

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

А в т о р е ф е р а т
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Томск – 2018

Работа выполнена в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники.

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

Официальные оппоненты:

Лапшин Олег Валентинович, доктор физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Томский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук, Отдел структурной макрокинетики, ведущий научный сотрудник

Салганский Евгений Александрович, доктор физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем химической физики Российской академии наук, ведущий научный сотрудник

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем химико-энергетических технологий Сибирского отделения Российской академии наук.

Защита состоится «25» декабря 2018 года в 12 часов 00 минут на заседании диссертационного совета Д 212.269.13 при федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», по адресу: 634050, г. Томск, ул. Усова, д.7, уч. корпус 8, ауд. 217.

С диссертацией можно ознакомиться в Научно-технической библиотеке федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» и на официальном сайте: <http://portal.tpu.ru:7777/council/2803/worklist>

Автореферат разослан «___» 2018 г.

Ученый секретарь диссертационного совета
кандидат технических наук, доцент



Матвеев Александр
Сергеевич

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

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.

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.

В связи с этим, **целью** диссертации является:

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.

Работа частично выполнялась в рамках:

- Гранта РФФИ 15-03-02578А «Разработка математических моделей горения и расчет нестационарной скорости горения металлизированных твердых ракетных топлив».

- гранта РФФИ 11-08-00370А «Разработка научных и методических основ вычислительной технологии расчета нестационарных процессов вентиляции угольных шахт, в том числе при возникновении пожара»;

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).

Публикации. Основные результаты диссертации представлены в 10 печатных работах и 1 работе на электронном носителе, в том числе 3 статей журналов, входящих в Перечень рецензируемых научных изданий, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией при Министерстве образования и науки Российской Федерации для опубликования основных научных результатов диссертаций, 8 публикаций в материалах всероссийских и международных научных конференций. Общий объем публикаций автора – 5.22 п.л., личный вклад автора – 2.57 п.л.

Структура и объем диссертации:

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка использованной литературы. Объем диссертации составляет 137 страниц. Список использованных источников содержит 125 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.

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

$$c_k \rho \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \dot{Q}. \quad (1)$$

Начальные и граничные условия:

$$T(x, 0) = T_0, \quad T(0, t) = T_a, \quad \frac{\partial T(\infty, t)}{\partial x} = 0. \quad (2)$$

Уравнение диффузии компонентов в реакционной ячейке записывается в виде:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_0 e^{-E_a/RT} \frac{1}{y^m} \frac{\partial}{\partial y} \left(y^m \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right). \quad (3)$$

Уравнение диффузии (3) при $m = 0$ соответствует случаю плоских реакционных ячеек, при $m = 2$ – сферических реакционных ячеек. На рисунке 1 представлены схемы реакционных ячеек в виде плоского слоя и в виде шарика (сферические).

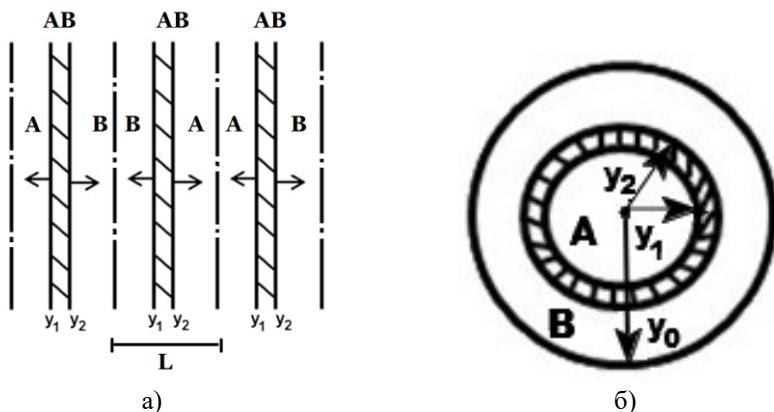


Рис. 1. Реакционные ячейки: а – плоские; б - сферические

Реакционная ячейка состоит из веществ А и В и продукта их синтеза – АВ. 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. Через образующийся и нарастающий слой продукта происходит диффузия реагентов и химическая реакция, при этом один из реагентов и продукт реакции АВ не плавятся. Смешения реагентов не происходит, реакция имеет гетерогенный характер. Размеры реакционных ячеек предполагаются одинаковыми, плотности веществ А, В и продукта АВ также одинаковы.

В уравнении (1) скорость тепловыделения \dot{Q} для плоских реакционных ячеек определяется в виде: $\dot{Q} = \frac{q}{L} \frac{\partial \delta}{\partial t}$, где q – тепловой эффект реакции, L – толщина плоской реакционной ячейки, δ – толщина слоя продукта.

Для сферических реакционных ячеек: $\dot{Q} = n \cdot q \cdot \frac{\partial V}{\partial t}$, $n = \frac{1}{V_0}$,

$V_0 = \frac{4}{3} \pi y_0^3$, $V = \frac{4}{3} \pi (y_2^3 - y_1^3) \frac{\partial V}{\partial t} = 4\pi \left(y_2^2 \frac{\partial y_2}{\partial t} - y_1^2 \frac{\partial y_1}{\partial t} \right)$, где n –

количество реакционных ячеек в единице объёма; V_0 – объём реакционных ячеек; y_1 и y_2 – внутренний и внешний радиус продукта АВ, образующегося в реакционных ячейках в виде шарового слоя.

Начальные и граничные условия для уравнения диффузии (3):

$$c(y_1(t), t) = c_1, \quad c(y_2(t), t) = c_2, \quad c(y, 0) = c_2, \quad y_1(0) < y < y_2(0). \quad (4)$$

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:

$$\begin{aligned} D_0 e^{-E_d/RT} \left. \frac{\partial c}{\partial y} \right|_{y_1(t)} &= c_1 \frac{\partial y_1}{\partial t}, \quad \frac{\partial y_1}{\partial t} = u_1, \\ -D_0 e^{-E_d/RT} \left. \frac{\partial c}{\partial y} \right|_{y_2(t)} &= (1 - c_2) \frac{\partial y_2}{\partial t}, \quad \frac{\partial y_2}{\partial t} = u_2. \end{aligned} \quad (5)$$

Список использованных обозначений: t – время; x – координата; T – температура; c_k – удельная теплоёмкость; ρ – плотность; λ – коэффициент теплопроводности; 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 $y_2(t)$.

Система уравнений (1)–(5) описывает процессы безгазового горения с учетом гетерогенности структуры в виде плоских реакционных ячеек (при $m = 0$ в уравнении (3)) и виде сферических реакционных ячеек (при $m = 2$ в уравнении (3)). Система уравнений (1)–(5) записывалась в безразмерном виде. В качестве масштабов выбраны следующие величины: масштаб

времени $t_* = c_k \rho RT_a^2 y_*^2 / (q E_d D_0 e^{-E_d/RT_a})$; масштаб координаты на

макроуровне $x_* = \sqrt{t_* \lambda / c_k \rho}$; масштаб температуры $T_* = RT_a^2 / E$; масштаб координаты для реакционной ячейки $y_* = L$ (для плоской реакционной ячейки) и $y_* = y_0$ (для сферической реакционной ячейки). Безразмерные переменные: координата $\xi = x / x_*$; $\eta = y / y_*$; время: $\tau = t / t_*$; температура

$\theta = \frac{E_d}{RT_a^2} (T - T_a)$; объём $\bar{V} = V / V_0$ (для сферической реакционной ячейки) и

$\bar{\delta} = \delta / L$ (для плоской реакционной ячейки). С учётом выбранных масштабов задача (1)–(5) в безразмерной форме принимает вид:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} + \dot{Q}. \quad (6)$$

Начальные и граничные условия для уравнения переноса тепла:

$$\theta(\xi, 0) = -\frac{1}{\gamma}, \quad \theta(0, \tau) = 0, \quad \frac{\partial \theta(\infty, \tau)}{\partial \xi} = 0. \quad (7)$$

Уравнение диффузии для плоских и сферических реакционных ячеек:

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} = \gamma \cdot e^{\frac{\theta}{1+\beta\theta}} \frac{1}{\eta^m} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta^m \frac{\partial c}{\partial \eta} \right), \quad (8)$$

при $m = 0$ уравнение (8) описывает плоские реакционные ячейки, при $m = 2$ - сферические реакционные ячейки.

Начальные и граничные условия для уравнения диффузии:

$$c(\eta_1(\tau), \tau) = c_1, \quad c(\eta_2(\tau), \tau) = c_2, \quad c(\eta, 0) = c_2, \quad \eta_1(0) \leq \eta \leq \eta_2(0). \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \gamma e^{\frac{\theta}{1+\beta\theta}} \frac{\partial c}{\partial \eta} \Big|_{\eta_1(\tau)} &= c_1 U_1, \\ -\gamma e^{\frac{\theta}{1+\beta\theta}} \frac{\partial c}{\partial \eta} \Big|_{\eta_2(\tau)} &= (1 - c_2) U_2. \end{aligned} \quad (10)$$

В уравнении (6) \dot{Q} определяется следующим образом: $\dot{Q} = \frac{1}{\gamma} \frac{\partial \bar{\delta}}{\partial \tau}$ - для

плоских реакционных ячеек, $\dot{Q} = \frac{1}{\gamma} \frac{\partial \bar{V}}{\partial \tau}$ - для сферических реакционных

ячеек. В задаче (6)–(10) введены безразмерные параметры γ , β ,

определяемые следующим образом: $\gamma = \frac{c_k \rho}{q} \frac{RT_a^2}{E_d}$ - число Тодеса, $\beta = \frac{RT_a}{E_d}$ -

число Аррениуса.

Для численного решения уравнения (6) используется явная разностная схема, для уравнения (8) - неявная разностная схема и 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 B и продуктом AB . При этом поля концентрации c_j^{n+1} интерполируются на новую сетку путём построения полиномов второго порядка.

В главе представлена методика численного решения системы уравнений разработанной математической модели. Представлены результаты тестирования 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 (рис. 2). 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» (рис. 3).

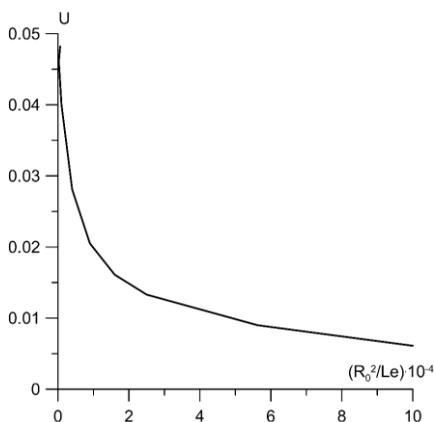


Рис. 2. Зависимость скорости горения U от отношения R_0^2/Le .

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

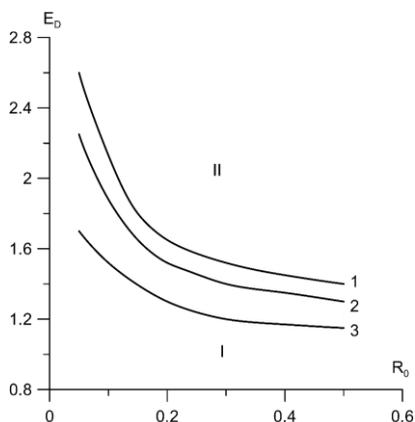


Рис. 3. Области стационарного (I) и колебательного (II) режимов распространения фронта горения при: 1 – $Le = 10^{-4}$, 2 – $Le = 5 \cdot 10^{-5}$, 3 – $Le = 10^{-5}$, $\gamma = 0.14286$, $\beta = 0.05$

Для математической модели, учитывающей диффузию через образующийся слой продукта и зависимость коэффициента диффузии от температуры, (6)-(10), 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. Результаты данных численных исследований представлены на рисунке 4.

Определено критическое значение безразмерного параметра γ , при котором происходит переход от колебательного режима к стационарному режиму распространения фронта горения. Расчёты показали, что и для сферических реакционных ячеек, и для плоских реакционных ячеек данный параметр совпадает и равен $\gamma_* = 0.122$. На рисунке 5 показаны графики скоростей при различных параметрах γ , на которых видны режимы горения при различных γ вблизи γ_* .

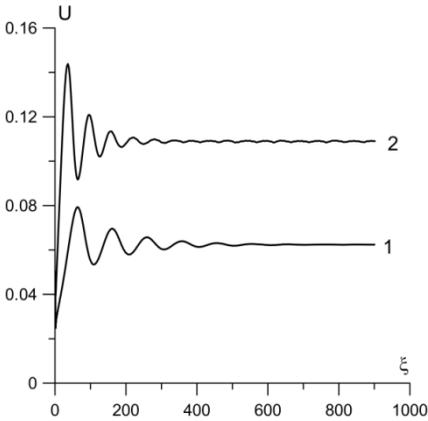


Рис. 4. Зависимости скорости горения U от координаты ξ при $c_1 = 0.51$
1 – плоские реакционные ячейки, 2 – сферические реакционные ячейки

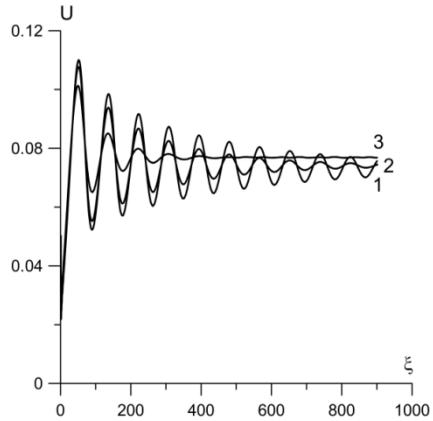


Рис. 5. Зависимости скорости горения U от координаты ξ при различных значениях γ : 1 - $\gamma = 0.12$, 2 - $\gamma = 0.121$, 3 - $\gamma = 0.125$; $c_1 = 0.505$

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 исследование влияния плавления одного из компонентов на скорость горения. С увеличением теплоты плавления скорость горения уменьшается при соответствующих значениях безразмерных параметров задачи.

Также в главе приведены результаты расчета скорости безгазового горения в зависимости 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 тепловода на

внешних границах в двухмерной осесимметричной постановке. Моделирование горения конического образца проводится на основе двух моделей горения безгазовых систем: известной модели безгазового горения и с учётом гетерогенности структуры прессованных образцов.

Математическая постановка задачи безгазового горения конического образца с учётом гетерогенности его структуры и плавления в безразмерных переменных и параметрах записывается следующим образом:

$$(1 + Ph \cdot \delta(\theta_m)) \frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{1}{\bar{r}} \frac{\partial}{\partial \bar{r}} \left(\bar{r} \frac{\partial \theta}{\partial \bar{r}} \right) + \frac{\partial^2 \theta}{\partial \bar{y}^2} + \frac{\partial \bar{V}}{\partial \tau} \left(\frac{1}{\gamma} + Ph \right). \quad (11)$$

Начальные условия:

$$\theta(\bar{r}, \bar{y}, 0) = \theta_0, \quad \theta_0 = - \left(\frac{1}{\gamma} + Ph \right), \quad \bar{V}(\bar{r}, \bar{y}, 0) = 1. \quad (12)$$

Граничные условия:

$$\theta(\bar{r}, 0, \tau) = 0, \quad \tau < \tau_f, \quad \frac{\partial \theta(\bar{r}, 0, \tau)}{\partial \bar{y}} = 0, \quad \tau \geq \tau_f, \quad \frac{\partial \theta(\bar{r}, \bar{L}, \tau)}{\partial \bar{y}} = -Bi(\theta(\bar{r}, \bar{L}, \tau) - \theta_0),$$

$$\frac{\partial \theta(0, \bar{y}, \tau)}{\partial \bar{r}} = 0, \quad \frac{\partial \theta(R_K(\bar{y}), \bar{y}, \tau)}{\partial n} = -Bi(\theta(R_K(\bar{y}), \bar{y}, \tau) - \theta_0). \quad (13)$$

Величина тепловыделения от химической реакции в уравнении (11) определяется из решения задач диффузии и реагирования на микроуровне, в реакционной ячейке из уравнений:

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} = \frac{1}{1/\gamma + Ph} \cdot e^{\frac{\theta}{1+\beta\theta}} \frac{1}{z^2} \frac{\partial}{\partial z} \left(z^2 \frac{\partial c}{\partial z} \right), \quad (14)$$

$$c(z_1(\tau), \tau) = c_1, \quad c(z_2(\tau), \tau) = c_2, \quad c(z, 0) = c_2, \quad z_1(0) \leq z \leq z_2(0). \quad (15)$$

В уравнении (11):

$$\frac{\partial \bar{V}}{\partial \tau} = z_2^2 \frac{\partial z}{\partial \tau} - z_1^2 \frac{\partial z}{\partial \tau} = z_2^2 |U_2| + z_1^2 |U_1|. \quad (16)$$

Значения \bar{U}_1 и \bar{U}_2 определяются из соотношений (5), записанных в безразмерной форме:

$$\frac{1}{1/\gamma + Ph} e^{\frac{\theta}{1+\beta\theta}} \frac{\partial c}{\partial z} \Big|_{z_1(\tau)} = c_1 \bar{U}_1, \quad - \frac{1}{1/\gamma + Ph} e^{\frac{\theta}{1+\beta\theta}} \frac{\partial c}{\partial z} \Big|_{z_2(\tau)} = (1 - c_2) \bar{U}_2. \quad (17)$$

В постановке (11)–(17) используется модель сферической реакционной ячейки в двумерном осесимметричном варианте, учитывающая

гетерогенность структуры конического образца, а также плавление одно из компонентов СВС состава. Принятые 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, $z = r/r_*$ (где r - радиальная координата гетерогенной структуры - шарика), $r_* = r_0$ - масштаб координаты для реакционной ячейки. Другие обозначения аналогичны приведенным обозначениям для задачи (1)–(5).

Для решения системы уравнений (11)–(13) проводилось преобразование координат, связанное с формой образца. Полученное в преобразованных координатах уравнение решалось по явной схеме. Для определения величины источников уравнения (11), определяемых в виде (16), в каждой точке пространства (в каждой точке разностной сетки) решалась задача (14)–(17).

На рисунках 6-7 представлены поля температуры и концентрации для модели, учитывающей гетерогенность структуры конического образца, а также плавление одно из компонентов СВС состава.

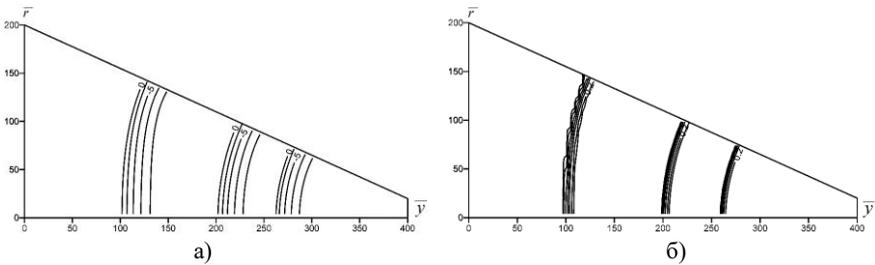
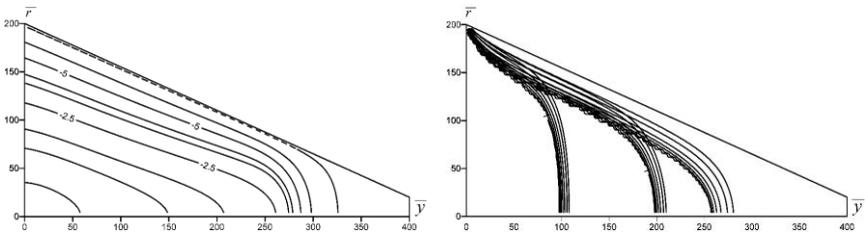


Рис. 6. Поля температуры (а) и концентрации (б) в моменты времени прохождения фронта горения координат $\xi = 100, 200, 300$. $Bi = 0$, $R_K(0) = 200$



а)

б)

Рис. 7. Поля температуры в момент времени прохождения фронтом горения координаты $\xi = 260$ (а) и концентрации (б) - $\xi = 100, 200, 260$. $Bi = \infty$, $R_K(0) = 200$

На рисунке 8 показаны скорости распространения фронта горения в коническом образце СВС состава при $R_K(0) = 150$ в трёх режимах: увеличение скорости фронта горения с пройденным расстоянием вдоль оси конуса (кривая 1), срыв (погасание) горения (кривая 2, 3), горение без срыва (кривая 4). Определено путем численных экспериментов критическое значение параметра Bi , характеризующего интенсивность теплоотдачи, при котором срыва горения не наблюдается (кривая 4).

Определена зависимость толщины недогоревшего слоя СВС образца от числа Bi при различных углах между образующей конуса и его высотой. Результаты представлены на рисунке 9.

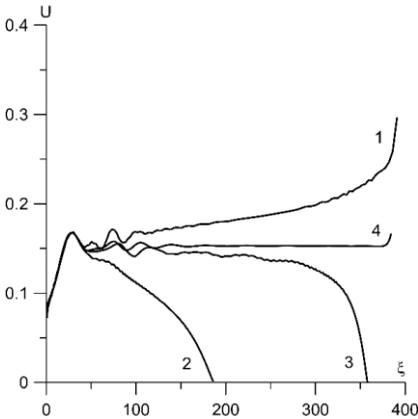


Рис. 8. Зависимость скорости пламени от координаты при значениях числа Bi :
1 - $Bi = 0$, 2 - $Bi = \infty$, 3 - $Bi = 0.035$, 4 - $Bi = 0.025$, $R_K(0) = 150$, $R_K(\bar{L}) = 20$

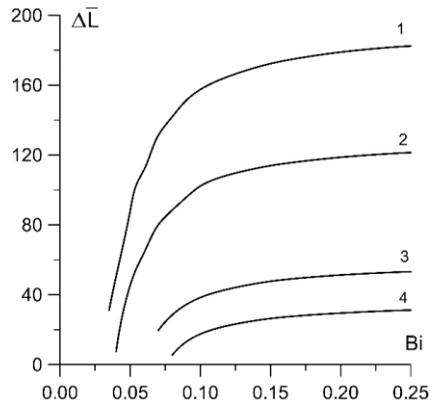


Рис. 9. Зависимость толщины недогоревшего слоя от числа Bi при углах полураствора конуса: 1 - 18° , 2 - 24° , 3 - 35° , 4 - 44°

Из рисунка 9 видно, что с уменьшением числа Bi расстояние до меньшего основания усеченного конуса, вблизи которого 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.

Исследовано влияние плавления на закономерности распространения волны безгазового горения в коническом образце с учётом гетерогенности его структуры. Выявлено, что плавление оказывает слабое влияние на скорость волны безгазового горения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные результаты и выводы диссертационной работы:

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.

Список трудов по теме диссертационного исследования:

Статьи в журналах, включенных в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук:

1. 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. – 0,75 п.л. / 0,38 п.л.

2. 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. – 0,75 п.л. / 0,37 п.л.

3. 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. – 0,38 п.л. / 0,19 п.л.

Публикации в других научных изданиях:

4. Крайнов А.Ю., Опрышко 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. – 0,32 п.л. / 0,12 п.л.

5. 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. – 0,43 п.л. / 0,22 п.л.

6. Крайнов А.Ю., Шульц Д.С. Математическая модель СВС процесса с учётом гетерогенности структуры и взаимной диффузии реагирующих компонентов // Современные проблемы современной механики: Сборник материалов научной конференции. – Томск: Томский государственный университет, 2011. – с.128-130. – 0,31 п.л. / 0,15 п.л.

7. 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. – 0,81 п.л. / 0,4 п.л.

8. **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: 14.03.2018). – 0,44 п.л. / 0,22 п.л.

9. **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. – 0,13 п.л. / 0,07 п.л.

10. **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. – 0,53 п.л. / 0,26 п.л.

11. **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. – 0,37 п.л. / 0,19 п.л.