

Дискретная 3D-модель безгазового горения

В.Г. Прокофьев^{1,2,}*

¹*Томский научный центр СО РАН, Томск, Россия*

²*Томский государственный университет, Томск, Россия*

**pvg@fif.tsu.ru*

Аннотация. Построена пространственная модель безгазового горения образца с дискретной структурой в форме параллелепипеда. Методом численного моделирования рассмотрены пространственные режимы горения донорно-акцепторной системы. Размер элементарной ячейки определяет фрагментацию волны горения. Рассчитаны средние скорости горения образца в зависимости от соотношения размеров элементарной ячейки и образца. С увеличением размера элементарной ячейки уменьшается удельная площадь контактных границ между ячейками. Обнаружены одноочаговые спиновые режимы горения образца с дискретной структурой в форме параллелепипеда. С увеличением масштаба гетерогенности установление спинового режима не происходит.

Ключевые слова: безгазовое горение, дискретная структура, элементарная ячейка, масштаб гетерогенности, спиновый режим горения.

1. Введение

В [1, 2] представлены аналитические обзоры работ по безгазовому горению в компактированных порошковых смесях. Теоретическое описание и моделирование структуры гетерогенной среды сводится к выделению элементарных реакционных ячеек, содержащих в определенном соотношении реагирующие компоненты. В [2] дана условная классификация моделей на основе характерных времен процесса. Так, например, СВС в гранулированных смесях относится к дискретным моделям второго рода. Известно [3, 4], что гранулирование исходной порошковой среды позволяет стабилизировать процесс горения и фазовый состав продуктов синтеза. Одной из особенностей горения гранулированных смесей по сравнению с негранулированными порошковыми составами является рост скорости горения с увеличением характерного размера гранул [4]. Другим примером, относящимся к дискретным моделям второго рода, является среда из частиц слоистых механокомпозигов [5]. Математическое моделирование дискретных волн безгазового горения основано на представлении реакционных ячеек в виде областей плоской конфигурации, соответственно, большинство математических моделей одномерные или двухмерные [1, 6–10]. Вместе с тем остается открытым вопрос об исследовании пространственных режимов дискретного горения и в частности возможности реализации нестационарных спиновых режимов безгазового горения [11–12]. В [13] спиновый режим наблюдался в экспериментах при дискретном горении механоактивированной смеси Nb/Si. Численное исследование нестационарных режимов безгазового горения однородного образца в виде стержня прямоугольного сечения выполнено в [14]. Для образцов квадратного сечения обнаружены спиновые режимы горения с периодическим движением одного или множества очагов. Показано, что количество очагов горения определяется размерами образца. В [15] проведено численное исследование нестационарных пространственных режимов безгазового горения трехслойного образца прямоугольного сечения, сформированного из смесей двух типов. Описаны квазистационарные установившиеся режимы горения с инертным и активным (акцепторным) внутренним слоем. В настоящей работе предложена физико-математическая пространственная модель безгазового горения образцов с дискретной структурой в форме прямоугольного стержня с квадратным основанием. Рассмотрены два типа структурных элементов-ячеек: донорные (DC) и акцепторные (AC) [8]. Все пространственные ячейки имеют кубическую форму, одинаковый размер и равномерно распределены в образце.

Характерный размер реакционной ячейки определяет масштаб гетерогенности реагирующей системы. Скорость экзотермической реакции определяется аррениусовской зависимостью от температуры. На внутренних границах реакционных ячеек задаются сопряженные граничные условия.

2. Математическая модель

Образец представляет собой прямой параллелепипед, состоящий из чередующихся донорных и акцепторных ячеек. Математическая модель горения донорно-акцепторной смеси включает в себя безразмерные уравнение теплопроводности и уравнение химической кинетики.

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = S_{ijk} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\Lambda_{ijk} \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right) + S_{ijk} \frac{\partial}{\partial \psi} \left(\Lambda_{ijk} \frac{\partial \theta}{\partial \psi} \right) + S_{ijk} \frac{\partial}{\partial \zeta} \left(\Lambda_{ijk} \frac{\partial \theta}{\partial \zeta} \right) + \Omega_{ijk} W_{ijk}(\theta, \eta) \quad (1)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial \tau} = \Gamma_{ijk} W_{ijk}(\theta, \eta) \quad (2)$$

$$W_{ijk}(\theta, \eta) = \varphi(\eta) \exp\left(\frac{\sigma_{ijk} \theta}{1 + Ar\theta}\right) \quad (3)$$

Все ячейки имеют кубическую форму со сторонами $d = \xi_i - \xi_{i-1} = \psi_j - \psi_{j-1} = \zeta_k - \zeta_{k-1}$, где d – характерный размер ячейки, определяющий масштаб гетерогенности системы. Взаимодействие реагентов донорной и акцепторной смеси происходит в соответствии с кинетическим законом реакции первого порядка – $\varphi(\eta) = 1 - \eta$. Масштабные переменные определяются составом донорной ячейки DC. Значения параметров с подстрочным индексом (ijk) определяются в соответствии с типом ячейки следующим образом: $S_{ijk} = 1$, $\Lambda_{ijk} = 1$, $\Omega_{ijk} = 1$, $\Gamma_{ijk} = \gamma_D$, $\sigma_{ijk} = 1$ для ячеек DC и $S_{ijk} = S_A$, $\Lambda_{ijk} = \Lambda_A$, $\Omega_{ijk} = \Omega_A$, $\Gamma_{ijk} = \gamma_A$, $\sigma_{ijk} = \sigma_A$ для ячеек AC. Структурный масштаб d и формально-кинетические параметры Λ_A , Ω_A , σ_A , определяющие состав смеси акцепторных ячеек, варьировались. Приведенная система дополняется граничными условиями на внешних границах образца в форме прямого параллелепипеда и начальными условиями

$$\tau \leq \tau_{ign} : \theta(0, \psi, \zeta, \tau) = 0, \quad \tau > \tau_{ign} : \frac{\partial \theta(0, \psi, \zeta, \tau)}{\partial \xi} = 0; \quad \frac{\partial \theta(L, \psi, \zeta, \tau)}{\partial \xi} = 0; \quad (4)$$

$$\frac{\partial \theta(\xi, 0, \zeta, \tau)}{\partial \psi} = 0; \quad \frac{\partial \theta(\xi, \psi, 0, \tau)}{\partial \zeta} = 0; \quad (5)$$

$$\frac{\partial \theta(\xi, D, \zeta, \tau)}{\partial \psi} = 0; \quad \frac{\partial \theta(\xi, \psi, D, \tau)}{\partial \zeta} = 0; \quad (6)$$

$$\theta(\xi, \psi, \zeta, 0) = \theta_0; \quad \eta(\xi, \psi, \zeta, 0) = 0. \quad (7)$$

В математической постановке задачи (1)–(7) использовались следующие безразмерные переменные и параметры:

$$\gamma_D = \frac{c_D R T_*^2}{Q_D E_D}, \quad \gamma_A = \frac{K_A(T_*)}{K_D(T_*)} \gamma_D, \quad Ar = \frac{R T_*}{E_D}, \quad \theta = \frac{(T - T_*) E_D}{R T_*^2}, \quad \theta_0 = -\frac{1}{\gamma_D}, \quad \Lambda_A = \frac{\lambda_A}{\lambda_D}, \quad S_A = \frac{c_D \rho_D}{c_A \rho_A},$$

$$\xi = \frac{x}{x_*}, \quad \psi = \frac{y}{x_*}, \quad \zeta = \frac{z}{x_*}, \quad t_* = \frac{c_D R T_*^2}{Q_D E_D K_D(T_*)}, \quad x_* = \sqrt{\frac{\lambda_D t_*}{\lambda_D \rho_D}}, \quad \sigma_A = \frac{E_A}{E_D}, \quad \tau = \frac{t}{t_*}, \quad \tau_{ign} = \frac{t_{ign}}{t_*}, \quad L = \frac{L_0}{x_*},$$

$$D = \frac{D_0}{x_*}, \quad d = \frac{d_0}{x_*}, \quad \Omega_A = \frac{Q_A K_A(T_*) c_D}{Q_D K_D(T_*) c_A}.$$

Здесь L_0 – длина образца, $D_0 \times D_0$ – размер основания образца; d_0 – размер ячейки; T – температура; $T_* = T_0 + Q_D/c_D$ – масштабная температура, за которую принята адиабатическая температура горения ДС; T_0 – температура окружающей среды и начальная температура образца; η – глубина превращения; $c_D, c_A, \lambda_D, \lambda_A, \rho_D, \rho_A$ – удельные теплоемкости, коэффициенты теплопроводности, плотности ДС и АС; Q_D, Q_A – тепловые эффекты реакции; t – время; x, y, z – пространственные координаты; $K_D(T), K_A(T)$ – константы скорости реакции; E_D, E_A – энергии активации; R – универсальная постоянная; t_{ign} – время теплового контакта. Для решения задачи (1)–(7) использовалась экономичная схема сквозного счета без явного выделения поверхности раздела между ячейками с распределенными коэффициентами теплопроводности и теплоемкости. Численное решение уравнения (1) получено методом покоординатного расщепления с использованием неявной схемы и процедуры осевого сдвига [14]. Для аппроксимации тепловых потоков использовались центральные разности.

Для расчета температурного поля по участкам границ между ячейками использовались эффективные значения теплофизических параметров: $(S_{i,j})_{eff} = (1 + S_A) / 2$, $(\Lambda_{i,j})_{eff} = (1 + \Lambda_A) / 2$, $(\Omega_{i,j})_{eff} = (1 + \Omega_A) / 2$. Расчеты выполнены на равномерной сетке с шагом по времени 0.5 и 0.5 по пространству. Аналогичный метод расчета применялся при исследовании двухмерной дискретной модели горения [8]. В области неустойчивости стационарного распространения фронта горения $9.1\gamma_D - 2.5Ar < 1$ для уменьшения выхода на спиновый режим горения задавалось начальное возмущение температурного поля [12].

3. Результаты

В ходе численного решения уравнений (1)–(7) определялась средняя скорость горения образца с дискретной структурой в адиабатических условиях в зависимости от масштаба гетерогенности d (Рис. 1). Скорость горения определяли после установления как среднюю скорость движения точки $\eta(\zeta_f, D/2, D/2, \tau) = 0.5$, приходящуюся на границу между ячейками. Скорость горения с увеличением масштаба ячейки растет, что определяется уменьшением площади межфазных границ на единицу объема S_Σ . Для крупных ячеек $d > 20$ происходит формирование и движение волны горения в границах каждой ячейки донорного и акцепторного типа. Перепад температуры $\Delta\theta$ в плоскости сечения образца, проходящем через точку $(\zeta_f, D/2, D/2)$, достигает 3–3.5 характерных интервала температуры. При малом размере ячейки $d \leq 8$ поверхность горения однородная, пульсации температуры в указанном сечении незначительны $\Delta\theta < 0.3$. С уменьшением размеров ячеек происходит гомогенизация тепловой структуры волны горения. Максимальные температуры наблюдаются на боковой поверхности образца в угловых точках при сгорании донорных ячеек, что обусловлено заданием адиабатических граничных условий на боковой поверхности. Различие результатов расчетов $U(d)$ (Рис. 1) от результатов двумерной задачи [8] обусловлено увеличением удельной площади контактных границ между ячейками при переходе к трехмерной модели и, возможно, различием процедуры вычисления средней скорости горения. Более высокая удельная площадь контактных границ в 3D приводит к меньшему времени тепловой релаксации реакционной ячейки по сравнению с 2D моделью. Соответственно, усиливается теплообмен между ячейками при переходе от 2D к 3D модели.

В численных расчетах удалось получить только классический спиновый режим горения – движение одного очага горения по боковой поверхности образца по спиралевидной траектории (Рис. 2) для относительно малых значений параметра гетерогенности $d \leq 8$ и при

небольшом удалении в область неустойчивости одномерного фронта $9.1\gamma_D - 2.5Ar < 1$. Направление движения очага указывает участок фронтальной поверхности с наибольшим градиентом, за которым располагается зона продуктов реакции (оттенки синего и голубого цветов). Соответственно, на Рис. 2 представлены два последовательных по времени температурных поля в течение одного цикла движения очага вдоль боковой поверхности образца. Шаг винтовой линии примерно равен $h_p = 32$, а период – $\tau_p = 530$ для образца с основанием $D = 64$. Для подтверждения установления спинового режима и нахождения его характеристик очаг горения совершал не менее 20 оборотов по боковой поверхности образца. С увеличением размера ячейки d , но при фиксированных размерах образца ($D = 64$), формирование результирующего очага, движущегося по боковой поверхности, не происходит.

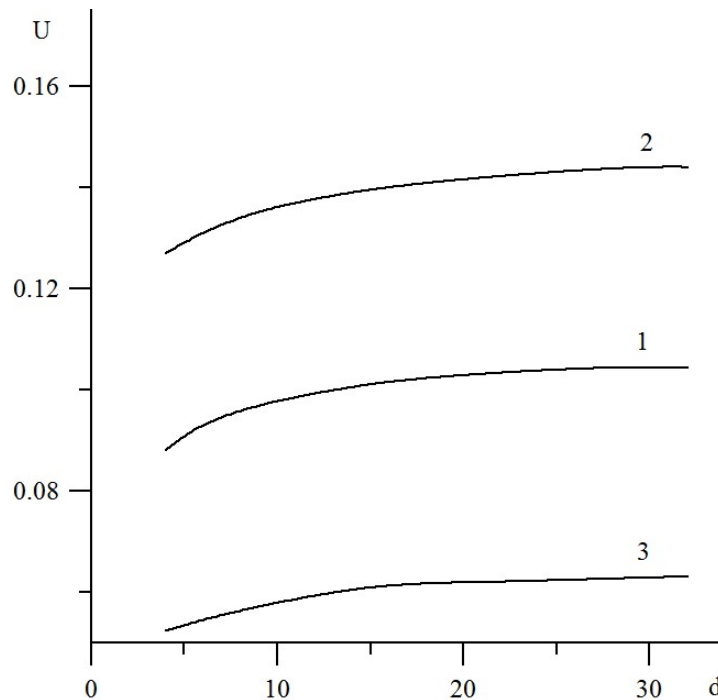


Рис. 1. Средняя скорость горения образца в зависимости от масштаба гетерогенности: 1, 2 – $\Lambda_A = 0.5$ (1), $\Lambda_A = 1.1$ (2), $S_A = 1$, $\Omega_A = 0.75$, $\sigma_A = 0.95$; 3 – $\Lambda_A = 0.46$, $S_A = 0.6$, $\Omega_A = 0.68$, $\sigma_A = 0.92$.

Для возникновения спинового режима при горении образца с ячейками $d = 8$ пришлось увеличить основание образца. Соответствующие поля температуры в поперечном сечении представлены на Рис. 3. Причем направление движения очага изменилось на противоположное, что, возможно, связано с изменением краевых условий на стадии зажигания при увеличении площади основания образца.

Скорость перемещения очага по боковой поверхности неравномерна: движение очага ускоряется в окрестности угловых точек и падает при движении вдоль боковых граней. С увеличением размеров ячеек $d > 10$ на формирование лидирующего очага накладывается движение фронта горения внутри отдельных ячеек. Установление периодической структуры температурного поля, характерного для спинового режима горения, не происходит. Увеличение размеров образца ($80 < D < 90$, $d \leq 8$) не привело к смене режима горения, например, как в случае горения однородного образца [14]. Спиновый режим горения оставался одноочаговым. С другой стороны, перепад температуры в волне горения образца с дискретной структурой (в сечении образца поперечном основному направлению движения волны горения) при тех же параметрах задачи намного выше, чем для однородного образца,

состоящего из донорной смеси. Время установления стационарных и нестационарных режимов горения для образцов с дискретной структурой существенно больше в сравнении с безгазовым горением однородных образцов, что не позволило рассчитать режимы при относительно больших размерах образца $D > 90$.

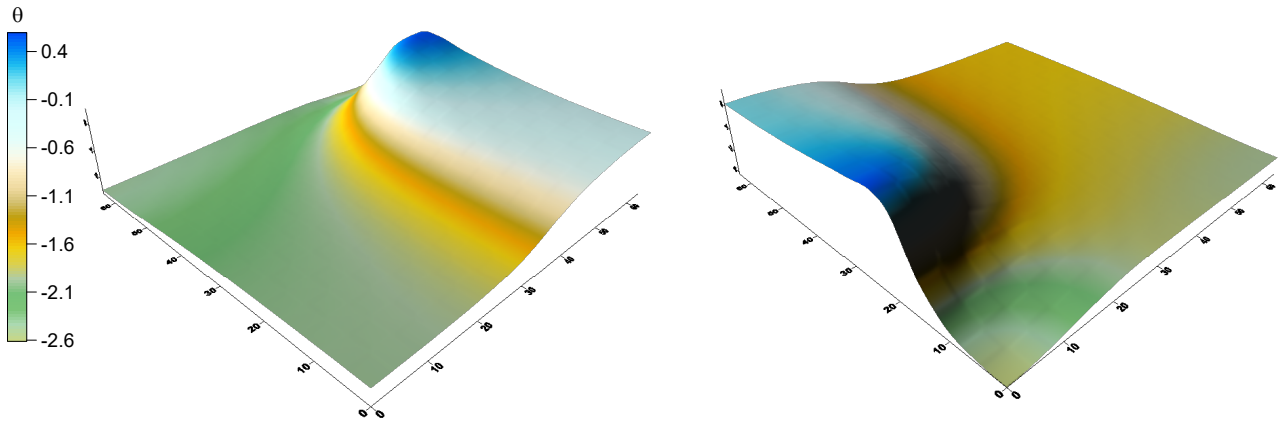


Рис. 2. Спиновый режим горения: $D = 64$, $d = 4$, $\theta_0 = -7.5$, $Ar = 0.1$, $S_A = 1$, $\Omega_A = 0.75$, $\gamma_A = \gamma_D$, $\sigma_A = 1.1$, $\Lambda_A = 0.75$.

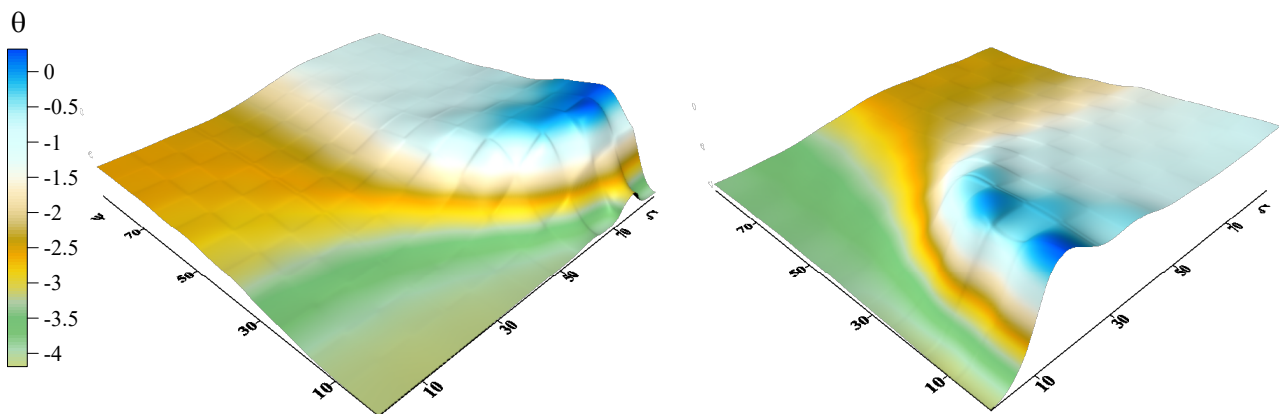


Рис. 3. Спиновый режим горения: $D = 88$, $d = 8$, $\theta_0 = -8$, $Ar = 0.1$, $S_A = 1$, $\Omega_A = 0.75$, $\gamma_A = \gamma_D$, $\sigma_A = 0.95$, $\Lambda_A = 0.4$.

4. Выводы

Построена трехмерная модель дискретного горения образца в форме прямоугольного стержня с регулярным распределением донорных и акцепторных элементарных ячеек кубической формы в соотношении 1:1. В отличие от двумерной модели скорость горения образца в стационарном режиме растет с увеличением размера элементарной ячейки, что связано с изменением удельной площади контактных границ между ячейками. В области неустойчивости распространения фронта горения получены одноочаговые спиновые режимы горения образцов с мелкими элементарными ячейками.

Благодарность

Работы выполнены при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (FSWM-2020-0036).

5. Список литературы

- [1] A.S. Rogachev, A.S. Mukas'yan, *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. **34**, 377, 2008; doi:10.1016/j.pecs.2007.09.002

- [2] A.S. Rogachev, A.S. Mukas'yan, *Combust., Explos. Shock Waves*, vol. **51**(1), 53, 2015; doi: 10.1134/S0010508215010050
- [3] B.S. Seplyarskii, R.A. Kochetkov, T.G. Lisina, N.I. Abzalov, *Intern. J. of SHS*, vol. **29**(2), 126, 2020; doi: 10.3103/S1061386220020090
- [4] B.S. Seplyarskii, N.I. Abzalov, R.A. Kochetkov, T.G. Lisina, *Combust., Explos. Shock Waves*, vol. **58**(2), 178, 2022; doi: 10.1134/S001050822202006X
- [5] A.S. Rogachev, N.A. Kochetov, V.V. Kurbatkina, E.A. Levashov, P.S. Grinchuk, O.S. Rabinovich, N.V. Sachkova, F. Bernard, *Combust., Explos. Shock Waves*, vol. **42**(4), 421, 2006; doi: 10.1007/s10573-006-0071-1
- [6] Grinchuk P.S., *J. of Engineering Physics and Thermophysics*, vol. **86**(4), 875, 2013; doi: 10.1007/s10891-013-0907-y
- [7] P.M. Krishenik, S.A. Rogachev, K.G. Shkadinsky, *Intern. J. of SHS*, vol. **21**(2), 75, 2012; doi: 10.3103/S1061386212020045
- [8] V.G. Prokof'ev, *Combust., Explos. Shock Waves*, vol. **56**(2), 142, 2020; doi: 10.1134/S0010508220020045
- [9] O.V. Lapshin, V.G. Prokof'ev, *Intern. J. of SHS*, vol. **31**(30), 114, 2022; doi: 10.3103/S1061386222030062
- [10] O.V. Lapshin, V.G. Prokof'ev, *Intern. J. of SHS*, vol. **32**(4), 247, 2023; doi: 10.3103/S1061386223040076
- [11] T.P. Ivleva, *Combust., Explos. Shock Waves*, vol. **42**(4), 403, 2006; doi: 10.1007/s10573-006-0069-8
- [12] V.G. Prokof'ev, V.K. Smolyakov, *Combust., Explos. Shock Waves*, vol. **52**(3), 313, 2016; doi: 10.1134/S0010508216030096
- [13] R. Trevino, E. Maguregui, F. Perez, E. Shafirovich, *Journal of Alloys and Compounds*, vol. **826**, 154228, 2020; doi: 10.1016/j.jallcom.2020.154228
- [14] V.G. Prokof'ev, *Intern. J. of SHS*, vol. **28**(3), 155, 2019; doi: 10.3103/S1061386219030099