показано, что новая модель значительно лучше согласуется с расчетами по полной модели, чем стандартная.

При моделировании зажигания и горения металлических частиц — важных составляющих современных ракетных топлив — принимают ряд упрощающих допущений, которые не всегда оправданы. Например, для расчета теплового потока  $Q$ , подводимого к поверхности частицы, часто используют закон Ньютона  $Q = \alpha S(T_{g\infty} - \bar{T})$ , где  $T_{g\infty}$  — температура газа на большом удалении от капли,  $\bar{T}$  — средняя температура частицы,  $\alpha$  — коэффициент теплоотдачи и  $S$  — площадь поверхности частицы. Между тем известно, что закон Ньютона справедлив лишь для условий установившегося теплообмена. Кроме того, тепловой поток определяется не средней температурой частицы  $\bar{T}$ , а температурой ее поверхности  $T_i$ . Цель работы, описанной в гл. 2, состояла в определении поправок в законе Ньютона, позволяющих учесть нестационарный характер теплообмена металлических частиц с газом и неоднородное распределение температуры внутри частиц.

Динамику прогрева сферической частицы металла в покоящемся газе рассчитывали по трем моделям: (1) полной модели, основанной на сопряженных уравнениях теплопроводности в газе и в частице, (2) стандартной приближенной модели (наиболее часто используемой в литературе), основанной на обык-

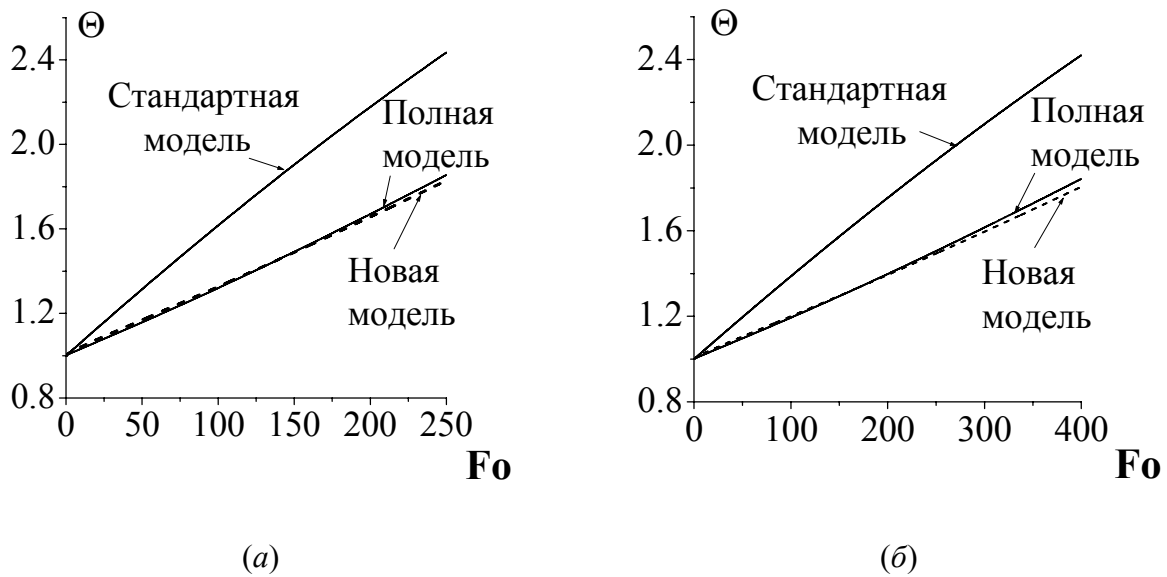
новенном дифференциальном уравнении для средней температуры частицы  $\bar{T}$ , и законе Ньютона  $Q = \alpha S(T_{g\infty} - \bar{T})$ , а также (3) новой приближенной модели, основанной на обыкновенном дифференциальном уравнении для средней температуры частицы  $\bar{T}$  и законе Ньютона в форме  $Q = \alpha_{eff} S(T_{g\infty} - T_i)$ , где  $\alpha_{eff}$  — эффективный коэффициент теплоотдачи, учитывающий нестационарный характер теплообмена. Приближенную зависимость коэффициента  $\alpha_{eff}$  от параметров задачи и времени определили из аналитического решения для сферической частицы с постоянной температурой поверхности:

$$\alpha_{eff} \approx \lambda_{eff} R^{-1} = \lambda_g \left( 1 + \sqrt{\frac{R^2}{\pi a_g t}} \right) R^{-1}, \quad (1)$$

где  $R = D/2$  — радиус частицы,  $\lambda_g$  — коэффициент теплопроводности газа,  $t$  — время и  $a_g$  — коэффициент температуропроводности газа.

Зависимость температуры поверхности от средней температуры частицы  $T_i = T_i(\bar{T})$  определили путем обобщения численных решений, полученных с использованием полной модели.

Сравнение результатов расчетов по трем указанным моделям для частиц алюминия, магния, бора и стали показало, что новая модель значительно лучше согласуется с расчетами по полной модели, чем стандартная. Например, на рис. 1 приведены расчетные зависимости безразмерной средней температуры  $\Theta = \bar{T}/T_0$  частиц магния (а) и алюминия (б) начального диаметра  $D_0 = 70$  мкм от безразмерного времени  $Fo = at/R^2$  ( $a$  — коэффициент температуропроводности металла, индекс 0 здесь и далее относится к начальному моменту времени  $t = 0$ ). Максимальные отклонения расчетной средней температуры частицы  $\bar{T}$  от численного решения сопряженной задачи при использовании новой модели не превышали 1%–4%, тогда как стандартная модель давала отклонения до 30%. Наибольшие отклонения наблюдались при высоких температурах газа. Последнее особенно важно для задачи о воспламенении частиц металлов в окислительной атмосфере. Другое важное достоинство новой модели — нали-



**Рис. 1.** Расчетные зависимости безразмерной средней температуры сферических частиц магния (а) и алюминия (б) от безразмерного времени при температуре воздуха  $\Theta_{g\infty} = 5,46$  ( $T_{g\infty} = 1600$  К)

чие в ней температуры поверхности частицы  $T_i$ , которая может существенно отличаться от средней температуры  $\bar{T}$ . При решении задачи о воспламенении частиц использование  $T_i$  вместо  $\bar{T}$  может повлиять на временные характеристики процесса ввиду сильной зависимости скорости гетерогенной реакции от температуры.

**Глава 3. Нестационарный теплообмен и испарение капель.** Рассмотрена задача о прогреве и испарении сферической капли жидкости. Предложена новая модель прогрева и испарения капли. Проведено сравнение расчетов по (1) полной сопряженной, (2) стандартной и (3) новой моделям. Показано, что новая модель значительно лучше согласуется с расчетами по полной модели, чем стандартная.

В начале гл. 3 приведено описание стандартной (наиболее часто используемой в литературе) модели прогрева и испарения капель и отмечены ее недостатки. Во-первых, при моделировании прогрева капель, как и твердых частиц (см. гл. 2), для расчета межфазного теплообмена в стандартной модели используют закон Ньютона  $Q = \alpha S(T_{g\infty} - \bar{T})$ . Однако закон Ньютона применим лишь к



задачам установившегося теплообмена. Поэтому при расчете прогрева и испарения капель, так же как и при расчете прогрева твердых частиц, необходимо вносить поправку на нестационарность теплового потока. Во-вторых, распределение температуры внутри капли считают пространственно однородным, полагая  $T_i = \bar{T}$ . Однако отличие температуры поверхности  $T_i$  от средней температуры частицы  $\bar{T}$  в задаче о прогреве и испарении капли может быть относительно большим и играть принципиальную роль: давление паров жидкости на поверхности капли сильно (экспоненциально) зависит от температуры  $T_i$ . В третьих, в стандартной модели используется допущение о подобии полей температуры и концентрации в окрестности капли (число Льюиса  $Le = 1$ ), тогда как расчеты по полной сопряженной модели не подтверждают это. В-четвертых, стандартная модель требует введения некоторой реперной температуры  $T_R$  для расчета теплофизических свойств газа (например,  $T_R = (T_{g\infty} + \bar{T})/2$ ).

Как и стандартная модель, новая модель основана на двух обыкновенных дифференциальных уравнениях баланса тепла и массы капли. В отличие от стандартной модели новая модель учитывает эффекты нестационарного тепло- и массообмена с окружающим газом, справедлива для произвольных значений числа Льюиса и не требует введения искусственной реперной температуры для расчета теплофизических свойств газа.

В новой модели при расчете коэффициента теплоотдачи вместо реального коэффициента теплопроводности  $\lambda_g$  используется «эффективный» коэффициент теплопроводности  $\lambda_{eff}$  (см. (1)), учитывающий влияние нестационарных эффектов на прогрев капли:

$$\alpha = \frac{Nu}{D} \lambda_{eff} \frac{\ln(1+B)}{B}.$$

Здесь  $Nu$  — число Нуссельта, множитель  $\ln(1+B)/B$  — поправка Сполдинга, учитывающая влияние вдува массы на коэффициент теплоотдачи, а  $B$  — коэффициент, рассчитываемый по формуле:  $B = (y_{vi} - y_{v\infty})/(1 - y_{vi})$ , где

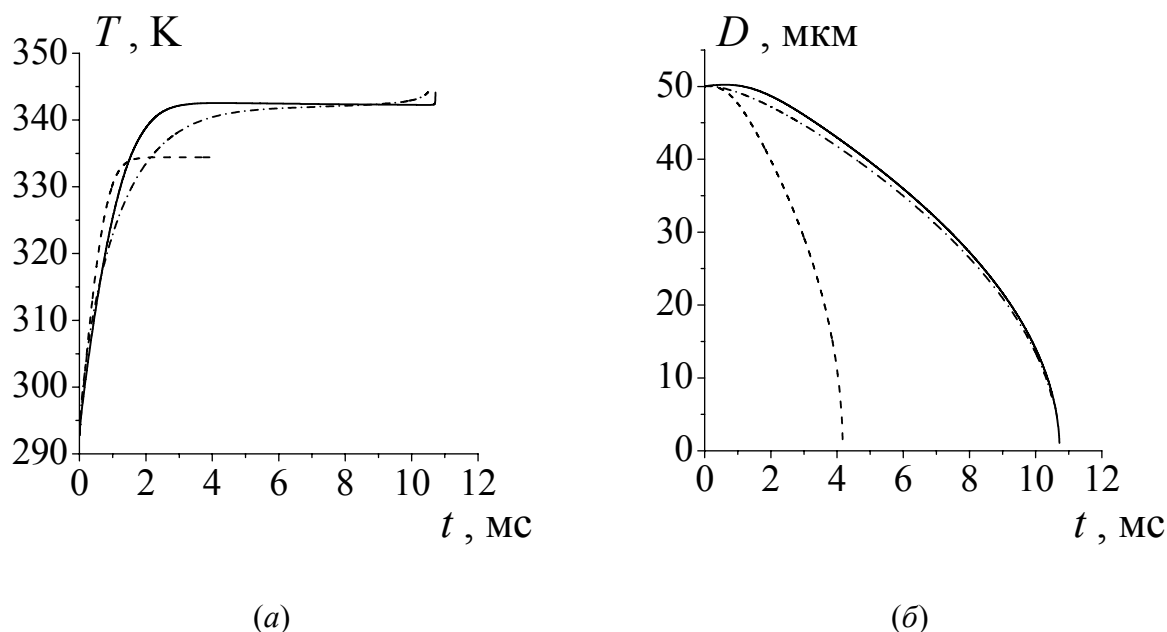
$y_{vi} = y_{vi}(T_i)$  и  $y_{v\infty}$  — значения массовой концентрации пара на поверхности капли и на большом удалении от капли соответственно.

В новой модели в уравнении для теплового потока, как и в гл. 2, используется не средняя температура капли  $\bar{T}$ , а температура ее поверхности  $T_i$ . Для определения  $T_i$  применили следующие соображения. Когда средняя температура капли  $\bar{T}$  достигает значения температуры насыщения (температуры «мокрого термометра»  $T_{wb}$ ), тепловой поток внутрь капли прекращается, т. е.  $d\bar{T}/dt = 0$ . Начиная с этого момента, весь тепловой поток  $Q$  расходуется на испарение капли. Период в эволюции капли, в течение которого  $d\bar{T}/dt > 0$  или  $\bar{T} < T_{wb}$ , называют *переходным периодом в жизни капли*. Период в эволюции капли, в течение которого  $d\bar{T}/dt = 0$  или  $\bar{T} = T_{wb}$ , называют *периодом квазистационарного испарения капли*. В этом случае  $\bar{T} = T_i = T_{wb}$  и  $Q = -L\dot{m}$ , где  $L$  — удельная теплота парообразования, а  $\dot{m}$  — массовая скорость испарения капли. Подстановка соотношений для  $Q$  и  $\dot{m}$  дает следующее нелинейное алгебраическое уравнение для температуры насыщения  $T_i = T_{wb}$ :

$$\text{Nu}\lambda_g(T_{g\infty} - T_i) = 2\rho_g D_g L \frac{y_{vi} - y_{v\infty}}{1 - y_{vi}} \quad (2)$$

где  $D_g$  — коэффициент бинарной диффузии пара жидкости в газе. В (2) параметры  $\lambda_g$ ,  $\rho_g$ ,  $D_g$ ,  $L$  и  $y_{vi}$  — известные функции  $T_i$  (естественной реперной температуры). Уравнение (2) можно решить методом последовательных приближений.

В новой модели предполагается, что температура поверхности капли  $T_i$  с самого начала процесса прогрева и испарения равна температуре насыщения, т. е.  $T_i = T_{wb}$ , а тепловой поток из газа в каплю равен  $Q = \alpha_{eff} S(T_{g\infty} - T_{wb})$ . Для проверки новой модели провели серию сравнительных расчетов с использованием стандартной, новой и полной моделей. Сравнение моделей проводили для капель ряда первичных углеводородов (*n*-гептана, *n*-декана, *n*-додекана и *n*-тетрадекана) в широком диапазоне давлений (от 0,1 до 4 МПа) и температур газа



**Рис. 2:** Испарение капли *n*-гептана при  $D_0=50$  мкм,  $T_{g\infty} = 800$  К,  $p = 0.1$  МПа и  $T_0 = 293$  К: расчетные зависимости средней температуры (а) и диаметра капли (б) от времени. Сплошные кривые соответствуют новой модели, штриховые — стандартной модели, а штрихпунктирные — полной модели

(от 400 до 1500 К). В качестве примера на рис. 2 представлены результаты сравнения для капель *n*-гептана с начальным диаметром 50 мкм и начальной температурой жидкости 293 К. Видно, что новая модель правильно предсказывает время жизни капли и температуру насыщения, тогда как стандартная модель значительно занижает значения этих параметров. Например, на рис. 2 температура насыщения приблизительно на 10 К меньше, чем предсказывает полная модель. При высокой температуре газа время жизни капли, предсказываемое стандартной моделью, приблизительно в 3 раза меньше, чем в полной модели. Анализ чувствительности новой модели к разным учтенным факторам показал, что наибольшее влияние на результат оказывает учет нестационарности теплообмена и использование температуры поверхности  $T_i$  для расчета теплофизических свойств газа.

**Глава 4. Воспламенение частиц металлов.** Рассмотрена задача о самовоспламенении частиц металлов — магния и алюминия. Предложены новые физико-математические модели воспламенения частиц магния и алюминия в воздухе и

кислороде, учитывающие нестационарный теплообмен и отличие температуры поверхности частицы от ее средней температуры. Представлены результаты применения моделей для решения прямой и обратной задач воспламенения частиц. Проведено сравнение с известными экспериментальными данными и со стандартными (наиболее часто используемыми в литературе) моделями.

Новую модель теплообмена твердой частицы с газом, рассмотренную в гл. 2, распространили на задачу о самовоспламенении сферических частиц магния и алюминия. Математически модели самовоспламенения сформулированы так:

$$cm \frac{d\bar{T}}{dt} = \alpha_{eff} S(T_{g\infty} - T_i) + SH\rho_{ox} K \bar{c}_{ox}^n e^{\left(-E/R_{Mg}T_i\right)}; \quad \bar{T}(0) = T_0 \quad (3)$$

для частиц магния и

$$cm \frac{d\bar{T}}{dt} = \alpha_{eff} S(T_{g\infty} - T_i) + SH\rho_{ox} \frac{K \bar{c}_{ox}^n}{h} e^{\left(-E/R_{Al}T_i\right)}; \quad \bar{T}(0) = T_0 \quad (4)$$

$$\frac{dh}{dt} = \frac{K \bar{c}_{ox}^n}{h} e^{\left(-E/R_{Al}T_i\right)}; \quad h(0) = h_0 \quad (5)$$

для частиц алюминия.

В (3)–(5) в дополнение к обозначениям, принятым ранее, введены следующие новые обозначения:  $c$  — теплоемкость материала частицы,  $m$  — масса частицы,  $h$  — толщина оксидной пленки;  $H$  — тепловой эффект реакции, отнесенный к массе оксида;  $\rho_{ox}$  — плотность оксидной пленки;  $K$  — эффективный предэкспоненциальный множитель;  $E$  — эффективная энергия активации;  $R_{Mg} = R^o / W_{Mg}$  и  $R_{Al} = R^o / W_{Al}$  — газовые постоянные для магния и алюминия;  $W_{Mg}$  и  $W_{Al}$  — молекулярные массы магния и алюминия и  $R^o$  — универсальная газовая постоянная;  $n$  — порядок реакции по окислителю.

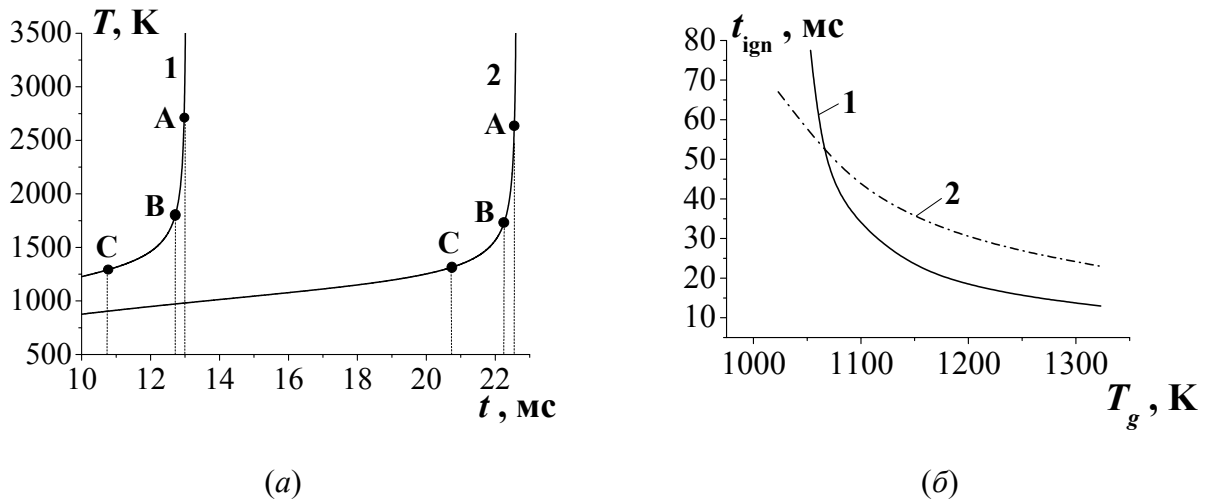
### **Воспламенение частиц магния**

Для проверки модели (2) сначала решили прямую задачу о воспламенении сферической частицы магния ( $D_0 = 44$  мкм) при атмосферном давлении и разных температурах воздуха  $T_{g\infty}$ , приняв для эффективных кинетических па-

раметров  $K$  и  $E$  литературные значения 0,103 м/с и 4,288 МДж/кг соответственно.

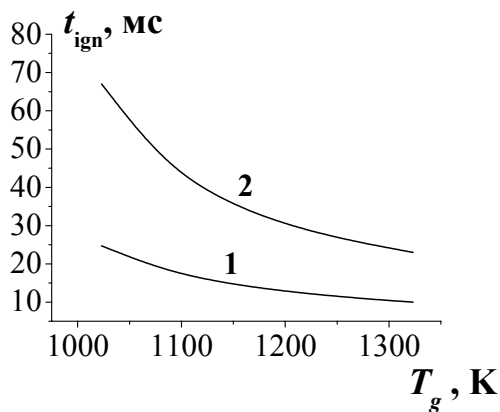
Расчеты проводили по двум моделям: новой (2) и стандартной. В ходе расчетов следили за изменением средней температуры частицы и определяли задержку воспламенения  $t_{ign}$  (рис. 3). На рис. 3, *а* приведен пример расчетных зависимостей средней температуры частицы магния при  $T_{g\infty} = 1323$  К, полученных с использованием новой (кривая 1) и стандартной (2) моделей. Под задержкой воспламенения  $t_{ign}$  условно понимали момент времени, когда расчетная скорость нарастания средней температуры частицы  $d\bar{T}/dt$  достигала «критического» значения  $10^7$  К/с. Выбор такого критерия воспламенения объясняется тем, что при более высоких «критических» значениях  $d\bar{T}/dt$  величина задержки воспламенения практически не изменялась. Например, для кривой 1 критерий  $d\bar{T}/dt = 10^7$  К/с давал  $t_{ign} \approx 13$  мс. При уменьшении «критического» значения  $d\bar{T}/dt$  на порядок (до  $d\bar{T}/dt = 10^6$  К/с) и на два порядка (до  $d\bar{T}/dt = 10^5$  К/с) задержка воспламенения изменялась на 2% и 14% соответственно. Из рис. 3, *а* следует, что при  $T_{g\infty} = 1323$  К задержки воспламенения, рассчитанные по новой и по стандартной моделям, отличаются почти в 2 раза.

На рис. 3, *б* представлены результаты расчетов в виде зависимостей задержек воспламенения от температуры воздуха, полученных с использованием новой (кривая 1) и стандартной (2) моделей. Проведенные расчеты показывают, что учет нестационарности теплообмена частицы с газом сложным образом влияет на задержку воспламенения. Если при высоких температурах воздуха новая модель предсказывает существенно более низкие задержки воспламенения, то в области низких температур она приводит к значительному увеличению задержек по сравнению со стандартной моделью. При этом в новой модели минимальная температура воздуха, при которой воспламенение частицы магния не происходило, приблизительно на 30 К выше (1053 К), чем в стандартной модели (1023 К).

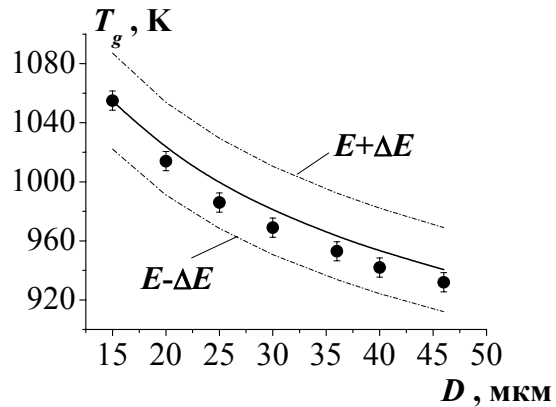


**Рис. 3** Расчетные зависимости (а) средней температуры частицы магния от времени при  $T_{g\infty}=1323$  К и (б) задержки воспламенения частицы магния от температуры воздуха при атмосферном давлении ( $D_0 = 44$  мкм,  $K = 0.103$  м/с и  $E = 4.288$  МДж/кг). Кривая 1 — новая модель, 2 — стандартная модель; А —  $d\bar{T}/dt \approx 10^7$  К/с; В —  $d\bar{T}/dt \approx 10^6$  К/с; С —  $d\bar{T}/dt \approx 10^5$  К/с

Далее, используя новую модель воспламенения частицы магния в воздухе, решили обратную задачу: определили эффективные кинетические параметры в законе окисления частицы металла, добившись наилучшего соответствия расчетов с известными экспериментальными данными по температуре воспламенения частиц. Уточненное значение эффективной энергии активации оказалось равным  $E = 4.345 \pm 0.114$  МДж/кг, т. е. близким к значению  $E = 4,288$  МДж/кг, взятому из литературы. Однако уточненное значение эффективного предэкспоненциального множителя  $K$  оказалось на порядок больше, чем в литературе:  $K = 1,391$  м/с вместо  $K = 0,103$  м/с. Последующее решение прямой задачи о самовоспламенении частиц магния в воздухе с помощью новой модели показало, что использование уточненных значений кинетических параметров приводит к значительному (в 2–3 раза) уменьшению расчетной задержки самовоспламенения частиц магния в диапазоне температур от 1023 до 1323 К (рис. 4, а). На рис. 4, б показано сравнение расчетных и измеренных предельных температур воспламенения сферических частиц магния разного размера.



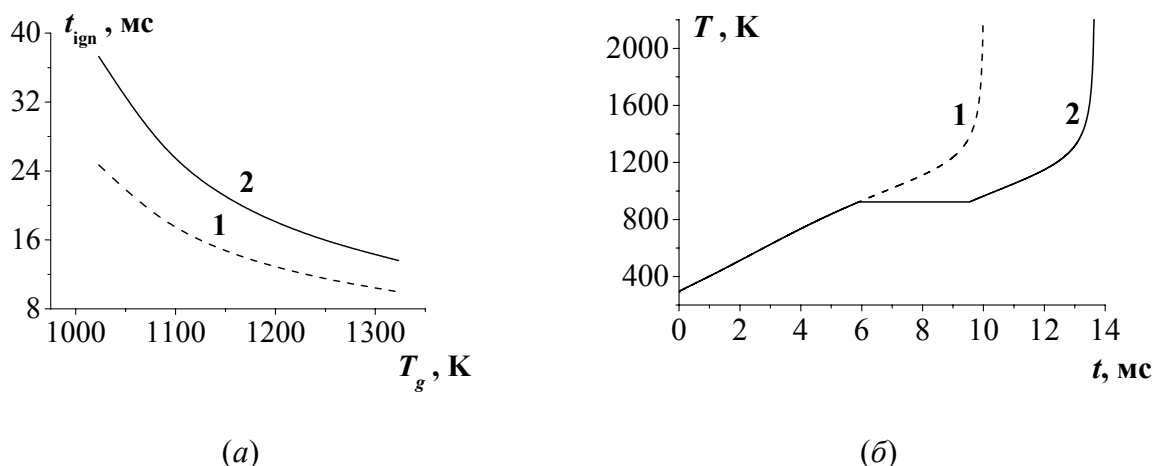
(a)



(б)

**Рис. 4** (а) Расчетные зависимости задержки воспламенения частицы Mg ( $D_0 = 44 \mu\text{м}$ ) от времени: 1 — новая модель с уточненными  $E$  и  $K$ ; 2 — новая модель с  $E$  и  $K$  из литературы; (б) сравнение расчетных (кривая) и измеренных в работе Касселя и Либмана (точки) предельных температур воспламенения сферических частиц магния разного размера

Известно, что мелкодисперсные частицы магния (частицы диаметром 15–46 мкм) воспламеняются при температуре окислительной среды, превышающей температуру плавления магния ( $\approx 923 \text{ K}$ ). В стандартной модели самовоспламенения частиц магния эффектом плавления металла, как правило, пренебрегают. Однако он может повлиять на задержку самовоспламенения металлических частиц. В связи с этим модель (2) модифицировали, чтобы учесть плавление металла. Для учета влияния процесса плавления на среднюю температуру частицы в правую часть (2) ввели дополнительное слагаемое, обеспечивающее изотермический фазовый переход и провели расчеты задержек самовоспламенения сферической частицы магния начального диаметра 44 мкм в воздухе с температурой 1023–1323 К при атмосферном давлении. На рис. 5 показано влияние процесса плавления на задержку самовоспламенения (а) и на характер изменения средней температуры частицы (б). В расчетах по модифицированной модели на зависимости  $\bar{T}(t)$  появляется изотермический участок (кривая 2 на рис. 5, б). Это объясняется тем, что по достижении температуры плавления на поверхности частицы все тепло, поступающее из газа, расходуется на плавление



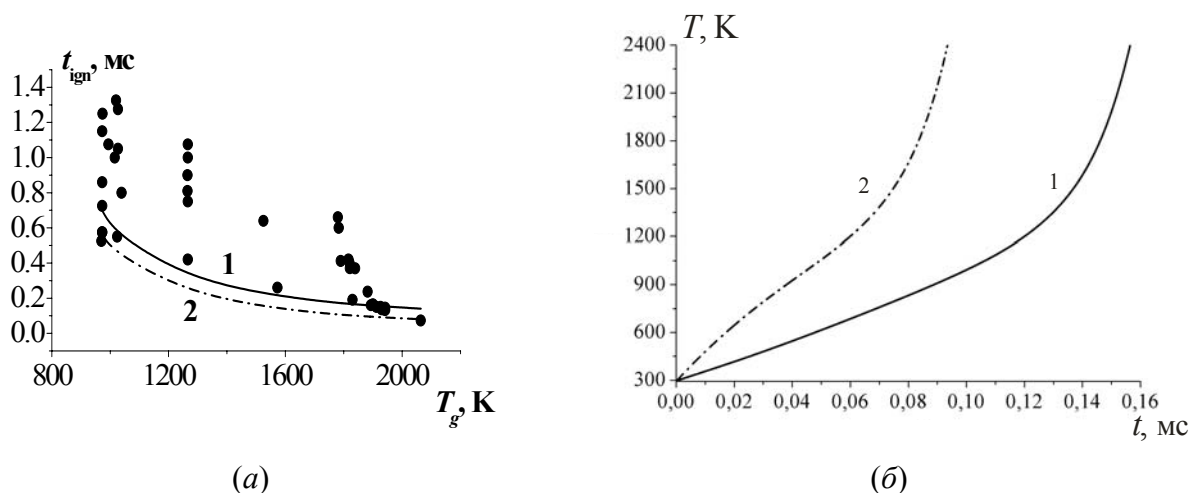
**Рис. 5:** Расчетные зависимости (а) задержки самовоспламенения от температуры воздуха и (б) средней температуры (при  $T_{g\infty} = 1323$  К) сферической частицы магния начального диаметра  $D_0 = 44$  мкм при  $p_0 = 0,1$  МПа: 1 — новая модель (2), 2 — модифицированная новая модель

ние металла до тех пор, пока частица полностью не расплавится. При этом рост средней температуры частицы временно прекращается. Именно поэтому модифицированная модель прогнозирует увеличение задержек самовоспламенения в среднем в 1,4–1,5 раз по сравнению с моделью, не учитывающей плавление.

### **Воспламенение частиц алюминия**

Для проверки модели (3)–(4) сначала решили прямую задачу о самовоспламенении сферической частицы алюминия начального диаметра  $D_0 = 6$  мкм в атмосфере газообразного кислорода с температурой  $T_{g\infty}$  от 975 до 1900 К и давлением  $p_0 = 0,1$  МПа. Для определенности под задержкой самовоспламенения в расчетах понимали промежуток времени, через который средняя температура частицы достигала значения 2300 К (критерий воспламенения, часто используемый в литературе). Полученные значения  $t_{ign}$  практически не отличались от значений, при которых  $d\bar{T}/dt = 10^7$  К/с. Для эффективных кинетических параметров  $K$  и  $E$  использовали литературные значения  $1,9 \cdot 10^{-9}$  м<sup>2</sup>/с и 2,638 МДж/кг соответственно. Отметим, что указанные кинетические парамет-





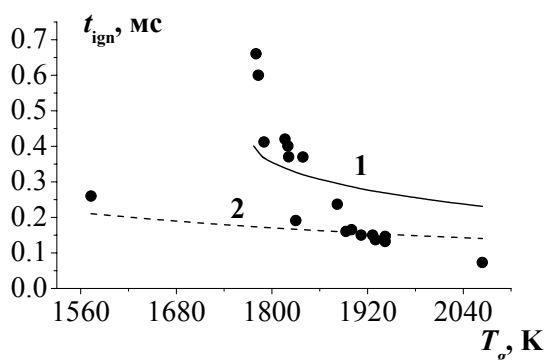
**Рис. 6:** (а) Измеренные в работе Бойко В. М. и др. (точки) и расчетные (кривые) задержки самовоспламенения газовзвеси сферических частиц алюминия с  $D = 6$  мкм в отраженной ударной волне и (б) расчетные зависимости средней температуры от времени при  $T_{g\infty} = 1922$  К: кривые 1 — новая модель, 2 — стандартная модель

ры были получены исходя из наилучшего согласия расчетов по стандартной модели с экспериментальными данными для алюминиевых нитей диаметром 30–50 мкм.

На рис. 6, а показано сравнение расчетов с известными экспериментальными данными. Эксперименты показывают, что частицы алюминия воспламеняются при температуре кислорода выше 975 К (по данным Борисова А. А. в условиях потока воспламенение возможно даже при 950 К). Видно, что расчеты по новой модели дают задержку самовоспламенения в 1,3–1,8 раз больше, чем расчеты по стандартной модели, и несколько лучше согласуются с экспериментальными данными. Такое отличие вызвано разной интенсивностью межфазного теплообмена в новой и в стандартной моделях. Например, на рис. 6, б показано поведение средней температуры частицы в этих моделях при  $T_{g\infty} = 1922$  К и прочих равных условиях. Отметим, что задержка самовоспламенения при  $T_{g\infty} = 1922$  К сопоставима с продолжительностью переходного периода прогрева частицы, когда  $Nu > 2$  ( $\approx 0,2$  мс), а при более высоких температурах величина  $t_{ign}$  оказывается меньше продолжительности переходного периода.

Как показано в гл. 2, стандартная модель может сильно искажать динамику изменения температуры частицы по сравнению с полной моделью. Поэтому,

используя новую модель (3)–(4), решили обратную задачу: определили эффективные кинетические параметры в законе окисления частицы металла, добившись наилучшего соответствия расчетов с экспериментальными данными Гуревича М. А. и др. по воспламенению частицы алюминия. Уточненное значение эффективной энергии активации оказалось равным  $E = 2,660 \pm 0,089$  МДж/кг, т. е. близким к значению  $E = 2,638$  МДж/кг, взятому из литературы. Однако уточненное значение эффективного предэкспоненциального множителя  $K$  оказалось почти на порядок меньше, чем в литературе:  $K = 0,25 \cdot 10^{-9}$  м<sup>2</sup>/с вместо  $K = 1,90 \cdot 10^{-9}$  м<sup>2</sup>/с. Последующее решение прямой задачи о самовоспламенении частиц алюминия в кислороде с помощью новой модели показало, что использование уточненных значений кинетических параметров приводит к значительному (в 2–3 раза) увеличению задержки самовоспламенения частиц алюминия при относительно высоких температурах  $T_{g\infty} > 1777$  К (рис. 7). Видно, что при использовании уточненных кинетических параметров расчетная высокотемпературная задержка самовоспламенения значительно лучше согласуется с экспериментальными данными. Следует отметить, что в подобных задачах отличие задержки самовоспламенения не более чем в два раза от измеренных значений обычно расценивается как удовлетворительное ввиду погрешности измерений температуры самовоспламенения.



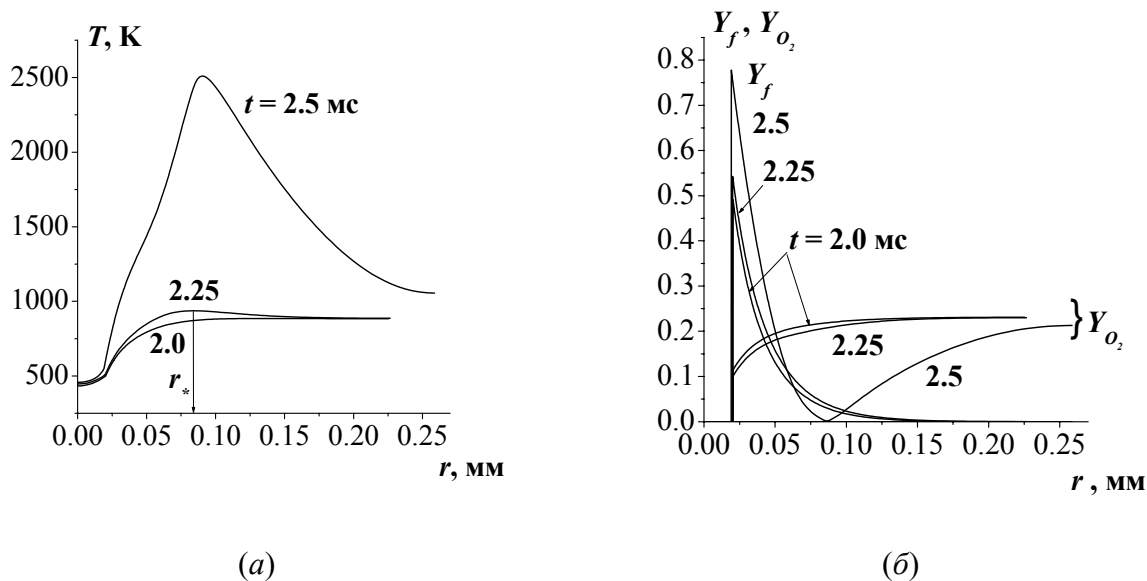
**Рис. 7:** Сравнение измеренных в работе Бойко В. М. и др. (точки) и расчетных (кривые) задержек самовоспламенения газозвеси сферических частиц алюминия с  $D = 6$  мкм в отраженной ударной волне: 1 — новая модель с уточненными кинетическими параметрами  $K$  и  $E$ , 2 — новая модель с кинетическими параметрами  $K$  и  $E$  из литературы

При  $T_{g\infty} < 1777$  К в новой модели частицы не самовоспламеняются. Вопрос о моделировании низкотемпературного самовоспламенения частиц алюминия пока остается открытым. В литературе активно обсуждается гипотеза о том, что при относительно низких температурах воспламенение частиц алюминия неразрывно связано со структурными изменениями оксидной пленки на ее поверхности. По-видимому, для учета таких структурных изменений параболический закон роста оксидной пленки (4) непригоден.

**Глава 5. Воспламенение и горение капель.** Приведено краткое описание полной математической модели испарения и самовоспламенения капель в плотных газовзвесах с учетом коллективных эффектов (разработана ранее в ИХФ РАН). В результате выполненного параметрического анализа численных решений задач испарения и самовоспламенения капель по полной модели предложен новый критерий самовоспламенения капли. На основе новой модели прогрева и испарения капли, описанной в гл. 4, и нового критерия самовоспламенения создана и проверена новая модель самовоспламенения и последующего горения капель жидких углеводородов в плотных газовзвесах.

Цель работы, описанной в гл. 5, — построить физико-математическую модель самовоспламенения (и горения) облака капель жидкого топлива, которая бы учитывала конечные скорости диффузии и химических превращений, а также экранирующие эффекты соседних частиц в облаке. Поскольку такая модель предназначена для применения в многомерных расчетах на оптимизацию рабочего процесса дизеля, основное требование к ней — адекватность и простота. В основу такой модели положили результаты исследований испарения и самовоспламенения капель, основанные на численном решении полной сопряженной задачи с многокомпонентной диффузией и реакцией в газовой фазе.

На первом этапе провели параметрическое исследование закономерностей самовоспламенения капельных газовзвесей *n*-декана и *n*-тетрадекана в условиях дизеля, используя полную модель. Для этой цели все определяющие параметры варьировали в широком диапазоне значений: начальный диаметр ка



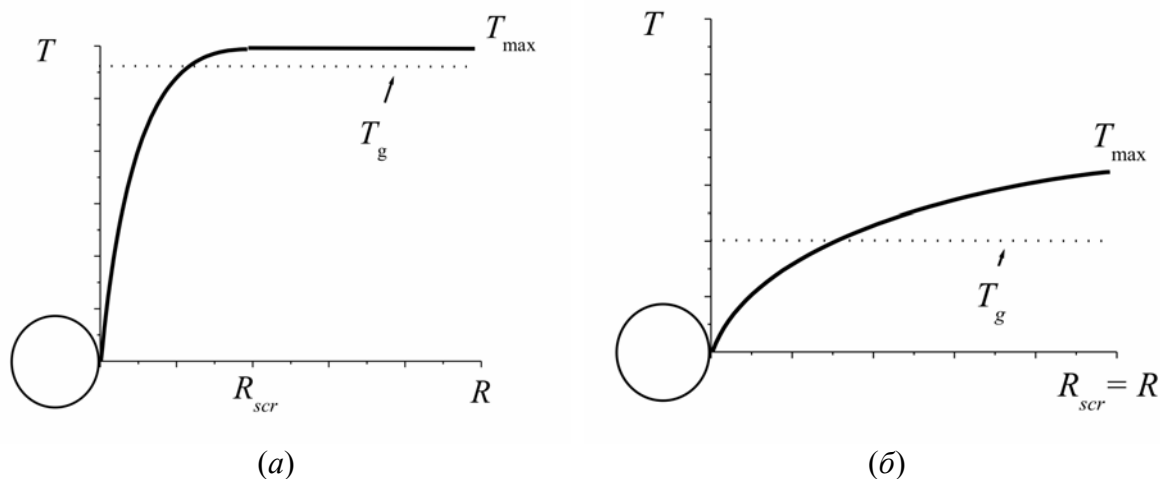
**Рис. 8:** Расчетные пространственные распределения (а) температуры и (б) массовых долей кислорода и пара горючего при самовоспламенении капли *n*-декана в воздухе. Начальные параметры:  $D_0 = 40$  мкм,  $T_0 = 300$  К,  $T_{g0} = 900$  К,  $p = 2$  МПа и  $\Phi = 1,0$

пель  $D_0$  — от 5 до 150 мкм, коэффициент избытка горючего в капельном облаке  $\Phi$  — от 0,1 до 2,0, давление  $p_0$  — от 2 до 8 МПа, температуру воздуха  $T_{g\infty}$  — от 800 до 900 К. Кинетику химических превращений описывали с помощью проверенного глобального механизма с 6 компонентами и 5 реакциями. Оказалось, что в расчетах самовоспламенение происходило на некотором приведенном расстоянии от центра капли  $\delta_* = D_*/D_0$  при некоторой приведенной температуре  $\theta_* = T_{g*}/T_{g\infty}$ . Например, на рис. 8 показаны результаты расчета самовоспламенения капли *n*-декана начального диаметра 40 мкм в стехиометрической ( $\Phi = 1$ ) капельной газозвеси при начальной температуре жидкости  $T_0 = 300$  К, температуре воздуха  $T_{g\infty} = 900$  К и давлении  $p = 2$  МПа. Самовоспламенение пара горючего происходит на некотором расстоянии  $r_*$  от поверхности капли (рис. 8, а). После самовоспламенения температура в окрестности точки  $r = r_*$  быстро нарастает во времени и вокруг капли образуется пламя конечной толщины с высокой температурой (до 2500 К). В окрестности точки максимума температуры (внутри пламени) концентрации пара горючего и кислорода стре-

мятся к нулю (рис. 8, б, момент времени 2,5 мс). После возникновения пламени вокруг капли массовая доля пара на поверхности частицы увеличивается приблизительно от  $y_{vi} = 0,55$  до  $y_{vi} = 0,78$ . В результате расчетов выяснилось, что значения  $\delta_*$  и  $\theta_*$  слабо зависят от определяющих параметров задачи. Этот эффект связан с относительно слабым влиянием определяющих параметров задачи на процессы переноса в газе и сильным их влиянием на скорость химических превращений: самовоспламенение происходило на таком расстоянии от капли, где образовывалась смесь, близкая к стехиометрической, при температуре, обеспечивающей прогрессирующее самоускорение реакции (в соответствии с теорией Н. Н. Семенова). Средние значения  $\delta_*$  и  $\theta_*$  по всем проведенным расчетам для двух топлив оказались равными 3,7 и 0,91 соответственно, причем максимальные отклонения по  $\theta_*$  не превышали 10%. Этот замечательный результат явился важной предпосылкой для разработки простой модели самовоспламенения и горения капель в облаке. Из него следует, что самовоспламенение паровоздушной смеси в окрестности капли происходит тогда, когда приведенная температура газа  $\theta = T_g / T_{g\infty}$  на расстоянии  $\delta_*$  достигает значения  $\theta_*$ .

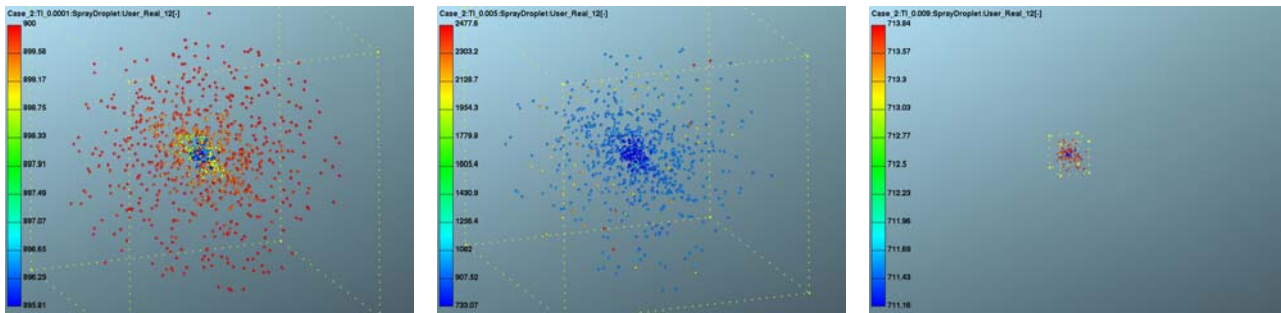
Если считать, что изменение температуры в период предвзрывного разогрева относительно мало, задержку самовоспламенения  $t_{ign}$  можно определить, используя модель испарения капли. Выполненные нами многочисленные сравнительные расчеты испарения и самовоспламенения капельных газовзвесей *n*-декана и *n*-тетрадекана в условиях дизеля подтвердили справедливость этой гипотезы.

На втором этапе, используя полученный результат, разработали простую модель самовоспламенения (и горения) капель в условиях дизеля. В основу модели положили расширенную модель испарения капель в капельной газовзвеси, которая дополняет модель, описанную в гл. 3, следующим образом. В трехмерном газодинамическом расчете полурасстояние  $R_e$  между соседними каплями в капельной газовзвеси зависит от массовой концентрации жидкости  $\Lambda$  и среднего радиуса капель  $R_0 = D_0 / 2$  в расчетной ячейке:  $R_e \approx R_0 (\rho / \Lambda)^{1/3}$ , где  $\rho$  —



**Рис. 9:** Распределения температуры вблизи капли: (а) при  $t < t_{scr}$ , (б) при  $t > t_{scr}$

плотность жидкости. Чтобы учесть диффузионно-лимитированные процессы в окрестности капле, среднюю температуру газа  $T_g$  и среднюю концентрацию пара в ячейке перераспределяли: вместо однородных распределений в ячейке получались неоднородные (параболические) распределения внутри элементарных сфер радиусом  $R_e$ . Распределения температуры и концентрации пара в сферах рассчитывали по известным значениям температуры и концентрации пара на поверхности капле. Как и в модели гл. 3, считали, что температура поверхности капле равна температуре насыщения  $T_{wb}$ . В такой модели естественным образом возникает период индукции  $t_{scr}$  – тот период в жизни капле, когда коллективные эффекты не проявляются (рис. 9, а). В течение этого периода глубина проникновения межфазных тепловых и диффузионных потоков  $R_{scr}$  меньше радиуса элементарной сферы ( $R_{scr} < R_e$ ), а сами потоки определяются значениями максимальной температуры газа  $T_{max}$  и минимальной концентрации пара в ячейке. По завершении периода индукции начинают проявляться коллективные эффекты (рис. 9, б). На этой стадии процесса  $R_{scr} = R_e$ , и тепловые и диффузионные потоки определяются значениями температуры и концентрации пара на границе элементарной сферы. Следуя критерию самовоспламенения, предложенному выше, самовоспламенение капле происходит, когда на параболическом профиле температуры  $\theta(\delta_*) = \theta_*$ . Сразу по истечении задержки само-



**Рис. 10:** Расчетная динамика изменения локальной температуры воздуха в окрестности капли (либо температура диффузионного пламени, либо температура газа)

воспламенения вокруг капли устанавливается фронт пламени: начинается стадия диффузионного горения. На этой стадии тепловой поток на поверхность капли определяется уже не максимальной температурой газа  $T_{\max}$ , а температурой пламени  $T_b$ , зависящей от теплоты реакции на единицу массы окислителя и массовой доли окислителя в пространстве с внешней стороны пламени. Одновременно с диффузионным пламенем, окружающим каплю, в топливно-воздушной смеси между каплями могут протекать химические реакции, приводящие к объемному самовоспламенению и распространению пламени.

На рис. 10 показаны последовательные расчетные распределения температуры в облаке капель *n*-декана с начальным диаметром 40 мкм в воздухе при  $T_0 = 900$  К и  $p_0 = 2$  МПа. Размер расчетной области  $1 \times 1$  см<sup>2</sup>. Расчет проведен с помощью имеющейся в ИХФ РАН вычислительной программы для многомерных, вязких, сжимаемых, многофазных турбулентных течений с новой моделью самовоспламенения (и горения) капель. Для простоты движение частиц не учитывали. В соответствии с новой моделью сразу после самовоспламенения той или иной капли начиналось ее диффузионное горение. Первый акт самовоспламенения происходил на периферии облака, где коллективные эффекты незначительны. В дальнейшем самовоспламенение возникало в слоях, расположенных ближе к центру облака. Лишь в конце процесса самовоспламенялись капли в центральной части облака. Последовательность кадров на рис. 10 свидетельствует о том, что облако самовоспламеняется и горит от периферии к центру. На последних кадрах в системе остаются только центральные капли, в то время как

все периферийные капли либо испарились, либо сгорели в диффузионных пламенах. Модель хорошо воспроизводит феноменологию очагового возникновения и анизотропного распространения волн самовоспламенения в дизеле.

### **ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ**

- (1) Учет нестационарного теплообмена между газом и частицей, а также отличия температуры поверхности частицы от средней температуры сильно влияет на расчетную задержку самовоспламенения частиц магния и Алюминия.
- (2) При использовании уточненных значений эффективных кинетических параметров в законах окисления металлов расчетные задержки самовоспламенения частиц магния и алюминия удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными.
- (3) Учет нестационарного тепло- и массообмена между газом и каплей, неоднородного распределения температуры внутри и в окрестности капли, а также экранирующего влияния соседних капель в плотной капельной газозвеси сильно влияет на расчетное время жизни капель.
- (4) При использовании новой модели прогрева и испарения капли расчетные значения времени жизни капель и температуры поверхности частиц хорошо согласуются с результатами численных расчетов по полной модели для капель жидких углеводородов.
- (5) Самовоспламенение капли происходит в момент времени, когда на определенном приведенном расстоянии от ее поверхности достигается определенная приведенная температура газа. Этот вывод подтвержден параметрическими численными расчетами для капель жидких углеводородов в условиях дизеля.
- (6) Применение новой модели прогрева и испарения капли в комбинации с новым критерием самовоспламенения позволяет воспроизвести основные особенности очагового возникновения и анизотропного распространения волн самовоспламенения в дизеле.



## Список опубликованных работ

1. Frolov S. M., Frolov F. S., Basara B. Mathematical model for transient droplet vaporization // In: Nonequilibrium Processes. Volume 1: Combustion and Detonation / Ed. by G. Roy, S. Frolov, A. M. Starik. Moscow: Torus Press. 2005. P. 179–193 (ISBN 5-94588-033-7).
2. Фролов Ф. С. Модель испарения капли горючего с учетом нестационарного теплообмена // Тезисы докладов Всероссийской конференции молодых ученых, посвященной 75-летию ЦИАМ. Москва: ЦИАМ. 2005. С. 180–182.
3. Авдеев К. А., Фролов Ф. С., Фролов С. М. Нестационарный теплообмен металлических частиц с газом // В Сб. трудов XXX Академических чтений по космонавтике. Москва: Война и мир. 2006. С. 153–155.
4. Фролов С. М., Посвянский В. С., Кузнецов Н. М., Фролов Ф. С. Испарение каплей двухкомпонентного топлива // В Сб. трудов XXX Академических чтений по космонавтике. Москва: Война и мир. 2006. С. 155–156.
5. Avdeev K. A., Frolov F. S., Frolov S. M. Effect of transient heating on ignition of metal particles // In: Pulsed and Continuous Detonations / Ed. by G. Roy, S. Frolov, J. Sinibaldi. Moscow: Torus Press. 2006. P. 72–83 (ISBN 5-94588-040-X).
6. Frolov S. M., Avdeev K. A., Frolov F. S. Effect of transient heat transfer on ignition of solid particles // Proc. 6<sup>th</sup> ISEHPM, Halifax, Canada: Dalhousie University Publ. 2006. P. 51–59.
7. Фролов Ф. С. Модель испарения капли с учетом нестационарного теплообмена с газом и неравномерного распределения температуры в жидкости // Труды IX Всероссийского съезда по теоретической и прикладной механике. Нижний Новгород: Изд-во Нижегородского государственного университета им. Н. И. Лобачевского. 2006. Том. II. С. 176-177 (ISBN 5-85746-921-X).
8. Frolov S. M., Frolov F. S., Basara B. Simple model of transient drop vaporization // Journal of Russian Laser Research. 2006. Vol. 27. No. 6. P. 562–574 (online publication by Springer Science + Business Media, Inc).
9. Avdeev K. A., Frolov F. S., Frolov S. M., Basara B. Effect of transient heat transfer on metal particle ignition // In: Turbulence, Heat and Mass Transfer, Vol. 5 / Ed. by K. Hanjalic, Y. Nagano, and G. Jakirlic. 2006. New York: Begell House Publ. P. 581–584 (ISBN 1-56700-229-3).
10. Avdeev K. A., Frolov F. S., Frolov S. M., Basara B. Effect of transient heat transfer on metal particle ignition // In: Turbulence, Heat and Mass Transfer, Vol. 5 / Ed. by K. Hanjalic, Y. Nagano, and G. Jakirlic. 2006. New York: Begell House Publ. CD.
11. Фролов Ф. С. Модель теплообмена металлических частиц с газом // Тезисы доклада IX Всероссийской школы-конференции молодых ученых «Актуальные вопросы теплофизики и физической гидрогазодинамики», Новосибирск. 2006. С. 125–126.
12. Авдеев К. А., Фролов Ф. С., Фролов С. М. Воспламенение твердых частиц в среде окислителя // Известия Тульского государственного университета.

- Серия: Автомобильный транспорт. 2006. Вып. 10. С. 62–68 (ISBN 5-7679-0994-6).
13. Авдеев К. А., Фролов Ф. С., Фролов С. М. Нестационарный теплообмен металлических частиц с газом // Химическая физика. 2006. Т. 25. № 11. С. 17–24.
  14. Фролов Ф. С., Сметанюк В. А., Фролов С. М. Модель испарения капель в газозвеси // В Сб. трудов XXXI Академических чтений по космонавтике. Москва, Комиссия РАН. 2007. С. 157–158.
  15. Smetanyuk V. A., Frolov F. S., Frolov S. M. Drop vaporization in spray. // In: Nonequilibrium processes: Plasma, Combustion, Atmospheric Phenomena / Ed. by G. D. Roy, S. M. Frolov, A. M. Starik. Moscow, Torus Press. 2007. P. 40 (ISBN 978-5-94588-047-4).
  16. Avdeev K. A., Frolov F. S., Borisov A. A., Frolov S. M. Modified model of magnesium particle ignition // In: Nonequilibrium processes: Plasma, Combustion, Atmospheric Phenomena / Ed. By G. D. Roy, S. M. Frolov, A. M. Starik. Moscow: Torus Press. 2007. P. 41 (ISBN 978-5-94588-047-4).
  17. Frolov S. M., Avdeev K. A., Frolov F. S. Effect of transient heat transfer on ignition of solid particles // Loss Prevention. 2007. Vol. 20. Issues 4–6. P. 310–316.
  18. Авдеев К. А., Фролов Ф. С., Борисов А. А., Фролов С. М. Модель воспламенения частицы алюминия // В кн. Актуальные проблемы российской космонавтики: Труды XXXII Академических чтений по космонавтике. Москва: Комиссия РАН. 2008. С. 179–180.
  19. Сметанюк В. А., Фролов Ф. С., Басевич В. Я., Фролов С. М. Модель самовоспламенения капель в плотной газозвеси // В сб. тезисов XXIII Международной конференции «Уравнения состояния вещества», Эльбрус. 2008. С. 123–124.
  20. Авдеев К. А., Фролов Ф. С. Модель воспламенения одиночной частицы алюминия // В сб. тезисов XXIII Международной конференции «Уравнения состояния вещества». Эльбрус: Изд-во ИПХФ РАН. 2008. С. 122–123.
  21. Фролов Ф. С. Модель испарения капель в газозвеси с учетом экранирующих эффектов // В сб. «Горение и взрыв». Москва: Торус Пресс. 2008. Вып. 1. С. 68–71 (ISBN 5-978-94588-056-6).
  22. Басевич В. Я., Борисов А. А., Сметанюк В. А., Фролов С. М., Фролов Ф. С. Моделирование самовоспламенения и горения капель в облаке топливно-воздушной смеси // В сб. «Горение и взрыв». Москва: Торус Пресс. 2008. Вып. 1. С. 6–9 (ISBN 5-978-94588-056-6).
  23. Авдеев К. А., Фролов Ф. С., Борисов А. А., Фролов С. М. Модифицированная модель воспламенения частицы магния // Химическая физика. 2008. Т. 27. № 6. С. 45–51.