

Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский Томский государственный университет»

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования «Томский государственный университет систем
управления и радиоэлектроники»

На правах рукописи

Шульц Денис Сергеевич

**ИССЛЕДОВАНИЕ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ПРОЦЕССОВ БЕЗГАЗОВОГО
ГОРЕНИЯ ГЕТЕРОГЕННЫХ СИСТЕМ**

01.04.17 – Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных
состояний вещества

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук,
профессор Крайнов Алексей Юрьевич

Томск – 2018

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	5
1. СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ САМОРАСПРОСТРАНЯЮЩЕГОСЯ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СИНТЕЗА (ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР).....	16
1.1 Научные основы СВС	16
1.2 Математическое моделирование процессов безгазового горения СВС систем.....	20
1.3 Выводы и постановка задач.....	25
2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ БЕЗГАЗОВОГО ГОРЕНИЯ С УЧЁТОМ ГЕТЕРОГЕННОСТИ СТРУКТУРЫ И ЗАВИСИМОСТИ ДИФФУЗИИ ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ.....	27
2.1 Физическая и математическая постановка задачи безгазового горения с учётом гетерогенной структуры образцов.....	28
2.2 Математическая модель безгазового горения с использованием плоских реакционных ячеек.....	29
2.3 Математическая модель безгазового горения с использованием сферических реакционных ячеек.....	33
2.4 Методика численного решения системы уравнений математической модели безгазового горения с учетом гетерогенности структуры образцов.....	37
2.5 Математическая модель безгазового горения без учёта влияния образующегося слоя продукта на диффузию реагентов.....	39
2.6 Тестирование методики и программы расчета распространения фронта безгазового горения	43
2.7 Тестирование методики расчёта диффузии в реакционной ячейке.....	45
Выводы по главе 2.....	48

3. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ БЕЗГАЗОВОГО ГОРЕНИЯ С УЧЁТОМ ГЕТЕРОГЕННОСТИ СТРУКТУРЫ И ЗАВИСИМОСТИ ДИФФУЗИИ ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ.....	49
3.1 Результаты численных расчётов скорости распространения волны безгазового горения без учёта влияния образующегося продукта на диффузию.....	49
3.2 Численное моделирование распространения волны безгазового горения с использованием модели плоских реакционных ячеек.....	58
3.3 Численное моделирование распространения волны безгазового горения с использованием модели сферических реакционных ячеек.....	63
3.4 Сравнение результатов моделирования распространения волны безгазового горения с использованием модели плоских и сферических реакционных ячеек.....	68
3.5 Численное моделирование распространения волны безгазового горения с использованием модели сферических реакционных ячеек с учетом плавления одного из компонентов смеси.....	70
3.6 Сравнение теоретических результатов с экспериментальными данными	74
Выводы по главе 3.....	77
4. ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ВОЛНЫ БЕЗГАЗОВОГО ГОРЕНИЯ В КОНИЧЕСКОМ ОБРАЗЦЕ.....	79
4.1 Физическая и математическая постановка задачи.....	79
4.2 Преобразование координат для проведения численного решения задачи распространения волны безгазового горения в коническом образце	83
4.3 Результаты численных исследований.....	86
4.3.1 Исследование влияния теплоотдачи на закономерности распространения волны безгазового горения в коническом образце без учета гетерогенности его структуры.....	87
4.3.2 Исследование влияния теплоотдачи на закономерности	

распространения волны безгазового горения в коническом образце с учетом гетерогенности структуры.....	101
4.3.3 Исследование влияния плавления и теплоотдачи на закономерности распространения волны безгазового горения в коническом образце с учетом гетерогенности его структуры.....	115
Выводы по главе 4.....	122
Заключение.....	123
Список использованной литературы	124

ВВЕДЕНИЕ

Исследование физико-химических и теплофизических процессов в химически реагирующих гетерогенных системах является актуальным. Наиболее ярко эти явления проявляются в процессах твердопламенного горения или безгазового горения. Твердопламенное горение является основной стадией самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС). С момента открытия СВС были разработаны научные основы, включающие в себя термодинамические расчёты и кинетику реакций, знания о составе продуктов, закономерностях формирования структуры продуктов, экспериментальные диагностики, позволяющие изучить механизм и закономерности горения. Научные основы СВС создавались и создаются до сегодняшнего дня учёными из разных стран посредством экспериментальных и теоретических исследований. Для получения новых материалов с заданными свойствами необходимо иметь представления о механизме и закономерностях СВС систем, использовать оригинальные методы диагностики (например, видеорегистрация параметров фронта горения и структуры фронта с возможностью компьютерной обработки, измерение температуры горения и т.п.).

Безгазовое горение используется в машиностроении, металлургии, химической промышленности, электротехнике и электронике, авиационно-космической технике, строительной промышленности. СВС составы используются в качестве локального автономного источника нагрева, в устройствах элементов специальной техники как воспламеняющие составы, замедлители распространения теплового импульса в огневых цепочках пиродинамических устройств, как источники тепла для импульсных устройств.

Немаловажное значение имеет математическое моделирование процессов СВС в режиме фронтального распространения волны химического превращения, результаты которого могут рассматриваться как уточнение представлений о механизме горения при соответствии результатов моделирования ранее полученным экспериментальным данным.

Исследование нестационарных процессов горения безгазовых составов имеет важное значение. Нестационарные процессы безгазового горения определяются составом реагирующих компонентов, внешним теплоотводом, гетерогенной структурой прессованных образцов СВС составов. К настоящему времени малоизученной остается область математического моделирования процессов нестационарного безгазового горения с учётом гетерогенности структуры исходных образцов. Актуальность данного направления обусловлена тем, что необходимо расширять представления о механизме горения гетерогенных систем, уметь предсказывать скорость распространения волны безгазового горения.

Цель диссертации:

Провести расчетно-теоретический анализ нестационарных процессов безгазового горения с учетом гетерогенности структуры СВС составов, зависимости диффузии от температуры, плавления одного из компонентов, теплоотдачи в окружающую среду и определить влияние этих факторов на скорость распространения фронта горения.

Для достижения цели диссертации решить следующие **задачи**:

1. На основе физико-математической модели нестационарного безгазового горения с учётом гетерогенности структуры образцов с использованием моделей плоских и сферических реакционных ячеек, учитывающих влияние образовавшегося слоя продукта на диффузию, провести численное исследование зависимости скорости фронта горения от размера гетерогенной структуры, формы реакционных ячеек, энергии активации диффузии.
2. Провести численное исследование влияния плавления во фронте горения одного из компонентов гетерогенной структуры на режимы и скорость распространения безгазового горения.
3. С использованием модели нестационарного безгазового горения с учётом гетерогенности структуры образцов в двумерном осесимметричном приближении провести численное исследование распространения фронта безгазового горения в коническом образце СВС при теплоотдаче в

окружающую среду.

4. Провести сравнение расчётно-теоретической скорости безгазового горения с экспериментальными зависимостями в широком диапазоне размеров гетерогенной структуры.

Актуальность поставленных задач определяется тем, что для использования безгазового горения в различных технических приложениях важно знать режимы и скорость распространения волны безгазового горения. Учёт влияния гетерогенности структуры с использованием моделей реакционных ячеек при нестационарном безгазовом горении позволит прогнозировать режим горения и скорость безгазового горения в зависимости от размеров и формы гетерогенной структуры образцов.

Положения, выносимые на защиту:

1. Результаты численного моделирования нестационарного безгазового горения с учётом гетерогенности структуры образцов дают качественное согласие теоретической и экспериментальной зависимости скорости распространения безгазового горения от масштаба гетерогенности структуры СВС состава. Выявлена существенная зависимость скорости распространения волны безгазового горения от формы реакционной ячейки: для сферических реакционных ячеек скорость выше чем для плоских в 1.7 раза.

2. Гетерогенность структуры образцов, учитываемая моделями плоских и сферических реакционных ячеек, не влияет на область существования автоколебательного режима распространения волны безгазового горения.

3. Результаты моделирования нестационарных процессов безгазового горения конического образца, показавшие, что учет гетерогенности уточняет влияние теплоотдачи на определение скорости безгазового горения и величину несгоревшей части конуса при теплоотдаче. Определена зависимость недогоревшей части конического образца от интенсивности теплоотдачи.

4. Расчетно-теоретический анализ скорости горения многослойных биметаллических нанопленок показал удовлетворительное согласие значений скорости распространения волны безгазового горения с экспериментальными

данными.

Научная новизна диссертации заключается в следующем:

1. Проведено численное моделирование нестационарного безгазового горения с учётом гетерогенности структуры образцов с использованием моделей плоских и сферических реакционных ячеек в широком диапазоне определяющих параметров задачи. Показана существенная зависимость скорости распространения волны безгазового горения от формы реакционной ячейки.

2. Расчетно-теоретическим путем выявлено, что гетерогенность структуры образцов, учитываемая моделями плоских и сферических реакционных ячеек, не влияет на область существования автоколебательного режима распространения волны безгазового горения.

3. Проведено численное моделирование нестационарного безгазового горения многослойных биметаллических нанопленок с использованием модели плоских реакционных ячеек.

4. Исследовано влияние теплоотдачи при горении конического образца и определены величины несгоревшей узкой части конуса в зависимости от интенсивности теплоотдачи и угла полураствора конуса.

Обоснованность и достоверность научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации, подтверждается:

- обоснованностью предположений математической модели и применением классических методов математического моделирования и численных методов;
- сеточной сходимостью численного решения задач при уменьшении шагов разностной схемы;
- выполнением законов сохранения массы и энергии в численной реализации математических моделей; совпадением результатов решения задачи о скорости распространения волны безгазового горения в классической постановке с известными результатами других авторов.
- хорошим соответствием данных численного моделирования с экспериментальными данными, опубликованными в научной литературе.

Научная значимость результатов исследований заключается в том, что:

- на основе численного моделирования нестационарного безгазового горения с учётом гетерогенности структуры образцов установлена количественная зависимость величины скорости распространения волны от геометрической формы реакционных ячеек; показано, что гетерогенность структуры образцов не влияет на область существования автоколебательного режима распространения волны безгазового горения;

- разработанная модель и методика численного решения позволяет исследовать влияние теплоотдачи на закономерности распространения волны безгазового горения в коническом образце;

- разработанная методика и программы численного расчета скорости нестационарного безгазового горения позволяют определить величину скорости распространения фронта горения в зависимости от масштаба и геометрической формы гетерогенной структуры в широком диапазоне их изменения.

Практическая значимость результатов исследований заключается в том, что:

- разработанная методика расчета скорости безгазового горения дает результаты, хорошо согласующиеся с экспериментальными данными, и может быть использована при теоретическом анализе нестационарного безгазового горения СВС систем с учётом их гетерогенной структуры и для определения скорости горения при заданном размере гетерогенной структуры, в том числе для многослойных биметаллических нанопленок;

- разработанная математическая модель безгазового горения конического образца СВС состава с учетом гетерогенности структуры и теплоотдачи и методика численного решения могут быть использованы для планирования экспериментов, раскрывающих кинетику и механизм реакций, структуру фронта горения.

Апробация работы.

Материалы диссертационной работы представлены на следующих конференциях:

- научной конференции «Байкальские чтения: наноструктурированные системы и актуальные проблемы механики сплошной среды (теория и эксперимент)» (Улан-Удэ, 19 – 22 июля 2010 г);
- Всероссийской молодежной научной конференции «Актуальные проблемы современной механики сплошных сред» (Томск, 16 – 19 октября 2010 г);
- VII Всероссийской научной конференции «Фундаментальные и прикладные проблемы современной механики», посвященной 50-летию полета Ю.А. Гагарина и 90-летию со дня рождения основателя и первого директора НИИ ПММ ТГУ А.Д. Колмакова (Томск, 12–14 апреля 2011 г);
- VII Всероссийской научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых с элементами научной школы для молодежи «Инноватика-2011» (Томск, 26 – 28 апреля 2011 г);
- 7-ом Международном семинаре по структуре пламени (7ISFS) (Новосибирск, 11 – 15 июля 2011 г);
- VIII Всероссийской научной конференции «Фундаментальные и прикладные проблемы современной механики», посвященной 135-летию ТГУ и 45-летию НИИ ПММ ТГУ (Томск, 22 – 25 апреля 2013 г);
- II Всероссийской молодежной научной конференции «Успехи химической физики» (Черноголовка, 19 – 24 мая 2013 г);
- III Всероссийской научной конференции «Актуальные проблемы современной механики сплошных сред и небесной механики» (Томск, 27 – 29 ноября 2013 г);
- IV Международной молодежной научной конференции "Актуальные проблемы современной механики сплошных сред и небесной механики" (Томск, 17 – 19 ноября 2014г);
- IX Всероссийской научной конференция «Фундаментальные и прикладные проблемы современной механики» (Томск, 21 – 25 сентября 2016 г);

- 11 Научной конференции по горению и взрыву (г. Москва, 7-9 февраля 2018 ИХФ РАН).

Основные результаты диссертации представлены в 10 работах, в том числе 3 статьи в журналах, рекомендованных ВАК для опубликования исследований по теме диссертации: «Физика горения и взрыва» - 1, «Компьютерные исследования и моделирование» - 1, «Известия высших учебных заведений. Физика» - 1, 6 статей в материалах международных, всероссийских научных и научно-практических конференций, 1 электронное издание в материалах международного семинара [115-124].

Структура и объем диссертации:

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка использованной литературы. Объем диссертации составляет 137 страниц. Список использованных источников содержит 124 наименований.

Краткое изложение содержания

Во введении сформулированы цели и задачи диссертационной работы, обоснована актуальность темы и поставленных задач, представлены положения, выносимые на защиту, научная новизна, научная и практическая значимость результатов исследования.

Глава 1 посвящена обзору научно-технической литературы. В главе представлены фундаментальные основы метода самораспространяющегося высокотемпературного синтеза как способа получения различных материалов и соединений. Рассмотрены экспериментальные и теоретические работы, посвященные стационарным и нестационарным моделям безгазового горения процессов СВС составов. В теоретических работах, посвященных исследованию влияния гетерогенности структуры прессованных смесей порошков для СВС, разработаны стационарные модели, учитывающие гетерогенность с использованием различных геометрических моделей реакционных ячеек. Из анализа научно-технической литературы выявлено, что нестационарные явления в этих моделях исследованы недостаточно. С учётом

выводов по результатам обзора научно-технической литературы формулируются цели и задачи диссертационной работы.

Глава 2 посвящена разработке математической модели нестационарного безгазового горения с учётом гетерогенности структуры и зависимости диффузии от температуры с использованием моделей плоских и сферических реакционных ячеек. Математическая модель нестационарного безгазового горения основана на подходе, предложенном Б.И. Хайкиным. Согласно его подходу для моделирования влияния тугоплавкого продукта на скорость горения вводится реакционная ячейка. Скорость химического реагирования в каждой точке по длине образца СВС определяется из решения задачи диффузии и химического реагирования в реакционных ячейках и учитывается зависимость коэффициента диффузии от температуры. Под реакционной ячейкой понимается усредненный элемент гетерогенной структуры смеси порошков, способных к СВС синтезу, содержащий вступающие в реакцию вещества в пропорции, равной их концентрации в смеси. В каждом элементе гетерогенной структуры СВС состава происходят процессы диффузии и реагирования реагентов при температуре в соответствующих точках образца, меняющейся во времени в процессе распространения фронта горения. При этом предполагается, что пространственное распределение температуры в реакционной ячейке отсутствует. Используются две модели реакционных ячеек: плоские и сферические.

Представлена методика численного решения системы уравнений разработанной математической модели. Проведено тестирование методики численного решения и программы ЭВМ на решении модельной задачи. Результаты численного решения модельной задачи с хорошей точностью совпадают с известными результатами других авторов. Проведено тестирование численного решения задачи диффузии реагентов в реакционной ячейке с учетом зависимости коэффициента диффузии от температуры на решении модельной задачи о линейном нагреве совокупности реакционных ячеек. Определены параметры разностной схемы, обеспечивающие

достаточную точность численного решения задачи.

В главе 3 представлены результаты численного моделирования нестационарного распространения фронта безгазового горения на основе разработанной математической модели, учитывающей гетерогенность с использованием моделей плоских и сферических реакционных ячеек. Для математической модели, не учитывающей влияние образующегося слоя продукта на диффузию реагентов, получены зависимости скорости распространения фронта безгазового горения от размера гетерогенной структуры, энергии активации диффузии. Результаты расчетов качественно согласуются с экспериментальными данными. Определена граница существования устойчивого и пульсирующего режимов распространения фронта безгазового горения в поле параметров «размер гетерогенной структуры» - «отношение энергии активации диффузии и химической реакции» при различных значениях параметров γ и β . Для математической модели, учитывающей диффузию через образующийся слой продукта и зависимость коэффициента диффузии от температуры, получены зависимости скорости горения от параметра γ . Проведен сравнительный анализ величины скорости распространения реакционной волны в зависимости от формы реакционных ячеек. Для сферических реакционных ячеек скорость выше примерно в 1.7 раза по сравнению с плоскими реакционными ячейками, что связано с величиной реакционной поверхности на единицу массы вещества. Определено критическое значение безразмерного параметра γ , при котором происходит переход от колебательного режима к стационарному режиму. Разработанная модель позволяет определить зависимость скорости горения от характерного размера гетерогенной структуры исходного состава СВС. Получено качественное согласие теоретической скорости распространения безгазового горения от масштаба гетерогенности структуры СВС состава. Проведено исследования влияния плавления одного из компонентов на скорость горения. С увеличением теплоты плавления скорость горения уменьшается при соответствующих значениях безразмерных параметров задачи.

Приведены результаты расчета скорости безгазового горения от размера гетерогенной структуры. Представлены результаты расчетно-теоретического анализа скорости горения многослойных биметаллических нанопленок. Получено удовлетворительное согласие значений скорости распространения волны безгазового горения с экспериментальными данными. Расчетно-теоретические значения скорости распространения волны безгазового горения с удовлетворительной точностью совпадают с экспериментальными данными в широком диапазоне величин размера гетерогенной структуры СВС состава.

Глава 4 посвящена численному исследованию распространения волны безгазового горения в коническом образце при наличии теплоотвода на внешних границах в двухмерной осесимметричной постановке. Приводится переход к системе координат, связанной с формой образца, необходимый для численного решения задачи. Проведены исследования влияния теплоотдачи на закономерности распространения волны безгазового горения в коническом образце без учёта гетерогенности его структуры и с учётом гетерогенности с использованием модели сферических реакционных ячеек. Численные исследования закономерностей распространения волны безгазового горения в коническом образце без учёта гетерогенности его структуры и с учётом гетерогенности показали, что скорости распространения волны безгазового горения, распределения концентраций и температур качественно совпадают. Было выявлено три режима распространения фронта горения: увеличение скорости фронта горения с пройденным расстоянием вдоль оси конуса, срыв (погасание) горения, горение без срыва. Определено критическое значение параметра Bi , характеризующего интенсивность теплоотдачи, при котором срыва горения не наблюдается. Определена толщина недогоревшего слоя образца в зависимости от Bi при различных углах между образующей конуса и его высотой. Исследовано влияние плавления на закономерности распространения волны безгазового горения в коническом образце с учётом гетерогенности его структуры.

В заключении сформулированы основные результаты, полученные в

диссертации.

Работа выполнена в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», на кафедре математической физики физико-технического факультета и в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники» на кафедре технологий электронного обучения факультета дистанционного обучения.

Автор выражает благодарность научному руководителю профессору Крайнову А.Ю. за полезные консультации и обсуждение результатов.

1. СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ САМОРАСПРОСТРАНЯЮЩЕГОСЯ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СИНТЕЗА (ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР)

1.1 Научные основы СВС

Горение конденсированных гетерогенных систем – это направление в науке, которое вызывает интерес многих учёных, начиная с 60-х годов XX века. Возможность проведения экзотермических реакций в гетерогенных средах используется в металлургии, химии. Процессы имеют высокую практическую важность и нуждаются в теоретических и экспериментальных исследованиях.

В 1967 году в отделении Института химической физики Академии наук СССР группой исследователей под руководством Мержанова Александра Григорьевича был открыт метод получения тугоплавких соединений – самораспространяющийся высокотемпературный синтез (СВС) [1-3]. Метод СВС основан на использовании экзотермических реакций горения для прямого синтеза различных материалов и соединений. Для организации процесса СВС используют реагенты в виде смеси порошков, гибридные системы твердое-жидкое, твердое-газ. Инициирование реакции горения осуществляется медленным нагревом всего образца (горение в режиме теплового взрыва), либо быстрым прогревом лишь небольшой части образца [4]. В первом случае реакция развивается равномерно во всех точках образца и при определенной температуре весь образец реагирует в режиме теплового взрыва [5,6]. Во втором случае наблюдается локальное инициирование экзотермической реакции, которая впоследствии самостоятельно распространяется по образцу в виде волны горения. Источниками инициирования реакции являются поток лучистой энергии, накалившее тело (спираль), электродуговой разряд, волна горения вспомогательного состава [7]. В [8] экспериментальным путём определены характеристики зажигания потоком лучистой энергии, а в [9] даётся теоретический анализ процесса зажигания образцов с помощью лучистой энергии. Волной горения иницируют реакции в труднозажигаемых системах. Экспериментальные исследования зажигания волной горения

представлены в [10, 11]. Чаще всего используется зажигание вольфрамовой проволокой или электродуговым разрядом.

В [12] представлены схемы типичных реакций СВС с описанием всех стадий процесса: приготовление смеси порошков, инициирование экзотермической реакции, самораспространение реакции по образцу в виде волны горения, получение продуктов синтеза. Необходимые и достаточные условия для реализации СВС рассмотрены в работе [13]. Для теоретических исследования реакций СВС используют основы макрокинетики и математические модели Семёнова Н.Н [5, 6], Франк-Каменецкого Д.А [14], Зельдовича Я.Б. [14-16], которые заложили фундамент в теорию теплового взрыва, зажигания и горения.

Продуктами СВС чаще всего являются тугоплавкие неорганические соединения. В [17] приведены наиболее распространенные случаи СВС-реагентов и химических соединений, синтезированных методом СВС. Они не отражают всех актуальных данных по системам и продуктам синтеза, полученным к настоящему времени, но дают чёткие представления о возможностях получения продуктов методом СВС. В [18] в хронологическом порядке их проведения представлены типичные СВС-синтезы. Со временем развития данного научного направления прослеживается тенденция перехода от простых систем и синтезов к более сложным. На момент открытия СВС использовали смеси порошков «металл-неметалл» и получали в качестве продуктов карбиды, бориды, силициды. Впервые о получении карбидов на примере системы Ti-C заявлено в [19], а в [20] сказано о синтезе силицидов. Через некоторое время удалось провести реакции металлов с металлами, в результате которых были получены продукты – интерметаллиды. Сначала данные продукты получали в режиме теплового взрыва [21], затем в режиме самостоятельного распространения волны горения [22]. Одна из известных и хорошо исследованных систем, дающих в качестве продуктов реакции интерметаллиды – система никель-алюминий. В ранних работах исследуются возможности получения алюминидов различных составов с разным

содержанием алюминия. Например, в [23] в результате реакции горения системы «никель-алюминий» экспериментальным путём получено четыре интерметаллических соединения: NiAl_3 , NiAl , Ni_2Al_3 , Ni_3Al . Системе Ni-Al посвящено большое количество работ, как экспериментальных [24-28, 46], так и теоретических с разработкой математических моделей и исследованиями различных процессов реакции горения на параметры воспламенения данной порошковой системы [29, 30]. Для оценки возможностей горения той или иной системы можно использовать предварительный термодинамический анализ [31-33], несмотря на то, что значение температуры горения не является критерием реализации реакции горения. Зная адиабатическую температуру горения, можно оценить, будет система гореть или нет. Например, в [34] указано значение адиабатической температуры горения для систем «металл-металл». Основные классы продуктов, полученных с помощью СВС, [12, 35, 42]: карбиды (TiC_x , ZrC_x , HfC , VC , SiC), бориды (TiB , TiB_2 , ZrB_2 , HfB_2 , VB), нитриды (TiN , HfN , VN , TaN , ZrN), силициды (TiSi , TiSi_2 , ZrSi , ZrSi_2), интерметаллиды (NiAl , Ni_3Al , TiNi , TiAl), халькогениды (TiSe_2 , TaSe_2 , MoSe_2 , WS_2), твердые растворы (TiC-WC , TiC-TiN , NbC-NbN) и др. Список продуктов СВС постоянно пополняется благодаря синтезу новых материалов (нанокристаллические порошки, керамики, плёнки), а также за счёт новых химических составов. В [36] автор проводит анализ работ учёных из разных стран, направленных на решение задач, связанных с получением нанокomпозиционных материалов методом СВС. В [37] упоминается о новом классе системы безгазового горения В-TiN. В [38] рассматривается методика получения нанокристаллов TiC. В [39] рассматриваются основные особенности процессов СВС нанокomпозиционных порошков. В [40] показано, что метод СВС применяется для получения квазикристаллов указанных составов смеси. В [41] приведён обзор работ, в которых показаны примеры получения методом СВС нанопорошков, плёнок, компактных материалов. Большой поток информации о СВС наноматериалах говорит об актуальности данного научного направления и его развитии. Подробный список материалов и изделий,

получаемых методом СВС и применяемых в различных отраслях производства, приведен в работе [35].

Продукты СВС синтеза получают по разным схемам в зависимости от классификации процесса СВС по агрегатному состоянию компонентов. Процессы СВС подразделяются [42] на малогазовые, фильтрационные, металлотермические, безгазовые. В малогазовых системах в ходе синтеза выделяется небольшое количество газообразных продуктов. Фильтрационное горение реализуется в гибридных системах «твёрдое-газ». Состав продуктов, полученных в режиме фильтрационного горения, сильно зависит от газопроницаемости и давления газа в окружающей атмосфере. Безгазовое горение – процесс, при котором исходные компоненты, промежуточные и конечные продукты находятся в конденсированном (твёрдом или расплавленном состоянии). При этом газовыделение практически отсутствует. Факторами, управляющими реакцией безгазового горения, являются: состав смеси порошков, соотношение и размер частиц реагентов, плотность смеси. Для безгазовых СВС-систем были определены экспериментальным путём общие закономерности горения. Выявили зависимости скорости горения различных систем от размера частиц реагента, плотности образца, давления окружающей среды, начальной температуры, количества инертного разбавителя. В [43] была экспериментально доказана возможность горения в безгазовом режиме смеси с участием железо-алюминиевого термита, получены зависимости скорости от размера частиц, начальной температуры, процента разбавления и т.д. Эксперименты по определению зависимости скорости от различных параметров проводились позже [44-48]. В [44, 45] представлены зависимости скорости горения от перечисленных параметров. Конкретные примеры зависимости скорости горения от указанных параметров представлены в [18, 34]. Несмотря на отличие абсолютных значений скорости горения у различных авторов для смесей одного и того же состава, были получены общие закономерности, характеризующие процесс безгазового горения СВС-систем. Характерные зависимости скорости распространения

волны СВС безгазового типа приведены в [7, 42]. Из приведенных графиков [42] видны следующие особенности: скорость безгазового горения не зависит от давления окружающей среды; с увеличением размера гетерогенной структуры скорость горения уменьшается; скорость горения растет при увеличении начальной температуры смеси.

При изучении СВС обнаружено три вида нестационарного горения: автоколебательный, спиновой, хаотический. Открытие спиновых волн и экспериментальное подтверждение автоколебательных режимов сделано в [50, 51], описание спиновых режимов представлено в [52-57], хаотическое распространение волны горения обнаружено в [58]. В [59] из численного решения задачи о нестационарном безгазовом горении авторы получили формулу для определения границы двух режимов распространения фронта горения: стационарного и нестационарного.

На данный момент исследованиями СВС процессов занимаются в 50 странах. В [60] приведен список продуктов, получаемых с помощью метода СВС в разных странах и организациях. Регулярно проводятся симпозиумы, семинары, конференции, разрабатываются концепции СВС как одной из перспективных отраслей научно-технического прогресса [61].

1.2 Математическое моделирование процессов безгазового горения СВС систем

При распространении фронта горения в безгазовых конденсированных системах важную роль играет гетерогенная структура вещества. Для описания такой структуры СВС составов в [63-66] была предложена модель реакционной ячейки. Реакционная ячейка представляет собой область в образце, в которой частицы каждого реагента находятся в заданном соотношении. Смесь реагентов, способная к СВС синтезу, представляет собой совокупность одинаковых реакционных ячеек, а значит, позволяет рассматривать любую ячейку как представителя всей смеси. Следовательно, возможен более подробный анализ реагирующей смеси в силу малости реакционной ячейки.

Примеры безгазовой модели горения приведены в [51, 67-69]. В таких моделях распространение стационарной волны горения описывается уравнением теплопроводности с объёмным источником тепловыделения. В [70-72] рассмотрена гетерогенная модель твердопламенного горения. Волна горения в такой модельной системе распространяется от одной пластинки из смеси реагентов СВС состава к другой пластинке. Последовательное распространение волны горения от пластинки к пластинке возможно благодаря теплопередаче.

В [64] выясняются качественные закономерности процесса горения на основе моделей, которые учитывают свойства различных гетерогенных конденсированных систем. Гетерогенные системы — это смеси частиц разных сортов, способных к химическому взаимодействию. Химическое превращение в гетерогенных системах имеет особенности. Гетерогенная система представляется в виде упорядоченных слоев реагирующих компонентов, как идеализация реальных смесевых систем и вводится модель реакционной диффузии. Модель предполагает, что при взаимном контакте исходных компонентов мгновенно образуется новая фаза – продукт реакции. Продукт АВ отделен от исходных компонентов А и В подвижными границами. Они перемещаются благодаря диффузионному переносу через слой продукта. На границах выделяется тепло в результате того, что исходные компоненты А и В переходят в продукт АВ. Задача стационарного горения такой слоевой системы сводится к рассмотрению процесса неизотермической диффузии в области с подвижными границами и процесса распространения тепла под действием тепловых источников на этих границах. Выводы из рассмотрения модельной слоевой системы, заключаются в следующем: стационарное горение слоевой системы, образующей конденсированные продукты, возможно при очень малых размерах слоёв. Данные выводы могут быть применены для описания процессов горения реальных гетерогенных конденсированных систем.

Стационарные режимы распространения реакции горения были проанализированы в [63-67, 73-76]. В ранних работах [67, 73] проводился расчёт стационарной скорости горения методами, основанными на теории

Зельдовича Я.Б [15, 16]. В остальных работах исследуются стационарные процессы горения в развитии модели [64]. В [74] представлена математическая модель стационарного горения в смеси титана с углеродом. Исходная смесь моделируется плоскими ячейками. Размер ячеек определяется размером частиц углерода. Математическая постановка состоит из уравнения диффузии внутри реакционной ячейки и уравнения теплопроводности во всём образце. В [75] рассмотрена задача о стационарном горении модельной системы, состоящей из упорядоченных слоёв реагентов. В соответствии с подходом [63] считается, что реагенты между собой взаимодействуют только с образованием одного слоя продукта, а диффузионным переносом вещества в направлении распространения волны горения пренебрегают. Математическая модель, также как и в [74], состоит из уравнений теплопроводности и диффузии. В [76] рассматривается модельная система «титан-бор» для исследования и уточнения механизма взаимодействия реагентов. Математическая модель записана в стационарном приближении. Полученные в результате численных расчётов данные полезны для анализа закономерностей горения в таких системах.

В [77] смесь представлена в виде сферических реакционных ячеек и на основе математической модели компактирования гетерогенной двухкомпонентной смеси под воздействием постоянной нагрузки развиваются теоретические представления об СВС-компактировании. В работе получены формулы для оценки макроскопических характеристик продукта реакции, установлено существование различных режимов процесса в зависимости от физико-химических параметров смеси, а также от величины силовой нагрузки. При умеренных силовых нагрузках возможно получение максимально уплотнённого продукта.

Один из важных вопросов в теории горения СВС систем – режимы распространения фронта горения. В зависимости от параметров задачи реализуются различные режимы горения: устойчивый, автоколебательный, неустойчивый, а также срыв горения. Анализ распространения фронта безгазового горения проводится численными методами, так как

аналитическими методами в пространственном случае такой анализ проводить затруднительно. В [68, 78-81] проведен анализ устойчивости стационарных режимов горения и сделан вывод о том, что в результате неустойчивости стационарных режимов к малым возмущениям возникают автоколебательные режимы. В [82] проведены численные исследования процесса горения безгазовых составов и выявлены особенности выхода на установившийся режим горения, учитывая, что существует область параметров, где стационарное горение оказывается неустойчивым и наблюдается пульсирующий режим распространения фронта горения. В [83] поясняются причины перехода от стационарного режима к автоколебательному с изменением плотности прессования образца. Явление неустойчивого горения исследуется и в экспериментальных работах. В [84] впервые экспериментально исследовано безгазовое горение многослойных тонких плёнок системы титан-алюминий, обнаружено два режима горения – автоколебательный и стационарный. При этом автоколебательный режим горения многослойных наноплёнок ранее не наблюдался в экспериментах, а был лишь теоретически предсказан. Определены скорости горения плёнок, которые значительно превосходят значения скоростей аналогичных составов, известных из [34]. В [85] проводится экспериментальное исследование режимов неустойчивого горения в безгазовых системах на примере системы «титан-бор».

Моделирование неустойчивых режимов горения проведено в [54-55, 85-89]. В [54-55, 85-87] выполнено моделирование неустойчивых режимов безгазового горения в трехмерном представлении. В [88] проведено численное исследование нестационарного горения безгазовых систем при наличии фазовых переходов. Авторы проводят анализ влияния плавления реагентов на устойчивость горения таких систем. Результаты численных расчётов показывают, что при различных температурах плавления наблюдаются разные режимы горения: стационарный режим при высокотемпературном фазовом переходе, автоколебательный – при отсутствии фазового перехода и при уменьшении температуры плавления, неустойчивый режим наблюдается с

дальнейшим снижением температуры фазового перехода. Режимы с дестабилизацией фронта горения (неустойчивые режимы) были рассмотрены ранее в [59]. В [89] рассмотрены закономерности нестационарных режимов горения безгазовых систем с легкоплавким компонентом. В отличие от [88] в данном исследовании рассмотрен не только случай полного расходования реагентов в реакции, которому соответствует стефановский режим фазового превращения. Рассмотрено тепловое влияние фазового перехода инертного легкоплавкого компонента на процесс безгазового горения компонентов. Получены результаты, качественно отличающиеся от результатов в работе [88], а именно – действие легкоплавкого инертного компонента на стабилизацию скорости фронта горения. Изложенный в [89] метод распространяется и на нестехиометрические смеси, в то время как в [88] исследовалось влияние фазового перехода плавящегося реагента на нестационарное горение только для стехиометрических составов. Влияние фазовых переходов на закономерности безгазового горения рассматривается также в [90, 91]. Экспериментально изучалась последовательность фазовых превращений в волне безгазового горения в [92]. Одномерная задача безгазового горения, учитывающая структурные изменения представлена в [93].

В [94] проводится численное исследование закономерностей нестационарных режимов горения безгазовых двухкомпонентных смесей, содержащих плавящийся реагент. Закономерности зажигания для системы с плавящимся реагентом, выявлены в [89]. В отличие от [88], где фазовый переход реализован только в режиме Стефана, в данной работе показано, что вне зависимости от состава смеси в нестационарных режимах возможны все типы фазового перехода в волне горения. В то время как в стационарных режимах горения реализуются фазовые переходы в волне горения в стефановском режиме [95] или в режиме химического превращения [76].

В [96] авторы исследуют влияние условий зажигания и плавления инертного компонента на неустойчивые режимы горения образца в форме диска. Построена двумерная математическая модель, учитывающая плавление

инертного компонента в образце. Численные расчёты показали, что влияние фазового перехода на характер горения тем сильнее, чем ближе температура фазового перехода к температуре горения. В [97] построена математическая модель безгазового горения пористого цилиндрического образца, при этом один из реагентов и продукт реакции – тугоплавкие, другой реагент – легкоплавкий, а в порах находится инертный газ.

К свойствам конечного продукта предъявляются жёсткие требования, поэтому нужно уметь управлять технологическим процессом, а значит необходимо предварительно проводить теоретические и модельные экспериментальные исследования. В [98] рассмотрена математическая модель процесса кислородной резки как пример применения макрокинетического подхода к моделированию высокотемпературных технологических процессов. Также проводится анализ устойчивости режимов превращения при соединении материалов с использованием СВС. При моделировании технологического процесса важно проводить оценку напряжений (термических, концентрационных) в ходе превращений. В [99] проведена оценка напряжений в зоне реакции, возникающих в процессе соединения материалов с использованием синтеза в твёрдой фазе. В [100, 101] на примере двумерной математической модели соединения инертных материалов с использованием СВС исследуются возможные режимы превращения в системе, в которой реагирующее вещество с инертным наполнителем находится между двумя инертными пластинами. В работах [102, 103] рассмотрена подобная задача, однако соединяемые материалы уже не являются одинаковыми.

1.3 Выводы и постановка задач

Из анализа научно-технической литературы, посвященной математическим моделям стационарного и нестационарного безгазового горения, можно сделать вывод о том, что область математического моделирования процессов нестационарного безгазового горения с учётом гетерогенности структуры с использованием моделей реакционной ячейки малоизучена. В связи с этим

поставлены цели и задачи диссертационной работы.

Цель диссертации:

Провести расчетно-теоретический анализ нестационарных процессов безгазового горения с учетом гетерогенности структуры СВС составов, зависимости диффузии от температуры, плавления одного из компонентов, теплоотдачи в окружающую среду и определить влияние этих факторов на скорость распространения фронта горения.

Для достижения цели диссертации решить следующие **задачи**:

1. На основе физико-математической модели нестационарного безгазового горения с учётом гетерогенности структуры образцов с использованием моделей плоских и сферических реакционных ячеек, учитывающих влияние образовавшегося слоя продукта на диффузию, провести численное исследование зависимости скорости фронта горения от размера гетерогенной структуры, формы реакционных ячеек, энергии активации диффузии.

2. Провести численное исследование влияния плавления во фронте горения одного из компонентов гетерогенной структуры на режимы и скорость распространения безгазового горения.

3. С использованием модели нестационарного безгазового горения с учётом гетерогенности структуры образцов в двумерном осесимметричном приближении провести численное исследование распространения фронта безгазового горения в коническом образце СВС при теплоотдаче в окружающую среду.

4. Провести сравнение расчётно-теоретической скорости безгазового горения с экспериментальными зависимостями в широком диапазоне размеров гетерогенной структуры.

2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ БЕЗГАЗОВОГО ГОРЕНИЯ С УЧЁТОМ ГЕТЕРОГЕННОСТИ СТРУКТУРЫ И ЗАВИСИМОСТИ ДИФФУЗИИ ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ

Настоящая глава посвящена разработке математической модели нестационарного безгазового горения с учётом гетерогенности структуры образцов и зависимости диффузии от температуры с использованием двух типов реакционных ячеек: 1) ячейка в виде плоского слоя и 2) сферическая ячейка. Гетерогенная структура представляет собой прессованную смесь порошков, способных к химическому реагированию. Каждый из порошков имеет свои гранулометрические характеристики. Предполагается, что в прессованных образцах отсутствует пористость. Под гетерогенными системами подразумеваются системы, описанные в работах [63, 64]. Согласно определению, данному в Физическом энциклопедическом словаре под редакцией А.М. Прохорова (1983 г.) «Гетерогенная система – неоднородная термодинамическая система, состоящая из различных по физическим свойствам или химическому составу частей (фаз). Смежные фазы отделены друг от друга физическими поверхностями раздела на которых скачком изменяется одно или несколько свойств системы ...».

Основные предположения математической модели безгазового горения с использованием плоских и сферических реакционных ячеек: через образующийся и нарастающий слой продукта происходит диффузия реагентов; один из реагентов и продукт реакции не плавятся [62]; смешения реагентов не происходит, то есть реакция имеет гетерогенный характер; размеры реакционных ячеек одинаковы; плотности реагентов и продукта одинаковы; пространственное распределение температуры в реакционной ячейке отсутствует.

В главе представлена математическая модель, приведено описание методики численного решения системы уравнений математической модели и представлены результаты тестирования на решении модельных задач.

2.1 Физическая и математическая постановка задачи безгазового горения с учётом гетерогенной структуры образцов

Для реализации СВС порошки различных металлов, способных к реакции [35], смешиваются, прессуются. Полученные образцы при воздействии высокотемпературных источников на границе зажигаются, и СВС процесс проходит в режиме распространения волны горения по образцу.

Для моделирования процессов СВС используется модель безгазового горения. В теории горения дана обобщенная математическая постановка задачи определения скорости горения [104]. Она состоит из уравнения переноса тепла с учётом скорости тепловыделения от химической реакции и выгорания реагентов. Для нахождения решения применяются численные методы [105], использование которых позволяет получать зависимости скорости горения от определяющих безразмерных параметров задачи.

В математической теории горения и взрыва система уравнений записывается в безразмерных переменных и параметрах. В зависимости от определяющих параметров задачи, граничных условий, условий теплообмена могут возникать различные режимы горения: устойчивые, автоколебательные, неустойчивые, а также срыв распространения пламени, который происходит при сильном теплоотводе из зоны химической реакции [35, 104].

При распространении пламени в безгазовых конденсированных системах важную роль играет гетерогенная структура вещества. В работах [64, 68] для описания гетерогенной структуры СВС составов была предложена модель реакционной ячейки. Для учета гетерогенной структуры исходных составов были предложены модели, учитывающие особенности реакции путем введения кинетических функций в законе Аррениуса. В работах [29-30] проведены исследования процессов в реакционной ячейке в условиях СВС при нагревании образца внешним источником при заданном законе изменения температуры от времени. В [106] представлены некоторые результаты расчетов для моделирования безгазового горения с использованием модели реакционной ячейки сферической формы, где на макроуровне решается задача переноса

тепла, а в реакционных ячейках по длине образца (на микроуровне) решается задача определения скорости реакции с учетом взаимной диффузии компонентов.

В развитие модели, предложенной в [106], строится математическая модель нестационарного распространения фронта горения СВС состава, когда скорость химического реагирования в каждой точке по длине образца СВС определяется из решения задачи диффузии и химического реагирования в реакционных ячейках и учитывается зависимость коэффициента диффузии от температуры. Под реакционной ячейкой понимается усредненный элемент гетерогенной структуры смеси порошков, способных к СВС синтезу, содержащий вступающие в реакцию вещества в пропорции, равной их концентрации в смеси. В каждом элементе гетерогенной структуры СВС состава происходят процессы диффузии и реагирования реагентов при температуре в соответствующих точках образца, меняющейся во времени в процессе реагирования. При этом предполагается, что пространственное распределение температуры в реакционной ячейке отсутствует. Обоснование такого предположения проведено в [63] на основе сравнения характерных масштабов диффузии и теплопроводности. Также предполагается, что коэффициент взаимной диффузии зависит от температуры по экспоненциальному закону [107]. Используются две модели реакционных ячеек: плоские и сферические.

2.2 Математическая модель безгазового горения с использованием плоских реакционных ячеек

Для моделирования безгазового горения с учетом гетерогенности структуры и зависимости диффузии от температуры примем модель реакционной ячейки в виде плоского слоя. Плоский слой состоит из веществ A и B и продукта их синтеза AB [64]. В каждом слое происходят процессы диффузии при температуре в соответствующих точках образца, меняющейся во времени в процессе распространения фронта реакции по образцу. Через образующийся и нарастающий слой продукта происходит диффузия реагентов

и химическая реакция, при этом один из реагентов и продукт реакции АВ не плавятся [62]. Смешения реагентов не происходит, реакция имеет гетерогенный характер. Размеры реакционных ячеек предполагаются одинаковыми, плотности веществ А, В и продукта АВ также одинаковы. Схема реакционных ячеек в виде плоского слоя изображена на рисунке 2.1. На рисунке 2.2 представлено расположение ячеек по длине образца.

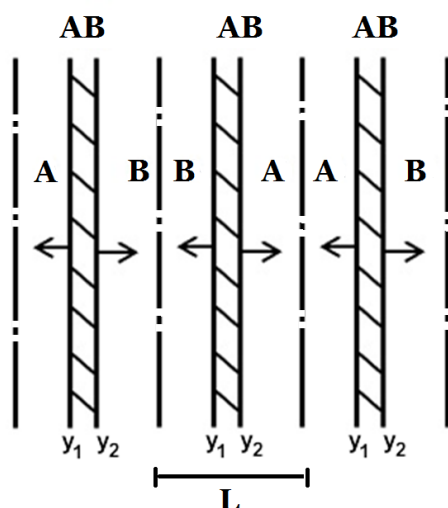


Рис. 2.1 Схема реакционных ячеек в виде плоского слоя



Рис. 2.2 Расположение ячеек по длине образца

Математическая постановка задачи с использованием модели плоских реакционных ячеек состоит из уравнения переноса тепла с учетом тепловыделения от реакции:

$$c_k \rho \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{q}{L} \frac{\partial \delta}{\partial t}. \quad (2.1)$$

Начальные и граничные условия:

$$T(x, 0) = T_0, \quad T(0, t) = T_a, \quad \frac{\partial T(\infty, t)}{\partial x} = 0, \quad (2.2)$$

где

t — время;

x — координата;

T — температура;

c_k — удельная теплоёмкость;

ρ – плотность;

λ – коэффициент теплопроводности;

δ – толщина слоя образовавшегося продукта;

L – толщина плоской реакционной ячейки;

q – тепловой эффект реакции.

Скорости реакции определяются диффузионным переносом веществ А и В через слой продукта АВ. Через слой АВ происходит диффузия вещества А к границе y_2 и вещества В к границе y_1 соответственно (на рис. 2.1). Достигнув границы, вещества вступают в реакцию, образуя продукт АВ, что приводит к нарастанию толщины слоя продукта АВ. Обозначим: $c_A = c$. При стехиометрическом соотношении количества веществ А и В будет выполнено: $c_B = (1 - c_A) = (1 - c)$.

Тогда процесс диффузии веществ А и В можно описать одним уравнением диффузии:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_0 e^{-E_d/RT} \frac{\partial^2 c}{\partial y^2}. \quad (2.3)$$

Граничные и начальные условия для уравнения (2.3):

$$c(y_1(t), t) = c_1, \quad c(y_2(t), t) = c_2, \quad c(y(0), 0) = c_2 \text{ при } y_1(0) < y < y_2(0), \quad (2.4)$$

где t – время;

c - концентрация;

y - координата по толщине слоя продукта АВ;

D_0 - предэкспоненциальный множитель в зависимости коэффициента диффузии от температуры;

E_d - энергия активации диффузии;

R – универсальная газовая постоянная;

$y_1(t)$, $y_2(t)$ - координаты границы, разделяющей вещество А и В от продукта АВ;

c_1 и c_2 - концентрации вещества на границах $y_1(t)$ и $y_2(t)$.

Движение границ $y_1(t)$ и $y_2(t)$ во времени определяется притоком вещества

А на границу y_2 и притоком вещества В на границу y_1 за счёт диффузии через слой АВ. Этот процесс описывается равенствами:

$$\begin{aligned} D_0 e^{-E_d/RT} \frac{\partial c}{\partial y} \Big|_{y_1(t)} &= c_1 \frac{\partial y_1}{\partial t}, \quad \frac{\partial y_1}{\partial t} = u_1, \\ -D_0 e^{-E_d/RT} \frac{\partial c}{\partial y} \Big|_{y_2(t)} &= (1-c_2) \frac{\partial y_2}{\partial t}, \quad \frac{\partial y_2}{\partial t} = u_2. \end{aligned} \quad (2.5)$$

С учетом (2.5) $\frac{\partial \delta}{\partial t}$ в уравнении (2.1) определяется в виде: $\frac{\partial \delta}{\partial t} = |u_1| + |u_2|$.

Систему уравнений (2.1)-(2.5) запишем в безразмерной форме. Выберем в качестве масштаба времени величину: $t_* = c_k \rho R T_a^2 L^2 / (q E_d D_0 e^{-E_d/RT_a})$, масштаб координаты на макроуровне: $x_* = \sqrt{t_* \lambda / c_k \rho}$, масштаб температуры: $R T_a^2 / E$, масштаб координаты для реакционной ячейки: $y_* = L$. Введем безразмерные переменные: $\xi = x / x_*$, $\tau = t / t_*$, $\theta = \frac{E_d}{R T_a^2} (T - T_a)$, $\eta = y / y_*$, $\bar{\delta} = \delta / L$.

С учетом выбранных масштабов задача (2.1)-(2.5) в безразмерной постановке принимает вид:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} + \frac{\partial \bar{\delta}}{\partial \tau} \frac{1}{\gamma}, \quad (2.6)$$

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} = \gamma e^{\frac{\theta}{1+\beta\theta}} \frac{\partial^2 c}{\partial \eta^2}, \quad (2.7)$$

где γ, β – безразмерные параметры задачи: $\gamma = \frac{c_k \rho}{q} \frac{R T_a^2}{E_d}$, $\beta = \frac{R T_a^2}{E_d}$.

Начальные и граничные условия в безразмерной форме запишутся следующим образом:

$$\begin{aligned} \theta(\xi, 0) &= -\frac{1}{\gamma}, \quad \theta(0, \tau) = 0, \quad \frac{\partial \theta(\infty, \tau)}{\partial \xi} = 0, \quad c(\eta_1(\tau), \tau) = c_1, \quad c(\eta_2(\tau), \tau) = c_2, \\ c(\eta(0), 0) &= c_2. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Скорость нарастания продукта АВ определяется соотношениями:

$$\gamma e^{\frac{\theta}{1+\beta\theta}} \frac{\partial c}{\partial \eta} \Big|_{\eta_1(t)} = c_1 U_1, \quad -\gamma e^{\frac{\theta}{1+\beta\theta}} \frac{\partial c}{\partial \eta} \Big|_{\eta_2(t)} = (1-c_2) U_2, \quad \frac{\partial \bar{\delta}}{\partial \tau} = |U_1| + |U_2|.$$

Система уравнений (2.6)-(2.8) описывает процессы безгазового горения с учетом гетерогенности структуры в виде плоских реакционных ячеек.

2.3 Математическая модель безгазового горения с использованием сферических реакционных ячеек

Для моделирования безгазового горения с учетом гетерогенности структуры и зависимости диффузии от температуры во втором варианте примем модель реакционной ячейки в форме шарика. Реакционная ячейка представляется в форме шарика, состоящего из вещества А, окруженного веществом В (рис. 2.3).

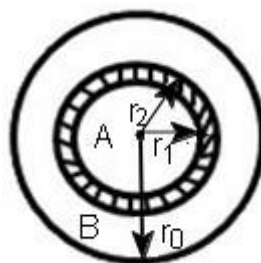


Рис. 2.3. Сферическая реакционная ячейка

Вещества находятся в заданном стехиометрическом соотношении. На границе контакта веществ А и В будет образовываться продукт реакции АВ. Для моделирования распространения волны безгазового горения в однородной смеси порошков расположим реакционные ячейки непрерывным образом по длине образца (рис. 2.4), аналогично тому, как сделано в случае использования модели плоских реакционных ячеек. При распространении волны горения по образцу по мере прогрева реакционных ячеек в них активируется диффузия, происходит реакция и нарастание слоя продуктов реакции в каждой реакционной ячейке. Размеры реакционных ячеек предполагаются одинаковыми, плотности веществ А, В и продукта АВ также одинаковы. Остальные предположения модели аналогичны модели с использованием плоских реакционных ячеек, п. 2.2.

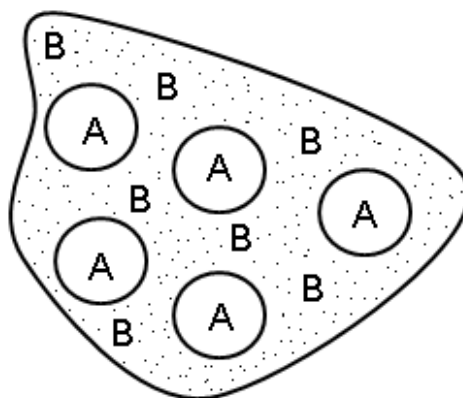


Рис. 2.4. Расположение сферических ячеек в образце

Математическая постановка задачи с использованием модели сферических реакционных ячеек состоит из уравнения переноса тепла с учетом тепловыделения от реакции:

$$c_k \rho \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \dot{Q} \quad (2.9)$$

Начальные и граничные условия:

$$T(x, 0) = T_0, \quad T(0, t) = T_a, \quad \frac{\partial T(\infty, t)}{\partial x} = 0, \quad (2.10)$$

где обозначения приняты как в (2.1)-(2.2).

Скорость тепловыделения $\dot{Q}$ определяется скоростью образования продукта АВ в реакции веществ А+В в единице объёма порошковой смеси. Скорость перемещения границ r_1 и r_2 шарового слоя, образующегося в реакции вещества АВ, умноженная на тепловой эффект q образования вещества АВ и количество реакционных ячеек в единице объёма, определяет скорость тепловыделения в виде:

$$\begin{aligned} \dot{Q} &= n \cdot q \cdot \frac{\partial V}{\partial t}, \quad n = \frac{1}{V_0}, \quad V_0 = \frac{4}{3} \pi r_0^3, \quad V = \frac{4}{3} \pi (r_2^3 - r_1^3), \\ \frac{\partial V}{\partial t} &= 4\pi \left(r_2^2 \frac{\partial r_2}{\partial t} - r_1^2 \frac{\partial r_1}{\partial t} \right), \end{aligned} \quad (2.11)$$

где

n – количество реакционных ячеек в единице объёма;

V_0 – объем реакционных ячеек;

V – объем шарового слоя продукта АВ;

r_1 и r_2 – внутренний и внешний радиус продукта АВ, образующегося в реакционных ячейках в виде шарового слоя (рис. 2.3).

Скорости реакции определяются диффузионным переносом веществ А и В через слой продукта АВ. Через слой АВ происходит диффузия вещества А к границе r_2 и вещества В к границе r_1 соответственно. Достигнув границы, вещества вступают в реакцию, образуя продукт АВ, что приводит к нарастанию толщины слоя продукта АВ. Каждая реакционная ячейка имеет свою температуру, изменяющуюся во времени согласно уравнению (2.9). Поэтому при записи уравнения диффузии учтем зависимость коэффициента диффузии от температуры. При стехиометрическом соотношении количества веществ А (c_A) и В (c_B) будет выполнено: $c_B = (1 - c_A) = (1 - c)$. Обозначив $c_A = c$, запишем уравнение диффузии в сферической системе координат в виде:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_0 e^{-E_d/RT} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial c}{\partial r} \right). \quad (2.12)$$

Начальные условия и граничные условия:

$$c(r_1(t), t) = c_1, \quad c(r_2(t), t) = c_2, \quad c(r(0), 0) = c_2, \quad r_1(0) \leq r \leq r_2(0), \quad (2.13)$$

где обозначения приняты как в (2.3)-(2.4), $r_1(t)$, $r_2(t)$ – координаты границы, разделяющей вещество А и В от продукта АВ;

c_1 и c_2 – концентрации вещества на границах $r_1(t)$, $r_2(t)$.

Движение границ $r_1(t)$ и $r_2(t)$ во времени определяется притоком вещества А на границу $r_2(t)$ и притоком вещества В на границу $r_1(t)$ за счёт диффузии через слой АВ. Этот процесс описывается равенствами:

$$D_0 e^{-E_d/RT} \left. \frac{\partial c}{\partial r} \right|_{r_1(t)} = c_1 \frac{\partial r_1}{\partial t}, \quad -D_0 e^{-E_d/RT} \left. \frac{\partial c}{\partial r} \right|_{r_2(t)} = (1 - c_2) \frac{\partial r_2}{\partial t}. \quad (2.14)$$

Обозначим: $\frac{\partial r_1}{\partial t} = u_1$ и $\frac{\partial r_2}{\partial t} = u_2$, тогда выражение (2.11) примет вид:

$$\frac{\partial V}{\partial t} = 4\pi (r_2^2 u_2 - r_1^2 u_1).$$

Систему уравнений (2.9) – (2.14) запишем в безразмерной форме. Выберем

в качестве масштабов следующие величины: масштаб времени $t_* = c_k \rho R T_a^2 r_0^2 / \left(q E_d D_0 e^{-E_d / R T_a} \right)$; масштаб координаты на макроуровне $x_* = \sqrt{t_* \lambda / c_k \rho}$; масштаб температуры $T_* = R T_a^2 / E$; масштаб координаты для реакционной ячейки $r_* = r_0$. (Масштабы температуры и координаты на макроуровне определяются так же, как и для плоской реакционной ячейки.)

Безразмерные переменные: координата $\xi = x / x_*$; $\eta = r / r_*$; время: $\tau = t / t_*$; температура $\theta = \frac{E_d}{R T_a^2} (T - T_a)$; объём $\bar{V} = V / V_0$.

С учетом выбранных масштабов задача (2.9) – (2.14) в безразмерной форме принимает вид:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} + \frac{\partial \bar{V}}{\partial \tau} \frac{1}{\gamma}, \quad (2.15)$$

$$\theta(\xi, 0) = -\frac{1}{\gamma}, \quad \theta(0, \tau) = 0, \quad \frac{\partial \theta(\infty, \tau)}{\partial \xi} = 0,$$

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} = \gamma \cdot e^{\frac{\theta}{1+\beta\theta}} \frac{1}{\eta^2} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta^2 \frac{\partial c}{\partial \eta} \right), \quad (2.16)$$

$$c(\eta_1(\tau), \tau) = c_1, \quad c(\eta_2(\tau), \tau) = c_2, \quad c(\eta, 0) = c_2, \quad \eta_1(0) \leq \eta \leq \eta_2(0). \quad (2.17)$$

В уравнении (2.15):

$$\frac{\partial \bar{V}}{\partial \tau} = \eta_2^2 \frac{\partial \eta}{\partial \tau} - \eta_1^2 \frac{\partial \eta}{\partial \tau} = \eta_2^2 |U_2| + \eta_1^2 |U_1|. \quad (2.18)$$

Значения U_1 и U_2 определяются из соотношений (2.14), записанных в безразмерной форме:

$$\gamma e^{\frac{\theta}{1+\beta\theta}} \frac{\partial c}{\partial \eta} \bigg|_{\eta_1(\tau)} = c_1 U_1, \quad -\gamma e^{\frac{\theta}{1+\beta\theta}} \frac{\partial c}{\partial \eta} \bigg|_{\eta_2(\tau)} = (1 - c_2) U_2. \quad (2.19)$$

В задаче (2.15) – (2.19) введены безразмерные параметры γ , β , определяемые следующим образом: $\gamma = \frac{c_k \rho}{q} \frac{R T_a^2}{E_d}$, $\beta = \frac{R T_a}{E_d}$ (аналогично случаю с плоскими реакционными ячейками).

2.4 Методика численного решения системы уравнений математической модели безгазового горения с учетом гетерогенности структуры образцов

Для получения функции тепловыделения на макроуровне необходимо решать множество задач диффузионных процессов в каждой реакционной ячейке. В наших численных расчетах использовалось M ячеек на длине расчетной области. На каждом временном шаге процесса решается M задач диффузии реагентов в реакционных ячейках. Из решения этих задач определяется массовая скорость диффузии веществ через слой продукта АВ, и скорость тепловыделения.

Задача решалась численно. Для этого уравнения (2.6) и (2.15) аппроксимировались на равномерной разностной сетке с использованием явной разностной схемы:

$$\frac{\theta_i^{n+1} - \theta_i^n}{\Delta \tau} = \frac{\theta_{i+1}^n - 2\theta_i^n + \theta_{i-1}^n}{h} + \dot{Q}^n, \quad (2.20)$$

где $\Delta \tau$ – шаг по времени; h – шаг по пространству; $\dot{Q}^n$ – источник тепла от химической реакции.

Величина $\dot{Q}^n$ определяется из решения совокупности уравнений (2.7) для плоских реакционных ячеек или уравнений (2.16) для сферических реакционных ячеек во всех точках пространственной переменной ξ . Уравнения (2.7) и (2.16) записываются в форме:

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} = \gamma \cdot e^{\frac{\theta}{1+\beta\theta}} \frac{1}{\eta^m} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta^m \frac{\partial c}{\partial \eta} \right), \quad (2.21)$$

при $m=0$ уравнение (2.21) соответствует уравнению (2.7), при $m=2$ – уравнению (2.16).

Уравнение (2.21) записывается по неявной разностной схеме в виде:

$$\frac{c_j^{n+1} - c_j^n}{\Delta \tau} = \gamma \cdot e^{\frac{\theta_j^n}{1+\beta\theta_j^n}} \frac{\eta_{j+1/2}^m (c_{j+1}^{n+1} - c_j^{n+1}) - \eta_{j-1/2}^m (c_j^{n+1} - c_{j-1}^{n+1})}{\eta_j^m h_\eta^2}, \quad (2.23)$$

где h_η – шаг по слою продукта АВ.

Уравнение (2.23) решается методом прогонки с граничными условиями

(2.17). Величина $\dot{Q}^n$ определяется по формуле (2.18), в которой значения $\bar{U}_1$ и $\bar{U}_2$ определяются из уравнения (2.19), где производные по пространству $\left. \frac{\partial c}{\partial \eta} \right|_{\eta_1(\tau)}, \left. \frac{\partial c}{\partial \eta} \right|_{\eta_2(\tau)}$ записываются также в виде конечных разностей.

Уравнение (2.23) записывается в форме:

$$A_j c_{j-1}^{n+1} + B_j c_j^{n+1} + C_j c_{j+1}^{n+1} = F_j, \quad (2.24)$$

Неизвестные величины c_j^{n+1} в системе линейных уравнений с трёхдиагональной матрицей определяются по формуле: $c_j^{n+1} = \alpha_j c_{j+1}^{n+1} + \beta_j$,

$$\alpha_j = -\frac{C_j}{A_j \alpha_{j-1} + B_j}, \quad \beta_j = \frac{F_j - A_j \beta_{j-1}}{A_j \alpha_{j-1} + B_j}, \quad \alpha_0 = 0, \quad \beta_0 = c_1.$$

Используется метод прогонки.

В процессе расчётов слой продукта увеличивается со скоростью $|U_1| + |U_2|$, поэтому на каждом шаге по времени проводится подвижка точек сетки «вслед» за границами разделов между веществом А и продуктом АВ и веществом В и продуктом АВ. При этом поля концентрации c_j^{n+1} интерполируются на новую сетку путём построения полиномов второго порядка.

Алгоритм решения задачи состоит из следующих вычислительных процедур:

1. задание всех необходимых исходных данных;
2. решение задачи диффузии компонентов через слой продукта (уравнения (2.21)) для всех реакционных ячеек, расположенных по длине расчётной области $0 < \xi < 1000$, и определение скорости тепловыделения $\dot{Q}^n$ в каждой точке расчётной области $0 < \xi < 1000$. С учётом скорости перемещения границ $\eta_1(\tau)$, $\eta_2(\tau)$ проводится перестройка сетки и интерполяция полей $c_i(\eta_i \tau^{n+1})$, $c_i(\eta_j \tau^{n+1})$ на новую сетку внутри слоя продукта;
3. определяется температура по длине образца на $(n+1)$ – временном слое θ_i^{n+1} по явной схеме (2.20);
4. повторяется расчёт по п.2, 3 до сгорания всего образца.

2.5 Математическая модель безгазового горения без учёта влияния образующегося слоя продукта на диффузию реагентов

В [62] указано, что в случае безгазового горения с участием легкоплавких компонентов слой продукта не оказывает существенного влияния на диффузию исходных компонентов А и В. Сформулируем постановку задачи при следующих допущениях: слой продукта реакции АВ не оказывает сопротивления при диффузии исходных веществ А и В, вступающих в реакцию; скорость реакции веществ А и В зависит от их концентрации по первому порядку, а от температуры по закону Аррениуса. Форма элемента гетерогенной структуры принята в виде шарика, в котором в центре находится вещество, окруженное шаровым слоем другого вещества (рис.2.5 а). В каждом элементе гетерогенной структуры СВС состава происходят процессы диффузии и реагирования реагентов при температуре в соответствующих точках образца, меняющейся во времени в процессе реагирования (рис.2.5 б). Согласно [64] данная модель справедлива для легкоплавких компонентов.

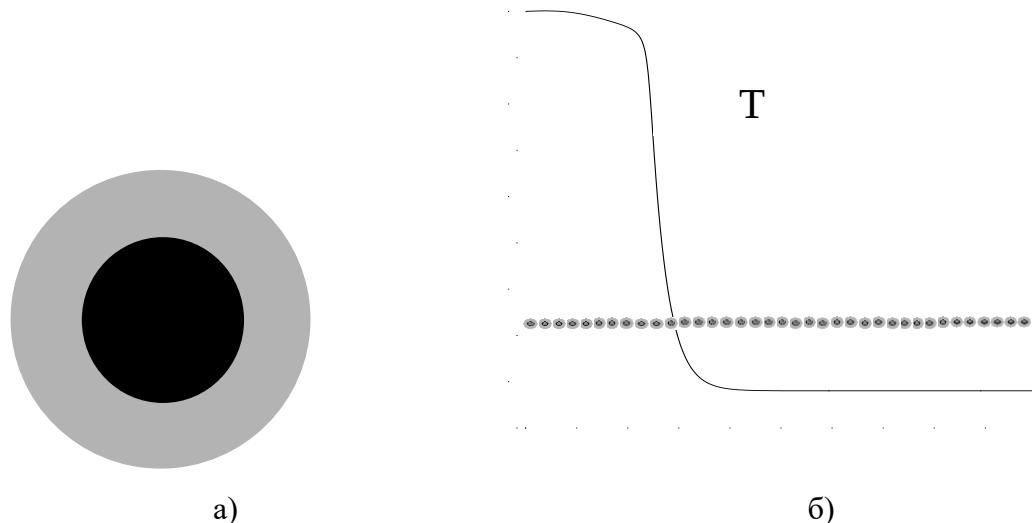


Рис. 2.5. Схема реакционной ячейки (а) и расположение ячеек по длине образца (б)

Математическая модель представляется в виде уравнения теплопроводности с источниками тепла:

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + Q\Phi(T(x,t)), \quad (2.25)$$

с начальными и граничными условиями:

$$T(x, 0) = T_0, \quad T(0, t) = T_a, \quad \frac{\partial T(\infty, t)}{\partial x} = 0. \quad (2.26)$$

Скорость химической реакции $\Phi(T(x, t))$ определяется из решения задачи химического реагирования в реакционной ячейке.

$$\frac{\partial b_1}{\partial t} = D(T) \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial b_1}{\partial r} \right) - b_1 b_2 k_0 \exp \left(-\frac{E}{RT} \right), \quad (2.27)$$

$$\frac{\partial b_2}{\partial t} = D(T) \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial b_2}{\partial r} \right) - b_1 b_2 k_0 \exp \left(-\frac{E}{RT} \right), \quad (2.28)$$

$$D(T) = D_0 \exp \left(-\frac{E_d}{RT} \right). \quad (2.29)$$

Начальные условия для уравнений (2.27) – (2.28):

$$b_1(x, r, 0) = \begin{cases} b_{10}, & 0 < r < r_m \\ 0, & r_m < r < r_0 \end{cases}, \quad b_2(x, r, 0) = \begin{cases} 0, & 0 < r < r_m \\ b_{20}, & r_m < r < r_0 \end{cases}, \quad (2.30)$$

где r_m – координата первоначальной границы веществ А и В.

Полагая, что реакционная ячейка окружена себе подобными, запишем граничные условия для уравнений (2.27) – (2.28) в виде:

$$\frac{\partial b_1(x, 0, t)}{\partial r} = \frac{\partial b_1(x, r_0, t)}{\partial r} = \frac{\partial b_2(x, 0, t)}{\partial r} = \frac{\partial b_2(x, r_0, t)}{\partial r} = 0 \quad (2.31)$$

Из решения задачи (2.27) – (2.28) с начальными и граничными условиями (2.30)–(2.31) определяется средняя по объему ячейки скорость химической реакции $\Phi(T(x, t))$ в виде:

$$\Phi(T(x, t)) = \frac{3}{r_0^3} \int_0^{r_0} b_1 b_2 k_0 \exp \left(-\frac{E}{RT(x, t)} \right) r^2 dr. \quad (2.32)$$

Получаемая средняя по ячейкам скорость химической реакции в зависимости от температуры, зависящей от координаты и времени (2.32) используется в уравнении (2.25).

В задаче (2.25) – (2.32) приняты следующие обозначения:

t – время;

x – координата;

c – удельная теплоемкость;

ρ – плотность;

T – температура;

λ – коэффициент теплопроводности;

Q – тепловой эффект реакции;

$\Phi(T(x, t))$ – скорость химической реакции;

T_0 – начальная температура;

T_a – адиабатическая температура;

b_1, b_2 – концентрация реагентов;

r – радиальная координата сферической системы координат в ячейке;

E, k_0 – энергия активации и предэкспоненциальный множитель в законе Аррениуса для скорости химической реакции;

E_d – энергия активации диффузии;

$D(T)$ – коэффициент диффузии; D_0 – предэкспоненциальный множитель в зависимости коэффициента диффузии от температуры.

Система уравнений (2.25)–(2.32) была записана в традиционных для теории горения безразмерных переменных и параметрах. В качестве масштабов выбраны: масштаб времени $t_* = \frac{c\rho RT_a^2}{Qb_{11}b_{21}Ek_0 \exp(-E/RT_a)}$; масштаб координаты

$x_* = \sqrt{t_* \lambda / c\rho}$; масштаб температуры $T_a = T_0 + Qb_{11}/(c\rho)$, где b_{11}, b_{21} – приведенные плотности реагентов. Использовались безразмерные переменные: $\xi = \frac{x}{x_*}, \tau = \frac{t}{t_*}$,

$\theta = \frac{E}{RT_a^2}(T - T_a), c_1 = \frac{b_1}{b_{10}}, c_2 = \frac{b_2}{b_{20}}$; в реакционной ячейке в качестве масштаба по пространству принят её радиус: $\bar{r} = r/r_0$.

С учётом выбранных масштабов и введённых безразмерных переменных постановка задачи (2.25)–(2.32) в безразмерной форме принимает вид:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} + \bar{\Phi}(\theta(\xi, \tau)), \quad (2.33)$$

$$\frac{\partial c_1}{\partial \tau} = \frac{Le}{R_0^2} \exp\left(E_D \frac{\theta}{1 + \beta\theta}\right) \frac{1}{\bar{r}^2} \frac{\partial}{\partial \bar{r}} \left(\bar{r}^2 \frac{\partial c_1}{\partial \bar{r}} \right) - \gamma c_1 c_2 \exp\left(\frac{\theta}{1 + \beta\theta}\right), \quad (2.34)$$

$$\frac{\partial c_2}{\partial \tau} = \frac{Le}{R_0^2} \exp\left(E_D \frac{\theta}{1 + \beta\theta}\right) \frac{1}{\bar{r}^2} \frac{\partial}{\partial \bar{r}} \left(\bar{r}^2 \frac{\partial c_2}{\partial \bar{r}} \right) - \gamma c_1 c_2 \exp\left(\frac{\theta}{1 + \beta\theta}\right). \quad (2.35)$$

Начальные и граничные условия в безразмерных переменных запишутся следующим образом:

$$\theta(\xi, 0) = \theta_0, \quad c_1(\xi, \bar{r}, 0) = \begin{cases} 1, & 0 < \bar{r} < \bar{r}_m \\ 0, & \bar{r}_m < \bar{r} < 1 \end{cases}, \quad c_2(\xi, \bar{r}, 0) = \begin{cases} 0, & 0 < \bar{r} < \bar{r}_m \\ 1, & \bar{r}_m < \bar{r} < 1 \end{cases}, \quad (2.36)$$

$$\theta(0, \tau) = 0, \quad \frac{\partial \theta(\infty, \tau)}{\partial \xi} = 0.$$

$$\frac{\partial c_1(\xi, 0, \tau)}{\partial \bar{r}} = \frac{\partial c_2(\xi, 0, \tau)}{\partial \bar{r}} = \frac{\partial c_1(\xi, \bar{r}_0, \tau)}{\partial \bar{r}} = \frac{\partial c_2(\xi, \bar{r}_0, \tau)}{\partial \bar{r}} = 0, \quad (2.37)$$

$$\bar{\Phi}(\theta(\xi, \tau)) = \frac{3}{\bar{r}_0^3} \int_0^{\bar{r}_0} c_1 c_2 \exp\left(\frac{\theta(\xi, \tau)}{1 + \beta\theta(\xi, \tau)}\right) \bar{r}^2 d\bar{r}. \quad (2.38)$$

Получившиеся параметры задачи характеризуют: $Le = D_0 / (\lambda / c\rho)$ – интенсивность диффузии, $R_0 = r_0 / x_*$ – размер гетерогенной структуры, $E_D = E_d / E$ – энергию активации диффузии, $\gamma = \frac{c\rho}{Qb_{11}} \frac{RT_a^2}{E}$ – тепловой эффект реакции, $\beta = RT_a / E$ – энергию активации химической реакции.

Задача (2.34)-(2.38) при задании в качестве начальных условий

$$c_1(\xi, \bar{r}, 0) = 1 \text{ при } 0 < \bar{r} < 1, \text{ а } c_2(\xi, \bar{r}, \tau) \equiv 1 \text{ при } 0 < \bar{r} < 1, \quad (2.36')$$

(реагент c_2 не расходуется) становится эквивалентной модели безгазового горения, в которой скорость реакции зависит от температуры по закону Аррениуса, и имеет первый порядок реакции:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} + c_1 \exp\left(\frac{\theta(\xi, \tau)}{1 + \beta\theta(\xi, \tau)}\right), \quad (2.39)$$

$$\frac{\partial c_1}{\partial \tau} = -\gamma c_1 \exp\left(\frac{\theta(\xi, \tau)}{1 + \beta\theta(\xi, \tau)}\right). \quad (2.40)$$

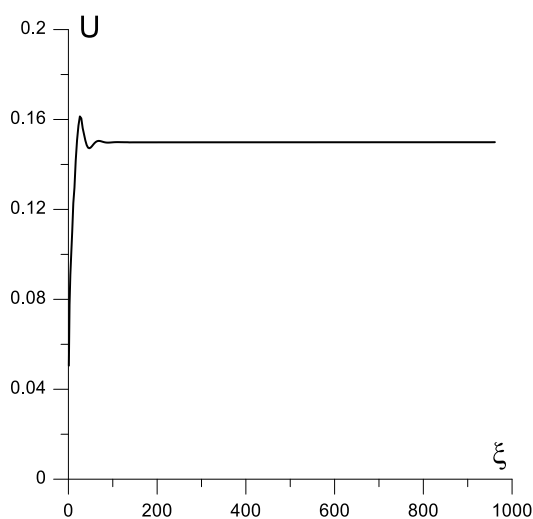
С начальными и граничными условиями:

$$\theta(\xi, 0) = \theta_0, \quad c_1(\xi, 0) = 1, \quad \theta(0, \tau) = 0, \quad \frac{\partial \theta(\infty, \tau)}{\partial \xi} = 0.$$

2.6 Тестирование методики и программы расчета распространения фронта безгазового горения

Решение задачи (2.39)-(2.40) проводилось многими исследователями [35]. В [108] представлено аналитическое решение задачи о скорости твердофазного горения. В безразмерной форме, в принятых масштабах для реакции первого порядка она дает величину $U = \gamma$. Было проведено численное решение задачи (2.33)-(2.35), (2.37), (2.38) с начальными условиями (2.36'). Эта задача эквивалентна (2.39)-(2.40). Задача (2.33)-(2.35), (2.37), (2.38) с начальными условиями (2.36') решалась численно методами, изложенными в п. 2.4. Из численного решения задачи была получена величина скорости $U = 0.15$ при $\gamma = 0.143$. Отличие составляет 4.8 %.

Установление скорости распространения фронта безгазового горения при $\gamma = 0.143$ представлено на рисунке 2.6 а, распределения температуры и концентрации в последовательные моменты времени через 200 единиц безразмерного времени представлены на рисунках 2.6 б, в.



а)

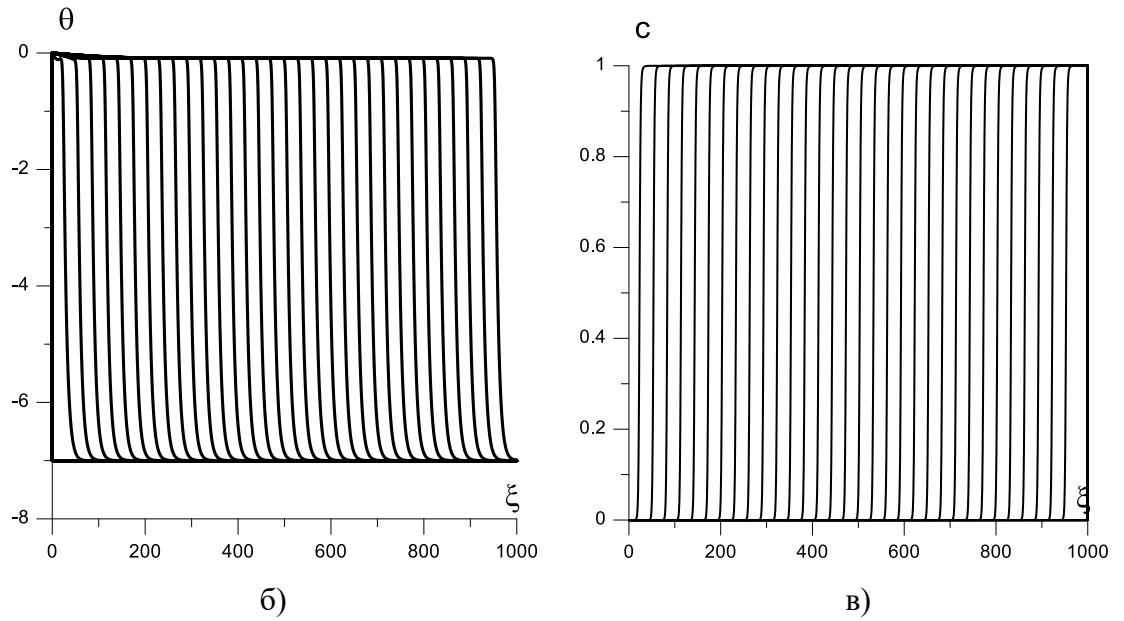


Рис. 2.6. Зависимости скорости распространения фронта горения от координаты (а), распределение температуры по координате (б) и концентрации реагента (в) в последовательные моменты времени через $\Delta\tau = 200$. $\gamma = 0.143$, $\beta = 0.05$

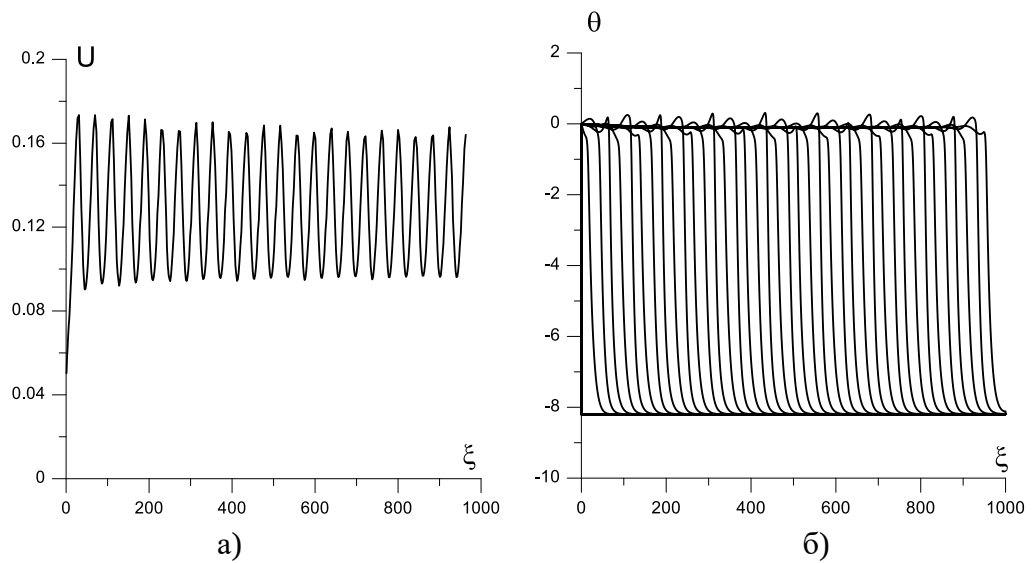


Рис. 2.7. Зависимости скорости распространения фронта горения от координаты (а), распределение температуры по координате в последовательные моменты времени через $\Delta\tau = 200$ (б). $\gamma = 0.122$, $\beta = 0.05$

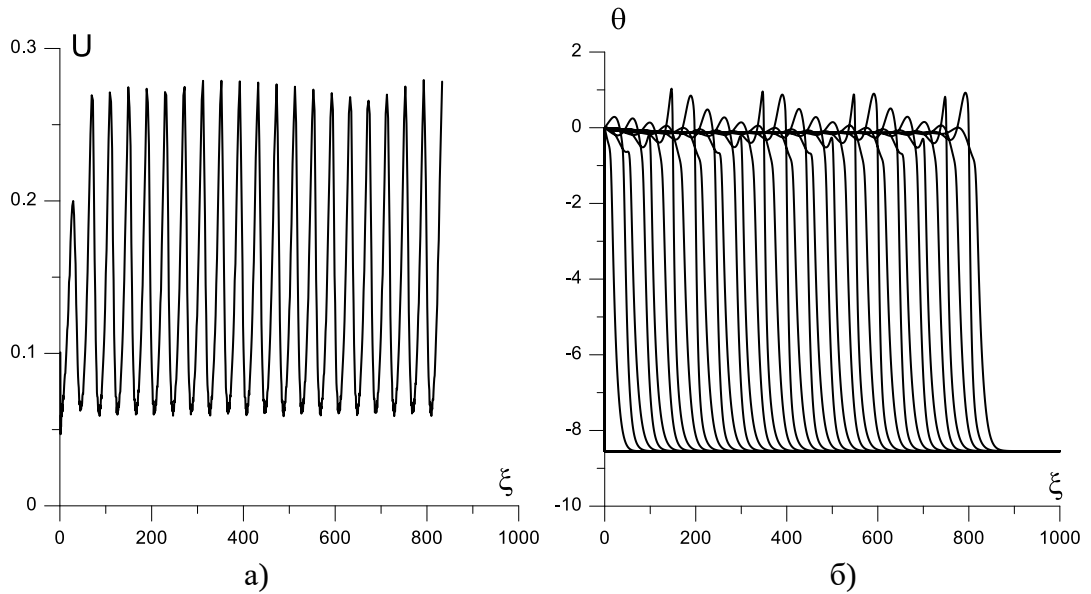


Рис. 2.8. Зависимости скорости распространения фронта горения от координаты (а), распределение температуры по координате в последовательные моменты времени через $\Delta\tau = 200$ (б). $\gamma = 0.117$, $\beta = 0.05$

В [35, 59, 80, 81] для режимов безгазового горения установлено, что при $9.1\gamma - 2.5\beta < 1$ возникает неустойчивый, пульсирующий режим распространения волны безгазового горения. При $\gamma = 0.143$ фронт горения устойчив. Если взять γ при $\beta = 0.05$ меньше $\gamma_* = 0.1236$, то возникает пульсирующий режим распространения фронта безгазового горения. Результаты расчета при $\gamma = 0.122$ и $\gamma = 0.117$ представлены на рисунках 2.7 и 2.8.

Проведенные тестовые расчеты показывают, что результаты вычислений по методике и программе ЭВМ соответствуют известным результатам [35, 59].

2.7 Тестирование методики расчёта диффузии в реакционной ячейке

Для тестирования методики решения задачи диффузии вещества через слой продукта АВ (2.7)-(2.8) (плоские реакционные ячейки) и (2.16)-(2.19) (сферические реакционные ячейки) была решена следующая модельная задача.

Рассматривается совокупность реакционных ячеек, находящаяся в одинаковых условиях, которая нагревается с заданной скоростью изменения температуры во времени от начальной температуры до конечной, соответствующей адиабатической температуре сгорания смеси. Изменение

температуры от времени задается зависимостью:

$$\theta(\tau) = \begin{cases} \theta_0 + H\tau, & 0 < \tau < -\theta_0/H \\ 0, & \tau > -\theta_0/H \end{cases} \quad (2.41)$$

Скорость роста температуры во времени $\frac{d\theta}{d\tau} = H$ задавалась характерной для изменения температуры во времени в веществе в зоне прогрева перед фронтом безгазового горения. В вариантах расчетов величина H задавалась равной трем значениям: 0.1, 0.04, 0.01.

Расчеты были проведены для моделей плоской и сферической реакционной ячейки. Результаты, представленные ниже, приведены для сферической реакционной ячейки. Диффузия и нарастание слоя продукта реакции описывается системой уравнений (2.16)-(2.19). Изменение температуры от времени задается зависимостью (2.41).

В расчетах величина H задавалась равной трем значениям: 0.1, 0.04, 0.01. Расчеты проводились при фиксированных значениях параметров $\gamma = 0.14286$, $\beta = 0.05$. На рисунках 2.9 и 2.10 представлены зависимости от времени величины температуры и толщины слоя образующегося продукта в виде шарового слоя, рассчитываемого как разность $\delta = \eta_2 - \eta_1$.

Из представленных результатов видно, что при большой скорости роста температуры ($H = 0.1$) ячейки сначала нагреваются, и только потом, после увеличения коэффициента диффузии с повышением температуры, происходит нарастание слоя продукта (кривые 1 на рисунках 2.9, 2.10). При малой скорости роста температуры ($H = 0.01$) к моменту достижения температуры, равной нулю, выгорание компонентов практически завершается (кривые 3 на рисунке 2.9).

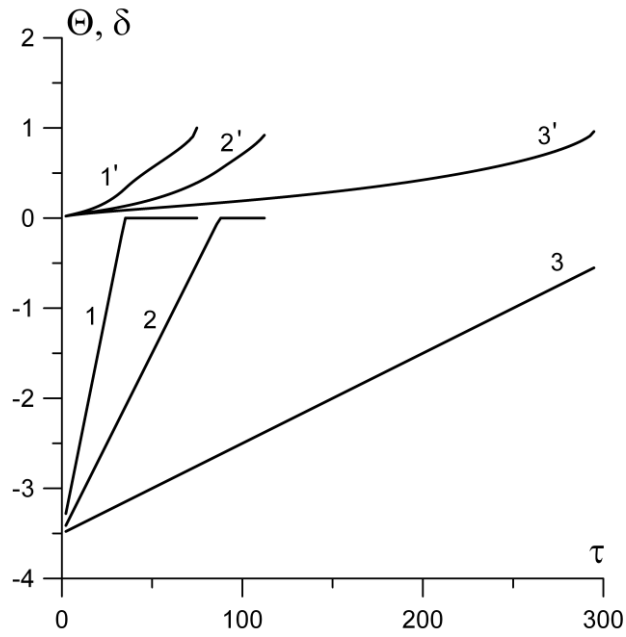


Рис. 2.9. Зависимости от времени температуры (1, 2, 3) и толщины слоя образовавшегося продукта (1', 2', 3') в объеме реакционной ячейки. $\gamma = 0.14286$, $\beta = 0.05$.
1, 1' – $H = 0.1$, 2, 2' – $H = 0.04$, 3, 3' – $H = 0.01$

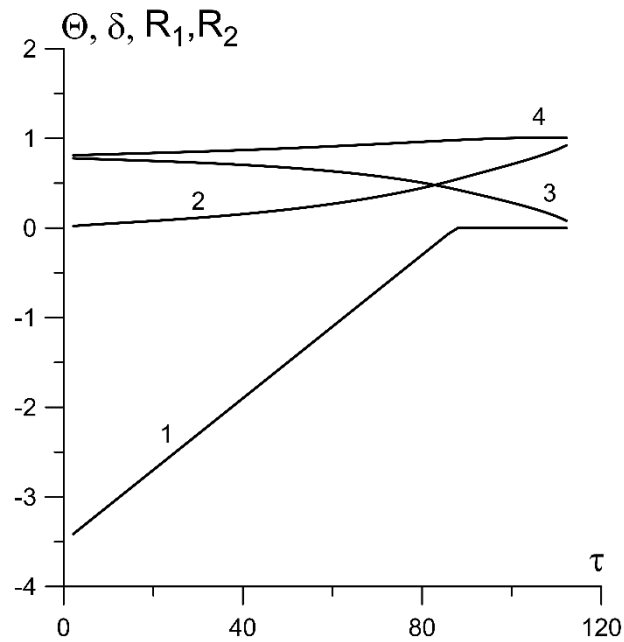


Рис. 2.10. Зависимости от времени: температуры (1), толщины слоя образовавшегося продукта в объеме реакционной ячейки (2), положения границ исходных веществ и продукта (3,4). $\gamma = 0.14286$, $\beta = 0.05$

При средней скорости роста температуры ($H = 0.04$) диффузия и реагирование проходят на фоне роста температуры. При этом примерно половина вещества выгорает к моменту достижения температуры, равной нулю.

После этого в изотермических условиях происходит дореагирование компонентов (кривые 2 на рисунках 2.9, рисунок 2.10).

Аналогичные расчеты проведены для плоских реакционных ячеек (2.7)-(2.8). Из решения модельных задач были определены необходимые характеристики разностной схемы (необходимое количество точек разностной сетки, величина числа Куранта), обеспечивающие заданную точность расчетов.

Выводы по главе 2

1. Сформулирована модель нестационарного безгазового горения с учётом гетерогенности структуры и зависимости диффузии от температуры с использованием двух моделей реакционных ячеек: плоских и сферических. Для каждой модели записана математическая задача в размерных и безразмерных переменных, приведены способы решения.

2. Разработана методика и программа ЭВМ для численного решения системы уравнений математической модели распространения волны безгазового горения с учетом гетерогенности структуры моделями плоских и сферических реакционных ячеек, а также модели, не учитывающей влияние образовавшегося слоя продукта на диффузию. Проведено тестирование методики численного решения и программы ЭВМ на решении модельных задач. Тестирование показало совпадение результатов расчетов с известными в научной литературе данными.

3. При решении модельных задач определены параметры разностной схемы, обеспечивающие удовлетворительную точность численного решения задач.

3. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ БЕЗГАЗОВОГО ГОРЕНИЯ С УЧЁТОМ ГЕТЕРОГЕННОСТИ СТРУКТУРЫ И ЗАВИСИМОСТИ ДИФФУЗИИ ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ

В главе представлены результаты численного исследования (моделирования) нестационарных режимов безгазового горения на основе моделей плоских и сферических реакционных ячеек. Представлены результаты численных расчётов с учетом диффузии через образующийся слой продукта и без учета влияния образующегося продукта на диффузию. Проведен сравнительный анализ величины скорости распространения реакционной волны в зависимости от формы реакционных ячеек. Проведен сравнительный анализ расчётно-теоретической скорости распространения волны безгазового горения с известными экспериментальными данными. Представлены результаты численного моделирования распространения волны безгазового горения с использованием модели сферических реакционных ячеек с учётом плавления одного из компонентов смеси.

3.1 Результаты численных расчётов скорости распространения волны безгазового горения без учёта влияния образующегося продукта на диффузию

Математическая модель безгазового горения, в которой не учитывается влияние образующегося слоя продукта на диффузию реагентов, представлена в п. 2.5 системой уравнений (2.33)-(2.38).

Уравнение (2.33) решалось по явной разностной схеме, уравнения (2.34) – (2.35) решались по неявной разностной схеме методом прогонки. Методика решения описана в пункте 2.4.

Численное решение модельной задачи (2.33) – (2.38) проводились в диапазоне изменения параметров задачи: $0.5 \leq E_D \leq 1.6$, $0.05 \leq R_0 \leq 1.0$, $10^{-4} \leq Le \leq 10^{-5}$ при различных значениях параметров γ и β .

Было проведено исследование влияния числа Le , размера гетерогенной

структуры R_0 , энергии активации диффузии E_D на скорость распространения волны безгазового горения. Расчеты проводились при фиксированных значениях величин параметров γ и β из области устойчивости распространения фронта безгазового горения [35].

На рисунке 3.1 представлена зависимость скорости распространения волны горения от координаты. Видно, что фронт безгазового горения, пройдя расстояние 150-250 безразмерных единиц, выходит на стационарный режим распространения.

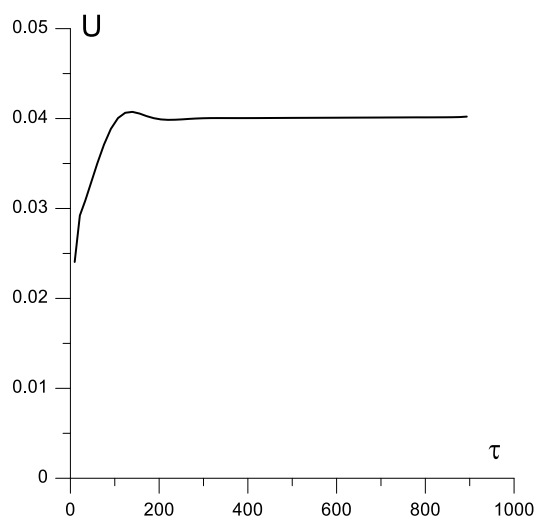


Рис. 3.1. Зависимости скорости распространения фронта горения от координаты.

$$\gamma = 0.143, \beta = 0.05, E_D = 1.0, R_0 = 0.1, Le = 10^{-5}$$

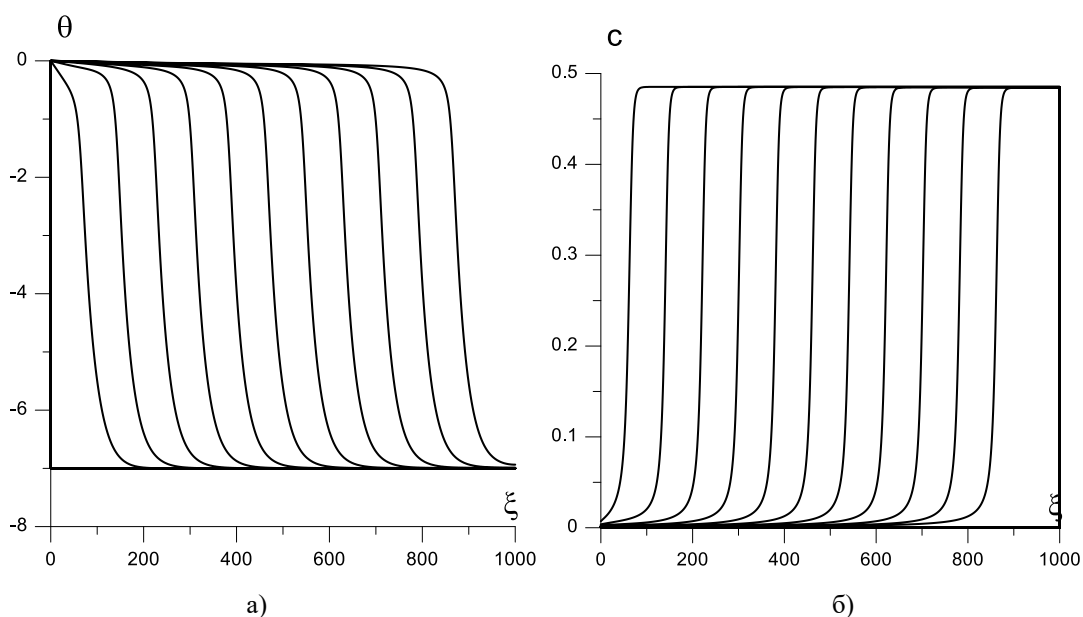


Рис. 3.2. Распределение температуры по координате (а) и концентрации реагента (б) в последовательные моменты времени через $\Delta\tau = 2000$. $\gamma = 0.143$, $\beta = 0.05$, $E_D = 1.0$,

$$R_0 = 0.1, Le = 10^{-5}$$

На рисунке 3.2 а, б представлены соответствующие этому случаю распределения температуры и концентрации компонента c_1 через интервал времени равный 2000 единиц безразмерного времени.

Результаты параметрических расчетов влияния параметров задачи на стационарную скорость распространения волны безгазового горения представлены в таблице 3.1.

Таблица 3.1. Величина стационарной скорости распространения волны безгазового горения при различных значениях параметров E_D , R_0 , Le .

E_D	R_0	Le	U
1.0	0.1	10^{-4}	0.048
		$5 \cdot 10^{-5}$	0.047
		10^{-5}	0.040
	0.3	10^{-4}	0.041
		$5 \cdot 10^{-5}$	0.036
		10^{-5}	0.021
	0.5	10^{-4}	0.033
		$5 \cdot 10^{-5}$	0.026
		10^{-5}	0.013
1.2	0.1	10^{-4}	0.046
		$5 \cdot 10^{-5}$	0.044
		10^{-5}	0.037
	0.3	10^{-4}	0.038
		$5 \cdot 10^{-5}$	0.032
		10^{-5}	0.018
	0.5	10^{-4}	0.029
		$5 \cdot 10^{-5}$	0.023
		10^{-5}	0.012

Из данных, приведенных в таблице 3.1 видно, что с увеличением интенсивности диффузии (числа Le) скорость горения U увеличивается. Такая зависимость наблюдается при всех значениях R_0 исследованного диапазона. С увеличением E_D стационарная скорость распространения волны безгазового

горения уменьшается.

Проведенное численное исследование зависимости стационарной скорости фронта горения от размера усредненного элемента гетерогенной структуры R_0 представлено на рисунке 3.3. С увеличением размера элемента гетерогенной структуры скорость распространения фронта горения уменьшается. Зависимость скорости фронта горения от размера частиц реагентов качественно соответствует экспериментальной зависимости, представленной в [35]. С увеличением числа Le скорость фронта горения увеличивается (рис. 3.3).

В математической постановке (2.33)-(2.38) параметры задачи R_0 и Le присутствуют в виде отношения Le/R_0^2 (в уравнениях (2.34) и (2.35)), поэтому полученные зависимости скорости распространения фронта пламени $U(R_0)$, представленные на рис. 3.3, были обработаны в виде зависимости $U(R_0^2/Le)$ и представлены на рисунке 3.4. Все зависимости, представленные на рисунке 3.3, легли на одну кривую на рисунке 3.4.

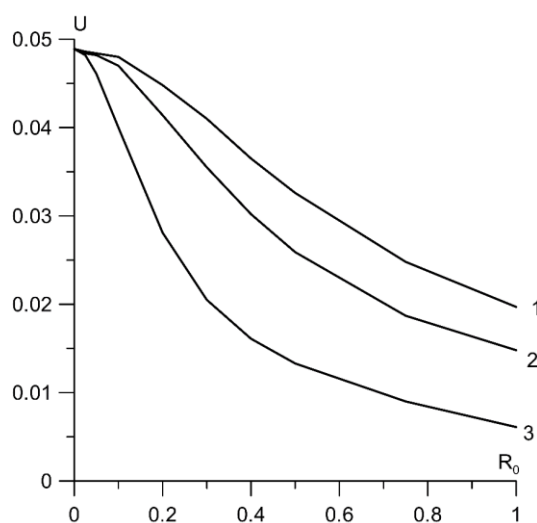


Рис. 3.3. Зависимость скорости горения U от размера элемента гетерогенной структуры R_0 при различных значениях Le : 1- $Le = 10^{-4}$, 2- $Le = 5 \cdot 10^{-5}$, 3 - $Le = 10^{-5}$, $E_D = 1$, $\gamma = 0.14286$, $\beta = 0.05$

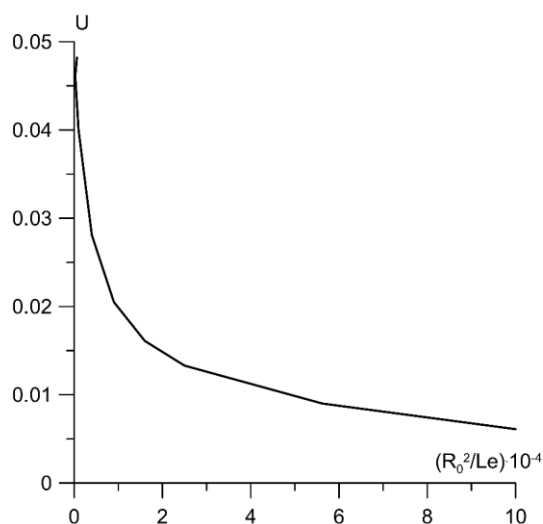


Рис. 3.4. Зависимость скорости горения U от отношения R_0^2/Le .

$$E_D = 1, \gamma = 0.14286, \beta = 0.05$$

Было проведено исследование влияния параметра E_D в более широком диапазоне его изменения. На рисунках 3.5 и 3.6 представлены зависимости скорости волны безгазового горения от координаты при различных значениях параметров R_0, Le, E_D . Из рисунков 3.5, 3.6 видно, что с увеличением E_D скорость сначала уменьшается, а начиная с некоторого значения E_D переходит в колебательный режим распространения.

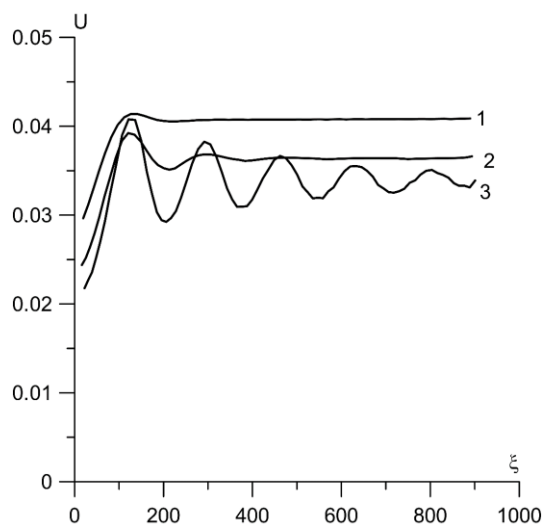


Рис. 3.5. Зависимость скорости горения U от координаты ξ при значениях E_D :
 1 – $E_D = 1.0$, 2 – $E_D = 1.3$, 3 – $E_D = 1.6$. $R_0 = 0.3$, $Le = 10^{-4}$, $\gamma = 0.14286$, $\beta = 0.05$

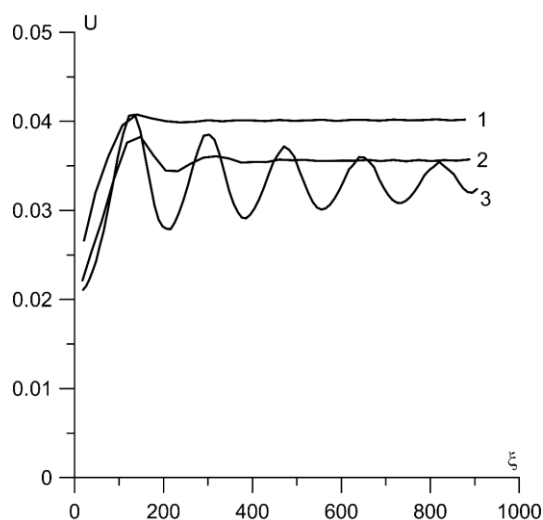


Рис. 3.6. Зависимость скорости горения U от координаты ξ при значениях E_D :
 1 – $E_D = 1.0$, 2 – $E_D = 1.3$, 3 – $E_D = 1.6$. $R_0 = 0.1$, $Le = 10^{-5}$, $\gamma = 0.14286$, $\beta = 0.05$

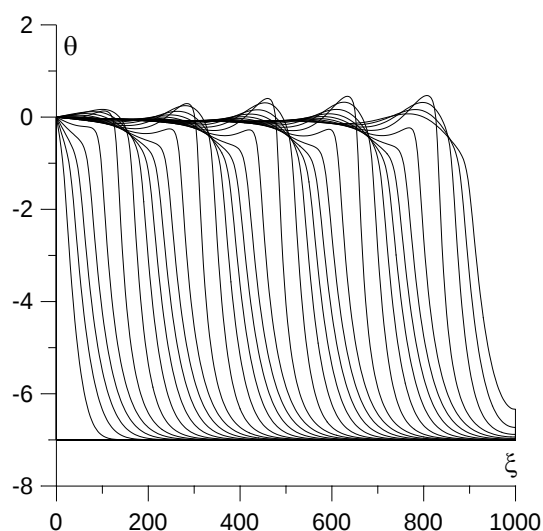


Рис. 3.7. Распределение температуры θ по координате ξ в последовательные моменты.
 $\gamma = 0.14286$, $\beta = 0.05$, $R_0 = 0.1$, $Le = 10^{-5}$, $E_D = 1.6$

На рисунке 3.7 представлены распределения температуры по координате в последовательные моменты времени при $E_D = 1.6$, $R_0 = 0.1$, $Le = 10^{-5}$, когда существует колебательный режим распространения волны безгазового горения, возникновение которого обусловлено высокой энергией активации диффузии в веществе. На рисунке 3.8 представлены зависимости стационарной скорости распространения фронта пламени от параметра E_D . Зависимости представлены до значения E_D , выше которого распространение фронта горения переходит в пульсирующий режим. При фиксированных значениях R_0 , скорость фронта горения с увеличением E_D уменьшается.

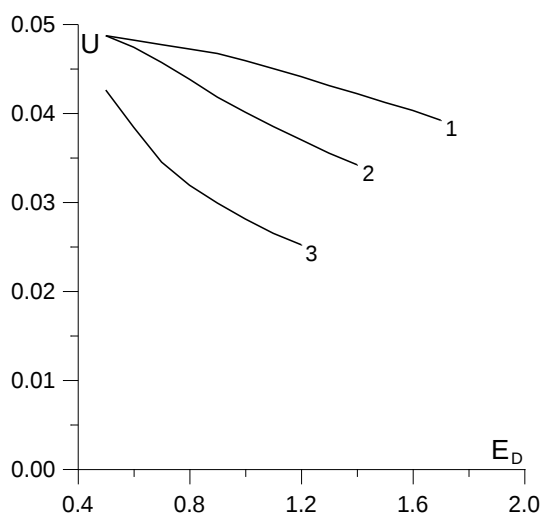


Рис. 3.8. Зависимость скорости горения U от параметра E_D при различных значениях R_0 : 1 - $R_0 = 0.05$, 2 - $R_0 = 0.1$, 3 - $R_0 = 0.2$. $Le = 10^{-5}$, $\gamma = 0.14286$, $\beta = 0.05$

Было проведено исследование влияния параметров E_D и R_0 на границу перехода от стационарного к пульсирующему распространению фронта горения. На рисунке 3.9 представлены области существования стационарного (I) и пульсирующего (II) режимов распространения фронта горения в области параметров $E_D - R_0$. С увеличением числа Le область стационарного распространения фронта увеличивается, кривые, описывающие границу между стационарным режимом распространения волны безгазового горения и пульсирующим, смещается в сторону больших значений E_D (на рисунке 3.10).

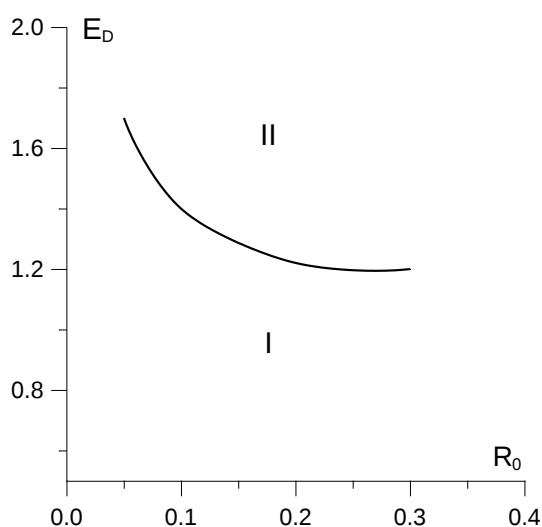


Рис. 3.9. Области стационарного (I) и колебательного (II) режимов распространения фронта горения при $Le = 10^{-5}$, $\gamma = 0.14286$, $\beta = 0.05$

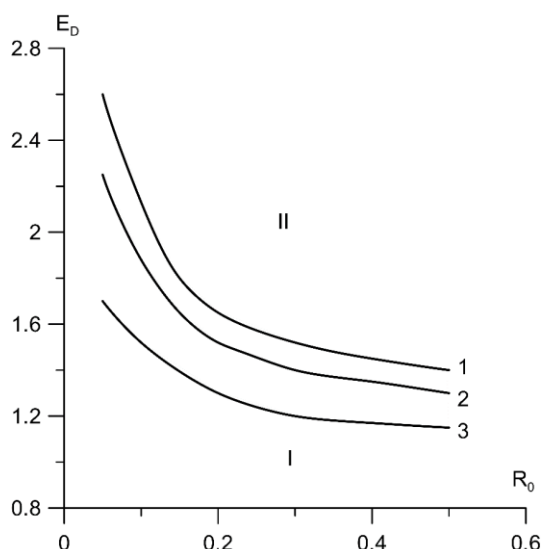


Рис. 3.10. Области стационарного (I) и колебательного (II) режимов распространения фронта горения при: 1 – $Le = 10^{-4}$, 2 – $Le = 5 \cdot 10^{-5}$, 3 – $Le = 10^{-5}$, $\gamma = 0.14286$, $\beta = 0.05$

Рассмотренные выше режимы распространения фронта горения соответствуют параметрам γ и β из области устойчивости распространения фронта безгазового горения: $\gamma = 0.14286$, $\beta = 0.05$. Исследуем, как распространяется волна безгазового горения при γ и β , взятых из области неустойчивого распространения фронта горения. Колебательный режим распространения фронта горения наблюдается и при γ , взятых из области неустойчивости. Однако не при всех значениях параметра E_D колебательный режим сохраняется. Численные расчёты были проведены при тех же значениях параметров R_0 , Le в широком интервале изменения параметра E_D при $\gamma = 0.117$, $\beta = 0.05$. Результаты расчётов представлены на рисунках 3.11 – 3.12.

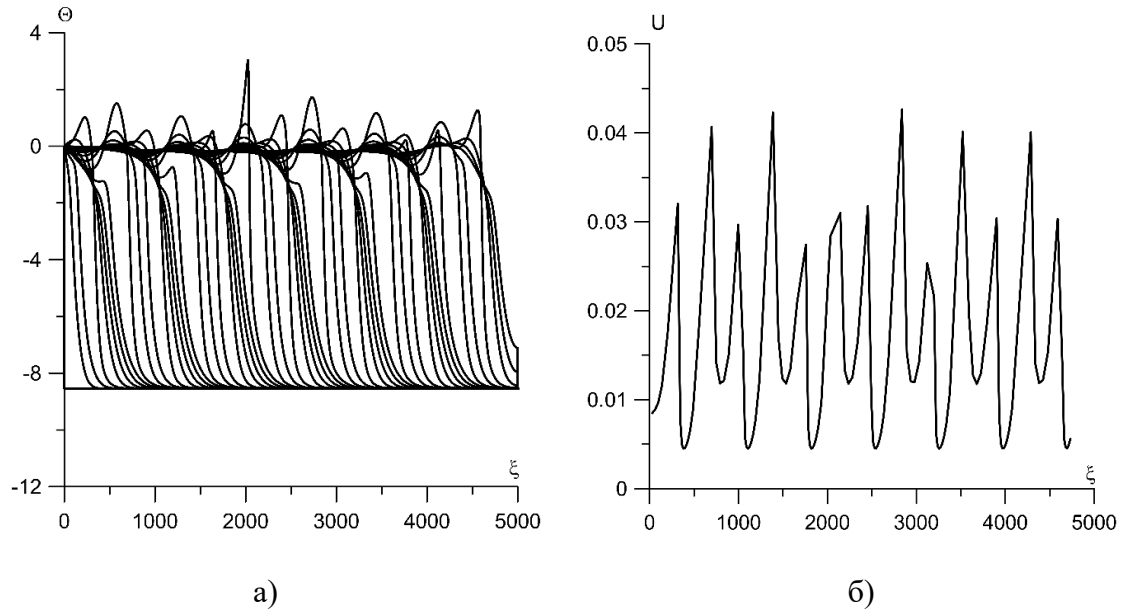


Рис. 3.11. Распределение температуры θ по координате ξ в последовательные моменты (а) и зависимость скорости горения (б) от координаты ξ . $Le=10^{-5}$, $E_D=1.2$, $R_0=0.3$, $\gamma=0.117$

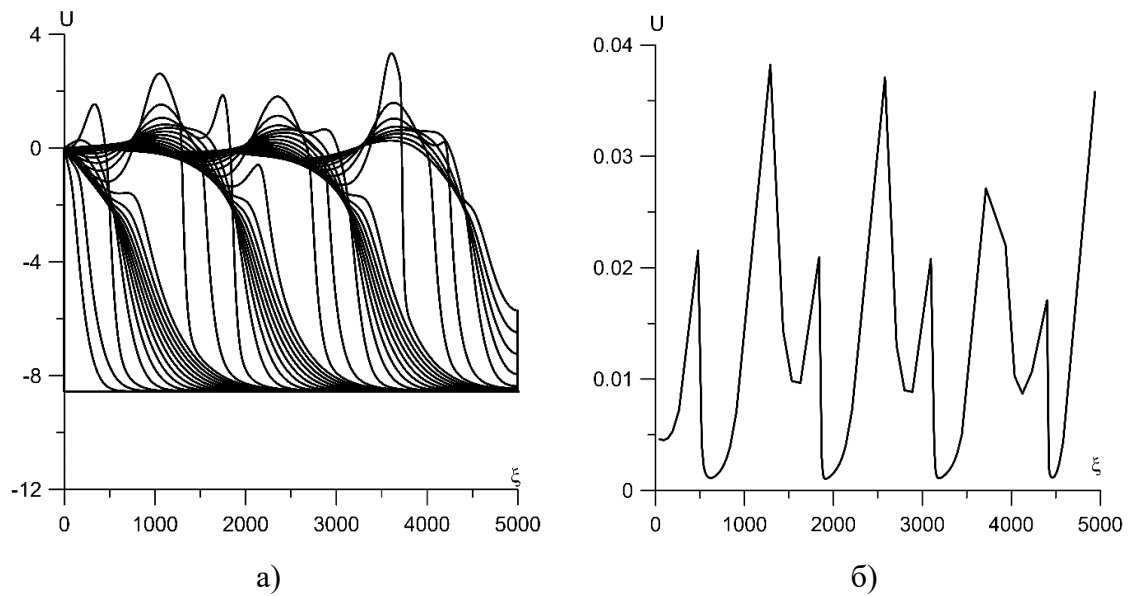


Рис. 3.12. Распределение температуры θ по координате ξ в последовательные моменты (а) и зависимость скорости горения (б) от координаты ξ . $Le=10^{-5}$, $E_D=1.4$, $R_0=0.5$, $\gamma=0.117$

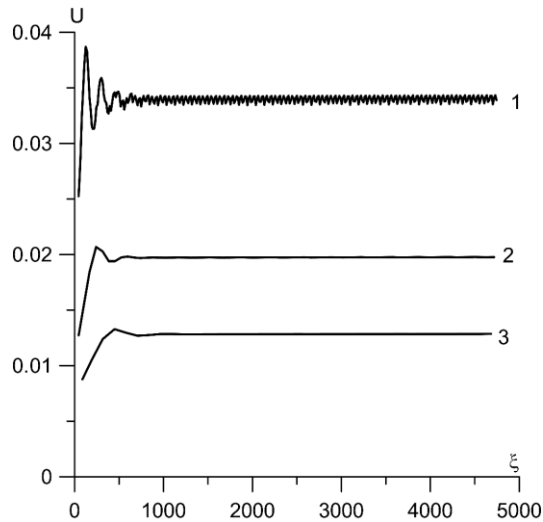


Рис. 3.13. Зависимость скорости горения U от координаты ξ при значениях $Le = 10^{-5}$, $E_D = 0.8$, $\gamma = 0.117$, 1 – $R_0 = 0.1$, 2 – $R_0 = 0.3$, 3 – $R_0 = 0.5$.

Расчёты показали, что при $\gamma = 0.117$ и $E_D > 0.8$ наблюдается колебательный режим. Некоторые графики скоростей и температуры этого режима показаны на рисунках 3.11, 3.12 при различных значениях E_D , R_0 , Le . При $E_D \leq 0.8$ наблюдается стационарный режим. На рисунке 3.13 показаны зависимости скорости горения при $E_D = 0.8$ и различных значениях размера R_0 .

3.2 Численное моделирование распространения волны безгазового горения с использованием модели плоских реакционных ячеек

Математическая постановка задачи о распространении фронта волны безгазового горения с использованием модели плоских реакционных ячеек представлена в главе 2 (п. 2.2).

В модели учитывается диффузия через образующийся слой продукта и учитывается зависимость коэффициента диффузии от температуры. В размерных переменных – это задача (2.1)–(2.5), в безразмерных переменных – (2.6)–(2.8). Методика решения описана в п. 2.4. Численное моделирование проводилось в следующем диапазоне изменения параметров задачи: $0.10 \leq \gamma \leq 0.20$, $0.505 \leq c_1 \leq 0.55$, $c_2 = 1 - c_1$, $\beta = 0.05$. Результаты расчетов приведены на рисунках 3.14 – 3.22.

На рисунках 3.14 – 3.16 приведены зависимости скорости фронта горения U от координаты ξ при различных значениях параметра γ .

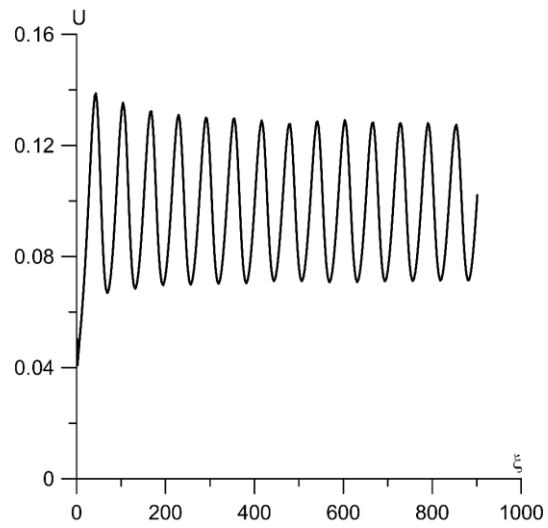


Рис. 3.14. Зависимости скорости горения U от координаты ξ при $\gamma = 0.12$, $c_1 = 0.525$

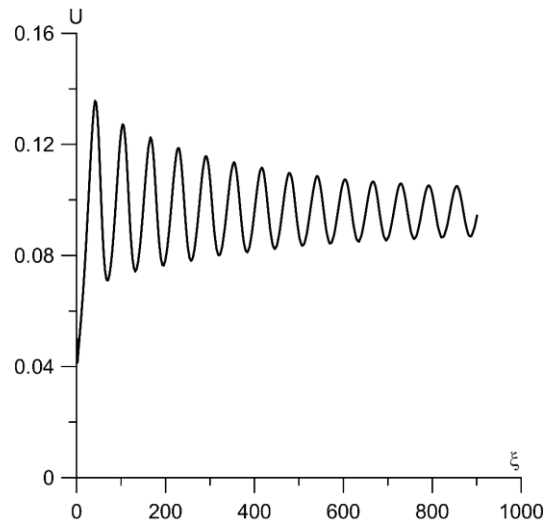


Рис. 3.15. Зависимости скорости горения U от координаты ξ при $\gamma = 0.121$, $c_1 = 0.525$

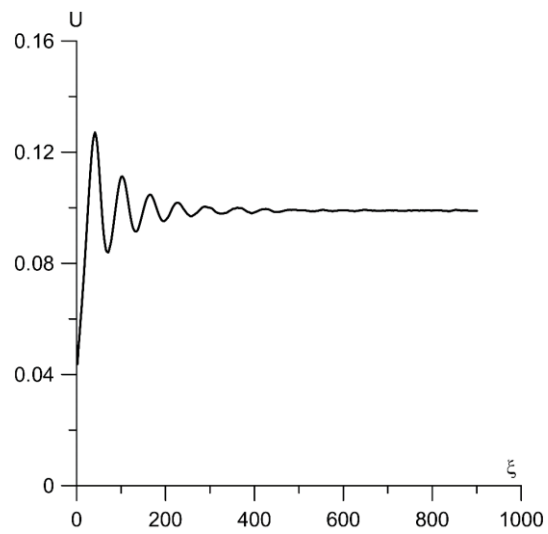


Рис. 3.16. Зависимости скорости горения U от координаты ξ при $\gamma = 0.125$, $c_1 = 0.525$

Расчёты показали, что при определенном критическом значении параметра γ происходит переход от колебательного режима к стационарному режиму. Из графиков видно, что при $\gamma = 0.121$ наблюдается ещё колебательный режим, при $\gamma = 0.125$ уже стационарный режим. Критическое значение параметра γ было определено [35, 80, 81] и равно: $\gamma_* = 0.122$. При $\gamma < \gamma_*$ наблюдается колебательный режим горения (рис. 3.14, 3.15), а при $\gamma > \gamma_*$ – стационарный (рис. 3.16).

На рисунках 3.14-3.16 приведены графики скорости волны безгазового горения, полученные при $c_1 = 0.525$. При других значениях параметра c_1 из указанного диапазона получаем такое же критическое значение параметра $\gamma_* = 0.122$. На рисунке 3.17 представлены графики скорости волны безгазового горения, полученных при $c_1 = 0.51$. Полученное критическое значение γ_* , при котором возникает колебательный режим распространения волны безгазового горения хорошо согласуется с аппроксимацией границы автоколебательного режима безгазового горения [35, 80, 81]: $9.1\gamma - 2.5\beta = 1$.

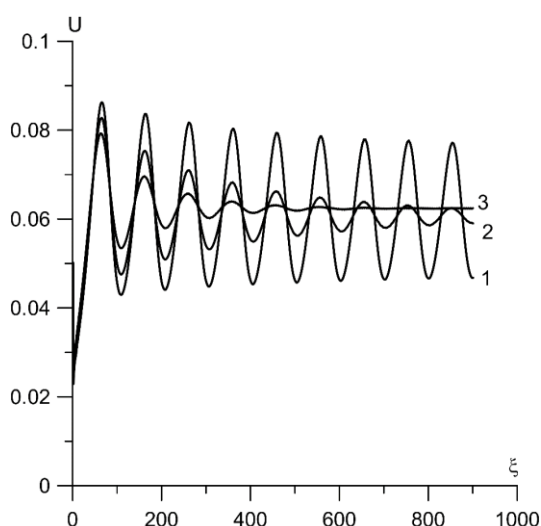


Рис. 3.17. Зависимости скорости горения U от координаты ξ при различных значениях γ : 1 - $\gamma = 0.12$, 2 - $\gamma = 0.121$, 3 - $\gamma = 0.125$; $c_1 = 0.51$

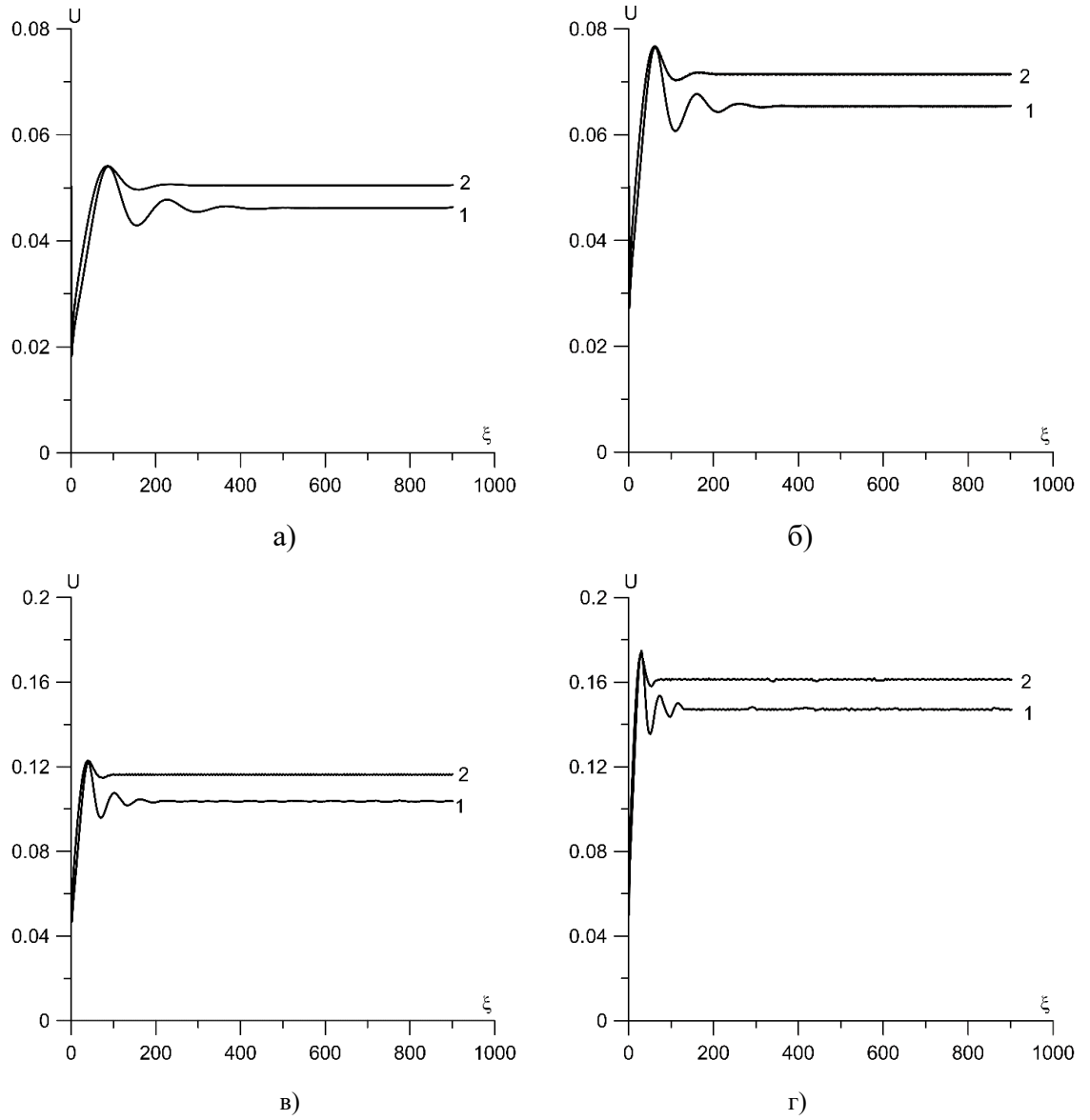


Рис. 3.18. Зависимости скорости горения U от координаты ξ при различных значениях γ : 1 - $\gamma = 0.13$, 2 - $\gamma = 0.14$; а) $c_1 = 0.505$, б) $c_1 = 0.51$, в) $c_1 = 0.525$, г) $c_1 = 0.55$

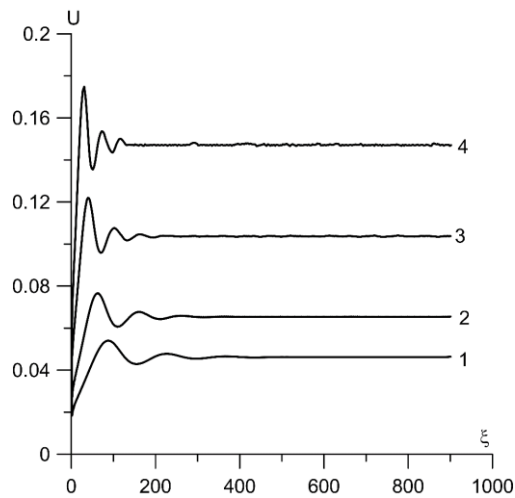


Рис. 3.19. Зависимости скорости горения U от координаты ξ при $\gamma = 0.13$:
1 - $c_1 = 0.505$, 2 - $c_1 = 0.51$, 3 - $c_1 = 0.525$, 4 - $c_1 = 0.55$

На рисунках 3.18, 3.19 показаны графики скоростей стационарного режима при различных параметрах c_1 в диапазоне $0.505 \leq c_1 \leq 0.55$. Видно, что с увеличением значения c_1 значение скорости увеличивается при соответствующих γ .

На рисунках 3.20, 3.21 представлены поля температуры. Из рисунка 3.20 видно, что в распределениях температуры по длине образца присутствуют периодические всплески, а на рисунке 3.21 всплески отсутствуют.

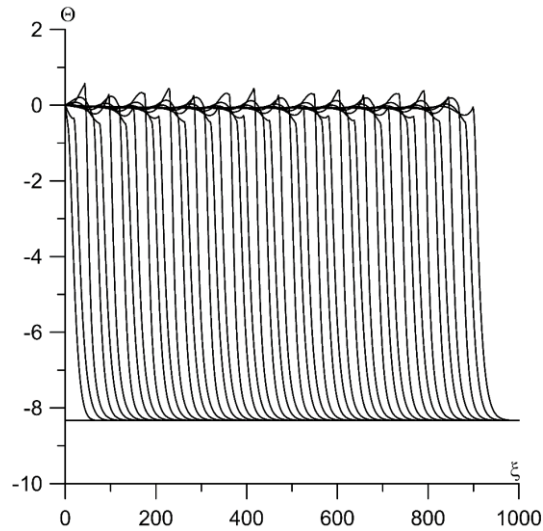


Рис. 3.20. Распределения температуры по координате ξ в последовательные моменты времени при $\gamma = 0.12$, $c_1 = 0.525$

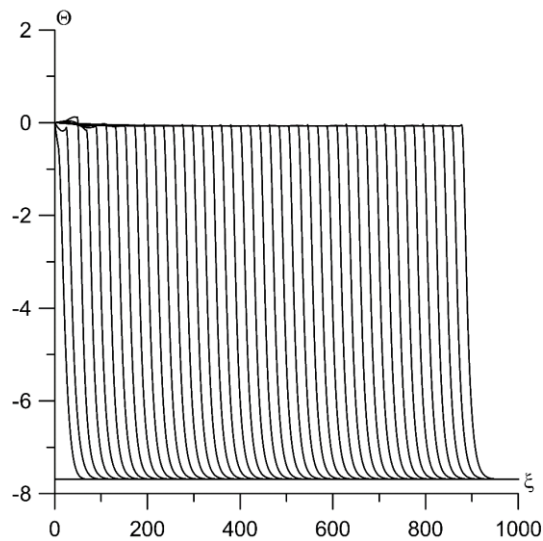


Рис. 3.21. Распределения температуры по координате ξ в последовательные моменты времени при $\gamma = 0.13$, $c_1 = 0.525$

Как видно из рисунка 3.18 скорость горения при различных значениях параметра c_1 увеличивается с увеличением параметра γ . На рисунке 3.22 представлены зависимости скорости распространения волны безгазового горения от параметра γ , выбранного из области устойчивого распространения фронта горения.

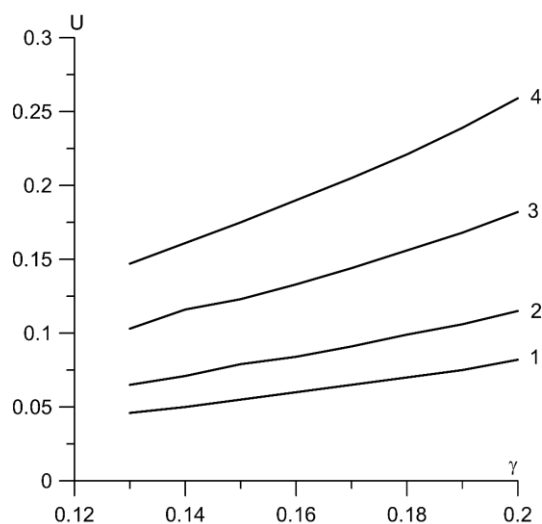


Рис. 3.22. Зависимости скорости горения U от γ при различных значениях c_1 :

1 – $c_1 = 0.505$, 2 – $c_1 = 0.51$, 3 – $c_1 = 0.525$, 4 – $c_1 = 0.55$

Из графика видно, что с увеличением параметра γ скорость фронта горения увеличивается. Чем выше значение параметра c_1 , тем выше значения скорости.

3.3 Численное моделирование распространения волны безгазового горения с использованием модели сферических реакционных ячеек

Математическая постановка задачи с использованием модели сферических реакционных ячеек представлена в главе 2 (п. 2.3). В размерных переменных – это задача (2.9)–(2.14), в безразмерных переменных – (2.15)–(2.19). Методика решения описана в п. 2.4. Численное моделирование проводилось в следующем диапазоне изменения параметров задачи: $0.10 \leq \gamma \leq 0.20$, $0.505 \leq c_1 \leq 0.55$, $c_2 = 1 - c_1$, $\beta = 0.05$. Зависимости скорости фронта горения U от координаты ξ при различных значениях параметра γ приведены на рисунках 3.23 – 3.25.

Численные расчёты при указанных значениях параметра γ проводились с целью определения критического значения параметра γ , при котором происходит переход от колебательного режима распространения фронта горения в стационарный режим.

Как видно из графиков, при значении $\gamma = 0.125$ наблюдается стационарный режим распространения фронта горения. Критическое значение параметра γ из [35, 80, 81] равно: $\gamma_* = 0.122$. При $\gamma < \gamma_*$ наблюдается колебательный режим горения (рис. 3.23, 3.24), а при $\gamma > \gamma_*$ – стационарный (рис. 3.25).

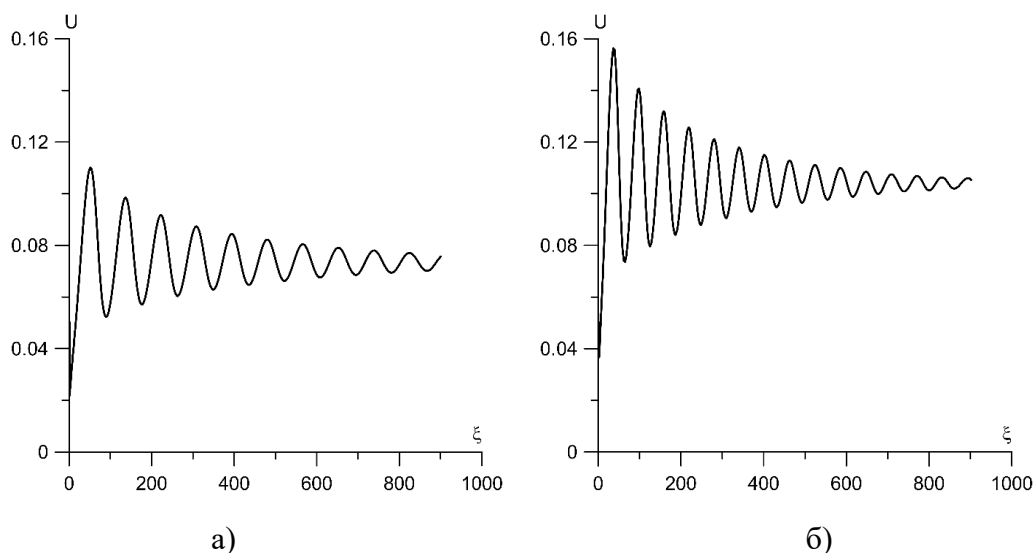


Рис. 3.23. Зависимости скорости горения U от координаты ξ при $\gamma = 0.12$ и различных значениях c_1 : а) $c_1 = 0.505$, б) $c_1 = 0.51$

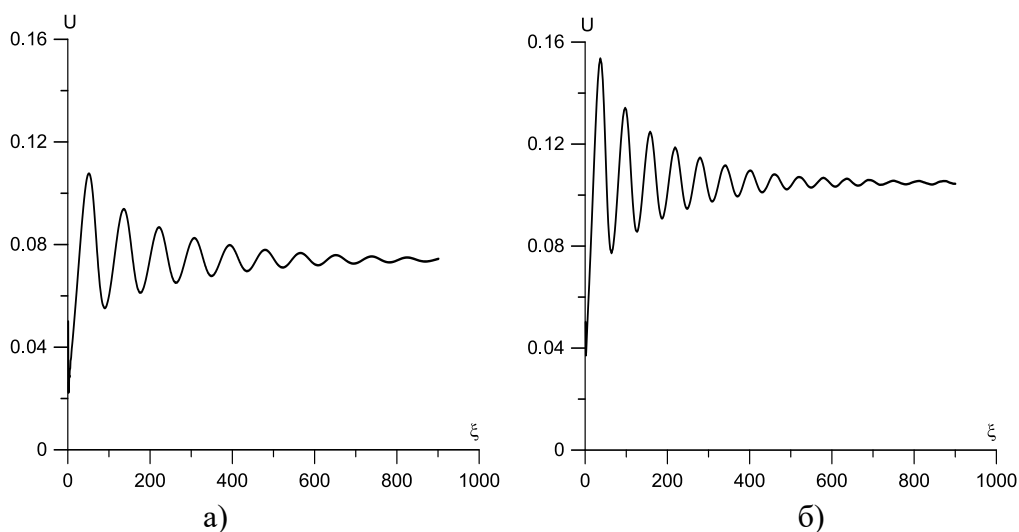


Рис. 3.24. Зависимости скорости U от координаты ξ при $\gamma = 0.121$ и различных значениях

c_1 : а) $c_1 = 0.505$, б) $c_1 = 0.51$

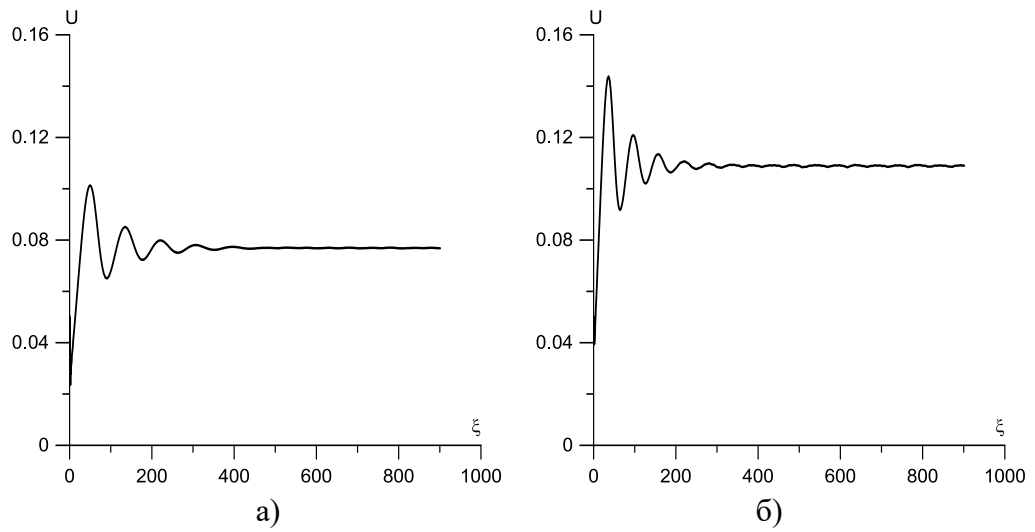


Рис. 3.25. Зависимости скорости горения U от координаты ξ при $\gamma = 0.125$ и различных значениях c_1 : а) $c_1 = 0.505$, б) $c_1 = 0.51$

О том, как меняется скорость при увеличении параметра γ и переходит в колебательный режим, можно судить по графику, представленному на рисунке 3.26.

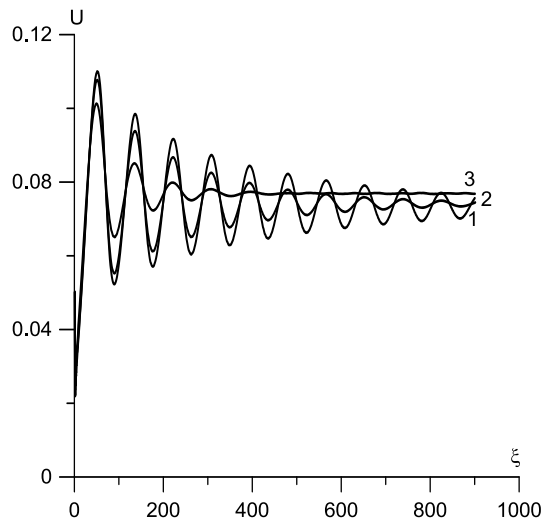


Рис. 3.26. Зависимости скорости горения U от координаты ξ при различных значениях γ : 1 - $\gamma = 0.12$, 2 - $\gamma = 0.121$, 3 - $\gamma = 0.125$; $c_1 = 0.505$

На рисунках 3.27 показаны графики скоростей стационарного режима при различных параметрах c_1 указанного диапазона. Видно, что с увеличением значения c_1 значение скорости увеличивается при соответствующих γ .

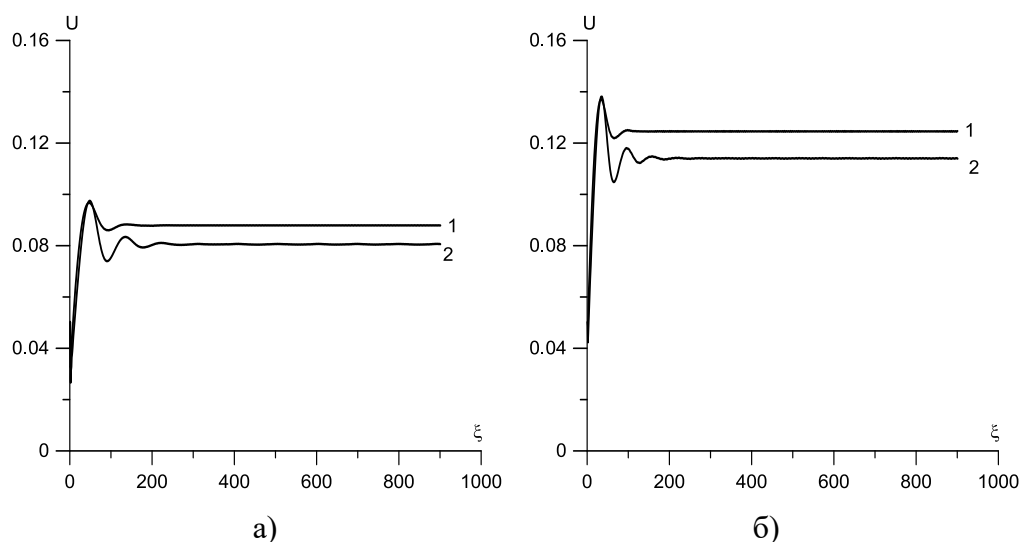


Рис. 3.27. Зависимости скорости горения U от координаты ξ при различных значениях γ : 1 - $\gamma = 0.13$, 2 - $\gamma = 0.14$; а) $c_1 = 0.505$, б) $c_1 = 0.51$

На рисунке 3.28 показаны графики скоростей при фиксированном значении параметра γ из диапазона стационарного режима распространения фронта горения, из которого также видно, что с увеличением параметра c_1 скорость горения возрастает.

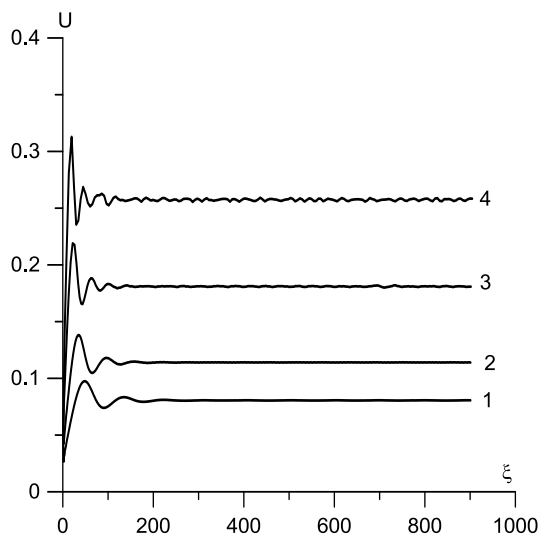


Рис. 3.28. Зависимости скорости горения U от координаты ξ при $\gamma = 0.13$:
1 - $c_1 = 0.505$, 2 - $c_1 = 0.51$, 3 - $c_1 = 0.525$, 4 - $c_1 = 0.55$

На рисунках 3.29, 3.30 представлены распределения температуры по координате в последовательные моменты времени. Из рисунка 3.29 видно, что в распределениях температуры по длине образца присутствуют периодические всплески, а на рисунке 3.30 всплески отсутствуют. При указанных значениях

параметра γ в первом случае наблюдается колебательный режим, а во втором – стационарный режим.

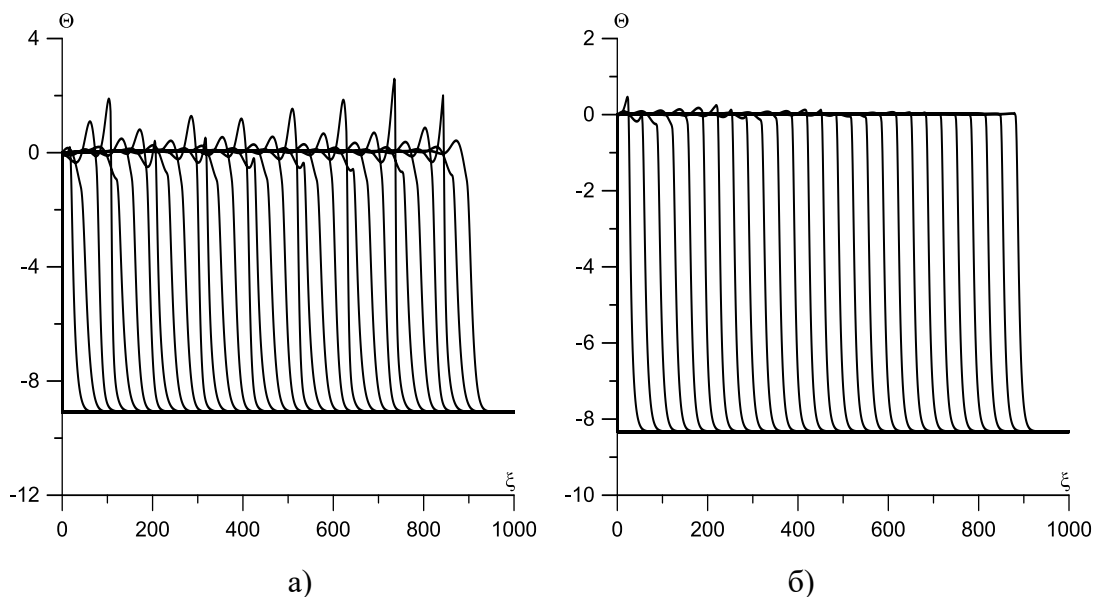


Рис. 3.29. Распределения температуры по координате ξ в последовательные моменты времени при $c_1 = 0.525$ и значениях γ : а) $\gamma = 0.11$, б) $\gamma = 0.12$

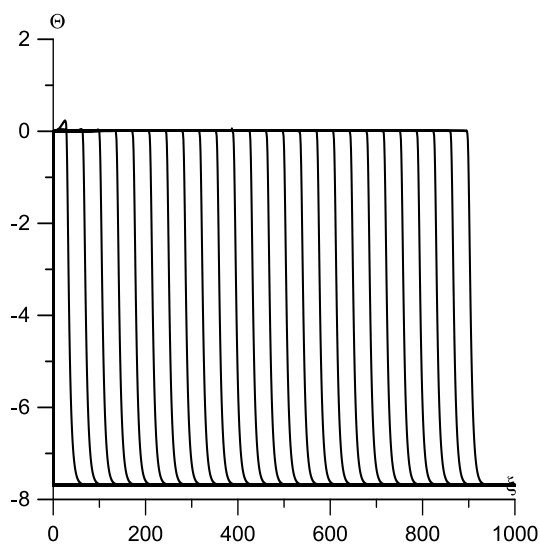


Рис. 3.30. Распределения температуры по координате ξ в последовательные моменты времени при $\gamma = 0.13$, $c_1 = 0.525$

На рисунке 3.31 представлены зависимости скорости распространения волны безгазового горения от параметра γ , выбранного из области устойчивого распространения фронта горения.

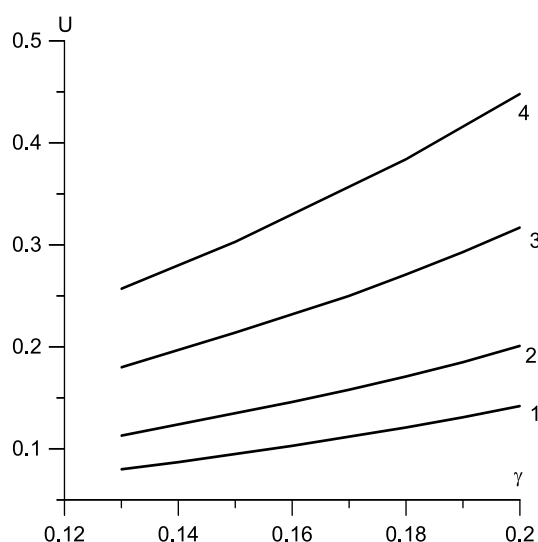


Рис. 3.31. Зависимости скорости горения U от γ при различных значениях c_1 :

$$1 - c_1 = 0.505, 2 - c_1 = 0.51, 3 - c_1 = 0.525, 4 - c_1 = 0.55$$

Из графика видно, что с увеличением параметра γ скорость фронта горения увеличивается. Чем выше значение параметра c_1 , тем выше значения скорости.

3.4 Сравнение результатов моделирования распространения волны безгазового горения с использованием модели плоских и сферических реакционных ячеек

Было проведено сравнение результатов численного моделирования распространения волны безгазового горения с учетом гетерогенной структуры с использованием модели плоских и сферических реакционных ячеек.

На рисунке 3.32 представлены зависимости скорости горения от координаты для двух моделей реакционных ячеек. Из рисунка видно, что скорости волны безгазового горения для сферических реакционных ячеек и ячеек в виде плоского слоя отличаются примерно в 1.7 раза. При этом скорость фронта горения для сферических реакционных ячеек больше. Такое отличие скоростей сохраняется при всех значениях параметра c_1 из указанного диапазона.

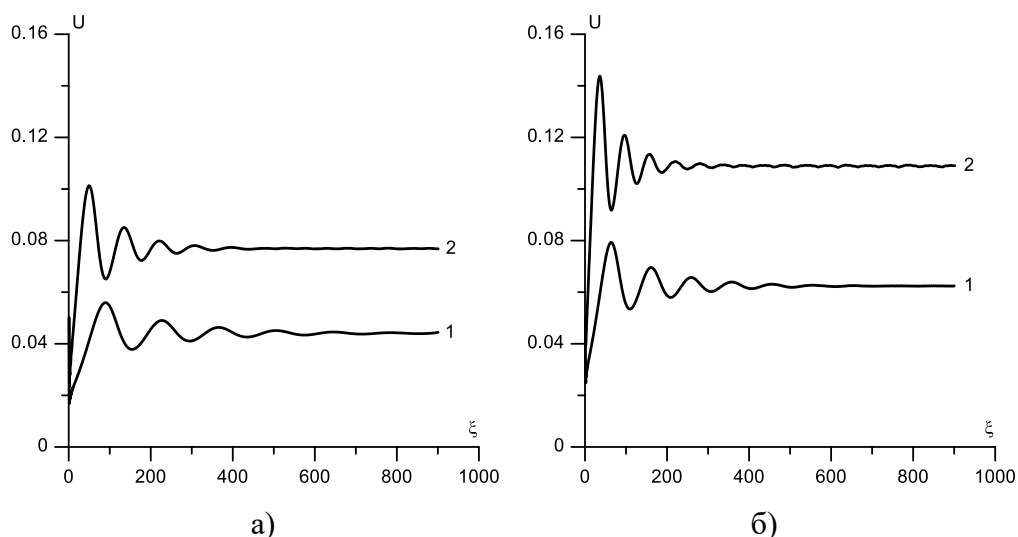
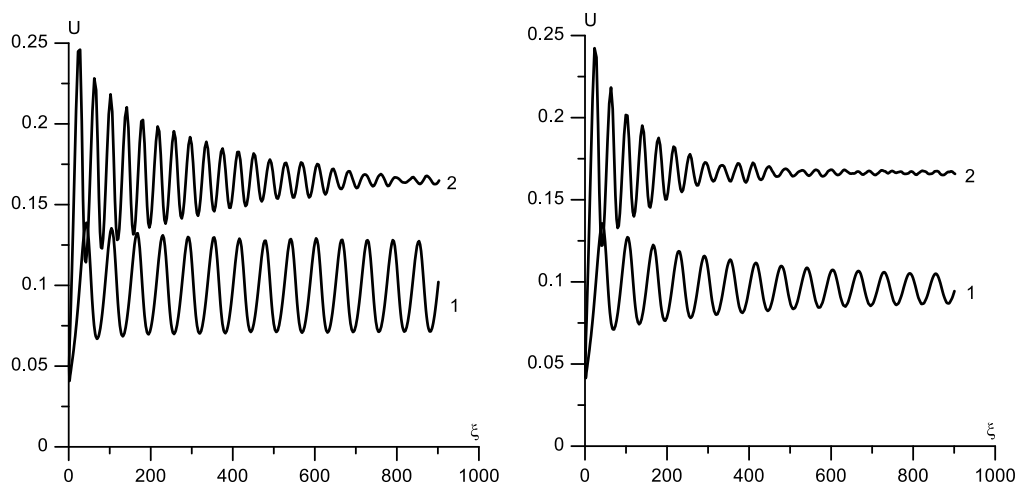


Рис. 3.32. Зависимости скорости горения U от координаты ξ при $\gamma = 0.125$ и различных значениях c_1 : а) $c_1 = 0.505$, б) $c_1 = 0.51$ (1 – плоские реакционные ячейки, 2 – сферические реакционные ячейки)

Критическое значение параметра γ_* , при котором происходит переход от колебательного режима в стационарный режим распространения фронта горения, и для сферических реакционных ячеек, и для плоских реакционных ячеек данный параметр совпадает и равен $\gamma_* = 0.122$. На рисунках 3.17 и 3.26 показаны графики скоростей при различных параметрах γ , из которых виден переход от одного режима к другому. На рисунке 3.33 показаны графики скоростей для плоских и сферических реакционных ячеек в колебательном режиме (рис. 3.33 а, 3.33 б) и в стационарном режиме (рис. 3.33 в). Полученное критическое значение γ_* хорошо согласуется с аппроксимацией границы автоколебательного режима безгазового горения: $9.1\gamma - 2.5\beta = 1$.



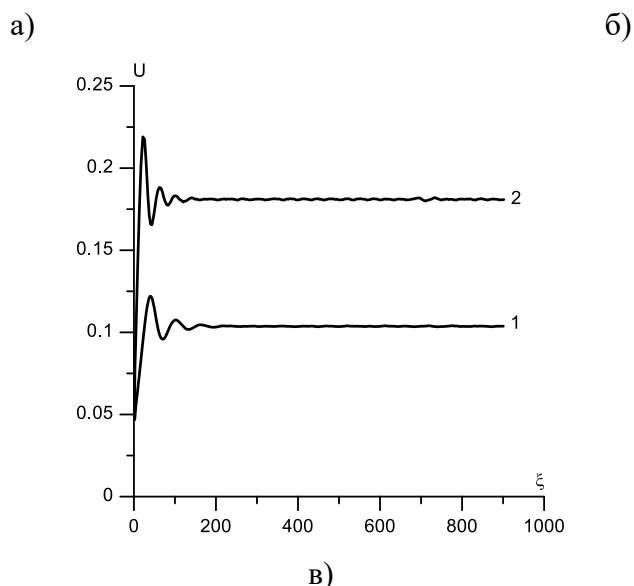


Рис. 3.33. Зависимости скорости горения U от координаты ξ при различных значениях γ : а) $\gamma = 0.12$, б) $\gamma = 0.121$, г) $\gamma = 0.125$; $c_1 = 0.51$ (1 – плоские реакционные ячейки, 2 – сферические реакционные ячейки).

На рисунках 3.22 , 3.31 представлены зависимости скорости фронта горения от параметра γ , выбранного из области устойчивого распространения фронта горения, рассчитанные при использовании модели плоских реакционных ячеек (рис. 3.22) и сферических реакционных ячеек (рис. 3.31). Видно, что в обоих случаях скорость волны увеличивается с увеличением параметров γ и c_1 .

3.5 Численное моделирование распространения волны безгазового горения с использованием модели сферических реакционных ячеек с учетом плавления одного из компонентов смеси

В моделях (2.1)-(2.6) и (2.9)-(2.14) не учитывается плавление реагентов в волне безгазового горения. Учет плавления одного из реагентов СВС состава следуя подходу, изложенному в [96, 109-111], где теплота фазового перехода (плавления) учитывается через зависимость удельной теплоемкости от температуры введением дельта-функции. При этом для сохранения неизменной адиабатической температуры горения потери тепла на плавление, определяемые теплотой фазового перехода, компенсируются соответствующим

изменением теплового эффекта реакции. В соответствии с [109-111] система уравнений (2.9)-(2.14) (для сферических реакционных ячеек) с учетом плавления одного из реагентов в безразмерной форме запишется в виде:

$$(1 + Ph \cdot \delta(\theta - \theta_L)) \frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} + \frac{\partial \bar{V}}{\partial \tau} \left(\frac{1}{\gamma} + Ph \right), \quad (3.1)$$

$$\theta(\xi, 0) = -\frac{1}{\gamma} + Ph, \quad \theta(0, \tau) = 0, \quad \frac{\partial \theta(\infty, \tau)}{\partial \xi} = 0.$$

Уравнение (3.1) дополняется уравнениями, описывающими процессы в реакционных ячейках (2.16)-(2.19). Для удобства приведем их здесь:

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} = \frac{1}{1/\gamma + Ph} \cdot e^{\frac{\theta}{1+\beta\theta}} \frac{1}{\eta^2} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta^2 \frac{\partial c}{\partial \eta} \right), \quad (3.2)$$

$$c(\eta_1(\tau), \tau) = c_1, \quad c(\eta_2(\tau), \tau) = c_2, \quad c(\eta, 0) = c_2, \quad \eta_1(0) \leq \eta \leq \eta_2(0), \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial \bar{V}}{\partial \tau} = \eta_2^2 \frac{\partial \eta}{\partial \tau} - \eta_1^2 \frac{\partial \eta}{\partial \tau} = \eta_2^2 |U_2| + \eta_1^2 |U_1|, \quad (3.4)$$

$$\frac{1}{1/\gamma + Ph} e^{\frac{\theta}{1+\beta\theta}} \frac{\partial c}{\partial \eta} \bigg|_{\eta_1(\tau)} = c_1 U_1, \quad -\frac{1}{1/\gamma + Ph} e^{\frac{\theta}{1+\beta\theta}} \frac{\partial c}{\partial \eta} \bigg|_{\eta_2(\tau)} = (1 - c_2) U_2. \quad (3.5)$$

В задаче (3.1) – (3.5) введены безразмерные параметры: $\gamma = \frac{c_k \rho}{q} \frac{RT_a^2}{E_d}$, $\beta = \frac{RT_a}{E_d}$

и $Ph = \frac{Q_L}{q\gamma}$ - характеризует относительную теплоту плавления. Обозначения: Q_L - теплота плавления, θ_L - безразмерная температура плавления, $\delta(\theta - \theta_L)$ - дельта-функция. Задача решалась численно методом, изложенным в главе 2. Дельта-функция была аппроксимирована П-образной функцией, нормированной на температурный интервал 0.5. На рисунках 3.34, 3.35 показаны графики скоростей из области нестационарного распространения фронта горения при различных параметрах Ph , c_1 и значении $\theta_L = -4.5$. Из рисунков видно, что с увеличением параметра Ph амплитуда автоколебаний увеличивается.

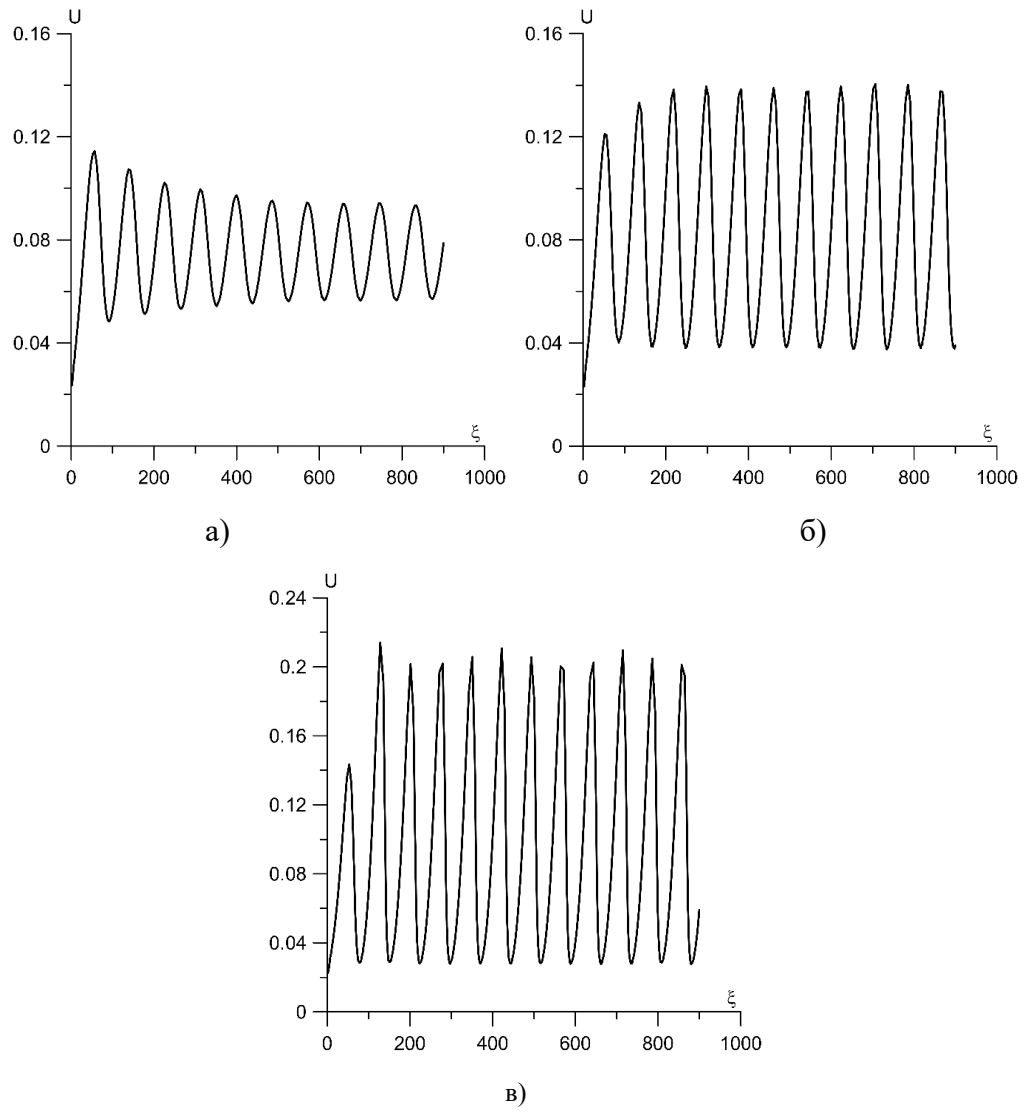
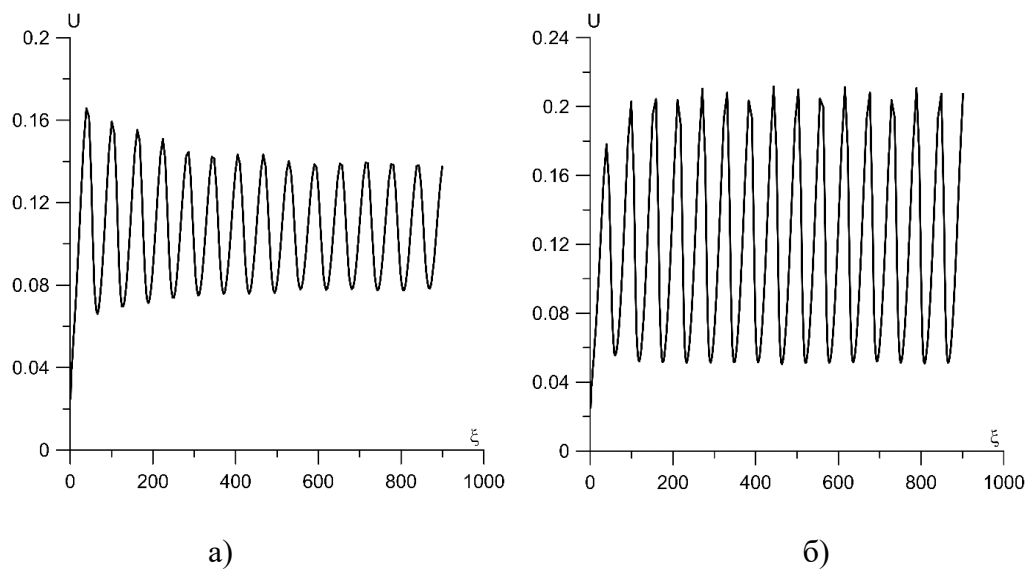
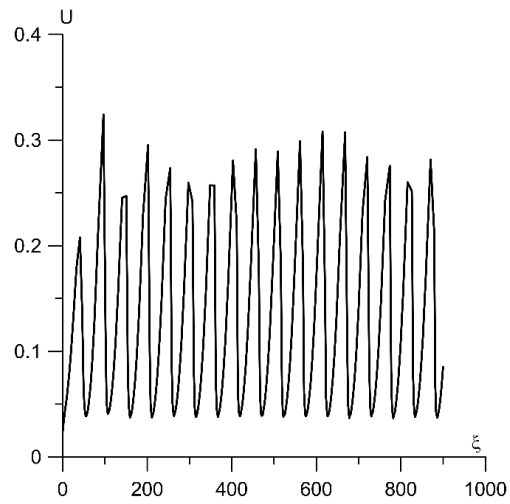


Рис.3.34. Зависимости скорости горения U от координаты ξ при $\gamma = 0.119$, $c_1 = 0.505$:

а) $Ph = 0$, б) $Ph = 0.4$, в) $Ph = 1$





в)

Рис. 3.35. Зависимости скорости горения U от координаты ξ при $\gamma = 0.119$, $c_1 = 0.51$:

а) $Ph = 0$, б) $Ph = 0.4$, в) $Ph = 1$

Таблица 3.2. Величина стационарной скорости распространения волны безгазового горения с учётом плавления при различных значениях параметров γ , c_1 , Ph .

γ	Ph	c_1	U
0.13	0	0.505	0.082
		0.51	0.117
		0.525	0.193
	0.4	0.505	0.079
		0.51	0.114
		0.525	0.181
	1	0.505	0.074
		0.51	0.112
		0.525	0.178
0.14	0	0.505	0.088
		0.51	0.126
		0.525	0.202

	0.4	0.505	0.085
		0.51	0.121
		0.525	0.196
	1	0.505	0.081
		0.51	0.112
		0.525	0.190

В таблице 3.2 приведены значения скоростей из области стационарного горения при различных значениях параметров задачи γ , c_1 , Ph . Из таблицы видно, что с увеличением параметра Ph скорость горения незначительно уменьшается (при соответствующих значениях параметра c_1).

3.6 Сравнение теоретических результатов с экспериментальными данными

Скорость распространения волны безгазового горения зависит от размера реакционной ячейки r_0 (или L). Размерное значение скорости определяется в виде: $u = U \cdot u_*$, где $u_* = x_*/t_*$. Из определения масштабов x_* , t_* следует, что u_* пропорциональна $1/r_0$ (или $1/L$). Следовательно, размерное значение величины скорости волны безгазового горения u пропорциональна величине $1/r_0$ (или $1/L$). Чем меньше размер реакционной ячейки, тем выше скорость волны безгазового горения. Этот результат качественно согласуется с результатами экспериментальных исследований зависимости скорости горения от размера частиц СВС состава [35].

Разработанная модель позволяет определить зависимость скорости горения от характерного размера гетерогенной структуры исходного состава СВС. Размер гетерогенной структуры явным образом не присутствует в параметрах

задачи (6)-(9). Масштаб скорости $u_* = x_*/t_* = \frac{1}{L} \sqrt{\frac{\lambda q E_d D_0 e^{-E_d/RT_a}}{c_k^2 \rho^2 R T_a^2}} = \frac{F}{L}$, где введено

обозначение $F = \sqrt{\frac{\lambda q E_d D_0 e^{-E_d/RT_a}}{c_k^2 \rho^2 R T_a^2}}$. Размерное значение величины скорости волны безгазового горения u пропорциональна величине $1/L$. Чем меньше размер реакционной ячейки, тем выше скорость волны безгазового горения. Этот результат качественно согласуется с результатами экспериментальных исследований зависимости скорости горения от размера частиц СВС состава.

Безразмерная скорость волны безгазового горения при $\gamma = 0.125$ имеет величину $U = u/u_* = 0.063$. В [112] представлены результаты экспериментов со смесью порошков никеля ПНК-1 (размер частиц менее 18 мкм – 90 %) и алюминия АСД-4 (размер частиц менее 16 мкм – 90 %), прессованных в образцы диаметром 10 мм и высотой до 18 мм. При механической активации этих порошков размер частиц чешуйчатой формы составил $5 \div 10$ мкм, а скорость горения прессованных из них образцов 5.5 см/с [112]. В соответствии с приведенными данными определим масштаб скорости u_* :

$$u_* = \frac{u}{U} = \frac{0.055}{0.063} = 0.873 \text{ м/с}.$$

Зависимость масштаба u_* от размера реакционной ячейки определим, если возьмем величину реакционной ячейки, связанную с размером частиц порошков после механической активации, $L_0 = 7 \cdot 10^{-6} \text{ м}$ (7 мкм). Тогда в силу того, что $u_* = F/L_0$ масштаб скорости при другом значении $L = L_1$ определится по формуле:

$$u_{*,1} = \frac{F}{L_1} = \frac{F}{L_0} \frac{L_0}{L_1} = u_* \frac{L_0}{L_1}.$$

В [4] приведены экспериментальные результаты измерений скорости горения многослойных биметаллических нанопленок. В частности, многослойная нанопленка Ni-Al при толщине двойного слоя 30 нанометров горит со скоростью 10 м/с [4]. Определим зависимость масштаба скорости u_* от толщины плоской реакционной ячейки. Примем, что частицы чешуйчатой формы аналогичны реакционным ячейкам плоской формы. Воспользуемся данными о скорости горения прессованных образцов из частиц чешуйчатой

формы 5.5 см/с при толщине частиц $5 \div 10$ мкм [112]. Тогда зависимость масштаба скорости от толщины плоской реакционной ячейки L_1 при $L_0 = 7$ мкм определится формулой:

$$u_{*,1} = \frac{0.873 \cdot L_0}{L_1} = \frac{0.873 \cdot 7 \cdot 10^{-6}}{L_1} = 6.11 \cdot 10^{-6} \frac{1}{L_1} \text{ м/с}, \quad (3.6)$$

а скорость определится через полученный масштаб скорости в виде:

$$u = U u_{*,1}. \quad (3.7)$$

Выбираем в качестве размера гетерогенной структуры нанопленки толщину ее двойного слоя, $L_1 = 30$ нм. По формуле (3.6) определяем масштаб скорости $u_{*,1}(L_1) = 203,7$ м/с и по (3.7) теоретическую скорость горения многослойной нанопленки Ni-Al, $u = U u_{*,1} = 12.8$ м/с. Получено хорошее соответствие расчетно-теоретических данных с экспериментальными [4], отличие составляет 28 %.

Также было проведено сравнение скоростей горения u от периода многослойной структуры. Результаты представлены на рисунке 3.36. На рисунке 3.36 кривая 1 соответствует случаю горения многослойной наноплёнки Ni-Al сразу после получения, без термической обработки (кривая взята из обзора [113]). Расчетные величины скорости горения, представленные на рис. 3.36 получены из расчета по формуле (3.7) с использованием масштаба (3.6).

Видно, что расчетные значения скорости распространения волны горения несколько превышают экспериментальные данные. Известно, что на скорость горения существенно влияет теплоотвод в окружающую среду, не учитываемый в представленной модели.

Расчетно-теоретические значения скорости распространения волны безгазового горения с удовлетворительной точностью совпадают с экспериментальными данными в широком диапазоне величин размера гетерогенной структуры СВС состава при выборе масштаба скорости исходя из экспериментальных данных для фиксированного размера гетерогенной структуры.

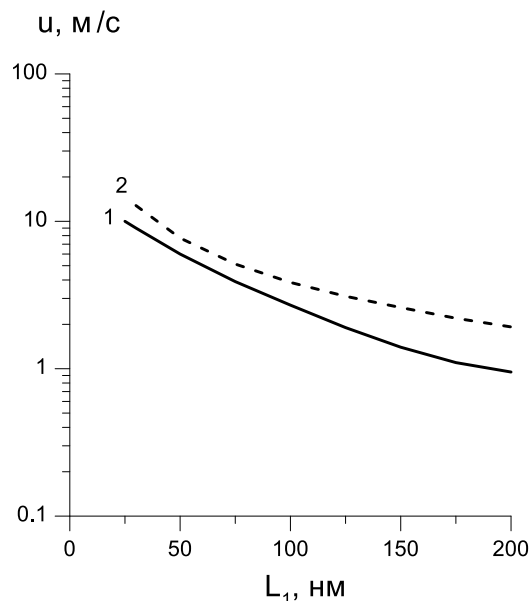


Рис. 3.36. Зависимость скорости горения u от периода многослойной структуры. 1 – экспериментальная кривая, 2 – расчетно-теоретическая

Выводы по главе 3

1. Проведено исследование распространения волны безгазового горения на основе математической модели без учета влияния образовавшегося слоя продукта на диффузию. Получены зависимости скорости распространения фронта безгазового горения от размера гетерогенности структуры R_0 , интенсивности диффузии Le , энергии активации диффузии E_D , качественно согласующиеся с экспериментальными данными: при увеличении R_0 скорость горения уменьшается; с увеличением Le скорость горения увеличивается; при больших энергиях активации диффузии фронт безгазового горения распространяется в пульсирующем режиме при γ и β взятых из области устойчивости. Определена граница существования устойчивого и пульсирующего режимов распространения фронта безгазового горения в поле параметров «отношение энергий активации диффузии и химической реакции» - «размер гетерогенной структуры» ($E_D - R_0$) при фиксированном значении параметров γ и β , взятых из области устойчивости распространения фронта безгазового горения.

2. Проведенные численные исследования распространения волны безгазового горения показали, что величина скорости распространения зависит от формы реакционных ячеек. Для сферических реакционных ячеек скорость выше, чем для плоских ячеек примерно в 1.7 раза. Причиной этого является большая реакционная поверхность на единицу массы вещества у сферических ячеек, чем у плоских.

3. Плавление одного из реагентов незначительно уменьшает скорость распространения волны безгазового горения.

4. Получено качественное согласие теоретической скорости распространения безгазового горения от масштаба гетерогенности структуры СВС состава.

5. Расчетно-теоретические значения размерной скорости распространения волны безгазового горения с хорошей точностью совпадают с экспериментальными данными в широком диапазоне величин размера гетерогенной структуры СВС состава при выборе масштаба скорости исходя из данных о скорости волны безгазового горения для фиксированного размера гетерогенной структуры.

4. ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ВОЛНЫ БЕЗГАЗОВОГО ГОРЕНИЯ В КОНИЧЕСКОМ ОБРАЗЦЕ

В данной главе проведено численное исследование распространения волны горения в коническом образце СВС состава при наличии теплоотвода на внешних границах в двухмерной осесимметричной постановке. Приводится физическая и математическая постановка задачи в размерных и безразмерных переменных. Для численного решения задачи используется переход к системе координат, связанной с формой образца. Проведено исследование влияния теплоотдачи на закономерности распространения волны безгазового горения в коническом образце без учёта и с учётом гетерогенности его структуры. Численные расчёты с учётом гетерогенности структуры образца проведены с использованием модели сферической реакционной ячейки. Проведен анализ влияния плавления одного из компонентов реакционной смеси на закономерности распространения волны безгазового горения в коническом образце с учётом гетерогенности его структуры.

4.1 Физическая и математическая постановка задачи

Для анализа структуры фронта безгазового горения СВС составов проводятся экспериментальные исследования на установках, принципиальная схема которой представлена на рисунке 4.1. Приготовленную смесь порошков, способную к реакции в режиме безгазового горения, запрессовывают в цилиндро-конической пресс-форме (2 на рис. 4.1), и коническую часть закладывают в коническую проточку в медной массивной подложке (1 на рис. 4.1). В цилиндро-коническом образце внешний радиус конической части $R_k(y)$, и высота конической части L . При инициировании реакции безгазового горения по запрессованному образцу распространяется фронт горения, затормаживаемый за счёт теплоотдачи в массивную медную подложку. После остывания образца проводят анализ структуры волны горения.

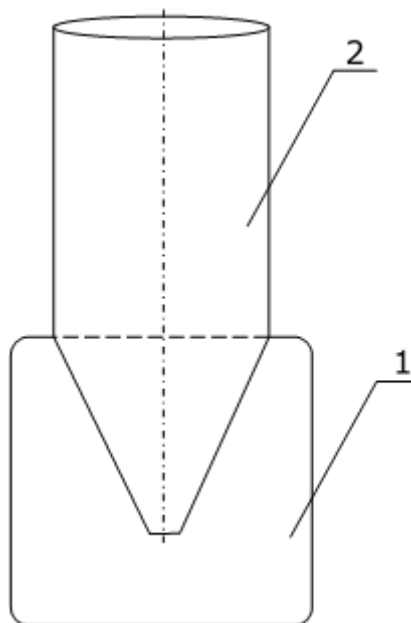


Рис. 4.1. Экспериментальная установка:
1 – медная подложка, 2 – смесь порошков

В работе [114] приведено численное моделирование процесса горения конического образца при теплоотводе в квазиодномерной постановке задачи. В данной главе проводится моделирование срыва горения в коническом образце в двухмерной осесимметричной постановке. Математическое моделирование этого процесса необходимо, так как оно может показать степень изменения глубины превращения исходных компонентов после затормаживания фронта горения в процессе его остывания.

Моделирование горения конического СВС образца проводится на основе модели горения безгазовых систем [35, 104]. Математическая постановка задачи в размерных переменных и параметрах записывается следующим образом:

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right] + Qk_0 b \exp \left(-\frac{E}{RT} \right), \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial b}{\partial t} = -bk_0 \exp \left(-\frac{E}{RT} \right). \quad (4.2)$$

Начальные условия:

$$T(r, y, 0) = T_H, \quad b(r, y, 0) = b_H. \quad (4.3)$$

Граничные условия:

$$\begin{aligned}
T(r, 0, t) &= T_a, \quad t < t_f, \quad \frac{\partial T(r, 0, t)}{\partial y} = 0, \quad t \geq t_f, \\
\lambda \frac{\partial T(r, L, t)}{\partial y} &= -\alpha(T - T_H), \\
\frac{\partial T(0, y, t)}{\partial r} &= 0, \\
\lambda \frac{\partial T(R_K(y), y, t)}{\partial n} &= -\alpha(T(R_K(y), y, t) - T_H),
\end{aligned} \tag{4.4}$$

В математической постановке задачи (4.1) – (4.4) приняты обозначения:

c – удельная теплоемкость;

ρ – плотность;

T – температура;

t – время;

λ – коэффициент теплопроводности;

r, y – радиальная и осевая координаты цилиндрической системы координат;

b – концентрация реагента;

$R_K(y)$ – внешний радиус конической части образца;

L – высота конической части образца;

E – энергия активации;

Q – тепловой эффект реакции;

k_0 – предэкспоненциальный множитель;

T_a – адиабатическая температура горения;

R – универсальная газовая постоянная;

t_f – момент времени, когда граничное условие первого рода переключается на граничное условие, соответствующее адиабатической границе;

α – коэффициент теплоотдачи;

n – направление нормали к боковой поверхности конической части образца; индекс H – начальные условия.

В безразмерных переменных математическая задача (4.1) – (4.4) принимает

ВИД:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{1}{\bar{r}} \frac{\partial}{\partial \bar{r}} \left(\bar{r} \frac{\partial \theta}{\partial \bar{r}} \right) + \frac{\partial^2 \theta}{\partial \bar{y}^2} + a \exp \left(\frac{\theta}{1 + \beta \theta} \right), \quad (4.5)$$

$$\frac{\partial a}{\partial \tau} = -\gamma a \exp \left(\frac{\theta}{1 + \beta \theta} \right). \quad (4.6)$$

Начальные условия:

$$\theta(\bar{r}, \bar{y}, 0) = -1/\gamma, \quad a(\bar{r}, \bar{y}, 0) = 1. \quad (4.7)$$

Граничные условия:

$$\begin{aligned} \theta(\bar{r}, 0, \tau) &= 0, \quad \tau < \tau_f, \quad \frac{\partial \theta(\bar{r}, 0, \tau)}{\partial \bar{y}} = 0, \quad \tau \geq \tau_f, \\ \frac{\partial \theta(\bar{r}, \bar{L}, \tau)}{\partial \bar{y}} &= -Bi \left(\theta(\bar{r}, \bar{L}, \tau) + 1/\gamma \right), \\ \frac{\partial \theta(0, \bar{y}, \tau)}{\partial \bar{r}} &= 0, \\ \frac{\partial \theta(R_K(\bar{y}), \bar{y}, \tau)}{\partial n} &= -Bi \left(\theta(R_K(\bar{y}), \bar{y}, \tau) + 1/\gamma \right). \end{aligned} \quad (4.8)$$

При приведении задачи (4.1) – (4.4) к безразмерному виду были использованы традиционные для теории горения безразмерные переменные и параметры [104]:

$$\begin{aligned} \tau &= t/t_*, \quad \bar{r} = r/x_*, \quad \bar{y} = y/x_*, \quad \theta = \frac{E}{RT_a^2} (T - T_a), \quad a = b/b_H, \quad t_* = \frac{c\rho RT_a^2}{a_0 k_0 E} \exp \left(\frac{E}{RT_a} \right), \\ x_* &= \sqrt{\frac{\lambda}{c\rho}} t_*, \quad \beta = \frac{RT_a}{E}, \quad \gamma = \frac{RT_a^2}{E} \frac{c\rho}{a_0 Q}, \quad Bi = \frac{\alpha x_*}{\lambda}, \end{aligned}$$

где безразмерные переменные:

τ – время;

$\bar{r}, \bar{y}$ – радиальная и осевая координаты;

θ – температура;

a – концентрация реагента;

безразмерные параметры:

β – число Аррениуса;

γ – число Тодеса;

Bi – число Био;

Величины со звёздочкой – масштабные величины.

Для численного решения задачи (4.5) – (4.8) был осуществлен переход к системе координат, связанной с формой образца.

4.2 Преобразование координат для проведения численного решения задачи распространения волны безгазового горения в коническом образце

Для численного решения задачи (4.5) – (4.8) был произведен переход от системы координат $(\bar{y}, \bar{r})$ к системе с координатами (ξ, η) . При этом были введены следующие замены: $\xi = \bar{y}$, $\eta = \frac{\bar{r}}{z(\bar{y})}$, $z(\bar{y}) = A\bar{y} + B$, $A = \left(\frac{R_K(\bar{L})}{R_K(0)} - 1 \right) \cdot \frac{1}{\bar{L}}$, $B = 1$.

На рисунке 4.2 показаны размеры в конической области образца, которые используются при переходе к другой системе координат.

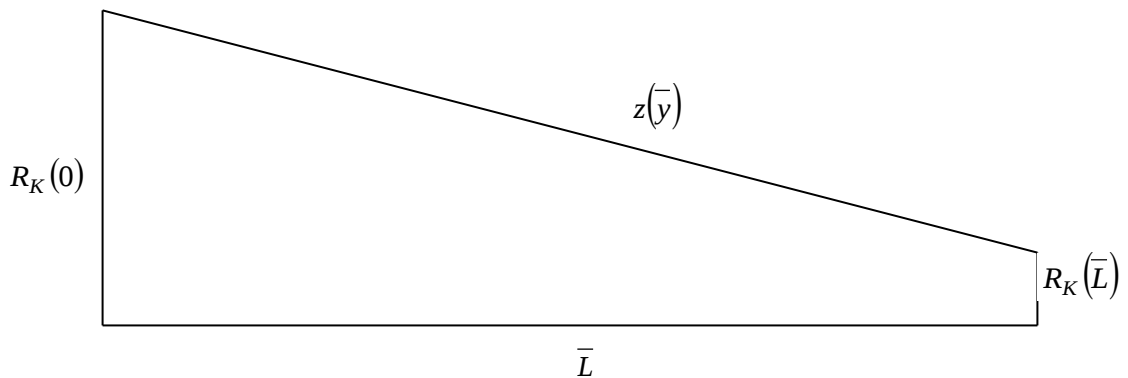


Рис. 4.2 Коническая часть СВС образца

На рисунке 4.2 введены следующие обозначения:

$\bar{L}$ – высота усеченного конуса;

$R_K(\bar{L})$ – радиус меньшего основания усеченного конуса;

$R_K(0)$ – радиус большего основания усеченного конуса.

Уравнение теплопроводности в безразмерных переменных (4.5) запишем в новых переменных. Для этого каждый член уравнения приведём к новой системе координат.

Член уравнения $\frac{\partial^2 \theta}{\partial \bar{y}^2}$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \theta}{\partial \bar{y}^2} &= \frac{\partial}{\partial \bar{y}} \left(\frac{\partial \theta}{\partial \bar{\xi}} \cdot \frac{\partial \bar{\xi}}{\partial \bar{y}} + \frac{\partial \theta}{\partial \bar{\eta}} \cdot \frac{\partial \bar{\eta}}{\partial \bar{y}} \right) = \\ &= \frac{\partial^2 \theta}{\partial \bar{\xi}^2} \left(\frac{\partial \bar{\xi}}{\partial \bar{y}} \right)^2 + 2 \frac{\partial^2 \theta}{\partial \bar{\xi} \partial \bar{\eta}} \cdot \frac{\partial \bar{\xi}}{\partial \bar{y}} \cdot \frac{\partial \bar{\eta}}{\partial \bar{y}} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial \bar{\eta}^2} \cdot \left(\frac{\partial \bar{\eta}}{\partial \bar{y}} \right)^2 + \frac{\partial \theta}{\partial \bar{\xi}} \cdot \frac{\partial^2 \bar{\xi}}{\partial \bar{y}^2} + \frac{\partial \theta}{\partial \bar{\eta}} \cdot \frac{\partial^2 \bar{\eta}}{\partial \bar{y}^2} \end{aligned}$$

Член уравнения $\frac{\partial}{\partial \bar{r}} \left(\bar{r} \frac{\partial \theta}{\partial \bar{r}} \right)$:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \bar{r}} = \frac{\partial \theta}{\partial \bar{\xi}} \cdot \frac{\partial \bar{\xi}}{\partial \bar{r}} + \frac{\partial \theta}{\partial \bar{\eta}} \cdot \frac{\partial \bar{\eta}}{\partial \bar{r}} = \frac{\partial \theta}{\partial \bar{\eta}} \cdot \frac{\partial \bar{\eta}}{\partial \bar{r}}, \text{ так как } \frac{\partial \bar{\xi}}{\partial \bar{r}} = 0.$$

$$\frac{\partial}{\partial \bar{r}} \left(\bar{r} \frac{\partial \theta}{\partial \bar{r}} \right) = \frac{\partial}{\partial \bar{r}} \left(\bar{r} \frac{\partial \theta}{\partial \bar{\eta}} \cdot \frac{\partial \bar{\eta}}{\partial \bar{r}} \right) = \frac{\partial \theta}{\partial \bar{\eta}} \cdot \frac{\partial \bar{\eta}}{\partial \bar{r}} + \bar{r} \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial \bar{\eta}^2} \cdot \left(\frac{\partial \bar{\eta}}{\partial \bar{r}} \right)^2 + \frac{\partial \theta}{\partial \bar{\eta}} \cdot \frac{\partial^2 \bar{\eta}}{\partial \bar{r}^2} \right).$$

Подставив полученные выражения в исходное уравнение (4.5), получим:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta}{\partial \tau} &= \frac{1}{\bar{r}} \left[\frac{\partial \theta}{\partial \bar{\eta}} \cdot \frac{\partial \bar{\eta}}{\partial \bar{r}} + \bar{r} \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial \bar{\eta}^2} \cdot \left(\frac{\partial \bar{\eta}}{\partial \bar{r}} \right)^2 + \frac{\partial \theta}{\partial \bar{\eta}} \cdot \frac{\partial^2 \bar{\eta}}{\partial \bar{r}^2} \right) \right] + \\ &+ \left[\frac{\partial^2 \theta}{\partial \bar{\xi}^2} \left(\frac{\partial \bar{\xi}}{\partial \bar{y}} \right)^2 + 2 \frac{\partial^2 \theta}{\partial \bar{\xi} \partial \bar{\eta}} \cdot \frac{\partial \bar{\xi}}{\partial \bar{y}} \cdot \frac{\partial \bar{\eta}}{\partial \bar{y}} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial \bar{\eta}^2} \cdot \left(\frac{\partial \bar{\eta}}{\partial \bar{y}} \right)^2 + \frac{\partial \theta}{\partial \bar{\xi}} \cdot \frac{\partial^2 \bar{\xi}}{\partial \bar{y}^2} + \frac{\partial \theta}{\partial \bar{\eta}} \cdot \frac{\partial^2 \bar{\eta}}{\partial \bar{y}^2} \right] + a \exp \left(\frac{\theta}{1 + \beta \theta} \right). \end{aligned} \quad (4.9)$$

Найдём выражения для производных $\frac{\partial \bar{\xi}}{\partial \bar{y}}, \frac{\partial^2 \bar{\xi}}{\partial \bar{y}^2}, \frac{\partial \bar{\eta}}{\partial \bar{y}}, \frac{\partial^2 \bar{\eta}}{\partial \bar{y}^2}, \frac{\partial \bar{\eta}}{\partial \bar{r}}, \frac{\partial^2 \bar{\eta}}{\partial \bar{r}^2}$. С учетом

связей $\bar{\xi} = \bar{y}$, $\bar{\eta} = \frac{\bar{r}}{z(\bar{y})}$, $z(\bar{y}) = A\bar{y} + B$ получим:

$$\frac{\partial \bar{\xi}}{\partial \bar{y}} = 1; \quad \frac{\partial^2 \bar{\xi}}{\partial \bar{y}^2} = 0,$$

$$\frac{\partial \bar{\eta}}{\partial \bar{y}} = -\frac{A\bar{r}}{(A\bar{y} + B)^2}; \quad \frac{\partial^2 \bar{\eta}}{\partial \bar{y}^2} = \frac{2A^2\bar{r}}{(A\bar{y} + B)^3}; \quad (4.10)$$

$$\frac{\partial \bar{\eta}}{\partial \bar{r}} = \frac{1}{A\bar{y} + B}; \quad \frac{\partial^2 \bar{\eta}}{\partial \bar{r}^2} = 0.$$

Подставив (4.10) в (4.9), получим:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial \bar{\eta}^2} \left(\frac{1}{A\bar{y} + B} \right)^2 + \frac{1}{\bar{r}} \frac{\partial \theta}{\partial \bar{\eta}} \left(\frac{1}{A\bar{y} + B} \right) + \frac{\partial^2 \theta}{\partial \bar{\xi}^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial \bar{\xi} \partial \bar{\eta}} \left(\frac{-2A\bar{r}}{(A\bar{y} + B)^2} \right) + \frac{\partial^2 \theta}{\partial \bar{\eta}^2} \left(\frac{A^2\bar{r}^2}{(A\bar{y} + B)^4} \right) +$$

$$+ \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \left(\frac{2A^2 \bar{r}}{(A\bar{y} + B)^3} \right) + a \exp \left(\frac{\theta}{1 + \beta \theta} \right). \quad (4.11)$$

Выражение $\frac{2A^2 \bar{r}}{(A\bar{y} + B)^3}$ умножается на $\frac{\bar{r}}{r}$ и полученное уравнение (4.11)

перепишется в следующем виде:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi \partial \eta} \left(\frac{-2A\bar{r}}{(A\bar{y} + B)^2} \right) + \frac{\partial^2 \theta}{\partial \eta^2} \left(\frac{1}{(A\bar{y} + B)^2} + \frac{A^2 \bar{r}^2}{(A\bar{y} + B)^4} \right) + \\ + \frac{1}{r} \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \left(\frac{1}{A\bar{y} + B} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \left(\frac{2A^2 \bar{r}^2}{(A\bar{y} + B)^3} \right) + a \exp \left(\frac{\theta}{1 + \beta \theta} \right) \end{aligned}$$

Подставив в получение выражение $\bar{r} = \eta(A\bar{y} + B)$ и $\xi = \bar{y}$, получим:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi \partial \eta} \left(-\frac{2A\eta}{A\xi + B} \right) + \\ + \frac{1}{\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right) \left(\frac{1 + A^2 \eta^2}{(A\xi + B)^2} \right) + \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \left(\frac{A^2 \eta}{(A\xi + B)^2} \right) + a \exp \left(\frac{\theta}{1 + \beta \theta} \right) \end{aligned} \quad (4.12)$$

Уравнение (4.12) есть уравнение теплопроводности (4.5) в новых координатах (ξ, η) .

Запишем граничное условие (4.8) в новых координатах (ξ, η) . Перепишем уравнение (4.8) в виде:

$$\frac{\partial \theta}{\partial n} = \frac{\partial \theta}{\partial r} \cos \alpha + \frac{\partial \theta}{\partial y} \sin \alpha = -Bi(\theta - \theta_0). \quad (4.13)$$

Производная $\frac{\partial \theta}{\partial r}$ при переходе от системы координат $(\bar{r}, \bar{y})$ к (ξ, η) запишется таким образом:

$$\frac{\partial \theta}{\partial r} = \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial r}. \quad (4.14)$$

Производная $\frac{\partial \theta}{\partial y}$ при переходе от системы координат $(\bar{r}, \bar{y})$ к (ξ, η) запишется в виде:

$$\frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y}. \quad (4.15)$$

$$\text{При этом } \frac{\partial \xi}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial \eta}{\partial r} = \frac{1}{A\bar{y} + B}, \quad \frac{\partial \xi}{\partial y} = 1, \quad \frac{\partial \eta}{\partial y} = -\frac{A\bar{r}}{(A\bar{y} + B)^2}. \quad (4.16)$$

Выражения (4.14), (4.15) подставляются в уравнение (4.13) и с учётом выражений (4.16) получается выражение:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \eta} \frac{1}{A\bar{y} + B} \cos \alpha + \left[\frac{\partial \theta}{\partial \xi} + \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \left(-\frac{A\bar{r}}{(A\bar{y} + B)^2} \right) \right] \sin \alpha = -Bi(\theta - \theta_0).$$

После преобразований получим:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \xi} \sin \alpha + \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \left[\frac{1}{A\bar{y} + B} \cos \alpha - \frac{A\bar{r}}{(A\bar{y} + B)^2} \sin \alpha \right] = -Bi(\theta - \theta_0).$$

Так как $\xi = \bar{y}$ и $\bar{r} = \eta(A\bar{y} + B)$ то окончательно граничное условие (4.8) в новых координатах (ξ, η) запишется следующим образом:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \xi} \sin \alpha + \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \left[\frac{\cos \alpha - A\eta \sin \alpha}{A\xi + B} \right] = -Bi(\theta - \theta_0). \quad (4.17)$$

Система уравнений (4.5)–(4.8), записанная в новых координатах (ξ, η) , принимает вид (4.12), (4.6)–(4.8) и (4.17).

Уравнение (4.12) и (4.6) решалось численно с использованием явной разностной схемы.

4.3 Результаты численных исследований

Параметры $\beta = 0.05$ и $\gamma = 0.14$ были выбраны из области устойчивого горения безгазовых систем [35]. Расчёты были проведены при выбранных параметрах, при этом значение числа Био варьировалось в диапазоне $0 \leq Bi \leq \infty$. Внешние границы конуса поддерживаются при начальной температуре при $Bi = \infty$, являются теплоизолированными при $Bi = 0$. Высота усеченного конуса принята равной $\bar{L} = 400$, радиус меньшего основания усеченного конуса $R_k(\bar{L}) = 20$, радиус большего основания усеченного конуса варьировался в

интервале $100 \leq R_K(0) \leq 400$. При зажигании СВС состава распространение фронта горения происходит в сторону уменьшения радиуса конуса. Скорость фронта горения определялась как скорость перемещения концентрации реагента $a = 0.5$ вдоль оси $\bar{y}$ на расстоянии от оси симметрии $\bar{r} = 5$.

Численные расчёты проводились с целью:

- 1) исследования зависимости скорости горения СВС состава от координаты ξ при различных значениях числа Bi ;
- 2) определения критического значения числа Bi , при котором срыва горения не происходит;
- 3) определения величины недогоревшей части образца $x_{ост}$ в зависимости от величины числа Bi при различных углах между образующей конуса и его высотой.

4.3.1 Исследование влияния теплоотдачи на закономерности распространения волны безгазового горения в коническом образце без учета гетерогенности его структуры

Было проведено исследование зависимости скорости горения СВС состава от координаты ξ при различных значениях числа Bi и $R_K(0)$. Значения числа Bi варьировались в интервале $0 \leq Bi \leq \infty$ для каждого $R_K(0)$. Значения $R_K(0)$ выбирались следующие: $R_K(0) = 100$, $R_K(0) = 150$, $R_K(0) = 200$.

На рисунке 4.3 показаны зависимости скорости горения СВС состава от координаты ξ при различных значениях числа Bi при $R_K(0) = 200$. На графике показано три режима распространения фронта горения:

- 1) увеличение скорости фронта горения с пройденным расстоянием вдоль оси конуса (кривая 1). Наблюдается при значении $Bi = 0$;
- 2) срыв (погасание) горения (кривые 2 и 3). Наблюдается при значениях $0.05 \leq Bi \leq \infty$. Из графика видно, что при $Bi = \infty$ происходит срыв горения на расстоянии $\Delta \bar{L} = 135$ от правой границы (меньшего основания) конуса. При

малых значениях числа Bi ($Bi = 0.05$) фронт горения останавливается на более близком расстоянии к правой границе конуса;

3) срыва горения не наблюдается (кривая 4). Данная кривая была получена в результате проведения вычислительных экспериментов по определению значения числа Bi , при котором срыва горения в коническом образце не происходит, сгорание конического образца происходит с почти стационарной скоростью. Кривая 4 соответствует числу $Bi = 0.035$.

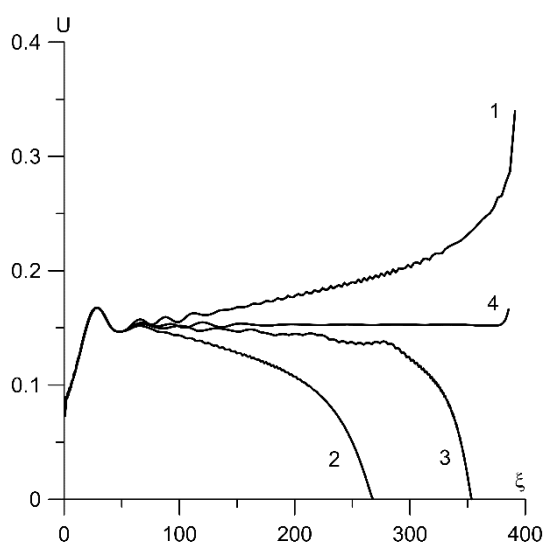


Рис. 4.3. Зависимость скорости пламени от координаты при значениях числа Bi : 1 – $Bi = 0$, 2 – $Bi = \infty$, 3 – $Bi = 0.05$, 4 – $Bi = 0.035$. $R_K(0) = 200$, $R_K(\bar{L}) = 20$

Для каждого варианта расчета, представленного на рисунке 4.3, были построены поля температуры и концентрации. Для случая $Bi = 0$, когда скорость горения увеличивается с пройденным расстоянием вдоль конуса (кривая 1 рис. 4.3), поля температуры и концентраций представлены на рисунках 4.4 – 4.5.

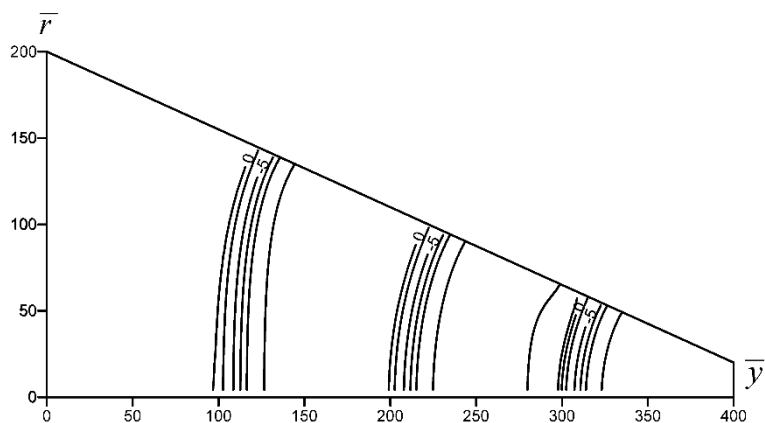


Рис. 4.4. Поля температуры в моменты времени прохождения фронтом горения координат $\xi = 100, 200$ и 300 . $Bi = 0$, $R_K(0) = 200$

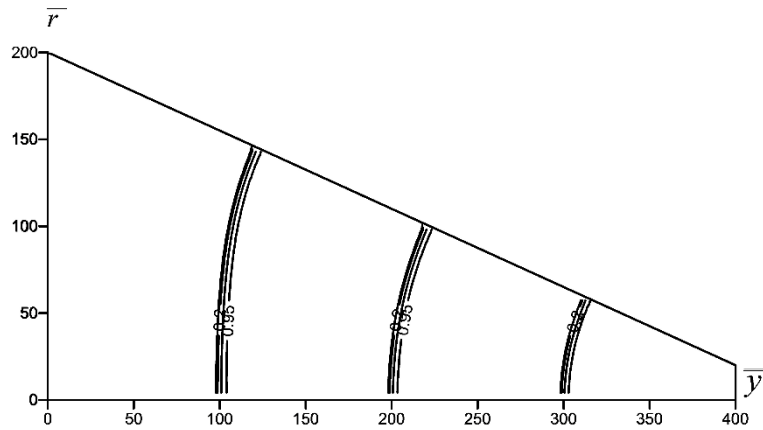


Рис. 4.5. Поля концентрации в моменты времени прохождения фронтом горения координат $\xi = 100, 200$ и 300 . $Bi = 0$, $R_K(0) = 200$

Для случая $Bi = \infty$, когда происходит срыв горения (кривая 2 на рис. 4.3), поля концентраций и температур представлены на рисунках 4.6 – 4.12.

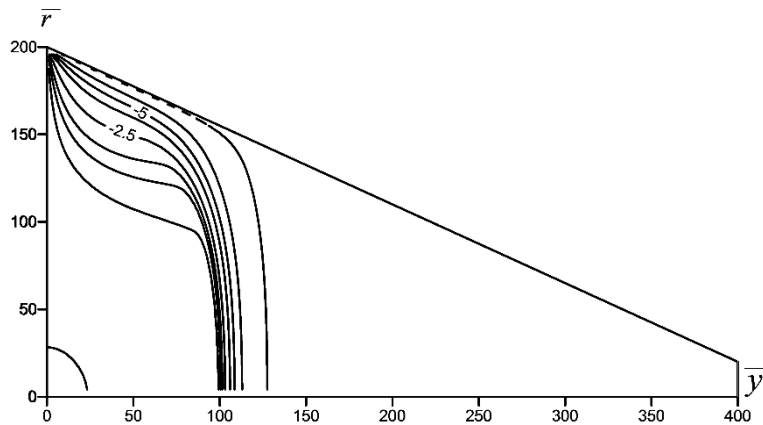


Рис. 4.6. Поле температуры в момент времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 100$. $Bi = \infty$, $R_K(0) = 200$

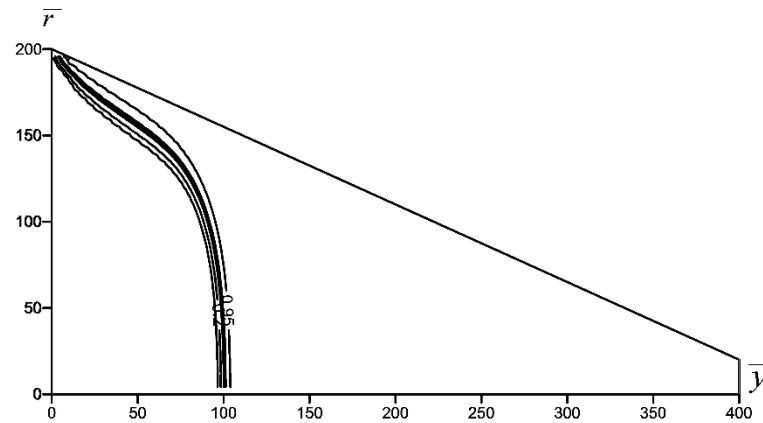


Рис. 4.7. Поле концентрации в момент времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 100$. $Bi = \infty$, $R_K(0) = 200$

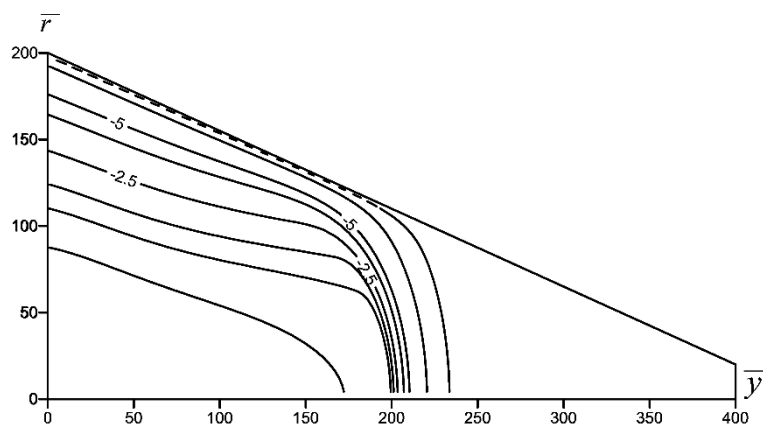


Рис. 4.8. Поле температуры в момент времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 200$. $Bi = \infty$, $R_K(0) = 200$

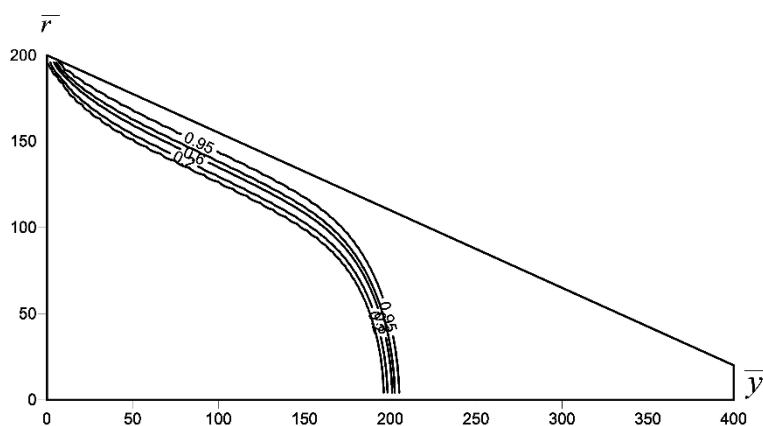


Рис. 4.9. Поле концентрации в момент времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 200$. $Bi = \infty$, $R_K(0) = 200$

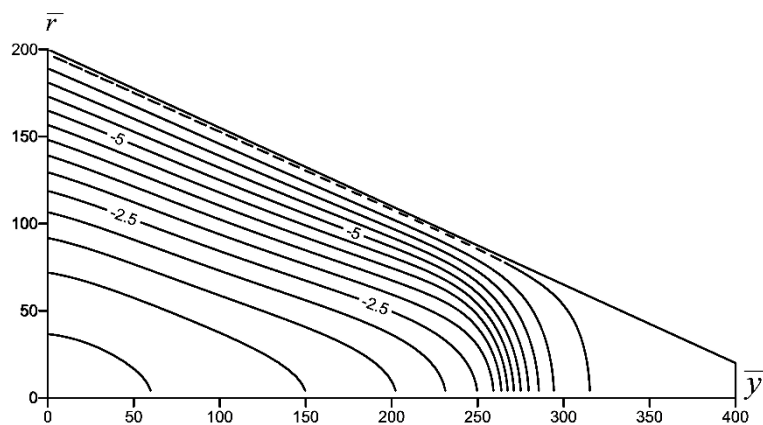


Рис. 4.10. Поле температуры в момент времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 260$. $Bi = \infty$, $R_K(0) = 200$

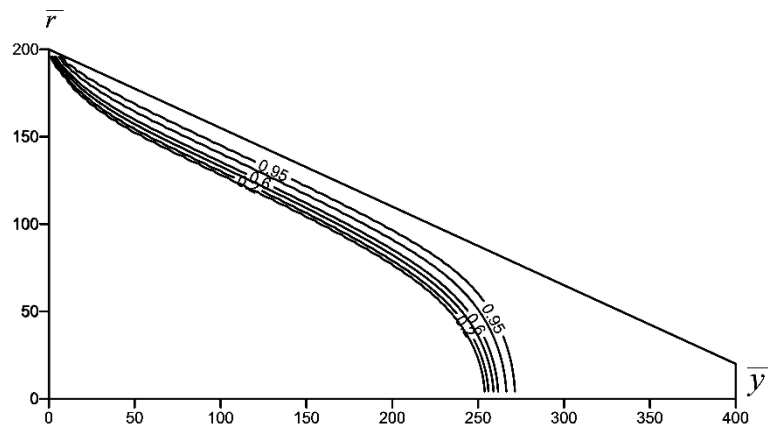


Рис. 4.11. Поле концентрации в момент времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 260$. $Bi = \infty$, $R_K(0) = 200$

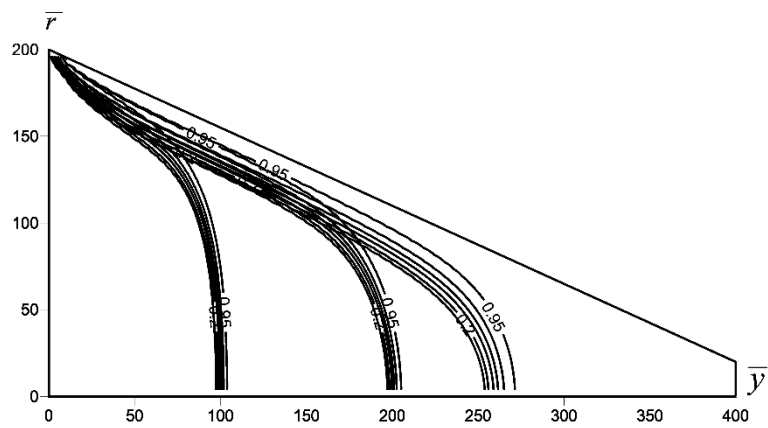


Рис. 4.12. Поля концентрации в момент времени прохождения фронтом горения координат $\xi = 100, 200$ и 260 . $Bi = \infty$, $R_K(0) = 200$

Для случая $Bi = 0.035$, когда срыва горения не наблюдается (кривая 4 на рис. 4.3), поля концентраций и температур представлены на рисунках 4.13 – 4.17.

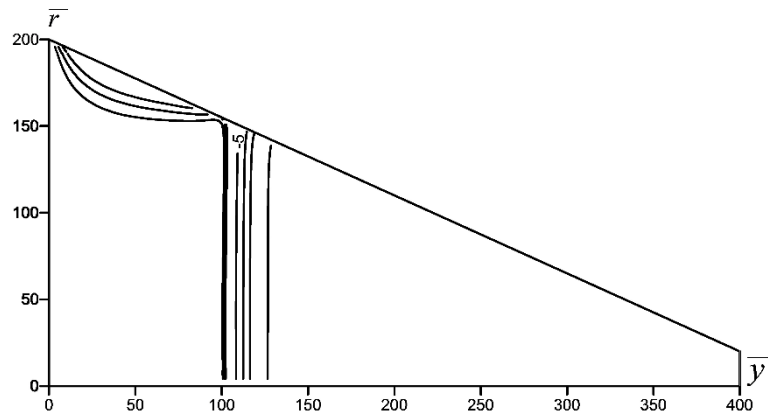


Рис. 4.13. Поле температуры в момент времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 100$. $Bi = 0.035$, $R_K(0) = 200$

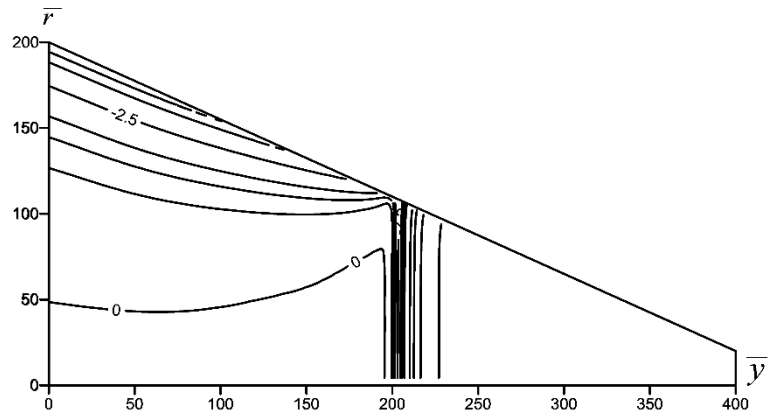


Рис. 4.14. Поле температуры в момент времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 200$. $Bi = 0.035$, $R_K(0) = 200$

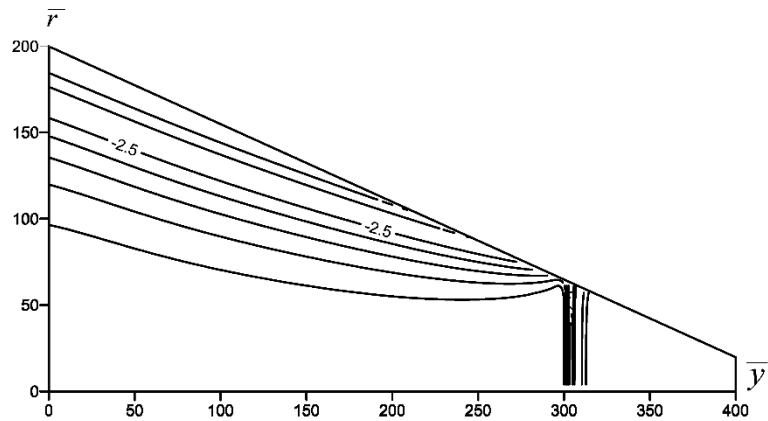


Рис. 4.15. Поле температуры в момент времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 300$. $Bi = 0.035$, $R_K(0) = 200$

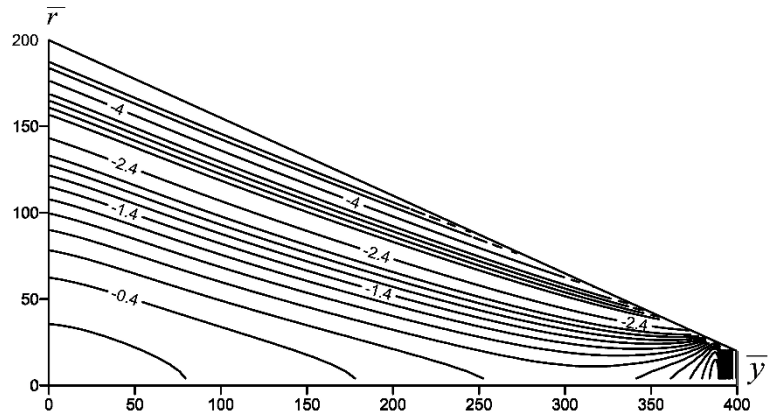


Рис. 4.16. Поле температуры в момент времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 390$. $Bi = 0.035$, $R_K(0) = 200$

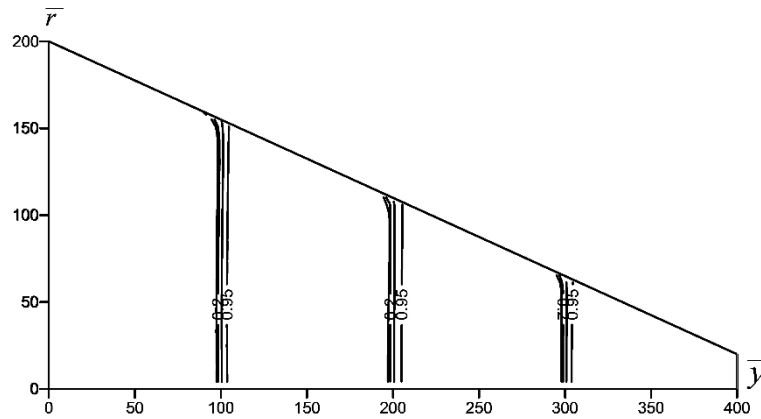


Рис. 4.17. Поля концентрации в момент времени прохождения фронтом горения координат $\xi = 100, 200, 300$. $Bi = 0.035$, $R_K(0) = 200$

Для кривой 3 (рис. 4.3) поля температуры и концентрации аналогичны полям для кривой 2, так как обе кривые соответствуют режиму срыва горения. Кривая 3 была получена в ходе вычислительных экспериментов по определению критического значения параметра Bi , при котором срыва горения не происходит, графики температурных полей и концентраций не приводятся.

Аналогичные картины распространения фронта горения в коническом образце СВС состава наблюдались и при других значениях $R_K(0)$. На рисунке 4.18 показаны скорости распространения фронта горения при $R_K(0) = 150$. Кривая 3 была получена в ходе расчётов по определению критического значения параметра Bi .

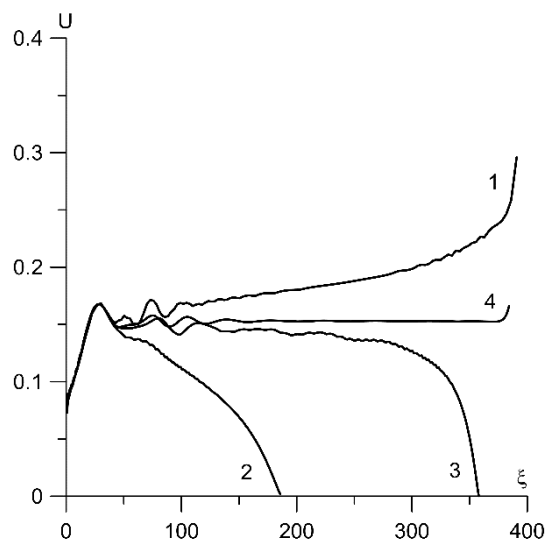


Рис. 4.18 Зависимость скорости пламени от координаты при значениях числа Bi :
 1 – $Bi = 0$, 2 – $Bi = \infty$, 3 – $Bi = 0.035$, 4 – $Bi = 0.025$, $R_K(0) = 150$, $R_K(\bar{L}) = 20$

Для случая $Bi=0$, когда скорость горения увеличивается с пройденным расстоянием вдоль конуса (кривая 1 на рис. 4.18) поля температуры и концентраций представлены на рисунках 4.19 – 4.20.

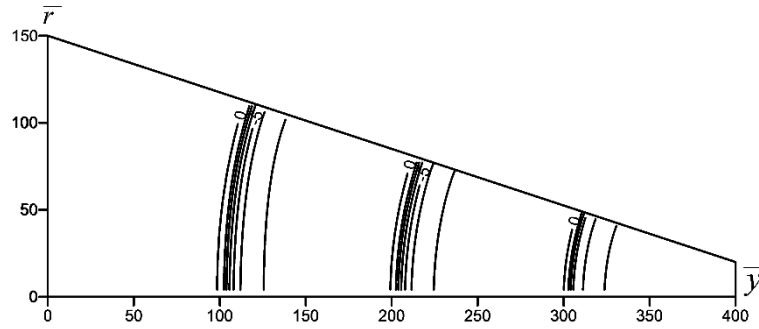


Рис. 4.19. Поля температуры в моменты времени прохождения фронтом горения координат $\xi = 100, 200$ и 300 . $Bi = 0$, $R_K(0) = 150$

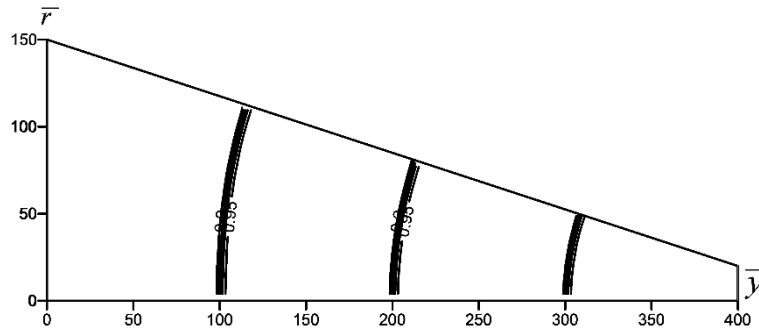


Рис. 4.20. Поля концентрации в моменты времени прохождения фронтом горения координат $\xi = 100, 200$ и 300 . $Bi = 0$, $R_K(0) = 150$

Для случая $Bi = \infty$, когда происходит срыв горения (кривая 2 на рис. 4.18), поля концентраций и температур представлены на рисунках 4.21 – 4.23

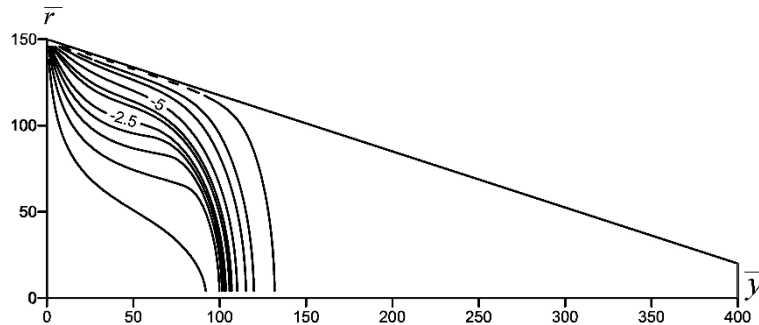


Рис. 4.21. Поле температуры в момент времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 100$. $Bi = \infty$, $R_K(0) = 150$

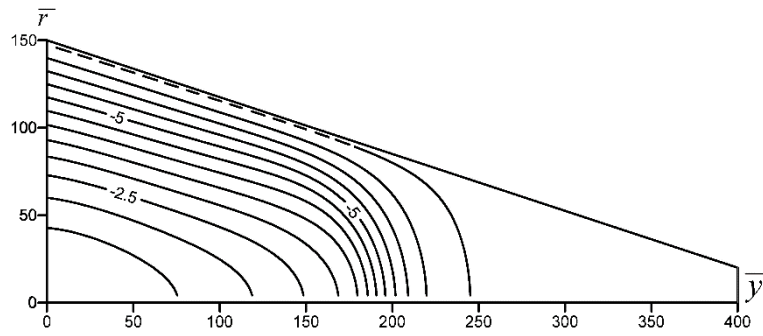


Рис. 4.22. Поле температуры в момент времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 180$. $Bi = \infty$, $R_K(0) = 150$

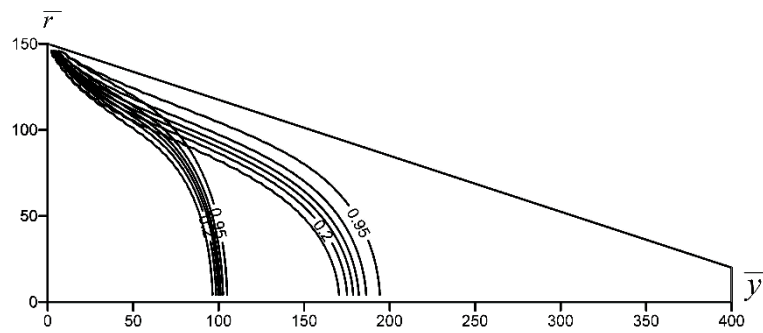


Рис. 4.23. Поля концентрации в моменты времени прохождения фронтом горения координат $\xi = 100$ и 180 . $Bi = 0$, $R_K(0) = 150$

Для случая $Bi = 0.025$, когда срыва горения не наблюдается (кривая 4 на рис. 4.18), поля концентраций и температур представлены на рисунках 4.24 – 4.28

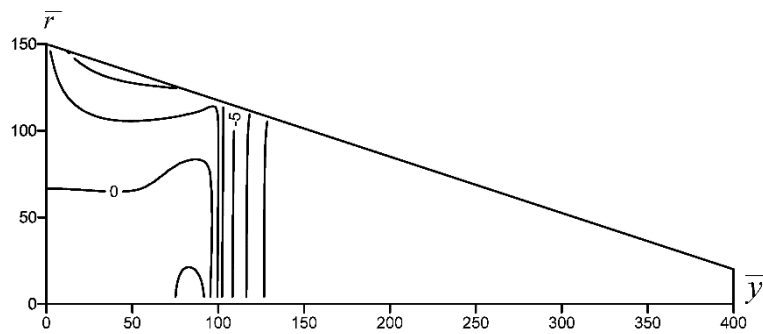


Рис. 4.24. Поле температуры в момент времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 100$. $Bi = 0.025$, $R_K(0) = 150$

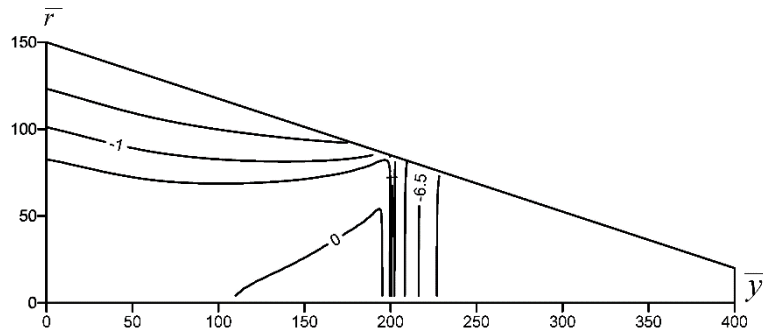


Рис. 4.25. Поле температуры в момент времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 200$. $Bi = 0.025$, $R_K(0) = 150$

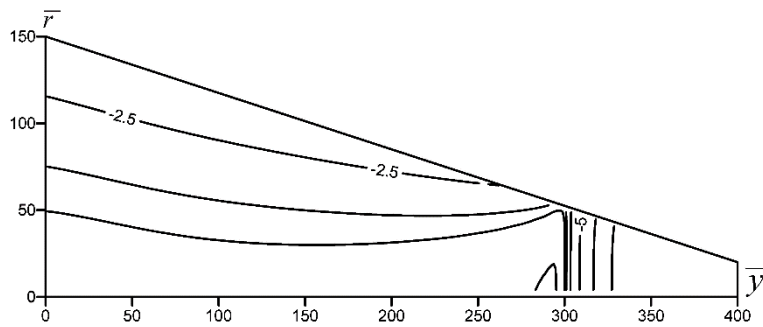


Рис. 4.26. Поле температуры в момент времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 300$. $Bi = 0.025$, $R_K(0) = 150$

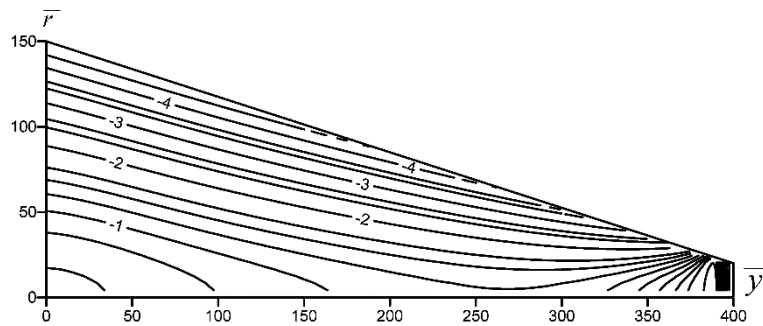


Рис. 4.27. Поле температуры в момент времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 390$. $Bi = 0.025$, $R_K(0) = 150$

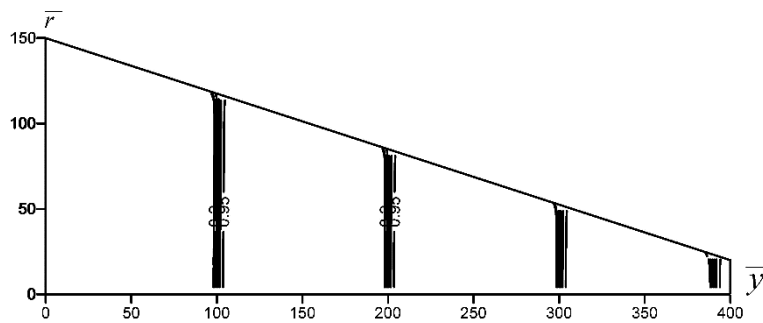


Рис. 4.28. Поля концентрации в момент времени прохождения фронтом горения координат $\xi = 100, 200, 300$ и 390 . $Bi = 0.025$, $R_K(0) = 150$

На рисунке 4.29 показаны скорости распространения фронта горения при $R_K(0)=100$.

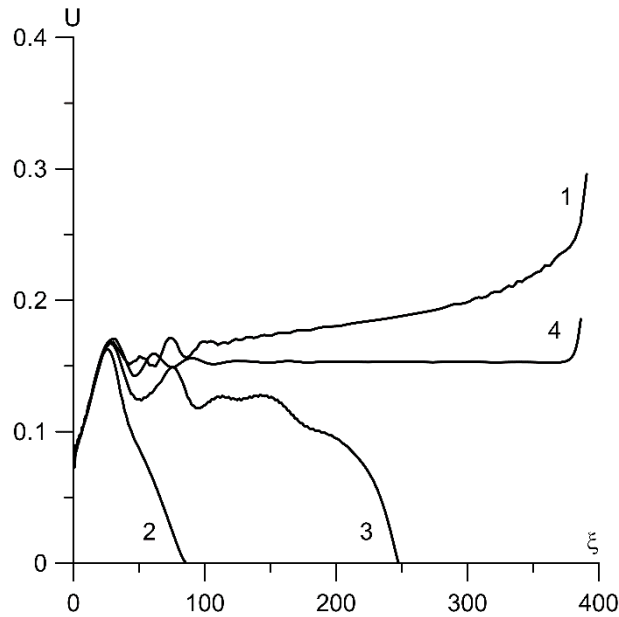


Рис.4.29 Зависимость скорости пламени от координаты при значениях числа Bi :

1 – $Bi = 0$, 2 – $Bi = \infty$, 3 – $Bi = 0.035$, 4 – $Bi = 0.015$, $R_K(0) = 150$, $R_K(\bar{L}) = 20$

Для случая $Bi=0$, когда скорость горения увеличивается с пройденным расстоянием вдоль конуса (кривая 1 на рис. 4.29) поля температуры и концентраций представлены на рисунках 4.30 – 4.31.

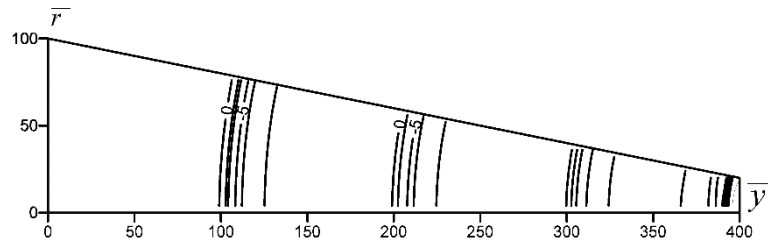


Рис. 4.30. Поля температуры в моменты времени прохождения фронтом горения координат $\xi = 100, 200, 300$ и 390 . $Bi = 0$, $R_K(0) = 100$

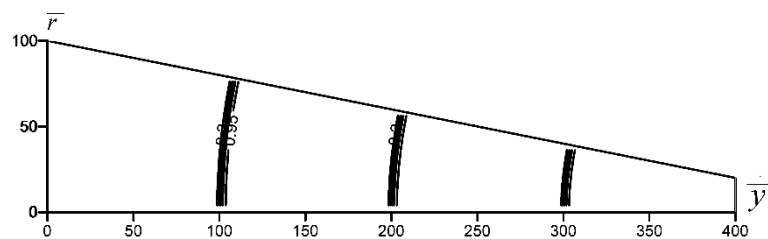


Рис. 4.31. Поля концентрации в моменты времени прохождения фронтом горения координат $\xi = 100, 200$ и 300 . $Bi = 0$, $R_K(0) = 100$

Для случая $Bi = \infty$, когда происходит срыв горения (кривая 2 на рис. 4.29), поля концентраций и температур представлены на рисунках 4.32 – 4.33.

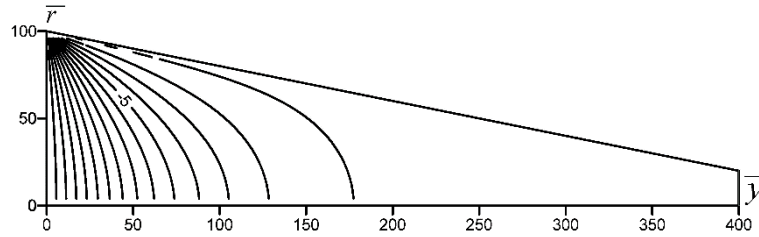


Рис. 4.32. Поле температуры в момент времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 85$. $Bi = \infty$, $R_K(0) = 100$

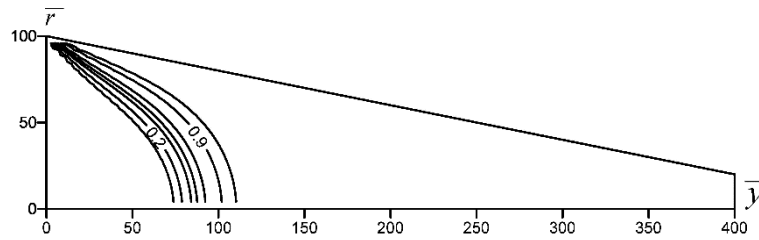


Рис. 4.33. Поле концентрации в момент времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 85$. $Bi = \infty$, $R_K(0) = 100$

Для случая $Bi = 0.015$, когда срыва горения не наблюдается (кривая 4 на рис. 4.29), поля концентраций и температур представлены на рисунках 4.34 – 4.38

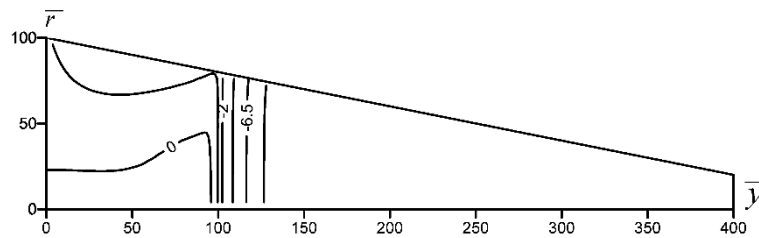


Рис. 4.34. Поле температуры в момент времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 100$. $Bi = 0.015$, $R_K(0) = 100$

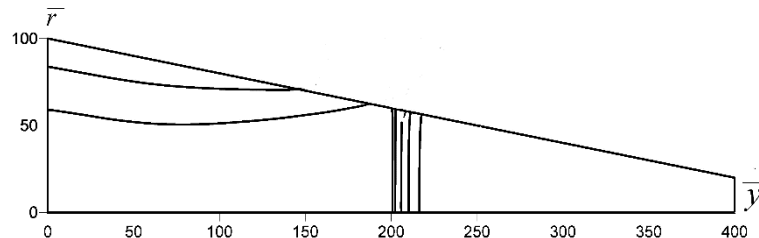


Рис. 4.35. Поле температуры в момент времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 200$. $Bi = 0.015$, $R_K(0) = 100$

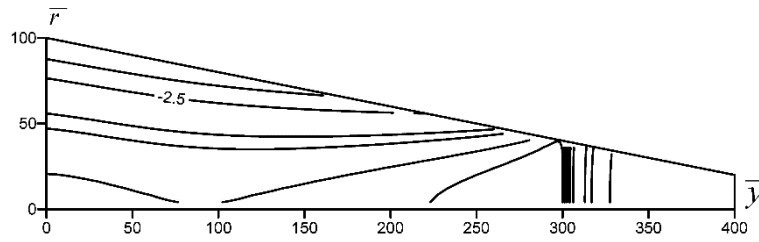


Рис. 4.36. Поле температуры в момент времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 300$. $Bi = 0.015$, $R_K(0) = 100$

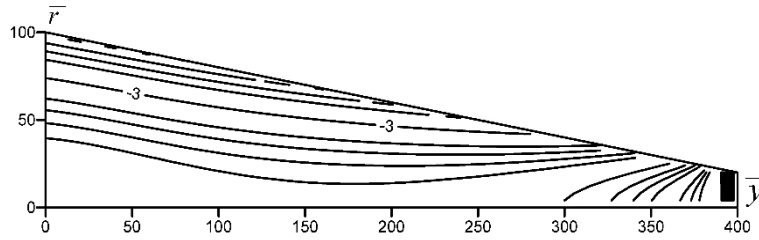


Рис. 4.37. Поле температуры в момент времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 390$. $Bi = 0.015$, $R_K(0) = 100$

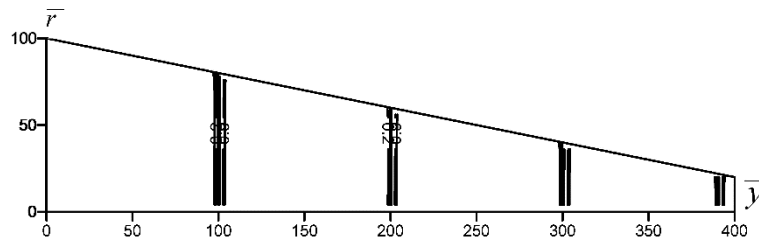


Рис. 4.38. Поля концентрации в моменты времени прохождения фронтом горения координат $\xi = 100, 200, 300$ и 390 . $Bi = 0.015$, $R_K(0) = 100$

Из вычислительных экспериментов следует, что критическое значение параметра Bi , при котором срыва горения конического образца не происходит, принимает разные значения для различных $R_K(0)$. Для $R_K(0) = 200$ было определено $Bi = 0.035$, для $R_K(0) = 150$ — $Bi = 0.025$, для $R_K(0) = 100$ — $Bi = 0.015$.

Немаловажным является определение величины недогоревшей части образца в режиме срыва горения (кривые 2, 3 на рисунках 4.3, 4.18, 4.29).

Величина недогоревшей части образца $x_{ост}$ зависит не только от величины числа Bi , но и от величины угла α между образующей конуса и его высотой (рис. 4.39).

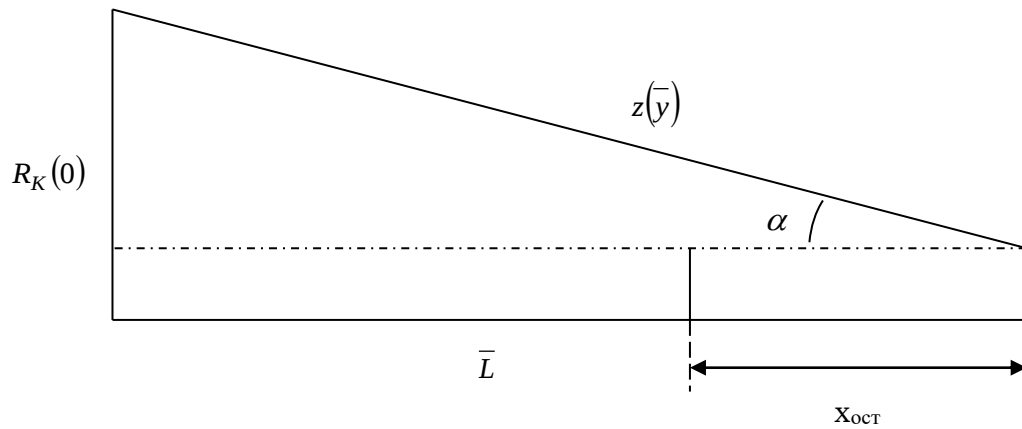


Рис.4.39. Определение величины недогоревшей части $x_{ост}$

Было проведено численное исследование зависимости толщины недогоревшего слоя СВС образца от числа Bi при различных углах между образующей конуса и его высотой. Результаты расчётов представлены на рисунке 4.40.

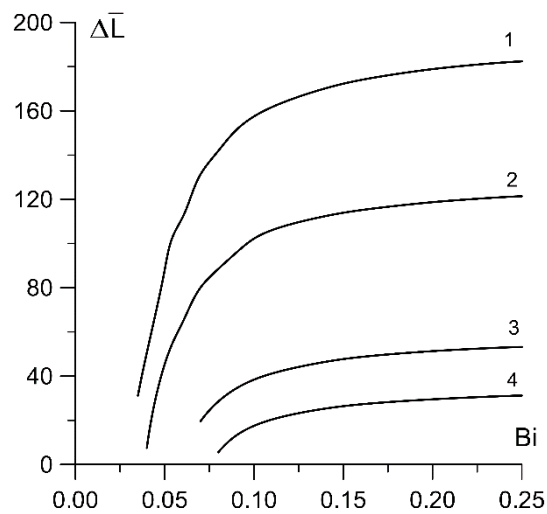


Рис. 4.40 Зависимость толщины недогоревшего слоя $x_{ост}$ от числа Bi при углах полураствора конуса: 1 – 18° , 2 – 24° , 3 – 35° , 4 – 44° .

Из рисунка 4.40 видно, что с уменьшением числа Bi расстояние до меньшего основания усеченного конуса, на котором фронт горения останавливается, уменьшается. При малых значениях числа Bi образец догорает весь. С уменьшением угла полураствора конуса толщина недогоревшего слоя вещества при одинаковых значениях числа Bi увеличивается.

4.3.2 Исследование влияния теплоотдачи на закономерности распространения волны безгазового горения в коническом образце с учетом гетерогенности структуры

Результаты, представленные в п. 4.3.1 получены на основе модели безгазового горения [35, 104]. В главе 2 представлена математическая модель безгазового горения с учётом гетерогенности структуры и зависимости диффузии от температуры.

Проведем решение задачи безгазового горения конического образца с использованием модели гетерогенной структуры в виде сферической реакционной ячейки. Модель, изложенная в п. 2.3 главы 2, в двумерном осесимметричном варианте в безразмерной форме записи системы уравнений модели имеет вид:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{1}{\bar{r}} \frac{\partial}{\partial \bar{r}} \left(\bar{r} \frac{\partial \theta}{\partial \bar{r}} \right) + \frac{\partial^2 \theta}{\partial \bar{y}^2} + \frac{\partial \bar{V}}{\partial \tau} \frac{1}{\gamma}. \quad (4.18)$$

Начальные условия:

$$\theta(\bar{r}, \bar{y}, 0) = -1/\gamma, \quad V(\bar{r}, \bar{y}, 0) = 1. \quad (4.19)$$

Граничные условия:

$$\begin{aligned} \theta(\bar{r}, 0, \tau) &= 0, \quad \tau < \tau_f, \quad \frac{\partial \theta(\bar{r}, 0, \tau)}{\partial \bar{y}} = 0, \quad \tau \geq \tau_f, \\ \frac{\partial \theta(\bar{r}, \bar{L}, \tau)}{\partial \bar{y}} &= -Bi \left(\theta(\bar{r}, \bar{L}, \tau) + 1/\gamma \right), \\ \frac{\partial \theta(0, \bar{y}, \tau)}{\partial \bar{r}} &= 0, \\ \frac{\partial \theta(R_K(\bar{y}), \bar{y}, \tau)}{\partial n} &= -Bi \left(\theta(R_K(\bar{y}), \bar{y}, \tau) + 1/\gamma \right). \end{aligned} \quad (4.20)$$

Величина тепловыделения от химической реакции в уравнении (4.18) определяется из решения задач диффузии и реагирования на микроуровне в реакционной ячейке. Подробная постановка изложена в п. 2.3 и имеет вид:

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} = \gamma \cdot e^{\frac{\theta}{1+\beta\theta}} \frac{1}{z^2} \frac{\partial}{\partial z} \left(z^2 \frac{\partial c}{\partial z} \right), \quad (4.21)$$

$$c(z_1(\tau), \tau) = c_1, \quad c(z_2(\tau), \tau) = c_2, \quad c(z, 0) = c_2, \quad z_1(0) \leq z \leq z_2(0). \quad (4.22)$$

В уравнении (4.18):

$$\frac{\partial \bar{V}}{\partial \tau} = z_2^2 \frac{\partial z}{\partial \tau} - z_1^2 \frac{\partial z}{\partial \tau} = z_2^2 |\bar{U}_2| + z_1^2 |\bar{U}_1|. \quad (4.23)$$

Значения $\bar{U}_1$ и $\bar{U}_2$ определяются из соотношений (2.14), записанных в безразмерной форме:

$$\gamma e^{\frac{\theta}{1+\beta\theta}} \frac{\partial c}{\partial z} \Big|_{z_1(\tau)} = c_1 \bar{U}_1, \quad -\gamma e^{\frac{\theta}{1+\beta\theta}} \frac{\partial c}{\partial z} \Big|_{z_2(\tau)} = (1-c_2) \bar{U}_2. \quad (4.24)$$

В отличие от п. 2.3 здесь принято обозначение $z = r/r_*$, где r - радиальная координата гетерогенной структуры – шарика, $r_* = r_0$ - масштаб координаты для реакционной ячейки $r_* = r_0$ - ее радиус. Другие обозначения аналогичны приведенным в п. 2.3.

Для решения системы уравнений (4.18)-(4.20) проводилось преобразование координат такое же, как представлено в п. 4.2. Полученное в преобразованных координатах уравнение решалось по явной схеме. Для определения величины источников уравнения (4.18), определяемых в виде (4.23), в каждой точке пространства (в каждой точке разностной сетки) решалась задача (4.21) – (4.24) по методике, изложенной в п. 2.4.

Как и в случае с задачей (4.5) – (4.8), проводились численные расчёты задачи (4.18)-(4.24) при таких же значениях числа Bi и $R_K(0)$. Были выбраны параметры: $\beta = 0.05$ и $\gamma = 0.14$, значение числа Био варьировалось в диапазоне $0 \leq Bi \leq \infty$. Параметр $R_K(0)$ принимал значения $R_K(0) = 200$, $R_K(0) = 150$, $R_K(0) = 100$.

Результаты расчетов при $R_K(0) = 200$ представлены на рисунках 4.41 – 4.50.

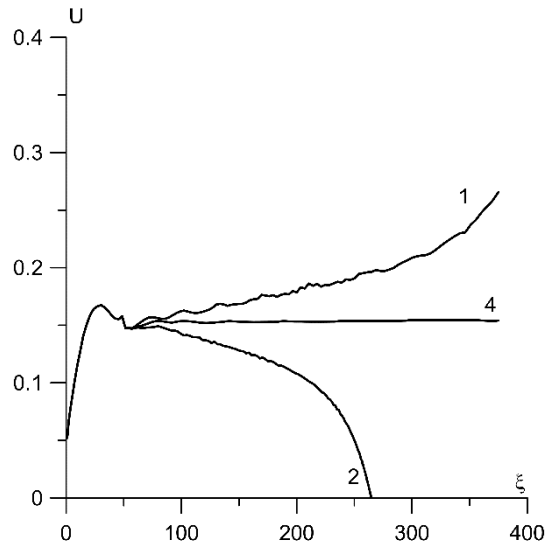


Рис. 4.41 Зависимость скорости пламени от координаты ξ при значениях числа Bi :

$$1 - Bi = 0, 2 - Bi = \infty, 4 - Bi = 0.033. R_K(0) = 200, R_K(\bar{L}) = 20$$

Кривые 1, 2, 4 на рисунке 4.41 качественно совпадают с кривыми 1, 2, 4 рисунка 4.3. На рисунках 4.42 – 4.44 показаны графики скоростей в сравнении двух моделей для каждого варианта задания числа Bi (увеличение скорости горения с пройденным расстоянием – кривая 1, срыв горения – кривая 2, горение образца без срыва горения – кривая 4). На рисунках 4.42 – 4.44 под буквой *а* представлены графики, соответствующие задаче (4.5) – (4.8), под буквой *б* – для задачи (4.18) – (4.24).

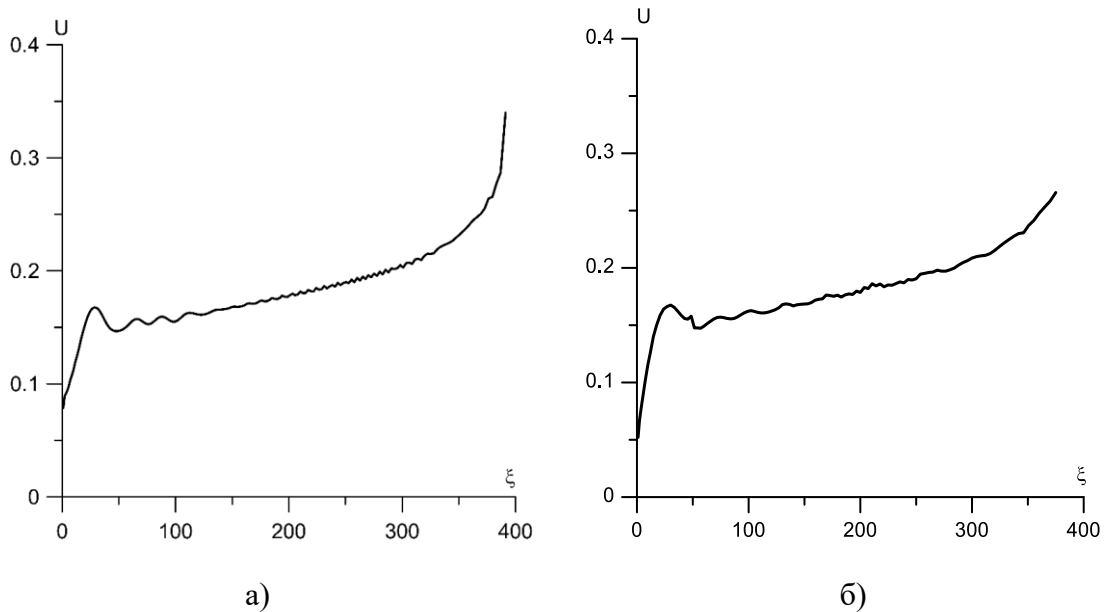


Рис. 4.42. Зависимость скорости пламени от координаты ξ при $Bi = 0$, $R_K(0) = 200$,

$$R_K(\bar{L}) = 20. \text{ а) – модель (4.5)-(4.8), б) – модель (4.18)-(4.24)}$$

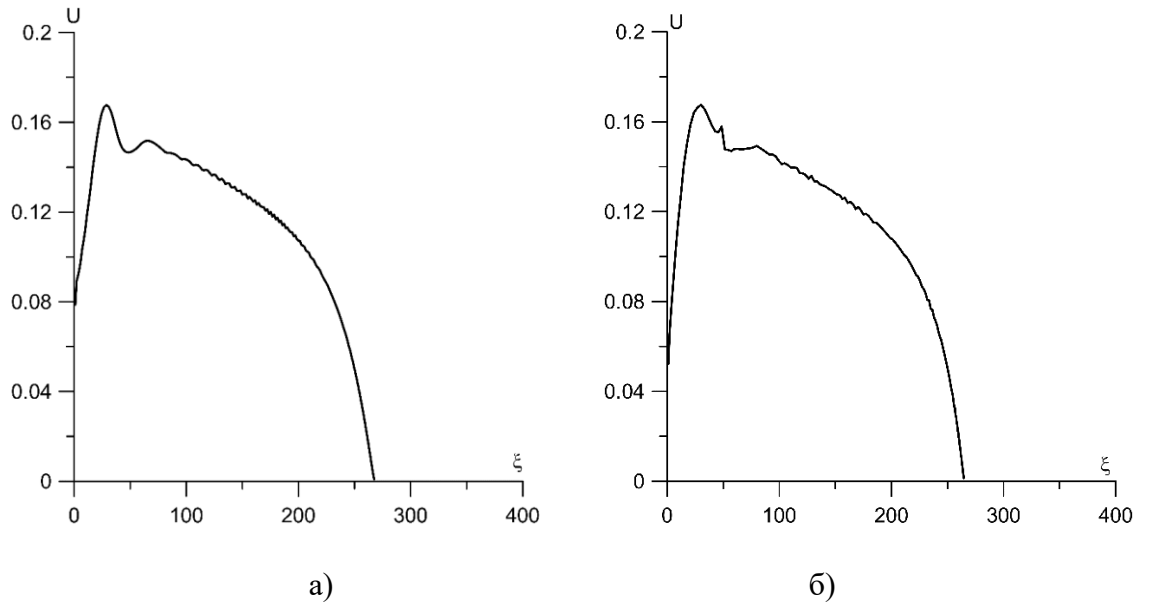


Рис. 4.43. Зависимость скорости пламени от координаты ξ при $Bi = \infty$, $R_K(0) = 200$, $R_K(\bar{L}) = 20$. а) – модель (4.5)-(4.8), б) – модель (4.18)-(4.24)

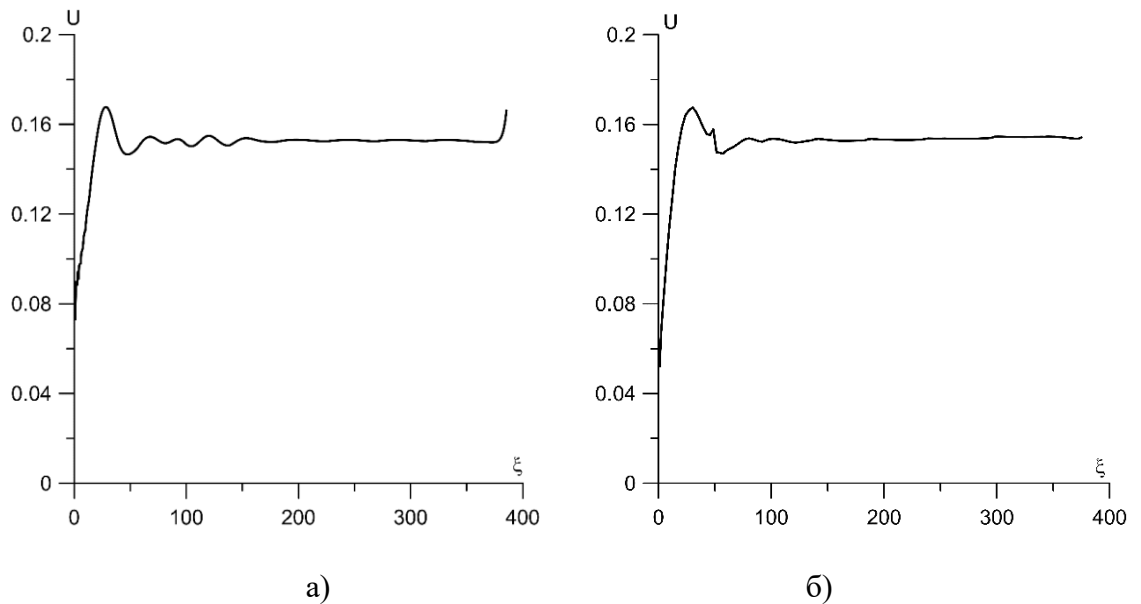


Рис. 4.44. Зависимость скорости пламени от координаты ξ при $R_K(0) = 200$, $R_K(\bar{L}) = 20$, $Bi = 0.035$ (а), $Bi = 0.033$ (б). а) – модель (4.5)-(4.8), б) – модель (4.18)-(4.24)

Небольшое отличие имеется в величине числа Bi на пределе срыва горения Bi_* : в задаче (4.5) – (4.8) предельное число Bi_* принимает значение $Bi_* = 0.035$, в задаче (4.24) – (4.30) значение $Bi_* = 0.033$. Аналогичные отличия чисел Bi и при $R_K(0) = 150$, $R_K(0) = 100$ (рис. 4.51, 4.61).

На рисунках 4.45, 4.46 построены поля температур и концентраций для

случая $Bi = 0$, когда скорость горения увеличивается с пройденным расстоянием вдоль конуса (кривая 1 на рис. 4.41, 4.42 б).

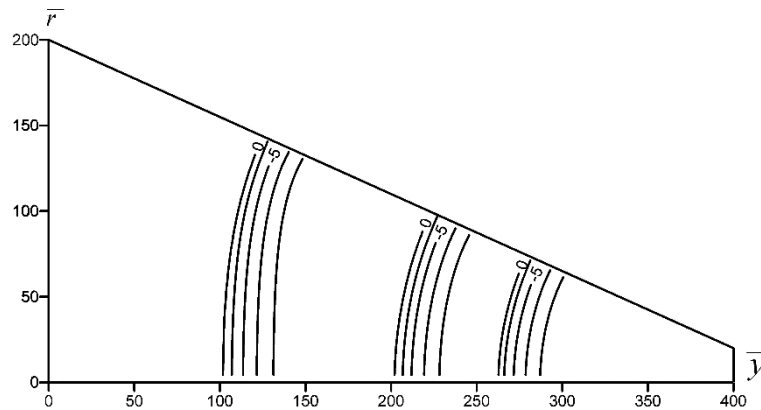


Рис. 4.45. Поля температуры в моменты времени прохождения фронтом горения координат $\xi = 100, 200$ и 300 . $Bi = 0$, $R_K(0) = 200$

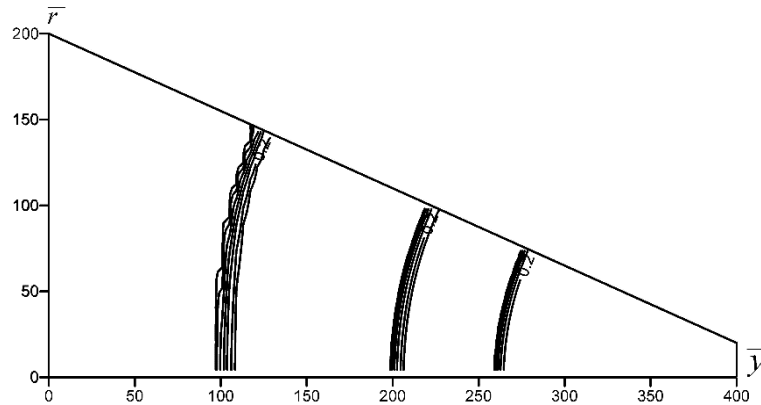


Рис. 4.46. Поля концентрации в моменты времени прохождения фронтом горения координат $\xi = 100, 200$ и 300 . $Bi = 0$, $R_K(0) = 200$

Рисунок 4.45 качественно соответствует рисунку 4.4, рисунок 4.46 – рисунку 4.5. На рисунках 4.47, 4.48 построены поля температур и концентраций для режима, когда происходит срыв горения (кривая 2 на рис. 4.41, 4.43 б).

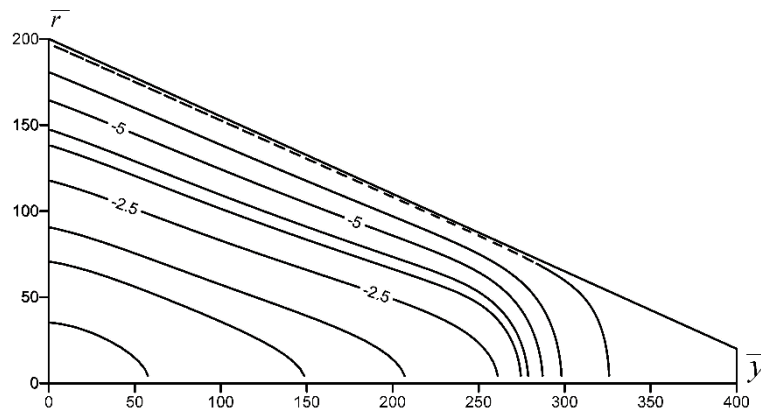


Рис. 4.47. Поле температуры в моменты времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 260$. $Bi = \infty$, $R_K(0) = 200$

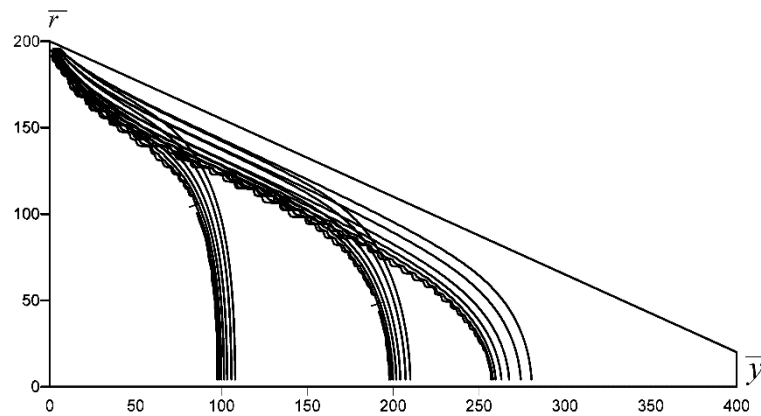


Рис. 4.48. Поля концентрации в моменты времени прохождения фронтом горения координат $\xi = 100, 200$ и 260 . $Bi = \infty$, $R_K(0) = 200$

Рисунок 4.47 качественно соответствует рисунку 4.10, рисунок 4.48 – рисунку 4.12. Поля температуры, полученные по модели с учетом гетерогенности структуры образца (4.18)-(4.24) в моменты времени прохождения фронтом горения координат $\xi = 100, 200$, аналогичны полям температуры, показанным на рисунках 4.6 – 4.9 и здесь не приводятся.

На рисунках 4.49, 4.50 построены поля температуры и концентрации для режима, когда срыва горения не происходит (кривая 4 на рис. 4.41, 4.44 б).

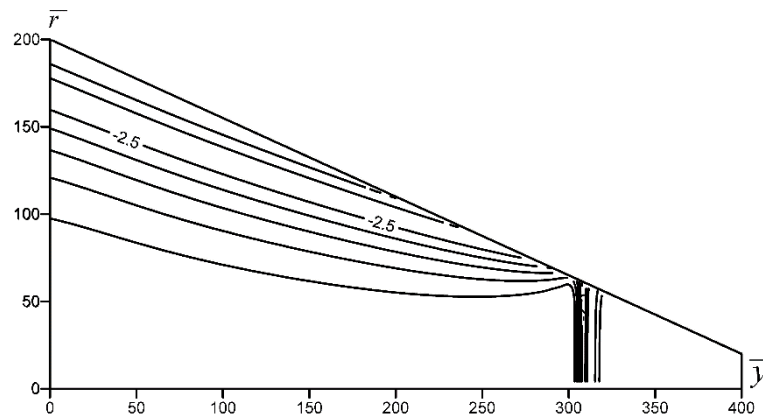


Рис. 4.49. Поле температуры в моменты времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 300$. $Bi = 0.033$, $R_k(0) = 200$

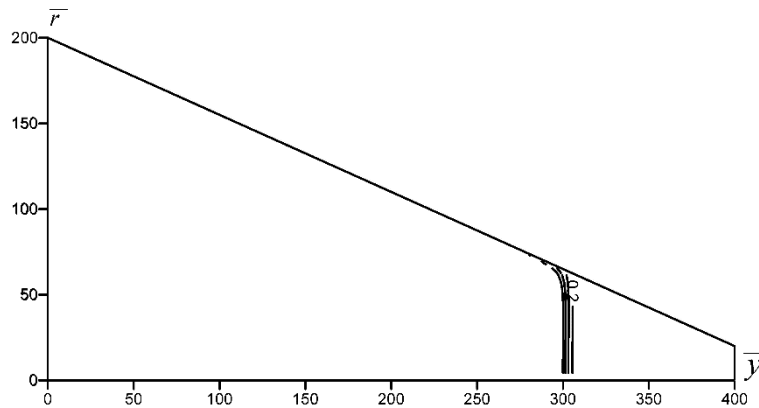


Рис. 4.50. Поле концентрации в моменты времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 300$. $Bi = 0.033$, $R_k(0) = 200$

Рисунок 4.49 качественно соответствует рисунку 4.15, рисунок 4.50 – распределению концентраций на рисунке 4.17. Поля температуры, полученные по модели с учетом гетерогенности структуры образца (4.18)-(4.24) в моменты времени прохождения фронтом горения координат $\xi = 100, 200$, аналогичны полям температуры, показанным на рисунках 4.13, 4.14, 4.16.

На рисунке 4.51 приведены скорости фронта горения для $R_k(0) = 150$. Приведенные зависимости качественно совпадают с зависимостями на рисунке 4.18.

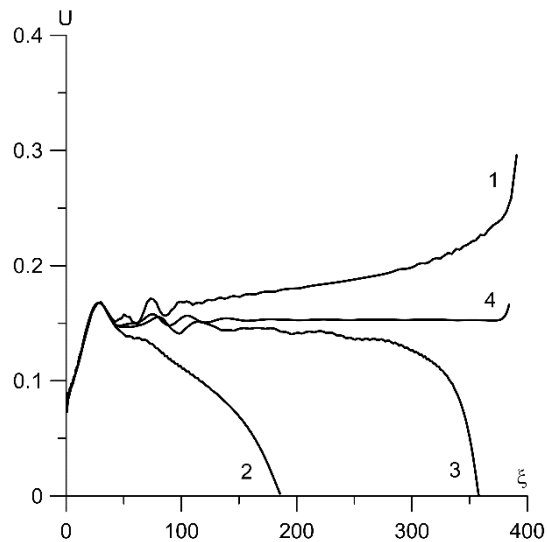


Рис. 4.51. Зависимость скорости пламени от координаты при значениях числа Bi :

$$1 - Bi = 0, 2 - Bi = \infty, 4 - Bi = 0.023, R_K(0) = 150, R_K(\bar{L}) = 20$$

На рисунках 4.52 – 4.54 показаны графики скоростей в сравнении для каждого режима горения. Аналогично тому, как были приведены графики для $R_K(0) = 200$.

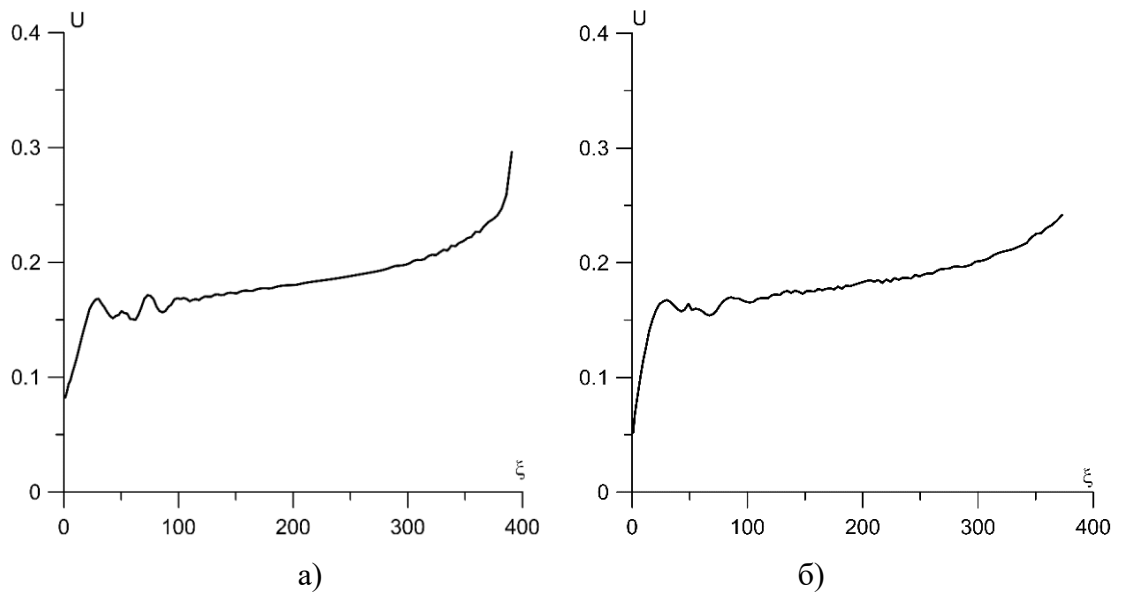


Рис. 4.52. Зависимость скорости пламени от координаты при $Bi = 0, R_K(0) = 150,$

$$R_K(\bar{L}) = 20. \text{ а) – модель (4.5)-(4.8), б) – модель (4.18)-(4.24)}$$

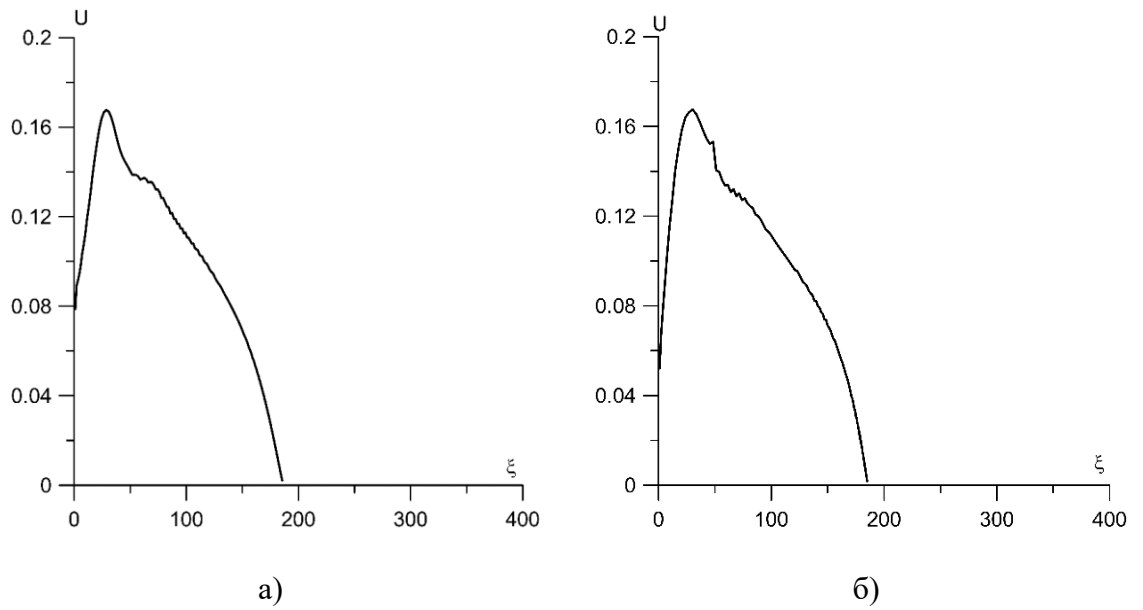


Рис. 4.53. Зависимость скорости пламени от координаты при $Bi = \infty$, $R_K(0) = 150$,

$R_K(\bar{L}) = 20$. а) – модель (4.5)-(4.8), б) – модель (4.18)-(4.24)

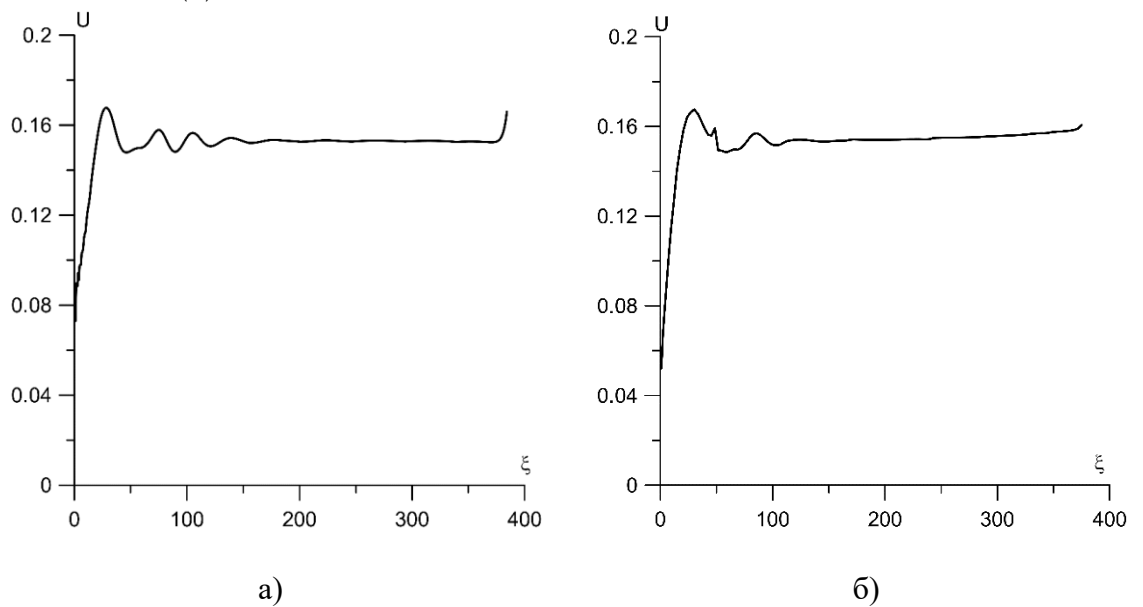


Рис. 4.54. Зависимость скорости пламени от координаты при $R_K(0) = 150$, $R_K(\bar{L}) = 20$,
 $Bi = 0.025$ (а), $Bi = 0.023$ (б). а) – модель (4.5)-(4.8), б) – модель (4.18)-(4.24)

Для каждого варианта задания числа Bi приведены некоторые графики полей температуры и концентрации по длине образца (рис. 4.55 – 4.60).

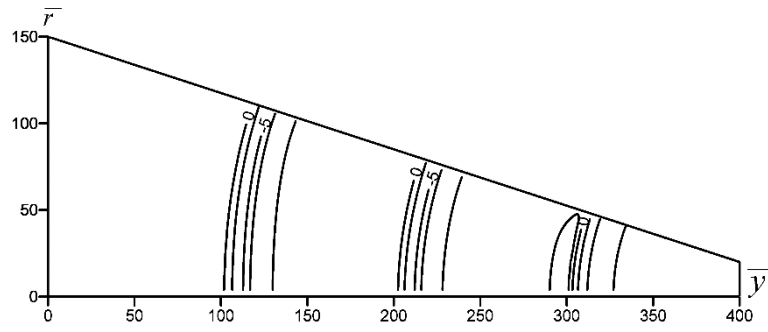


Рис. 4.55. Поля температуры в моменты времени прохождения фронтом горения координат $\xi = 100, 200$ и 300 . $Bi = 0$, $R_K(0) = 150$

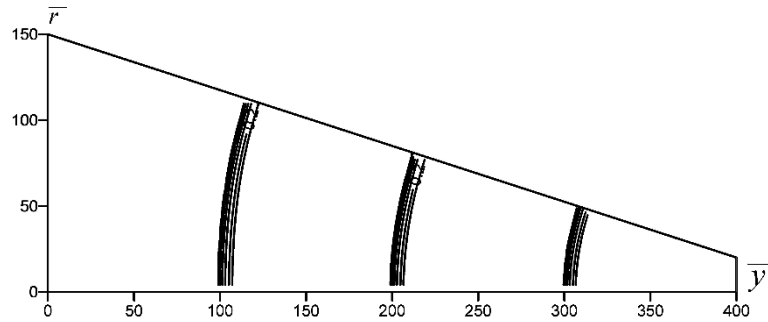


Рис. 4.56. Поля концентрации в моменты времени прохождения фронтом горения координат $\xi = 100, 200$ и 300 . $Bi = 0$, $R_K(0) = 150$

Поля, представленные на рисунках 4.55 и 4.56, качественно соответствуют полям на рисунках 4.19 и 4.20.

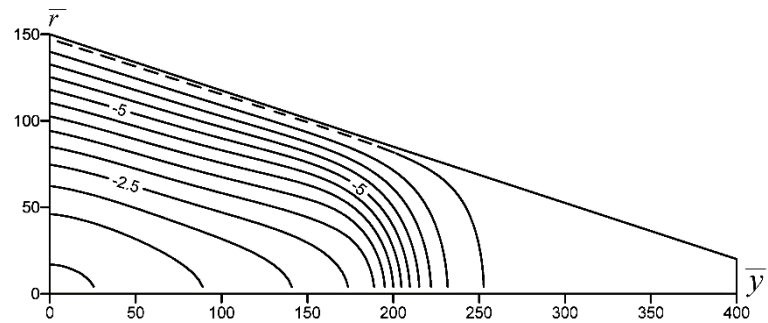


Рис. 4.57. Поле температуры в моменты времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 180$. $Bi = \infty$, $R_K(0) = 150$

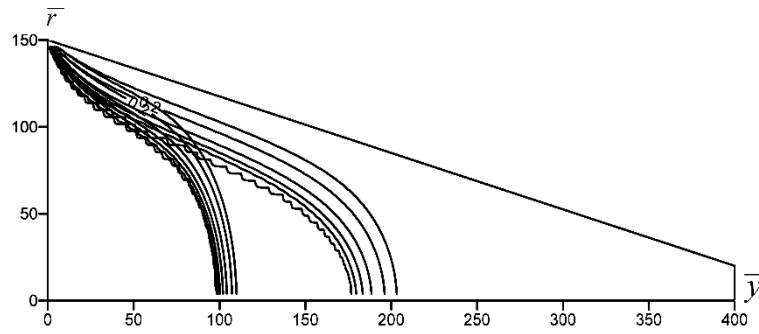


Рис. 4.58. Поля концентрации в моменты времени прохождения фронтом горения координат $\xi = 100, 180$. $Bi = \infty$, $R_K(0) = 150$

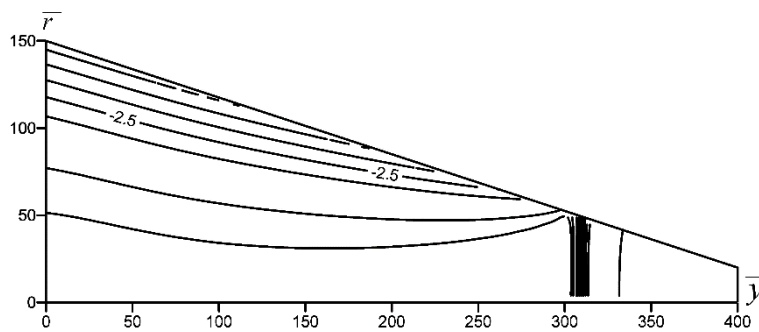


Рис. 4.59. Поле температуры в моменты времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 300$. $Bi = 0.023$, $R_K(0) = 150$

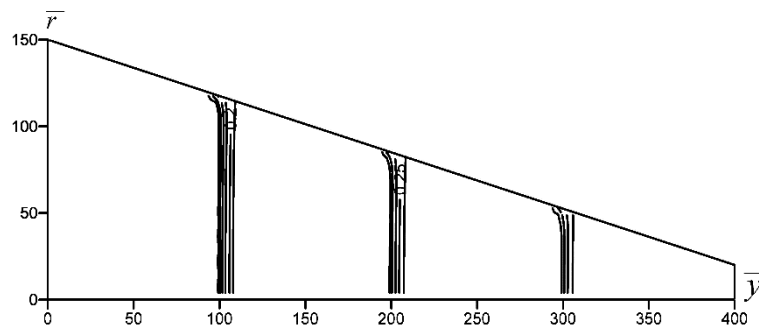


Рис. 4.60. Поля концентрации в моменты времени прохождения фронтом горения координат $\xi = 100, 200$ и 300 . $Bi = 0.023$, $R_K(0) = 150$

На рисунке 4.61 приведены скорости фронта горения для $R_K(0) = 100$. На рисунках 4.62 – 4.64 показаны графики скоростей в сравнении для каждого режима горения. Аналогично тому, как были приведены графики для $R_K(0) = 200$, $R_K(0) = 150$.

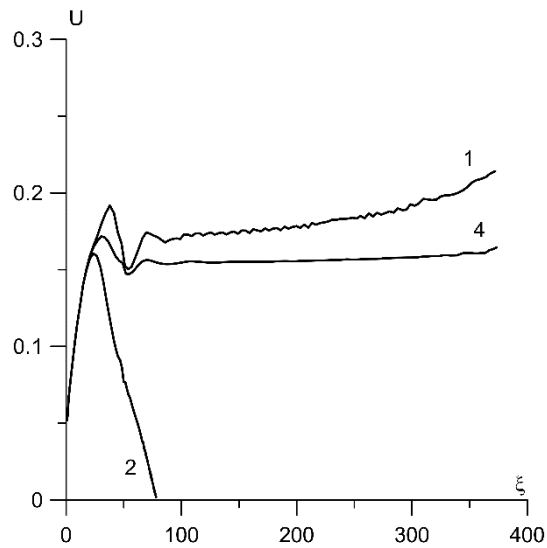


Рис.4.61 Зависимость скорости пламени от координаты при значениях числа Bi :
 1 – $Bi = 0$, 2 – $Bi = \infty$, 4 – $Bi = 0.013$, $R_K(0) = 100$, $R_K(\bar{L}) = 20$

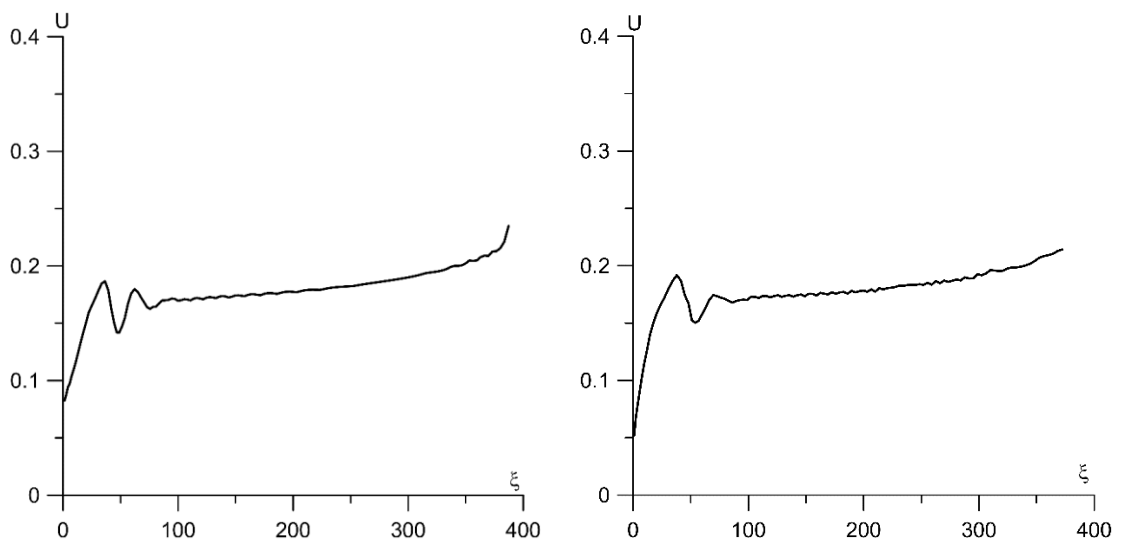


Рис. 4.62 Зависимость скорости пламени от координаты ξ при $Bi = 0$, $R_K(0) = 100$, $R_K(\bar{L}) = 20$. а) – модель (4.5)-(4.8), б) – модель (4.18)-(4.24)

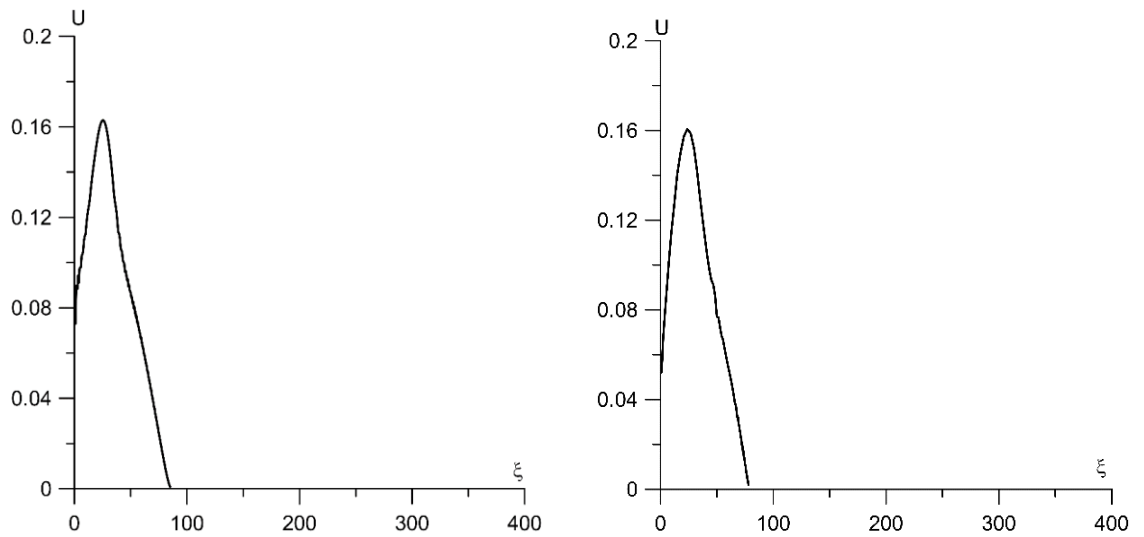


Рис. 4.63 Зависимость скорости пламени от координаты ξ при $Bi = \infty$, $R_K(0) = 100$, $R_K(\bar{L}) = 20$. а) – модель (4.5)-(4.8), б) – модель (4.18)-(4.24)

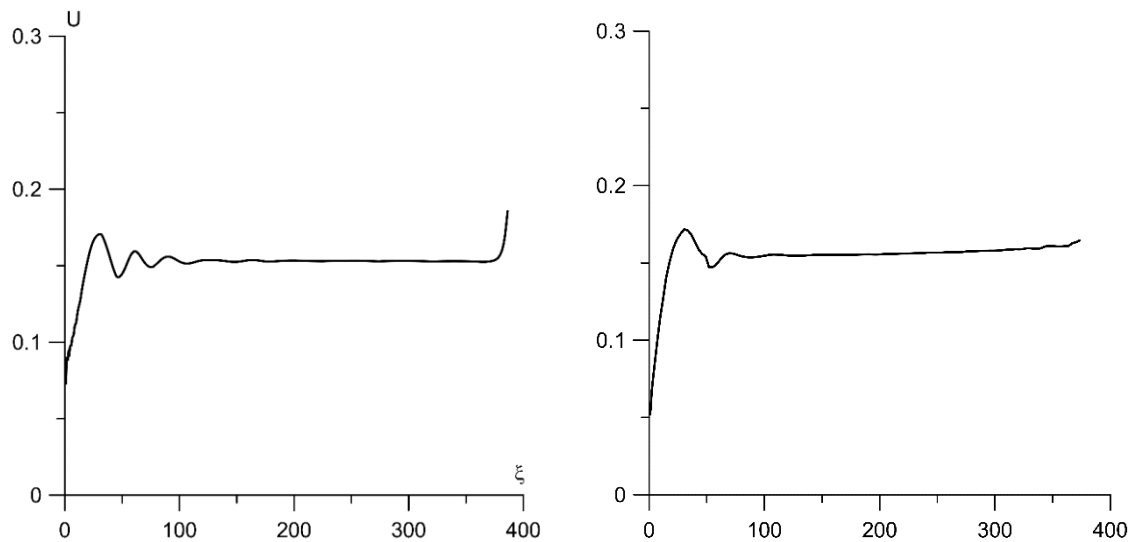


Рис. 4.64 Зависимость скорости пламени от координаты ξ при $R_K(0) = 100$, $R_K(\bar{L}) = 20$, $Bi = 0.015$ (а), $Bi = 0.013$ (б). а) – модель (4.5)-(4.8), б) – модель (4.18)-(4.24)

Для каждого режима горения приведены некоторые графики распределения температур и концентраций по длине образца (рис. 4.65 – 4.69).

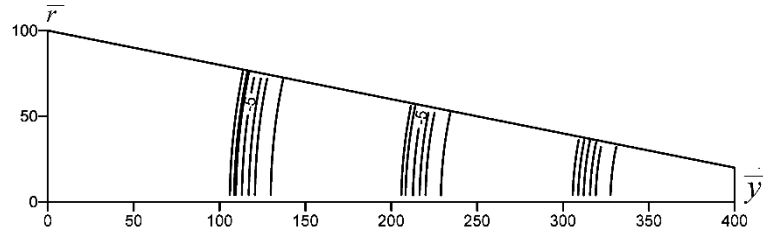


Рис. 4.65. Поля температуры в моменты времени прохождения фронтом горения координат $\xi = 100, 200$ и 300 . $Bi = 0$, $R_K(0) = 100$

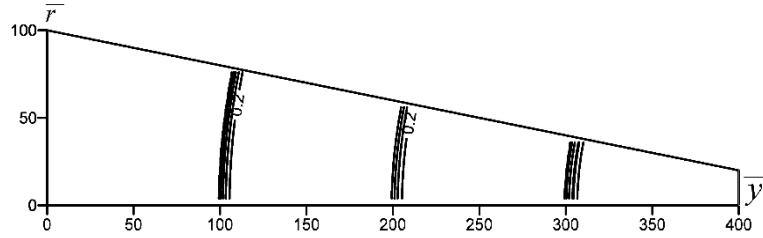


Рис. 4.66. Поля концентрации в моменты времени прохождения фронтом горения координат $\xi = 100, 200$ и 300 . $Bi = 0$, $R_K(0) = 100$

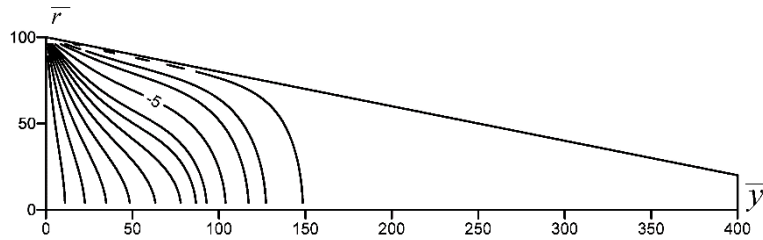


Рис. 4.67. Поле температуры в моменты времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 75$. $Bi = \infty$, $R_K(0) = 100$

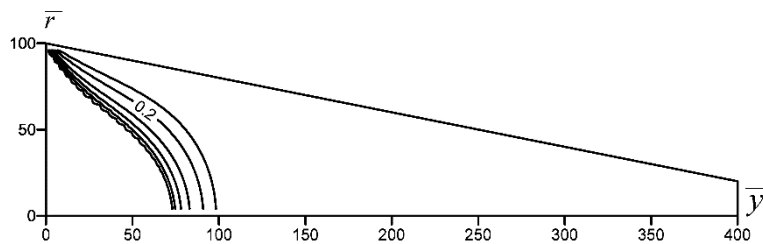


Рис. 4.68. Поле концентрации в моменты времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 75$. $Bi = \infty$, $R_K(0) = 100$

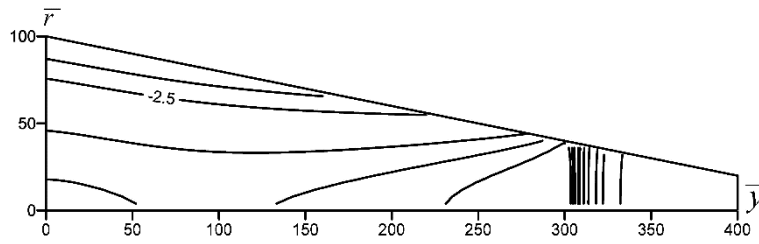


Рис. 4.69. Поле температуры в моменты времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 300$. $Bi = 0.013$, $R_k(0) = 100$

4.3.3 Исследование влияния плавления и теплоотдачи на закономерности распространения волны безгазового горения в коническом образце с учетом гетерогенности его структуры

В данном разделе приводятся результаты исследования влияния плавления и теплоотдачи на закономерности распространения волны безгазового горения в коническом образце с учетом гетерогенности его структуры. Гетерогенность структуры моделируется с использованием модели сферических реакционных ячеек. Плавление одного из компонентов СВС состава моделируется с использованием подхода Самарского как это реализовано в [96, 104-106]. Модель, изложенная в п. 2.3 главы 2, в двумерном осесимметричном варианте в безразмерной форме записи система уравнений модели имеет вид:

$$(1 + Ph \cdot \delta(\theta_m)) \frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{1}{\bar{r}} \frac{\partial}{\partial \bar{r}} \left(\bar{r} \frac{\partial \theta}{\partial \bar{r}} \right) + \frac{\partial^2 \theta}{\partial \bar{y}^2} + \frac{\partial \bar{V}}{\partial \tau} \left(\frac{1}{\gamma} + Ph \right). \quad (4.25)$$

Начальные условия:

$$\theta(\bar{r}, \bar{y}, 0) = \theta_0, \quad \theta_0 = -\left(\frac{1}{\gamma} + Ph \right), \quad \bar{V}(\bar{r}, \bar{y}, 0) = 1. \quad (4.26)$$

Граничные условия:

$$\theta(\bar{r}, 0, \tau) = 0, \quad \tau < \tau_f, \quad \frac{\partial \theta(\bar{r}, 0, \tau)}{\partial \bar{y}} = 0, \quad \tau \geq \tau_f,$$

$$\frac{\partial \theta(\bar{r}, \bar{L}, \tau)}{\partial \bar{y}} = -Bi \left(\theta(\bar{r}, \bar{L}, \tau) - \theta_0 \right),$$

$$\frac{\partial \theta(0, \bar{y}, \tau)}{\partial \bar{r}} = 0,$$

$$\frac{\partial \theta(R_K(\bar{y}), \bar{y}, \tau)}{\partial n} = -Bi(\theta(R_K(\bar{y}), \bar{y}, \tau) - \theta_0). \quad (4.27)$$

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} = \frac{1}{1/\gamma + Ph} \cdot e^{\frac{\theta}{1+\beta\theta}} \frac{1}{z^2} \frac{\partial}{\partial z} \left(z^2 \frac{\partial c}{\partial z} \right), \quad (4.28)$$

$$c(z_1(\tau), \tau) = c_1, \quad c(z_2(\tau), \tau) = c_2, \quad c(z, 0) = c_2, \quad z_1(0) \leq z \leq z_2(0). \quad (4.29)$$

$$\frac{\partial \bar{V}}{\partial \tau} = z_2^2 \frac{\partial z}{\partial \tau} - z_1^2 \frac{\partial z}{\partial \tau} = z_2^2 |\bar{U}_2| + z_1^2 |\bar{U}_1|. \quad (4.30)$$

Значения $\bar{U}_1$ и $\bar{U}_2$ определяются из соотношений (2.14), записанных в безразмерной форме:

$$\frac{1}{1/\gamma + Ph} e^{\frac{\theta}{1+\beta\theta}} \frac{\partial c}{\partial z} \Big|_{z_1(\tau)} = c_1 \bar{U}_1, \quad -\frac{1}{1/\gamma + Ph} e^{\frac{\theta}{1+\beta\theta}} \frac{\partial c}{\partial z} \Big|_{z_2(\tau)} = (1 - c_2) \bar{U}_2. \quad (4.31)$$

Обозначения: $Ph = \frac{E_d}{RT_a^2} \frac{a_0 Q_m}{c\rho}$ - параметр, характеризующий теплоту плавления реагента в СВС составе, θ_m - температура плавления, Q_m - теплота плавления, $\delta(\theta_m)$ - единичная дельта-функция. Другие обозначения аналогичны приведенным в п. 4.1.

На рисунке 4.70 показаны графики скоростей горения с учётом плавления для трёх значений интенсивности теплоотдачи, при $R_K(0) = 200$

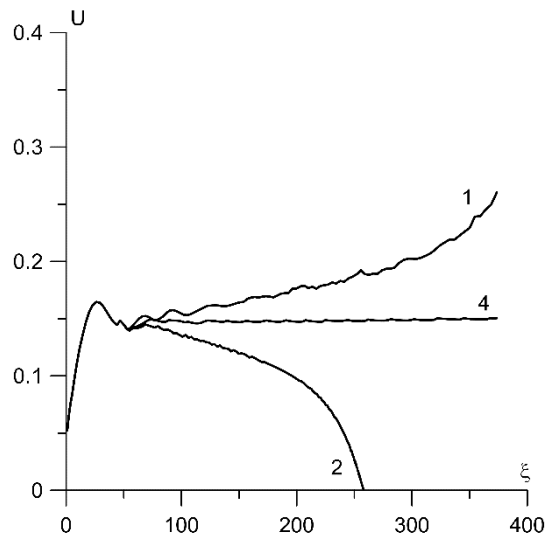


Рис.4.70. Зависимость скорости пламени от координаты ξ с учётом плавления при значениях числа Bi : 1 — $Bi = 0$, 2 — $Bi = \infty$, 4 — $Bi = 0.033$. $R_K(0) = 200$, $R_K(\bar{L}) = 20$

На рисунках 4.71, 4.72 построены поля температуры и концентрации для случая, когда скорость горения увеличивается с пройденным расстоянием вдоль конуса (кривая 1 на рис. 4.70).

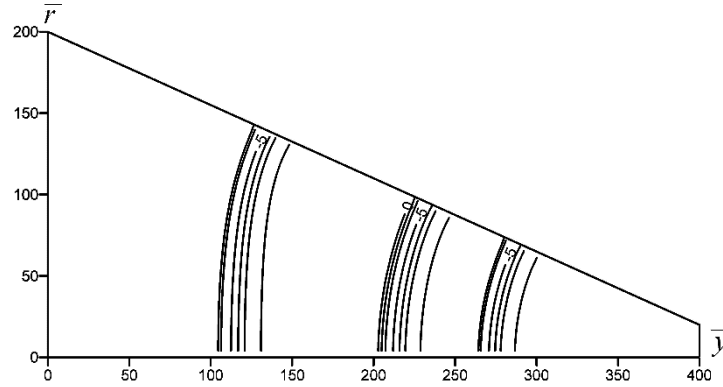


Рис. 4.71. Поля температуры в моменты времени прохождения фронтом горения координат $\xi = 100, 200$ и 300 . $Bi = 0$, $R_K(0) = 200$

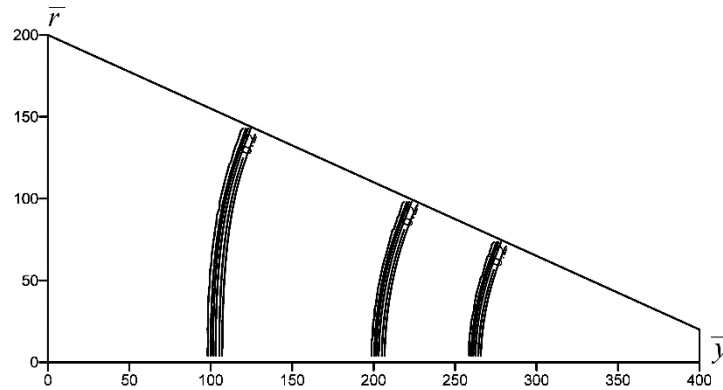


Рис. 4.72. Поля концентрации в моменты времени прохождения фронтом горения координат $\xi = 100, 200$ и 300 . $Bi = 0$, $R_K(0) = 200$

На рисунках 4.73 – 4.76 построены поля температуры и концентрации для режима, когда происходит срыв горения (кривая 2 на рис.4.70).

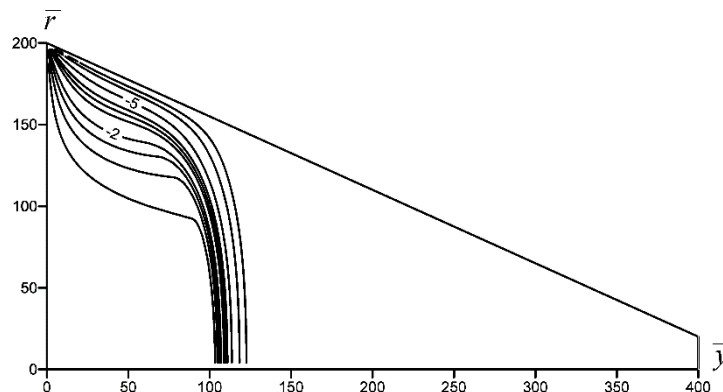


Рис. 4.73. Поле температуры в момент времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 100$. $Bi = \infty$, $R_K(0) = 200$

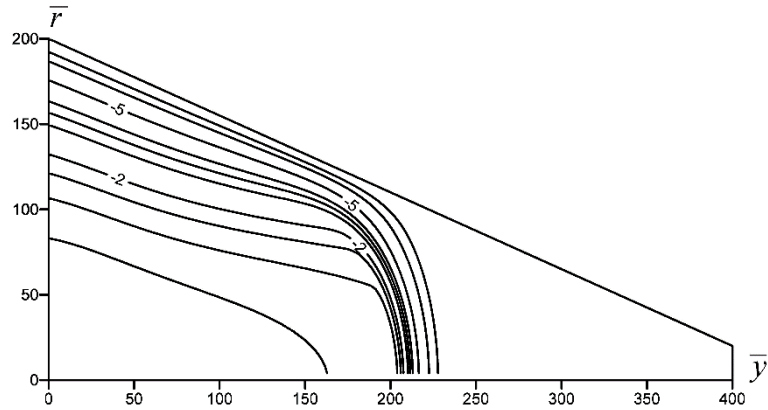


Рис. 4.74. Поле температуры в момент времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 200$. $Bi = \infty$, $R_K(0) = 200$

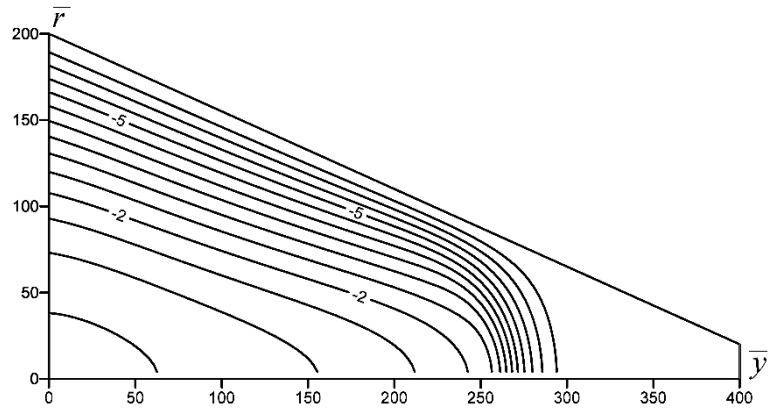


Рис. 4.75. Поле температуры в момент времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 260$. $Bi = \infty$, $R_K(0) = 200$

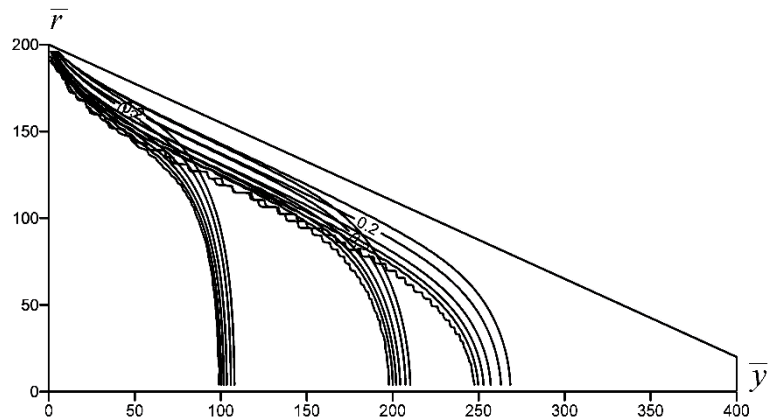


Рис. 4.76. Поля концентрации в моменты времени прохождения фронтом горения координат $\xi = 100, 200$ и 260 . $Bi = \infty$, $R_K(0) = 200$

Для режима, когда срыва горения не происходит (кривая 4 на рис. 4.70), распределения температуры и концентрации такие же, как в случае без учета

плавления.

На рисунках 4.77 – 4.79 приведено сравнение графиков скоростей всех трёх режимов распространения волны горения с учётом плавления и без учёта плавления при $R_K(0) = 200$. Графики скоростей без учёта плавления нарисованы штрихпунктирной линией.

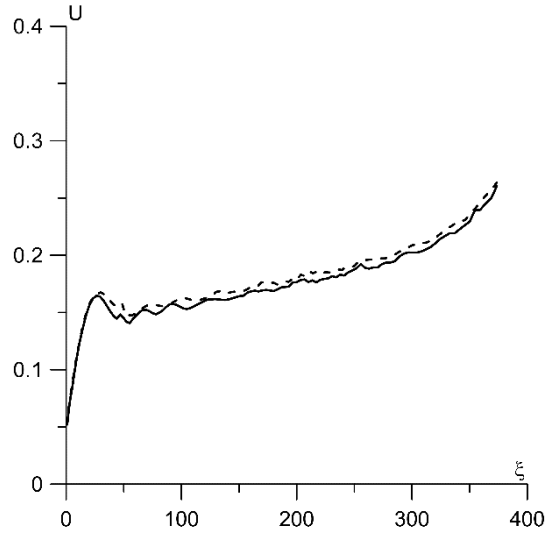


Рис. 4.77. Зависимость скорости пламени от координаты ξ с учётом и без учета плавления. $Bi = 0$, $R_K(0) = 200$

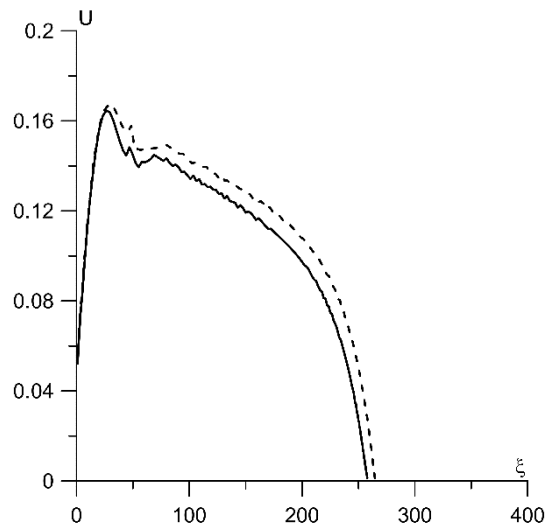


Рис. 4.78. Зависимость скорости пламени от координаты ξ с учётом и без учета плавления. $Bi = \infty$, $R_K(0) = 200$

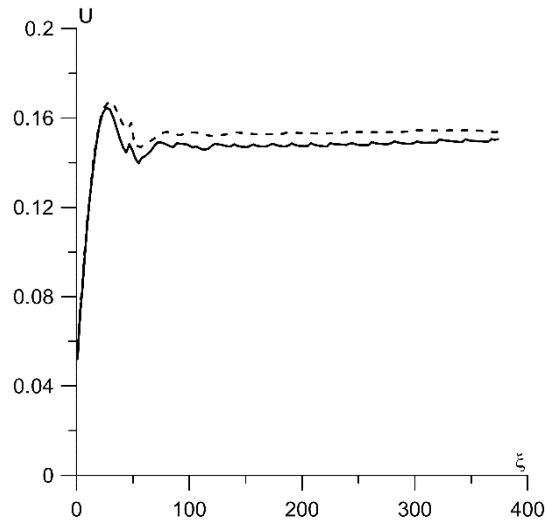


Рис. 4.79. Зависимость скорости пламени от координаты ξ с учётом и без учета плавления. $Bi = 0.033$, $R_K(0) = 200$

Из сравнительных рисунков видно, что скорости волны безгазового горения практически совпадают, плавление оказывает слабое влияние на скорость волны безгазового горения (на рис. 4.77 – 4.79). На рисунках 4.80, 4.81 показаны графики скоростей горения с учётом плавления для трёх режимов распространения скорости пламени при $R_K(0) = 150$, $R_K(0) = 100$. Графики скоростей на рисунках 4.80, 4.81 качественно соответствуют расчетам без учета плавления (на рис. 4.51 и 4.61).

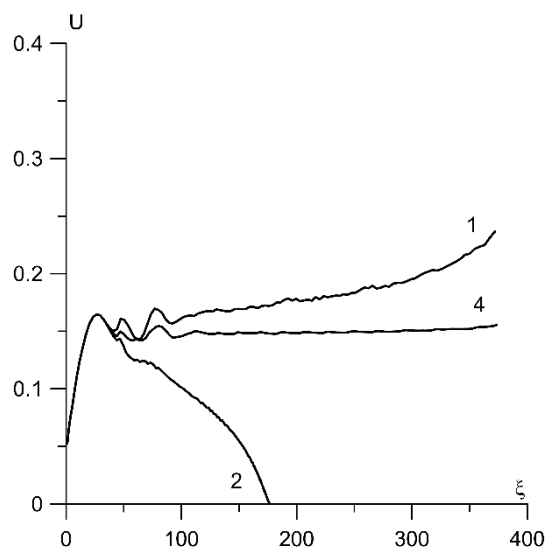


Рис. 4.80. Зависимость скорости пламени от координаты ξ с учётом плавления при значениях числа Bi : 1 – $Bi = 0$, 2 – $Bi = \infty$, 4 – $Bi = 0.023$, $R_K(0) = 150$, $R_K(\bar{L}) = 20$

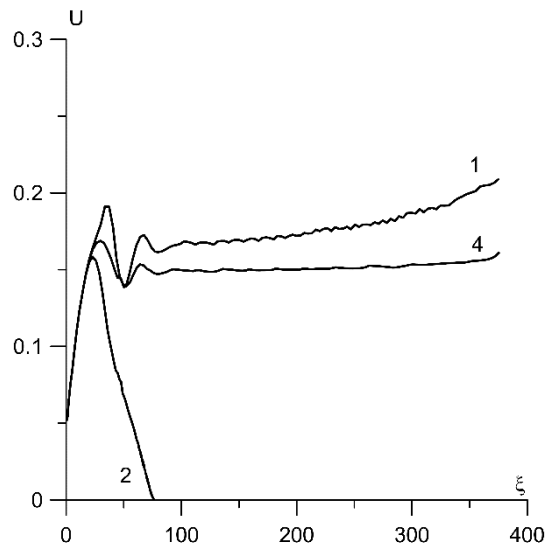


Рис.4.81. Зависимость скорости пламени от координаты ξ с учётом плавления при значениях числа Bi : 1 – $Bi = 0$, 2 – $Bi = \infty$, 4 – $Bi = 0.013$, $R_K(0) = 100$, $R_K(\bar{L}) = 20$

Представленные в данной главе результаты численных исследований влияния теплоотдачи на закономерности распространения волны горения в коническом образце с учётом гетерогенности структуры могут быть использованы для планирования экспериментов для анализа реакций безгазового горения. При этом нужно учитывать, что в зависимости от значения числа Bi наблюдаются разные режимы горения, в том числе режим без срыва горения и со срывом горения. В последнем из перечисленных режимов важным является величина недогоревшей части образца. Здесь следует принять во внимание зависимость данной величины от числа Bi , а также от угла полураствора конуса.

Выводы по главе 4

1. Проведено численное исследование распространения волны горения в коническом образце СВС состава при наличии теплоотвода на внешних границах в двухмерной осесимметричной постановке.
2. Определены посредством вычислительного эксперимента критические величины теплоотвода, приводящие к срыву горения.
3. Определены величины недогоревшего слоя в зависимости от интенсивности теплоотдачи и геометрических величин конического образца СВС состава.
4. Проведен сравнительный анализ результатов расчетов скорости для двух моделей безгазового горения с учетом и без учета гетерогенности структуры СВС состава конического образца. Анализ показал, что зависимости скорости распространения волны безгазового горения качественно совпадают.
5. Проведено исследование влияния плавления на закономерности распространения волны безгазового горения в коническом образце с учётом гетерогенности его структуры. Анализ показал, что плавление оказывает слабое влияние на скорость волны безгазового горения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

По результатам выполненной работы сформулированы выводы:

1. Проведено численное моделирование безгазового горения с учётом гетерогенности структуры образцов, показавшее качественное согласие теоретической и экспериментальной зависимости скорости распространения безгазового горения от масштаба гетерогенности структуры СВС состава. Сравнение результатов численного моделирования горения с использованием модели плоских и сферических реакционных ячеек показало отличие скорости распространения волны безгазового горения в 1.7 раза.

2. Учет гетерогенности структуры образцов с использованием моделей плоских и сферических реакционных ячеек, и влияния образовавшегося слоя продукта на диффузию, не влияет на область существования автоколебательного режима распространения волны безгазового горения.

3. Результаты моделирования нестационарных процессов безгазового горения конического образца, показали, что учет гетерогенности уточняет величину несгоревшей части конуса при теплоотдаче. Получены зависимости толщины непрореагировавшего слоя от числа Bi и различных углах полураствора конуса.

4. Расчетно-теоретический анализ скорости горения многослойных биметаллических нанопленок показал удовлетворительное согласие значений скорости распространения волны безгазового горения с экспериментальными данными.

5. Разработанные методики расчёта могут быть использованы при теоретическом анализе нестационарного безгазового горения СВС систем с учётом их гетерогенной структуры, для определения скорости горения, исследования влияния теплоотдачи на закономерности распространения волны горения в коническом образце, планирования экспериментов по анализу структуры фронта горения.

Результаты исследований опубликованы в работах [115–124].

Список использованной литературы

1. Мержанов А.Г., Боровинская И.П., Шкиро В.М. Явление волновой локализации автотормозящихся твердофазных реакций. Диплом №287. СССР. Приор. от 05.07.67. Бюлл. изобр., 1984, №32, с.3; Вестн. АН СССР, 1984, №10, с.141.
2. Мержанов А.Г., Шкиро В.М., Боровинская И.П. Пат. Франция №2088668, 1972; Пат. США №3726643, 1973; Пат. Англия №1321084, 1974; Пат. Япония №1098839, 1982.
3. Мержанов А.Г., Боровинская И.П. Самораспространяющийся высокотемпературный синтез тугоплавких неорганических соединений. Докл. АН СССР. – 1972. – Т.204, №2, с.366-369.
4. Рогачев А. С., Мукасян А.С. Горение для синтеза материалов: введение в структурную макрокинетику. – М.: Физматлит, 2013. – 400 с.
5. Семенов Н.Н. К теории процессов горения // Журн. Рус. Физ.-хим. Об-ва. – 1928. Т.60, №3. – с.241-250
6. Семенов Н.Н. Тепловая теория горения и взрывов // Успехи физ.наук. – 1940. – Т.23, №3. – с.251
7. Мержанов А.Г. Твердопламенное горение. – Черноголовка: ИСМАН, 2000. – 224 с.
8. Стовбун В.П., Кедрова Т.И., Барзыкин В.В. Зажигание систем с тугоплавкими продуктами реакции // Физика горения и взрыва. 1972. Т. 18. №3. С. 349–354.
9. Стовбун В.П., Барзыкин В.В., Шкадинский К.Г. О роли тепловых потерь излучением при зажигании безгазовых гетерогенных систем лучистым потоком // Физика горения и взрыва. 1977. Т. 13. №6. С. 821–827.
10. Ермаков В.И., Струнина А.Г., Барзыкин В.В. Экспериментальное исследование процесса зажигания безгазовых систем волной горения // Физика горения и взрыва. 1976. Т. 12. №2. С. 211–217.
11. Ермаков В.И., Струнина А.Г., Барзыкин В.В. Экспериментальное

исследование влияния теплотерь на процесс зажигания безгазовых систем волной горения // Физика горения и взрыва. 1978. Т. 14. №6. С. 36–44.

12. Амосов А.П., Боровинская И.П., Мержанов А.Г. Порошковая технология самораспространяющегося высокотемпературного синтеза материалов: Учеб. пособ. / Под научной редакцией В.Н. Анциферова. – М.: Машиностроение–1, 2007. – 567 с.

13. Мержанов А.Г. Проблемы технологического горения // Процессы горения в химической технологии и металлургии. Черноголовка, 1975.

14. Зельдович Я.Б., Франк-Каменецкий Д.А. Теория теплового распространения пламени. – Журн. физ. химии, 1938, т.12, в.1, с.100-105

15. Зельдович Я.Б. Теория горения и детонации газов. – М. – Л.: Изд-во АН СССР, 1944. – 71 с.

16. Зельдович Я.Б. К теории распространения пламени. – Журн. физ. химии, 1948, т.22, в.1, с.27-49.

17. Merzhanov A.G. Solid flames: Discovery, concepts and horizons of cognition // Combustion Sci. Technology, 1994. Vol. 98. No. 4-6. P. 307-336.

18. Merzhanov A.G. Worldwide evolution and present status of SHS as a branch of modern R & D (to the 30th Anniversary of SHS) // Int. J. Self-Prop. High-Temp. Synt., 1997. Vol. 6. No.2. P. 119-163.

19. Шкиро В.М. Синтез карбидов при горении смесей переходных металлов с углеродом // Тр. конф. молодых ученых по физ. химии, хим. физике и физике твердого тела. — Черноголовка, 1970. С. 144–145.

20. Итин В.И., Найбороденко Ю.С., Братчиков А.Д., Будкевич Н.П., Коростелев С.В., Шолохов Л.В. Самораспространяющийся высокотемпературный синтез силицидов и соединений никеля с титаном // Изв. ВУЗов. Физика. 1975. №3. С. 133–135.

21. Найбороденко Ю.С., Итин В.И., Савицкий К.В. Экзотермические эффекты при спекании смеси порошков никеля и алюминия // Изв. Вузов.Физ., 1968. №10. С. 27–35, 103–108.

22. Найбороденко Ю.С. Итин В.И. Исследование процесса безгазового

горения смесей порошков разнородных металлов. I. Закономерности и механизм горения // Физика горения и взрыва. 1975. Т. 11. №3. С. 343–353.

23. Подергин В.А., Неронов В.А., Яровой В.Д., Маланов М.Д. Синтез алюминидов некоторых переходных металлов // Процессы горения в химической технологии и металлургии. – Черноголовка, 1975.

24. Китлер В.Д. Кирдяшкин А.И., Максимов Ю.М. Особенности горения крупногетерогенной порошковой смеси разнородных металлов на примере системы Ni-Al// Сборник докладов пятой всероссийской конференции «Фундаментальные и прикладные проблемы современной механики», 3 – 5 октября 2006, Томск.

25. Найбороденко Ю.С., Итин В.И. Исследование процесса безгазового горения смесей порошков разнородных металлов. II. Влияние состава смесей на фазовый состав продуктов и скорость горения // Физика горения и взрыва. 1975. №5. С. 734–738.

26. Найбороденко Ю.С., Итин В.И. Закономерности безгазового горения смесей разнородных порошков. В кн. Горение и взрыв. Материалы IV Всесоюзн. Симп. по горению и взрыву. М.: Наука, 1977, с.201-206.

27. Найбороденко Ю.С., Итин В.И., Мержанов А.Г., Боровинская И.П., Ушаков В.П., Маслов В.М. Безгазовое горение смеси металлов и самораспространяющийся высокотемпературный синтез интерметаллидов. Теория и техн. металлотермических процессов. Новосибирск: Наука, 1974, с.117-123.

28. Найбороденко Ю.С., Итин В.И., Мержанов А.Г., Боровинская И.П., Ушаков В.П., Маслов В.М. Безгазовое горение смеси металлов и самораспространяющийся высокотемпературный синтез интерметаллидов // Изв. ВУЗов, Физика, 1973, №6, с.142-146.

29. Лапшин О.В., Овчаренко В.Е. Математическая модель высокотемпературного синтеза интерметаллического соединения Ni_3Al на стадии воспламенения // Физика горения и взрыва. 1996. Т. 32, № 2. С. 46-54.

30. Лапшин О.В., Овчаренко В.Е. Математическая модель

высокотемпературного синтеза алюминида никеля Ni_3Al в режиме теплового взрыва порошковой смеси чистых элементов // Физика горения и взрыва. 1996. Т. 32, № 3. С. 68-76.

31. Новиков Н.П., Боровинская И.П., Мержанов А.Г. Термодинамический анализ реакций самораспространяющегося высокотемпературного синтеза // Процессы горения в химической технологии и металлургии. Черноголовка, 1975. С.174-188.

32. Мамян С.С., Петров Ю.М., Стесик Л.Н. Термодинамическое исследование условий образования некоторых тугоплавких соединений при горении // Процессы горения в химической технологии и металлургии / Под ред. А.Г. Мержанова. Черноголовка, 1975.

33. Мержанов А.Г., Китаин М.М., Гольдшлегер У.И., Штейнберг А.С. Термодинамический анализ взаимодействия окисла железа с метан-кислородной смесью. Докл. АН СССР, 1977, т.237, №2, с.391-394.

34. Итин В.И., Найбороденко Ю.С. Высокотемпературный синтез интерметаллических соединений. Томск: Изд-во Томск.ун-та, 1989. – 214 с.

35. Мержанов А.Г., Мукасян А.С. Твердопламенное горение. М.: ТОРУС ПРЕСС, 2007. 336 с.

36. Евстигнеев В.В. Самораспространяющийся высокотемпературный синтез. Современные проблемы // Ползуновский вестник. 2005. №4-1, с.21-35.

37. T.Bilyan, K.Manukyan, S.Kharatyan and J.Puszynski. Mechanochemically and thermally activated combustion of B-TiN system // VIII International Symposium on Self-Propagating High Temperature Synthesis, Italy, 21-24 June, 2005, Abstracts Book. P.13-15.

38. B.Cochepin, S.Dubois, V.Gauthier, M.F.Beaufort, D.Vrel and J.P.Bonnet. Nanocrystalline TiC Combustion Synthesized from nanostructured reactants and TiC diluent // VIII International Symposium on Self-Propagating High Temperature Synthesis, Italy, 21-24 June, 2005, Abstracts Book. P.28-30.

39. Талако Т.Л., Григорьева Т.Ф., Лецко А.И., Баринаева А.П., Витязь П.А., Ляхов Н.З. Особенности самораспространяющегося высокотемпературного

синтеза нанокomпозиционных порошков интерметаллид/оксид с использованием механокomпозитов-прекурсоров // Физика горения и взрыва. 2009. Т. 45, № 5. С. 51-59.

40. Корчагин М.А., Бохонов Б.Б. Самораспространяющийся высокотемпературный синтез квазикристаллов // Физика горения и взрыва. 2004. Т. 40, № 4. С. 74-81.

41. Сычев А.Е., Мержанов А.Г. Самораспространяющийся высокотемпературный синтез наноматериалов // Успехи химии. 2004. Т.73. №2. С.157-170.

42. Левашов Е.А., Рогачев А.С., Курбаткина В.В., Максимов Ю.М., Юхвид В.И. Перспективные материалы и технологии самораспространяющегося высокотемпературного синтеза: учебное пособие – М.: Изд.Дом МИСиС, 2011. – 377 с.

43. Максимов Э.И., Мержанов А.Г., Шкиро В.М. Безгазовые составы как простейшая модель горения нелетучих конденсированных систем // Физика горения и взрыва. 1965. Т.1, № 4. С. 24-30.

44. Мержанов А.Г. Самораспространяющийся высокотемпературный синтез // Физическая химия. Современные проблемы / под ред. Я.М. Колотыркина. М.: Химия, 1983, с.5-44.

45. Rise R.W. Review. Microstructural aspects of fabricating bodies by self-propagating synthesis. J.Mater. Sci., 1991, v.26, p.6533-6541.

46. Маслов В.М., Боровинская И.П., Мержанов А.Г. К вопросу о механизме безгазового горения // Физика горения и взрыва. 1976. Т. 12, № 5. С. 703-709.

47. Маслов В.М., Воюев С.И., Мержанов А.Г. Экспериментальное определение некоторых термодинамических параметров методом горения. Черноголовка: ИСМАН-ПРЕСС, 1990.

48. Филоненко А.К., Бунин В.А., Вершинников В.И. Особенность зависимости скорости горения от диаметра для некоторых безгазовых составов // Химическая физика. – 1982. – Т.1. – №2, с.260-264.

49. Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплоперенос в химической

кинетики. М.: Наука, 1987, 483 с.

50. Мержанов А.Г., Филоненко А.К., Боровинская И.П. Новые явления при горении конденсированных систем // Докл. АН СССР. – 1973. – Т.208, №4. – с.892-894.

51. И. П. Боровинская, А. Г. Мержанов, Н. П. Новиков, А. К. Филоненко. Безгазовое горение смесей порошков переходных металлов с бором // Физика горения и взрыва. 1974. Т. 10, № 1. С. 3-15.

52. Ивлева Т.П., Мержанов А.Г., Шкадинский К.Г. Математическая модель спинового горения // Докл. АН СССР. – 1978. – Т.239, №5. – с.1086-1088.

53. Ивлева Т.П., Мержанов А.Г., Шкадинский К.Г. О закономерностях спинового режима распространения фронта горения // Физика горения и взрыва. 1980. Т. 16, № 2. С. 3-10.

54. Ивлева Т.П., Мержанов А.Г. Математическое моделирование трехмерных спиновых режимов волн безгазового горения // Докл. РАН. – 1999. – Т.369, №2. – с.186-191.

55. Ивлева Т.П., Мержанов А.Г. Трехмерные спиновые волны безгазового горения // Докл. РАН. – 2000. – Т.371, №6. – с.753-758

56. Максимов Ю.М., Пак А.Т., Лавренчук Г.В., Найбороденко Ю.С., Мержанов А.Г. Спиновое горение безгазовых систем // Физика горения и взрыва. 1979. Т. 15, № 3. С. 156-159.

57. Мержанов А.Г., Дворянкин А.В., Струнина А.Г. Новая разновидность спинового горения // Докл. АН СССР, 1982, т.267, №4, с.869-872.

58. Струнин Д.В. О хаотизации колебаний фронта горения конденсированных систем при наличии плавления // Ж. вычисл. мат. и мат. физ., 1991, т.31, с.543-550.

59. Шкадинский К.Г., Хайкин Б.И., Мержанов А.Г. Распространение пульсирующего фронта экзотермической реакции в конденсированной фазе // Физика горения и взрыва. 1971. Т. 7, № 1. С. 19-28.

60. Puszynski J.A., Degraw A. Past and Current Accomplishments in Production of Ceramic Powders and Structures by Self-Propagating High-Temperature Synthesis

// *Advances in Science and Technology*. 2010.V. 63. P. 228–235.

61. Концепция развития СВС как области научно-технического прогресса. Черноголовка, «Территория», 2003, 368 с.

62. Мержанов А. Г. Теория безгазового горения (препринт). Черноголовка. 1973. 25 с.

63. Алдушин А.П., Хайкин Б.И. К теории горения смесевых систем, образующих конденсированные продукты реакции // *Физика горения и взрыва*. 1974. Т. 10, № 3. с. 313-323.

64. Хайкин Б.И. К теории процесса горения в гетерогенных конденсированных средах // *Процессы горения в химической технологии и металлургии*. Черноголовка: Изд-во ОИХФ АН СССР, 1975. С. 227-244

65. Алдушин А.П., Каспарян С.Г., Шкадинский К.Г. Распространение фронта экзотермической реакции в конденсированных смесях, образующих двухфазные продукты // *Горение и взрыв: материалы IV Всесоюз.симпоз. по горению и взрыву*. – М.: Наука, 1977. – с.207-212.

66. Околович Е.В., Мержанов А.Г., Хайкин Б.И., Шкадинский К.Г. Распространение зоны горения в плавящихся конденсированных смесях // *Физика горения и взрыва*. 1977. Т. 13, № 3. С. 326-335.

67. Новожилов Б.В. Скорость распространения фронта экзотермической реакции в конденсированной фазе // *Доклады АН СССР*. – 1961. – Т.141, №1. – с.151-154.

68. Алдушин А.П., Мержанов А.Г., Хайкин Б.И. О некоторых особенностях горения конденсированных систем с тугоплавкими продуктами реакции // *Доклады АН СССР*. – 1972. – Т.204, №5. – с.1139-1142.

69. Хайкин Б.И. Распространение зоны горения в системах, образующих конденсированные продукты реакции. В кн: *Горение и взрыв. Материалы IV Всесоюзного симпозиума по горению и взрыву*. М.: Наука, 1977, с.121-137.

70. Мержанов А.Г., Вадченко С.Г. Гетерогенная модель распространения пламени // *Доклады РАН*. - 1997. - Т. 352. № 4. С.487-489.

71. Мержанов А.Г. Распространение твердого пламени в модельной

гетерогенной среде // Доклады РАН. - 1997. - Т. 353. № 4. С.504-507.

72. Мержанов А.Г., Перегудов А.Н., Гонтковская В.Т. Гетерогенная модель твердопламенного горения: численный эксперимент// Доклады РАН. 1998. Т. 360. № 2. С.217-219.

73. Хайкин Б.И., Мержанов А.Г. К теории теплового распространения фронта химической реакции // Физика горения и взрыва. – 1966. – №3 – с.36-46.

74. Некрасов Е.А., Смоляков В.К., Максимов Ю.М. Математическая модель горения системы титан – углерод // Физика горения и взрыва. – 1981. – Т.17. – №5 – с.39-46.

75. Некрасов Е.А., Смоляков В.К., Максимов Ю.М. О влиянии граничной кинетики в процессах стационарного горения безгазовых систем // Физика горения и взрыва. – 1982. – Т.18. – №3 – с.59-62.

76. Смоляков В.К., Некрасов Е.А., Максимов Ю.М. Моделирование безгазового горения с фазовыми превращениями// Физика горения и взрыва. – 1984. – №2 – с.63-73.

77. Смоляков В.К., Лапшин О.В. Формирование макроскопической структуры продукта в режиме силового СВС-компактирования // Физика горения и взрыва. 2002. Т. 38, № 2. С. 26-35.

78. Махвиладзе Г.М., Новожилов Б.В. Двумерная устойчивость горения конденсированных систем // Журн. прикл. мех. и техн. физики, 1971, №5, с.51-59.

79. Шкадинский К.Г., Хайкин Б.И. Влияние теплотерь на распространение фронта экзотермической реакции в конденсированной фазе. – В кн.: Горение и взрыв: Матер. III Всесоюзного симпозиума по горению и взрыву. М.: Наука, 1972, с.104-109.

80. Максимов Э.И., Шкадинский К.Г. Об устойчивости стационарного горения безгазовых составов // Физика горения и взрыва. – 1971. – №3 – с.454-457.

81. Алдушин А.П., Мартемьянова Т.М., Мержанов А.Г., Хайкин Б.И., Шкадинский К.Г. Автоколебательное распространение фронта горения в

гетерогенных конденсированных средах // Физика горения и взрыва. 1973. Т. 9, № 5. С. 613-626.

82. Шкадинский К.Г. Особенности выхода на установившийся режим горения при зажигании безгазовых составов накалиной поверхностью // Физика горения и взрыва. – 1971. – №3 – с.332-336.

83. Алдушин А.П., Хайкин Б.И. Влияние теплофизических характеристик на устойчивость стационарного горения безгазовых систем // Физика горения и взрыва. – 1975. – №1 – с.128-130.

84. Рогачев А.С., Григорян А.Э., Илларионова Е.В., Канель И.Г., Мержанов А.Г., Носырев А.Н., Сачкова Н.В., Хвесюк В.И., Цыганков П.А. Безгазовое горение многослойных биметаллических нанопленок Ti/Al // Физика горения и взрыва. 2004. Т. 40, № 2. С. 45-51.

85. Максимов Ю.М., Мержанов А.Г., Пак А.Т., М. Кучкин М.Н. Режимы неустойчивого горения безгазовых систем // Физика горения и взрыва. 1981. Т. 17, № 4. с. 51-58.

86. Щербак С.Б. Режимы неустойчивого горения образцов безгазовых составов в форме стержней квадратного и кругового сечения. // Физика горения и взрыва. – 1983. – Т. 19, №5. – С. 9-12.

87. Щербак С.Б. Пространственные режимы неустойчивого горения образца безгазового состава в форме длинного стержня квадратного сечения. // Физика горения и взрыва. – 1984. – Т. 20, №2. – С. 23-28.

88. Алдушин А.П., Вольперт В.А., Филипенко В.П. Влияние плавления реагентов на устойчивость горения безгазовых систем // Физика горения и взрыва. 1987. Т. 23, № 4. С. 35-41.

89. Прокофьев В.Г., Смоляков В.К. Нестационарные режимы горения безгазовых систем с легкоплавким инертным компонентом // Физика горения и взрыва. 2002. Т. 38, № 2. С. 21-25.

90. Смоляков В.К. Фазовые переходы в волне безгазового горения // Химическая физика, 2002. Т.21, №11. С. 97-105.

91. Некрасов Е.А., Тимохин А.М., Пак А.Т. К теории безгазового горения с

фазовыми превращениями // Физика горения и взрыва. – 1990. – Т. 26, № 5. – С. 79-85.

92. Мержанов А.Г., Рогачев А.С., Мукасян А.С., Хусид Б.М. Макрокинетика структурных превращений при безгазовом горении смесей порошков титана и углерода // Физика горения и взрыва. – 1990. – Т. 26, № 1. – С. 104-114.

93. Смоляков В.К. Макроструктурные превращения в процессах безгазового горения // Физика горения и взрыва. – 1990. – Т. 26, № 3. – С. 55-61

94. Прокофьев В.Г., Смоляков В.К. Нестационарные режимы горения бинарной безгазовой смеси при зажигании накаливаемой стенки // Физика горения и взрыва. 2005. Т. 41, № 2. С. 45-50.

95. Алдушин А.П., Мержанов А.Г. Безгазовое горение с фазовыми превращениями // Докл. АН СССР. 1977. Т.236, №5, с.1133-1136.

96. Прокофьев В.Г., Смоляков В.К. Особенности зажигания и неустойчивые режимы безгазового горения образца в форме диска // Физика горения и взрыва. 2017. Т. 53, № 1. С. 43-47.

97. Прокофьев В.Г., Смоляков В.К. Формирование макроструктуры продукта в нестационарном СВС-процессе // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2012. №1 (17). С. 103-114.

98. Князева А.Г. Приложение макрокинетики к моделированию технологических процессов // Физическая мезомеханика. 2004. Т. 7, № S1-1. С. 12-15.

99. Чащина А.А., Князева А.Г. Напряжения в зоне реакции в процессе соединения материалов с использованием синтеза в твердой фазе // Известия Томского политехнического университета. Инжиниринг георесурсов. 2006. Т. 309, № 5. С. 107-113.

100. Чащина А.А., Князева А.Г. Режимы распространения твердофазной реакции в щели между двумя инертными пластинами // Физическая мезомеханика. 2004. Т. 7, № S1-1. С. 82-88.

101. Чащина А.А., Князева А.Г. Режимы соединения материалов с использованием синтеза в твёрдой фазе // Химия в интересах устойчивого развития. 2005. Т. 13, № 2. С. 343-350.
102. Алигожина К.А., Князева А.Г. Распространение фронта химической реакции в условиях СВС-сварки в режиме горения // В сборнике: Высокие технологии в современной науке и технике. Сборник научных трудов в 2-х томах. Национальный исследовательский Томский политехнический университет; Редакторы: Лопатин В.В., Яковлев А.Н. 2013. С. 338-340.
103. Алигожина К.А., Князева А.Г. Моделирование режимов превращения, реализующихся при соединении разнородных материалов с использованием синтеза в твердой фазе // Математическое моделирование в естественных науках. 2013. №1. С. 8-10.
104. Зельдович Я.Б., Баренблатт Г.И., Либрович В.Б., Махвиладзе Г.М. Математическая теория горения и взрыва. – М: Наука, 1980. – 478 с.
105. Самарский А.А. Теория разностных схем. – М.: Наука, 1977. – 388 с.
106. Чернецова В.В., Шкадинский К.Г. Математическое моделирование макрокинетики взаимодействия во фронте горения гетерогенных составов с конденсированными продуктами реакции // Химическая физика процессов горения и взрыва. Материалы XII симпозиума по горению и взрыву. Часть I. Черноголовка 2000. С. 153-155.
107. Болтакс Б.И. Диффузия в полупроводниках. – М: Физматгиз. 1961. 462 с.
108. Новожилов Б.В. Нестационарное горение твердых ракетных топлив. – М.: Наука, 1973. – 176 с.
109. Прокофьев В.Г., Смоляков В.К. Безгазовое горение системы термически сопряженных слоев // Физика горения и взрыва. 2016. Т. 52, № 1. С. 70-75.
110. Прокофьев В.Г., Смоляков В.К. Влияние фазового перехода на трехмерные неустойчивые режимы безгазового горения // Физика горения и взрыва. 2016. Т. 52, № 3. С. 65-71.

111. Прокофьев В.Г., Смоляков В.К. Спиновые режимы горения безгазовых систем с плавлением одного из компонентов смеси // Химическая физика. 2016. Т. 35, № 12. С. 57-61.

112. Сеплярский Б.С., Кочетов Н.А., Кочетков Р.А. Влияние механической активации на скорость горения прессованных образцов и образцов насыпной плотности из смеси Ni + Al // Физика горения и взрыва. 2016. Т. 52, №3. С. 59-64.

113. Рогачёв А.С., Мукасян А.С. Горение гетерогенных наноструктурных систем (обзор) // Физика горения и взрыва. – 2010. – Т. 46, №3. – С. 3-30.

114. Stepanov B.V. and Rogachev A.S. Quenching of solid-phase combustion front of a symmetric sample by supercritical heat loss. – International Journal of Self-Propagating High-Temperature Synthesis Volume 1, Number 3, 1992. – p. 409-416

115. Крайнов А.Ю., Опышко А.Ф., Шульц Д.С. Моделирование распространения волны безгазового горения в коническом образце // Байкальские чтения: Наноструктурные системы и актуальные проблемы механики сплошной среды (теория и эксперимент): Тезисы докладов научной конференции. (Улан-Удэ, 19-22 июля 2010 г.). Ижевск, ИПМ УрО РАН. 2010. с. 121-124.

116. Крайнов А.Ю., Шульц Д.С. Срыв горения конического образца СВС-состава при внешнем теплоотводе // Труды Томского государственного университета. – Т.276. – Сер.физико-математическая: Молодёжная научная конференция Томского государственного университета 2010 г. – Томск: Изд-во Том.ун-та, 2010. – с.77-81.

117. Крайнов А.Ю., Шульц Д.С. Использование вычислительных технологий для определения закономерностей горения конденсированных систем // Инноватика-2011: Сборник материалов VII Всероссийской научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых учёных с элементами научной школы (26-28 апреля 2011 г.) / Под ред. А.Н.Солдатов, С.Л.Минькова. – Томск: Томское университетское издательство, 2011. – Т.2. – с. 86-91.

118. Крайнов А.Ю., Шульц Д.С. Математическое моделирование СВС процесса в гетерогенных реагирующих порошковых смесях. // Компьютерные исследования и моделирование, 2011. – Т.3 - №2 – с.147-153.

119. Shultz D.S., Krainov A.Yu. Mathematical modeling of gasless combustion taking into account the structure heterogeneity and the interdiffusion of reactants [Электронный ресурс] / PROCEEDINGS OF 7 th INTERNATIONAL SEMINAR ON FLAME STRUCTURE, July 11-15, 2011 Novosibirsk, Russia. - URL: <http://www.kinetics.nsc.ru/kcp/7ISFS/CD/Papers/OP-05.pdf> (дата обращения: 10.04.2018).

120. Шульц Д.С., Крайнов А.Ю. Численное моделирование безгазового горения с учётом гетерогенности структуры и зависимости диффузии от температуры // Физика горения и взрыва, 2012. – Т.48. – №5 – с.142-147.

121. Шульц Д.С., Крайнов А.Ю. Численное моделирование нестационарного горения безгазовых составов на основе модели диффузионной кинетики // Изв.вузов. Физика. – 2013. – Т.56. – №9/3. – С.223-225.

122. Шульц Д.С., Крайнов А.Ю. Численное моделирование нестационарного СВС с использованием модели реакционных ячеек // Успехи химической физики: Сб. тезисов докладов на II Всероссийской молодежной конференции, 19–24 мая 2013 г. — М.: Издательская группа «Граница», 2013. — с.37.

123. Шульц Д.С., Крайнов А.Ю. Численное моделирование безгазового горения с использованием модели сферических реакционных ячеек. // Труды Томского государственного университета – Т.296. Сер. Физико-математическая: Актуальные проблемы современной механики сплошных сред и небесной механики / под ред. М.Ю.Орлова. – Томск, 2015. – с. 189-195.

124. Шульц Д.С., Крайнов А.Ю. Численное моделирование безгазового горения с использованием модели плоских и сферических реакционных ячеек // Фундаментальные и прикладные проблемы современной механики (ФППСМ-2016): Сборник трудов IX всероссийской научной конференции, 21-25 сентября

2016 года, г.Томск. – Томск: Томский государственный университет, 2016. – с.448-450.