Методологические аспекты разработки математических моделей горения частиц металлов в воздухе

© А.В. Воронецкий, В.И. Крылов, К.Ю. Арефьев, А.А. Гусев

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, 105005, Россия

Предложен комбинированный расчетно-экспериментальный подход для уточнения эмпирических констант в законе горения частиц порошкообразных металлических горючих. Проведена апробация метода на примере моделирования распространения фронта пламени в установке постоянного объема. Рассмотрены конструкция установки данного типа и методика проведения эксперимента. Приведено описание математической модели. Представлено сравнение расчетных и экспериментальных значений скорости распространения фронта пламени в газовзвесях алюминиевых порошкообразных металлических горючих. Показана возможность применения рассматриваемого комбинированного расчетно-экспериментального подхода для уточнения физико-математических моделей, используемых для описания воспламенения и горения двухфазных реагирующих газодинамических течений.

Ключевые слова: математическое моделирование, экспериментальное исследование, горение частиц металла, фронт пламени, камера дожигания, закон горения

Введение. Для совершенствования прямоточных воздушно-реактивных двигателей (ПВРД) и ракетно-прямоточных двигателей (РПД) требуется, во-первых, повысить энергетические характеристики используемых топлив и, во-вторых, эффективность рабочего процесса в камерах сгорания двигателей. Для решения первой задачи все шире используют высокометаллизированные твердые топлива (BMTT). Решение второй задачи неразрывно связано с реализацией высоких значений полноты сгорания BMTT [1].

В РПД имеет место двустадийный рабочий процесс: первая стадия — первичное горение (газификация) ВМТТ в газогенераторе; вторая стадия — горение внутри камеры сгорания в воздушной среде поступающих из газогенератора газообразных и конденсированных продуктов первичного процесса [2]. В целях исключения неточной трактовки излагаемого материала для продуктов первичного горения воспользуемся термином «продукты газификации» ВМТТ, понимая при этом, что они включают в себя и конденсированные частицы. Следует отметить, что в качестве перспективных рассматриваются также и схемы ПВРД с прямой подачей псевдоожиженного порошкообразного металлического горючего (ПМГ) в камеру сгорания [3, 4].

Конденсированные продукты газификации представляют собой мелкодисперсные высокометаллизированные частицы. В зависимости от состава ВМТТ в частицах могут содержаться алюминий, магний, бор, а также их соединения, сплавы и образовавшиеся при первичном горении оксиды. Поскольку концентрация горючих элементов в частицах достаточно высока, будем называть их частицами.

Учитывая сложный химический состав ПМГ, при моделировании рабочего процесса в реальных РПД целесообразно использовать упрощенные эмпирические законы горения частиц ПМГ [5, 6]. В этом случае основной проблемой становится уточнение констант и общего вида этих законов. Решение данной проблемы возможно при моделировании процессов, близких по своей природе процессам в камере сгорания РПД, для которых имеются необходимые экспериментальные данные. В качестве одного из таких приближений может быть рассмотрен процесс распространения фронта пламени в газовзвесях ПМГ в установках постоянного объема (УПО) [7, 8].

Разумеется, для подобного моделирования желательно было бы иметь частицы ПМГ, отобранные непосредственно на выходе из газогенератора. Однако база данных по таким продуктам практически отсутствует, что определяется в первую очередь большой сложностью осуществления на практике процесса гашения частиц непосредственно за соплом газогенератора. В связи с этим на начальной стадии работ целесообразно провести исследование по построению и уточнению эмпирических законов горения для конкретных металлов, из которых состоят частицы ПМГ.

Экспериментальная установка. Прежде чем перейти к описанию математической модели, рассмотрим конструктивные особенности УПО и методику проведения эксперимента.

Моделируемый эксперимент был выполнен на разработанной в МГТУ им. Н.Э. Баумана [9] установке «УПО 1500» (рис. 1), которая позволяет исследовать закономерности распространения и структуру фронта пламени в газовзвесях ПМГ. Рабочий участок высотой 1500 мм имеет квадратное поперечное сечение (80×80 мм). Одна из стенок рабочего участка выполнена прозрачной, что позволяет наблюдать за процессом распространения фронта пламени.

Принцип действия установки заключается в следующем. Устройство распыливания подает ПМГ в течение определенного промежутка времени, пока не произойдет заполнение газовзвесью всего объема рабочего участка. После этого происходит локальный поджиг газовзвеси в нижней зоне рабочего участка, и фронт пламени начинает перемещаться снизу вверх. Регистрация закономерностей оседания газовзвеси и распространения фронта пламени осуществляется автоматизированной системой измерений, обрабатывающей сигналы, поступающие от фоторезистивных датчиков. Наличие ресивера необходимо для исключения увеличения давления в зоне рабочего участка в процессе эксперимента.

	Средняя	абсо	лютная	скорость
раст	простране	ния	фронта	пламени
$\overline{w_{f_{\mathfrak{Z}}}}$	определя	яется	по завис	симости

$$w_{f_{\mathfrak{H}}} = w_{\mathrm{oc}} + w_{f_{\mathrm{OTH}}}$$

где $\overline{w_{oc}}$ — средняя скорость оседания газовзвеси; $\overline{w_{f_{OTH}}}$ — скорость распространения фронта пламени относительно неподвижной системы координат, связанной с УПО.

Следует отметить, что эксперимент на данной установке проводили преимущественно при значениях коэффициента избытка воздуха α < < 0,5, поскольку при $\alpha \ge 0,5$ не реализуются достаточные для регистрации в УПО скорости распространения фронта пламени газовзвесях большинства ПМГ. Последнее обстоятельство обусловливает определенную специфику используемой математической модели, так как, согласно данным [10], в этом случае (при α < 1) необходимо учитывать лучистый теплообмен. Математическая модель. Мо-



Рис. 1. Схема рабочего участка «УПО 1500»:

 устройство распыливания ПМГ; 2 датчики регистрации оседания ПМГ; 3 датчики регистрации перемещения фронта пламени; 4 — газовые ресиверы; 5 — воспламенитель

делирование распространения фронта пламени в газовзвеси ПМГ условно можно разделить на три взаимозависимых этапа: 1) моделирование процессов, происходящих в газовой среде с учетом тепловыделения при горении частиц; 2) разрешение траекторной задачи для частиц ПМГ; 3) моделирование лучистого переноса энергии.

При построении математической модели приняты следующие допущения:

1) газовая среда представляет собой смесь воздуха и продуктов сгорания ПМГ;

2) при взаимодействии ПМГ с воздухом конденсированные продукты реакции накапливаются в пределах фронта пламени частицы;

3) газовая среда оптически прозрачна;

4) частицы ПМГ имеют сферическую форму;

5) особенности геометрии расчетной области допускают двумерную постановку задачи.

Система уравнений, описывающая процессы в газовой среде, включает в себя уравнения неразрывности, сохранения импульса и энергии [11]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho v) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho v) = S_m, \qquad (1) \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho v_x) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho v_x v_x) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho v_x v_y) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \\ + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{2}{3} \mu \left(2 \frac{\partial v_x}{\partial x} - \frac{\partial v_x}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right) \right] + S_{u_x}, \qquad (2) \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho v_y) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho v_y v_x) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho v_y v_y) = -\rho g - \frac{\partial p}{\partial y} + \\ + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial v_y}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial y} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{2}{3} \mu \left(2 \frac{\partial v_y}{\partial y} - \frac{\partial v_x}{\partial x} \right) \right] + S_{u_y}, \qquad (3) \\ \frac{\partial (\rho h)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho h v_x)}{\partial x} + \frac{\partial (\rho h v_y)}{\partial y} = \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial (\rho v_x)}{\partial x} + \frac{\partial (\rho v_y)}{\partial x} + \\ + \mu \left[2 \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v_y}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_y}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial y} \right)^2 - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} \right)^2 \right] - \\ -\lambda \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + S_e, \qquad (4) \end{aligned}$$

где ρ — плотность газа, кг/м³; p — давление газа, Па; h — полная энтальпия газа, Дж/кг; λ — коэффициент теплопроводности, Вт/(м·К); v — скорость газа, м/с; v_x , v_y — проекции скорости газа на координатные оси, м/с; μ — коэффициент динамической вязкости, Па·с; T температура газа, К; h — энтальпия газа, Дж/кг; g = 9,81 м/с² — ускорение свободного падения; S_m — источниковый член в уравнении неразрывности кг/(м³·с); S_{q_x} , S_{q_y} — источниковые члены в уравнениях импульса, Н/м³; S_e — источниковый член в уравнении энергии, Вт/м³.

Поскольку газовая смесь состоит из двух компонентов (воздуха и продуктов сгорания ПМГ), введем уравнение сохранения массовой доли продуктов сгорания:

$$\frac{\partial(\rho Y_{\mathrm{n.c}})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v Y_{\mathrm{n.c}}) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v Y_{\mathrm{n.c}}) = -(\frac{\partial J}{\partial x} + \frac{\partial J}{\partial y}) + S_{\mathrm{n.c}},$$
(5)

где $Y_{n.c}$ — массовая доля продуктов сгорания; $S_{n.c}$ — источниковый член, характеризующий скорость образования газообразных продуктов сгорания, кг/(м³·c); $J = -\rho D \left(\frac{\partial Y_{n.c}}{\partial x} + \frac{\partial Y_{n.c}}{\partial y} \right)$ — диффузионный по-

ток, кг/(м²·с); D — коэффициент диффузии, м²/с.

Массовые доли воздуха и продуктов сгорания связаны соотношением

$$Y_{\rm BO3} = 1 - Y_{\rm f.c}$$

Система замыкается уравнением состояния идеального газа:

$$\frac{p}{\rho} = (Y_{\rm B03}R_{\rm B03} + Y_{\rm II.c}R_{\rm II.c})T,$$

где $R_{\text{воз}}$ — газовая постоянная воздуха, Дж/(кг·К); $R_{\text{п.с}}$ — газовая постоянная продуктов сгорания с учетом наличия конденсированной фазы, Дж/(кг·К).

Источниковые члены в уравнениях (1) и (4) определяются по приведенным ниже зависимостям:

$$S_{\text{n.c}} = \sum_{i=0}^{n_{\text{q}}} \frac{\frac{dm_{\text{q}_i}}{dt} (Km_0 + 1)(1 - z)}{V};$$
$$S_m = \sum_{i=0}^{n_{\text{q}}} \frac{\frac{dm_{\text{q}_i}}{dt} [1 - z(Km_0 + 1)]}{V},$$

где Km_0 — массовое стехиометрическое отношение реагентов для реакции ПМГ с воздухом; *i* — порядковый номер частицы в конечном элементе; $n_{\rm q}$ — количество частиц в рассматриваемом конечном элементе; V — объем конечного элемента, м³; $m_{\rm q_i}$ — масса частицы, кг; z — массовая доля конденсированной фазы в составе продуктов сгорания.

Для определения траектории *i*-й частицы ПМГ используют уравнения динамики материальной точки:

$$\frac{dv_{\mathbf{q}_{x_i}}}{dt} = F_{D_i}(v_x - v_{\mathbf{q}_{x_i}}), \tag{6}$$

$$\frac{dv_{\mathbf{q}_{y_i}}}{dt} = F_{D_i}(v_y - v_{\mathbf{q}_{y_i}}) + \frac{g(\rho_{\mathbf{q}_i} - \rho)}{\rho_{\mathbf{q}_i}},$$
(7)

где $v_{\mathbf{u}_{x_i}}$, $v_{\mathbf{u}_{y_i}}$ — проекции скорости частицы на координатные оси, м/с; F_D — коэффициент аэродинамического сопротивления частицы, 1/с; $\rho_{\mathbf{u}}$ — плотность материала частиц, кг/м³;

Коэффициент аэродинамического сопротивления *i*-й частицы ПМГ *F_D* определяется по зависимости [12]:

$$F_{D_i} = \frac{18\mu C_{D_i} \operatorname{Re}_{\mathbf{q}_i}}{\rho_{\mathbf{q}} d_{\mathbf{q}_i}^2 24},$$

где C_{D_i} — коэффициент сопротивления; $\operatorname{Re}_{\mathfrak{q}_i}$ — число Рейнольдса частицы; $d_{\mathfrak{q}_i}$ — диаметр частицы, м.

Для вычисления Re_ч, и C_{Di} использованы [13] соотношения:

$$\operatorname{Re}_{\mathbf{q}_{i}} = \frac{\rho d_{\mathbf{q}_{i}} \sqrt{\left(v_{\mathbf{q}_{x_{i}}} - v_{x}\right)^{2} + \left(v_{\mathbf{q}_{y_{i}}} - v_{y}\right)^{2}}}{\mu},$$
$$C_{D_{i}} = a_{1} + \frac{a_{2}}{\operatorname{Re}_{\mathbf{q}_{i}}} + \frac{a_{3}}{\operatorname{Re}_{\mathbf{q}_{i}}^{2}},$$

где *a*₁, *a*₂, *a*₃ — эмпирические константы.

С учетом изложенного источниковые члены в уравнениях (2) и (3) имеют вид

$$S_{\mathbf{q}_{x}} = \sum_{i=0}^{n_{\mathbf{q}}} m_{\mathbf{q}_{i}} \Delta t \left(v_{\mathbf{q}_{x_{i}}} - v_{x} \right) \frac{18\mu C_{D_{i}} \operatorname{Re}_{\mathbf{q}_{i}}}{\rho_{\mathbf{q}} d_{\mathbf{q}_{i}}^{2} 24},$$

$$S_{\mathbf{q}_{y}} = \sum_{i=0}^{n_{\mathbf{q}}} m_{\mathbf{q}_{i}} \Delta t \left(v_{\mathbf{q}_{y_{i}}} - v_{y} \right) \frac{18\mu C_{D_{i}} \operatorname{Re}_{\mathbf{q}_{i}}}{\rho_{\mathbf{q}} d_{\mathbf{q}_{i}}^{2} 24},$$

где Δt — шаг по времени, с.

При анализе теплового состояния частиц рассматриваются две стадии процесса: первая стадия — до момента воспламенения частицы; вторая стадия — после момента воспламенения частицы. На первой стадии температура частицы переменна и ее изменение определяется конвективным тепловым потоком от газа к частице, лучистым тепловым потоком от других частиц и теплоподводом в результате гетерогенной химической реакции. Для определения лучистого теплового потока необходимо знать эффективную температуру излучения фронта пламени, окружающего частицу $T_{\phi.n_i}$. В нашем случае в качестве $T_{\phi.n_i}$ используется равновесная температура горения ПМГ в воздухе (при стехиометрическом соотношении реагентов).

Принимая во внимание изложенное, для *Т*_ч можно записать:

$$\frac{dT_{\mathbf{q}_{i}}}{dt} = \begin{cases} (q_{\pi_{i}} + q_{\kappa_{i}} + q_{\chi_{i}}) \frac{6\pi}{\rho_{\mathbf{q}} d_{\mathbf{q}_{i}} C_{\mathbf{q}}} & \text{при } T_{\mathbf{q}} < T_{\text{вос}}, \\ 0 & \text{при } T_{\mathbf{q}} \ge T_{\text{вос}}, \end{cases}$$
(8)

где T_{q_i} — температура частицы, К; $T_{\text{вос}}$ — температура воспламенения частицы, К; q_{κ_i} — конвективный тепловой поток от газа к частице, Вт/(м²·K); q_{π_i} — лучистый тепловой поток к частице, Вт/(м²·K); q_{κ_i} — тепловой поток к частице в результате химической реакции, Вт/(м²·K); C_{q} — теплоемкость материала частицы, Дж/(кг·K).

Для моделирования процесса лучистого теплообмена между частицами используется уравнение распространения интенсивности излучения в ортогональных проекциях сферических гармоник [14], которое является предпочтительным для случая оптически малопрозрачных сред:

$$\frac{1}{3a_{\rm q}} \left(\frac{\partial^2 G}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 G}{\partial y^2} \right) + 4E_{\rm q} - a_{\rm q}G = 0, \tag{9}$$

$$a_{\rm q} = \sum_{i=0}^{n_{\rm q}} \varepsilon_{\rm q} \, \frac{\pi d_i^2}{4V},\tag{10}$$

$$E_{\mathbf{q}} = \sum_{i=0}^{n_{\mathbf{q}}} \varepsilon_{\mathbf{q}} \frac{\pi d_i^2}{4V} \sigma_0 T_i^4, \qquad (11)$$

$$T_{i} = \begin{cases} T_{\mathbf{q}_{i}} \text{ при } T_{\mathbf{q}_{i}} < 2300 \text{ K}, \\ T_{\phi, \pi_{i}} \text{ при } T_{\mathbf{q}_{i}} = 2300 \text{ K}, \end{cases}$$
(12)

$$d_{i} = \begin{cases} d_{\mathbf{u}_{i}} \operatorname{при} T_{\mathbf{u}_{i}} < 2300 \text{ K}, \\ d_{\phi.\pi_{i}} \operatorname{при} T_{\mathbf{u}_{i}} = 2300 \text{ K}, \end{cases}$$
(13)

где *G* — интенсивность излучения, Вт/м²; *i* — порядковый номер частицы в рассматриваемом объеме; $\varepsilon_{\rm ч}$ — степень черноты материала частицы; d_i — определяющий диаметр, м; σ_0 — постоянная Стефана — Больцмана, $\sigma_0 = 5,67 \cdot 10^{-8}$ Вт/(м²·K⁴); T_i — определяющая температура, К; $d_{\phi.n_i}$ — диаметр фронта пламени вокруг частицы, м.

Лучистый и конвективный тепловые потоки к частице до момента ее воспламенения могут быть определены по зависимостям

$$q_{\pi_i} = \varepsilon_{\mathbf{q}} \sigma_0 \left(\frac{G}{4\sigma_0} - T_{\mathbf{q}_i} \right)^4,$$

$$q_{\mathbf{k}_i} = \mathrm{Nu}_i \frac{\lambda}{d_{\mathbf{u}_i}} \Big(T - T_{\mathbf{u}_i} \Big).$$

Для вычисления Nu_i использована зависимость [15]

$$Nu_i = 2, 0 + 0, 6 \operatorname{Re}_{q_i}^{0,5} \operatorname{Pr}^{1/3},$$

где Pr — число Прандтля.

Для определения теплового потока, обусловленного протеканием гетерогенной химической реакции (на этапе воспламенения), используется параболический закон окисления. При этом считается, что в начальный момент вся поверхность частицы покрыта оксидной пленкой [9]:

$$q_{\mathbf{x}_{i}} = H_{\mathrm{T}} \frac{\rho_{\mathrm{okc}}}{\delta_{i}} K Y_{\mathrm{BO3}} \exp(-\frac{E}{R_{\mu} T_{\mathbf{q}_{i}}}),$$

где $\rho_{\text{окс}}$ — плотность оксида, кг/м³; δ_i — толщина оксидной пленки на поверхности частицы, м; $K = 7,4\cdot 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$ — предэкспоненциальный множитель; E = 70 кДж/моль — энергия активации; $R_{\mu} = 8,314 \text{ Дж/(моль·К)}$ — универсальная газовая постоянная.

Изменение толщины оксидной пленки на этапе воспламенения определяется зависимостью [16]

$$\frac{d\delta_i}{dt} = \frac{K}{\delta_i(t)} Y_{\text{BO3}} \exp(-\frac{E}{R_{\mu}T_{\mathbf{q}_i}}).$$

Для моделирования горения частиц ПМГ в воздухе вводятся следующие допущения. Линейная скорость изменения радиуса частицы *r*_ч, определяется эмпирическим законом следующего вида [5]:

$$\frac{dr_{\mathbf{u}_i}}{dt} = -C_0 Y_{\mathrm{BO3}},$$

где C_0 — эмпирическая константа.

В качестве основного аргумента в используемом законе горения рассмотрена массовая доля воздуха $Y_{\rm воз}$ в пространстве вокруг частицы. Применение эмпирического закона горения позволяет также сделать следующее допущение: $d_{\phi,\pi_i} = d_{q_i}$. Принято, что влияние диаметра частицы на значение эмпирических констант в законе горения отсутствует. Поскольку моделирование осуществляется при $\alpha < 0.5$, во время эксперимента имеет место относительно малое изменение диаметра частицы. В связи с этим допустимо пренебречь возможностью изменения режима горения по мере выгорания частицы.

На этапе воспламенения частицы принято, что ее масса не изменяется ввиду относительно малого изменения толщины оксидной пленки по сравнению с размерами частицы.

Тогда

$$\frac{dm_{\mathbf{q}_{i}}}{dt} = \begin{cases} 0 \text{ при } T_{\mathbf{q}_{i}} < T_{\text{BOC}}, \\ -C_{0}(\rho Y_{\text{BO3}})\rho_{\mathbf{q}}\pi d_{\mathbf{q}_{i}}^{2} \text{ при } T_{\mathbf{q}_{i}} \ge T_{\text{BOC}}. \end{cases}$$

С учетом принятых допущений источниковый член в уравнении (5) можно определить по зависимости

$$S_e = \begin{cases} \sum_{i=0}^{n_{\rm q}} \frac{dm_{{\rm q}_i}}{dt} H_{\rm T} \\ V \\ \sum_{i=0}^{n_{\rm q}} \frac{-q_{{\rm K}i} \pi d_{{\rm q}_i}^2}{V} \text{ при } T_{\rm q} \geq T_{\rm Boc}, \end{cases}$$

где *H*_т — теплота сгорания ПМГ [Дж/кг].

На данном этапе исследования моделирование распространения фронта пламени выполнено для случая горения в воздухе порошкообразного монофракционного алюминия со следующими свойствами: $C_{\rm q} = 1177 \ \text{Дж/(кг·K)}; \ \rho_{\rm q} = 2700 \ \text{кг/m}^3; \ \varepsilon_{\rm q} = 0,4; \ \rho_{\rm occ} = 3800 \ \text{кг/m}^3.$

Выбор использованного при проведении расчетов размера частиц ПМГ обусловлен следующими соображениями. Среднемассовый диаметр частиц алюминия марки «АСД-1» равен $d_{43} = 21,9$ мкм, а среднеповерхностный $d_{32} = 17,4$ мкм. Для алюминия марки «АСД-4»: $d_{43} =$ = 10,1 мкм, $d_{32} = 7,4$ мкм. Так как интенсивность процесса горения частиц определяется преимущественно диаметром d_{43} , а интенсивность процесса переноса лучистого потока — диаметром d_{32} , то диаметр, определяющий скорость распространения фронта пламени в газовзвеси ПМГ, целесообразно задавать в пределах d_{32} и d_{43} . При моделировании для «АСД-4» начальный диаметр частиц принят равным $d_{44} = 8,5$ мкм, а для «АСД-1» $d_{44} = 19,5$ мкм. Толщина оксидной пленки на поверхности частицы в начальный момент принята равной $\delta_i = 3$ нм [16].

Эффективная температура излучения фронта пламени частицы принимается равной $T_{\phi.\pi} = 3570$ К, что соответствует равновесной температуре горения алюминия в воздухе при $\alpha = 1$. Стехиометрическое соотношение компонентов в реакции $Km_0 = 3,85$. Массовая доля конденсированных продуктов сгорания z = 0,4 [17]. Начальное давление в рабочем участке p = 0,1 МПа. Расчеты проведены в диапазоне $\alpha = 0,15...0,4$.

При моделировании учитывается зависимость свойств воздуха [18] и продуктов сгорания ПМГ от температуры [17]. Коэффициент диффузии *D* определяется по полуэмпирической зависимости Фуллера — Шлеттера — Гиддингса [19]:

$$D = \rho T^{1,75} B,$$

где $B = 8,37 \cdot 10^{-10}$ — множитель, рассчитанный для рассматриваемой смеси при давлении p = 0,1 МПа.

Схема расчетной области и укрупненная структура ее конечноэлементного разбиения приведены на рис. 2. Рассмотрим распространение фронта пламени в газовзвеси ПМГ в рабочем участке высотой l = 1,5 м и шириной b = 0,08, что соответствует размерам рабочего участка установки «УПО 1500».



Рис. 2. Схема расчетной области и укрупненная структура ее конечноэлементного разбиения

При формировании граничных условий принято допущение об отсутствии теплообмена между газовзвесью и стенкой: стенка является адиабатной, полностью отражает лучистый поток. Тогда граничное условие на стенке в уравнении (4) имеет вид

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial n} = 0,$$

где *п* — направление по нормали к поверхности.

Соответственно, для уравнения (9)

$$\frac{\partial G}{\partial n} = 0.$$

На стенках в уравнениях (1)–(3) и (5) принимается граничное условие прилипания v = 0 м/с. При взаимодействии частицы со стенкой при решении уравнений (6), (7) удар полагается абсолютно упругим.

При численном моделировании в уравнениях (1)–(5) используются следующие начальные условия в расчетной области: v = 0 м/с; T = 300 K; p = 0,1 МПа; $Y_{n.c} = 0$.

При решении уравнений (6)–(8), (10) предполагается, что в начальный момент частицы равномерно распределены по объему, их скорость равна $v_{4y_i} = -0,6$ м/с, что равно средней скорости оседания газовзвеси $\overline{w_{oc}}$. В начальный момент температура частиц в области y < 0,01 м принимается равной $T_4 = 2300$ К для моделирования воспламенения газовзвеси, температура остальных частиц принимается равной $T_4 = 300$ К.

Начальные условия в уравнении (9) соответствуют равенству

$$G = \sigma_0 T_{\phi.\pi_i}^4.$$

Для конечно-разностной аппроксимации уравнений (1)-(5), (9) используется неявная схема первого порядка. Решение уравнений (1)-(4) осуществляется с помощью решателя, основанного на давлении (PBS) методом PISO.

Уравнения (6), (7) интегрируют методом Рунге — Кутты 4-го порядка. Следует отметить, что действительное количество частиц в рабочем участке может достигать 10¹¹, в связи с чем решение траекторной задачи применительно к каждой частице является затратным с точки зрения времени расчета и ресурсов ЭВМ. В связи с этим частицы объединены в кластеры (общим количеством более 8000), которые равномерно распределены по всему объему рабочего участка. Для каждого из таких кластеров предполагается, что частицы, содержащиеся в нем, имеют одинаковую температуру, массу и скорость. Количество частиц в кластере зависит от коэффициента избытка воздуха α в рабочем участке. Такой подход позволяет решать уравнения (10) и (8) для одной из частиц и распространять полученные результаты на все частицы в пределах одного кластера, что практически не сказывается на погрешности вычислений, однако позволяет существенно снизить затрачиваемые ресурсы аппаратного времени для расчетов.

Результаты математического моделирования. Для апробирования предложенной математической модели и сравнения полученных данных с экспериментом проведена серия расчетов скорости распространения фронта пламени в газовзвеси частиц алюминия при коэффициентах избытка воздуха $\alpha = 0,15...0,4$.

Одним из критериев распространения фронта пламени в газовзвеси является изменение температуры частиц алюминия T_ч по высоте. Результаты математического моделирования распространения фронта пламени представлены на рис. 3, 4. Данные приведены с ша-гом по времени $\Delta t = 0,05$ с при $\alpha = 0,14$, начальном диаметре частиц $d_{\rm H} = 19,5$ мкм. На рис. 3 красными точками обозначены воспламенившиеся частицы, температура фронта пламени которых близка к температуре горения алюминия (около 3600 К). В процессе горения ПМГ реализуется прогрев газовой фазы близи воспламенившихся частиц и прогрев невоспламенившихся частиц, расположенных выше по рабочему участку. Прогрев частиц осуществляется посредством конвективного, лучистого тепловых потоков и тепловыделения в результате поверхностной химической реакции. Расчеты показали, что значения конвективного и лучистого тепловых потоков могут иметь один порядок, при этом конвективный тепловой поток к частице может принимать как положительное, так и отрицательное значение. До момента достижения частицей температуры воспламенения ее нагрев осуществляется за счет лучистого теплового потока, конвективный тепловой поток при этом отрицательный, так как температура газа, окружающего частицу, меньше температуры частицы. При больших значениях теплопроводности газа конвективный тепловой поток может быть и положительным. В таком случае частица нагревается как за счет излучения, так и за счет конвекции. Тепловой поток, обусловленный протеканием гетерогенной химической реакции частицы, является положительным. После достижения температуры Твос частицы воспламеняются и фронт пламени распространяется вверх по рабочему участку. При этом в рассматриваемой постановке задачи (при отсутствии тепловых потерь в стенки рабочего участка) фронт пламени имеет практически плоскую форму.

Анализ полученных данных позволил выявить следующий эффект: по мере прохождения фронта пламени по газовзвеси частиц, скорость его распространения снижается на 30...40 %. Повышенные значения скорости перемещения фронта пламени в начальный момент обусловлены, по нашему мнению, влиянием узла воспламенения. Методологические аспекты разработки математических моделей...



Рис. 3. Изменение температуры частиц по времени т при $\alpha = 0,15$ и $d_{\rm q} = 19,5$ мкм (красными точками обозначены воспламенившиеся частицы)



Рис. 4. Изменение концентрации продуктов сгорания по времени τ при $\alpha = 0,15$ и $d_{\rm q} = 19,5$ мкм

На видеограмме горения частиц алюминия в установке постоянного объема «УПО 1500» (рис. 5) видно, что характер распространения фронта пламени, полученный расчетным методом (см. рис. 3, 4), схож с экспериментальным (см. рис. 5). Следует отметить, что результаты по качественным особенностям распространения фронта пламени в газовзвеси ПМГ удовлетворительно согласуются с данными, приведенными в работе [9].



Рис. 5. Кинограмма распространения фронта пламени по газовзвеси частиц алюминия в «УПО 1500»

На основе полученных данных можно отметить значительно большую ширину фронта пламени в газовзвесях ПМГ по сравнению с фронтом пламени в гомогенных газовых системах [9]. Анализ показывает, что в расчетах и экспериментах наблюдается значительная размытость зоны реакции. Одним из факторов, оказывающих существенное влияние на протяженность фронта пламени, является коэффициент избытка воздуха α. С уменьшением значения величины α возрастает общее количество частиц в рабочем участке, соответственно, увеличивается суммарная площадь поверхности частиц, отнесенная к единице объема. В результате длина пробега излучения в газовзвеси уменьшается, что приводит к уменьшению зоны прогрева частиц.

Зависимость средней скорости распространения фронта пламени от коэффициента избытка воздуха в рабочем участке для монофракционных ПМГ при различных начальных диаметрах частиц качественно согласуется с имеющимися данными экспериментов для порошков алюминия марок «АСД-1» и «АСД-4» [9]. Сопоставление расчетных и экспериментальных данных представлено на рис. 6.



Рис. 6. Зависимость средней скорости распространения фронта пламени от коэффициента избытка воздуха α:

l — «АСД-1» (экспериментальные данные); *2* — «АСД-4» (экспериментальные данные); *3* — результаты расчета для рассматриваемого монофракционного ПМГ с $d_{\rm q} =$ = 19,5 мкм; *4* — результаты расчета для рассматриваемого монофракционного ПМГ с $d_{\rm q} =$ 8,5 мкм Как уже отмечалось, при увеличении массовой концентрации ПМГ в РУ увеличивается суммарная площадь поверхности частиц, в связи с чем наблюдается интенсификация процессов лучистого переноса тепла между частицами, приводящая к соответствующему увеличению скорости распространения фронта пламени. Некоторые расчетные значения скорости распространения фронта пламени w_{f_p} для монофракционных порошков алюминия с диаметрами частиц 8,5 мкм и 19,5 мкм и экспериментальные данные w_{f_9} для полифракционных ПМГ марок «АСД-1» и «АСД-4» представлены в таблице.

Номер расчета	α	$d_{ ext{y}}$, мкм	<i>w_{f₃}</i> , м/с	<i>W</i> _{fp} , м/с
1	0,15	8,5	6,00	5,85
2	0,25	8,5	4,00	3,92
3	0,40	8,5	1,50	1,52
4	0,15	19,5	2,50	2,47
5	0,25	19,5	1,70	1,58
6	0,40	19,5	1,00	0,97

Некоторые расчетные данные скорости распространения фронта пламени

Сопоставление расчетных и экспериментальных данных показывает, что их удовлетворительную качественную сходимость (по значению *w_f*) можно получить при использовании следующего эмпирического закона горения

$$\frac{dr_{\mathbf{q}}}{dt} = -C_0 Y_{\mathrm{BO3}},$$

где $C_0 = 9,3 \cdot 10^{-4}$ м/с.

Выводы. Предложенный в работе апробированный методологический подход позволяет проводить комплексное расчетно-экспериментальное исследование процессов воспламенения и горения частиц ПМГ. Возможность использования разработанной математической модели для построения эмпирических законов горения частиц ПМГ продемонстрирована на примере моделирования распространения фронта пламени в установке постоянного объема. Сравнение расчетных и экспериментальных данных показало, что представленная математическая модель надлежащим образом описывает процессы распространения фронта пламени в газовзвеси частиц алюминия. Предложенный методологический подход может быть использован для более сложных дисперсных композиций, что позволит определять и верифицировать законы горения конденсированных бор- и литийсодержащих частиц, других типов соединений.

Работа выполнена при поддержке Гранта Ведущей научной школы России, проект НШ-9774.2016.8.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Александров В.Ю., Арефьев К.Ю., Прохоров А.Н., Федотова К.В., Шаров М.С., Яновский Л.С. Методика экспериментальных исследований эффективности рабочего процесса в высокоскоростных ПВРД газогенераторной схемы на твердых топливах. Известия высших учебных заведений. Машиностроение, 2016, № 2, с. 65–75.
- [2] Обносов Б.В., Сорокин В.А., Яновский Л.С., Ягодников Д.А., Францкевич В.П., Животов Н.П., Суриков Е.В. и др. Конструкция и проектирование комбинированных ракетных двигателей на твердом топливе. Москва, Издво МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2014, 279 с.
- [3] Курзинер Р.И. Реактивные двигатели для больших сверхзвуковых скоростей полета. Москва, Машиностроение, 2006, 262 с.
- [4] Демидов С.С., Малинин В.И., Бульбович Р.В. Ракетный двигатель на порошкообразном алюминиевом горючем и углекислом газе в качестве окислителя. Вестник ПНИПУ. Аэрокосмическая техника, 2014, № 36, с. 119–130.
- [5] Воронецкий А.В. Метод сравнительной оценки эффективности горения мелкодисперсного конденсированного горючего в камерах РПД произвольной геометрии. *Наука и образование*, 2016, № 1. URL: http://technomag.bmstu.ru/doc/830993.html (дата обращения 18.08.2016).
- [6] Похил П.Ф., Беляев А.Ф., Фролов Ю.В. Горение порошкообразных металлов в активных средах. Москва, Наука, 1972, 294 с.
- [7] Кудрявцев В.М., Сухов А.В., Воронецкий А.В. Распространение фронта химической реакции в двухфазном потоке. Высокотемпературные газовые потоки, их получение и диагностика, 1987, № 4, с. 66-69.
- [8] Шевчук В.Г., Горошин С.В., Клячко Л.А., Агеев Н.Д., Кондратьев Е.Н., Золотко А.Н. Скорость распространения пламени в аэровзвеси частиц магния. Физика горения и взрыва, 1980, № 1, с. 57–63.
- [9] Ягодников Д.А. Воспламенение и горение порошкообразных металлов. Москва, Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2009, 432 с.
- [10] Озерова Г.Е., Степанов А.М. Влияние излучения на распространение пламени по газовзвеси частиц твердого горючего. *Физика горения и взрыва*, 1973, № 5, с. 627–635.
- [11] Андерсон Д., Таннехилл Дж., Флетчер Р. Вычислительная гидромеханика и теплообмен. В 2 томах. Т. 2. Москва, Мир, 1990, 382 с.
- [12] User's manual on website Software products and services from ANSYS and Fluent. URL: http://www.fluent.com (дата обращения 18.08.2016).
- [13] Morsi S.A., Alexander A.J. An investigation of particle trajectories in twophase flow systems. *Fluid Mech*, 1972, vol. 2, pp. 193–208.
- [14] Siegel R., Howell J. *Thermal radiation heat transfer*. Washington DC, Hemisphere Publishing Corp., 1992, 1072 p.
- [15] Соу С. Гидродинамика многофазных сред. Москва, Мир, 1971, 536 с.
- [16] Schmitz C. Handbook of Aluminium Recycling. München, Vulkan-Verlag GmbH, 2007, 510 p.
- [17] Трусов Б.Г. Моделирование химических и фазовых равновесий при высоких температурах. Москва, Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 1991, 40 с.
- [18] Варгафтик Н.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жид-костей. Москва, Наука, 1972, 720 с.
- [19] Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей. Ленинград, Химия, 1982, 471 с.

Статья поступила в редакцию 02.11.2016

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом: Воронецкий А.В., Крылов В.И., Арефьев К.Ю., Гусев А.А. Методологические аспекты разработки математических моделей горения частиц металлов в воздухе. Инженерный журнал: наука и инновации, 2017, вып. 1. http://dx.doi.org/10.18698/2308-6033-2017-01-1571

Воронецкий Андрей Владимирович — д-р техн. наук, профессор, заведующий отделом НИИЭМ МГТУ им. Н.Э. Баумана. Область научных интересов: теория горения высокометаллизированных топлив, математическое моделирование рабочих процессов в ракетных двигателях. Автор более 140 научных публикаций. e-mail:voron@bmstu.ru

Крылов Владимир Иванович — канд. техн. наук, доцент, директор НИИЭМ МГТУ им. Н.Э. Баумана. Область научных интересов: газовая динамика двухфазных потоков, исследование рабочих процессов в ракетных двигателях. Автор более 60 научных публикаций. e-mail:kvi@ bmstu.ru

Арефьев Константин Юрьевич — канд. техн. наук, науч. сотрудник НИИЭМ, доцент кафедры «Ракетные двигатели» МГТУ им. Н.Э. Баумана. Область научных интересов: теория смещения и горения гомогенных и гетерогенных топливных композиций, математическое моделирование рабочих процессов в воздушно-реактивных двигателях. Автор более 40 научных публикаций. e-mail: arefyev@rambler.ru

Гусев Андрей Алексеевич — инженер НИИЭМ МГТУ им. Н.Э. Баумана. Область научных интересов: теория смешения и горения гомогенных и гетерогенных топливных композиций, математическое моделирование рабочих процессов в воздушно-реактивных двигателях. Автор 5 публикаций. e-mail: andrew_gusman@mail.ru

The methodological aspects covering the development of mathematical models of metal particles combustion in air

© A.V. Voronetskiy, V.I. Krilov, K.Yu. Aref'yev, A.A. Gusev

Bauman Moscow State Technical University, Moscow, 105005, Russia

The article deals with the combined computational and experimental approach for clarifying the empirical constants in the combustion law of the particles of powdered metal fuel (PMF). A possibility of the method usage is demonstrated on modelling of flame front propagation in a constant volume experimental stand. The paper considers a design of the experimental stand and the methodology of the experiment. It also describes mathematical model used. A comparison of the calculated and experimental values of the flame front speed for PMF gas suspensions is included. The possibility of applying this combined computational and experimental approach to clarify the physical and mathematical models to describe the ignition and combustion of two-phase reactive gas dynamic flows is shown.

Keywords: mathematical modeling, experimental research, metal particles combustion, flame front, combustion chamber, combustion law

REFERENCES

- Aleksandrov V.Yu., Aref'yev K.Yu., Prokhorov A.N., Fedotova K.V., Sharov M.S., Yanovskiy L.S. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy*. Mashinostroenie Proceedings of Higher Educational Institutions. Machine Building, 2016, no. 2, pp. 65–75.
- [2] Obnosov B.V., Sorokin V.A., Yanovskiy L.S., Balyko Yu.P., Frantskevich V.P., Yagodnikov D.A., Zhivotov N.P., Surikov E.V., Sharov M.S., Tikhomirov M.A. Konstruktsiya i proektirovanie kombinirovannykh raketnykh dvigateley na tverdom toplive [Construction and design of combined solid-fuel rocket engines]. Moscow, Bauman MSTU Publ., 2014, 279 p.
- [3] Kurziner R.I. *Reaktivnye dvigateli dlya bol'shikh sverkhzvukovykh skorostei poleta* [Jet engines for high-supersonic speeds]. Moscow, Mashinostroenie Publ., 1989, 263 p.
- [4] Demidov S.S., Malinin V.I., Bulbovich R.V. Vestnik PNIPU. Aerokosmicheskaya technika — PNRPU Aerospace Engineering Bulletin, 2014, no. 36, pp. 119–130.
- [5] Voronetskii A.V. Nauka i obrazovanie Science and Education, 2016, no. 1. Available at: http://technomag.bmstu.ru/doc/830993.html (accessed 18.08.2016).
- [6] Pohil P.F., Belyaev A.F., Frolov Yu.V. Gorenie poroshkoobraznykh metallov v aktivnykh sredakh [Combustion of powder metals in active media]. Moscow, Nauka, 1972, 294 p.
- [7] Kudryavtsev V.M., Sukhov A.V., Voronetskii A.V. Rasprostranenie fronta khimicheskoy reaktsii v dvukhfaznom potoke [Spreading of chemical reaction front in two-phase flow]. *Visokotemperaturnye gazovye potoki, ikh poluchenie i diagnostika* [High-temperature gas flows, their creation and diagnostics]. 1987, vol. 4, pp. 66-69.
- [8] Shevchuk V.G., Goroshin S.V., Klyachko L.A. *Fizika goreniya i vzryva Physics of combustion and explosion*, 1980, vol. 1, pp. 57–63.

- [9] Yagodnikov D.A. *Vosplamenenie i gorenie poroshkoobraznikh metallov* [Ignition and combustion of powdered metal]. Moscow, Bauman MSTU Publ., 2009, 432 p.
- [10] Ozerova G.E., Stepanov A.M. Fizika goreniya i vzryva Physics of combustion and explosion, 1973, vol. 5, pp. 627–635.
- [11] Anderson D., Tannehill J., Fletcher R. *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*. New York, McGraw-Hill Publ., 1984, 803 p.
- [12] User's manual on website Software products and services from ANSYS and Fluent. Available at: http://www.fluent.com (accessed 18.08.2016).
- [13] Morsi S.A., Alexander A.J. An investigation of particle trajectories in twophase flow systems. *Fluid Mech.*, 1972, vol. 2, pp. 193–208.
- [14] Siegel R., Howell J. *Thermal radiation heat transfer*. Hemisphere Publishing Corporation, Washington DC, 1992, 1072 p.
- [15] So S. *Gidrodinamika mnogofaznykh sred* [Hydrodynamics of multiphase media]. Moscow, Mir Publ., 1971, 720 p.
- [16] Schmitz C. Handbook of Aluminium Recycling. Vulkan-Verlag GmbH, 2007, 510 p.
- [17] Trusov B.G. *Modelirovanie khimicheskih i fazovykh prevrascheniy pri vysokikh temperaturakh* [Modeling of chemical and phase transformations at high temperatures]. Moscow, Bauman MSTU Publ., 1991, 40 p.
- [18] Vargaftik N.B. Handbook of termophysical properties of gases and liquids. NewYork, Springer Publ., 1975, 758 p. [In Russian: Vargaftik N.B. Spravochnik po teplofizicheskim svoystvam gazov i zhidkostey. Moscow, Nauka Publ., 1972, 720 p.].
- [19] Rid R., Prausnitz J., Sherwood T. *The properties of gases and liquids*. New York, McGraw-Hill, 1977, 688 p. [In Russian: Rid R., Prausnitz J., Sherwood T. *Svoistva gazov i zhidkostey*. Leningrad, Khimiya Publ., 1982, 471 p.

Voronetskiy A.V., Dr. Sci. (Eng.), Professor, Head of the Department, Scientific and Research Institute of Power Engineering, Bauman Moscow State Technical University. e-mail: voron@bmstu.ru

Krilov V.I., Cand. Sci. (Eng.), Director, Scientific and Research Institute of Power Engineering, Bauman Moscow State Technical University. e-mail: kvi@bmstu.ru

Aref'yev K.Yu., Cand. Sci. (Eng.), Research Scientist, Scientific and Research Institute of Power Engineering, Associate Professor, Department of Rocket Engines, Bauman Moscow State Technical University. e-mail: arefyev@rambler.ru

Gusev A.A, engineer, Scientific and Research Institute of Power Engineering, Bauman Moscow State Technical University. e-mail: andrew_gusman@mail.ru