

Единая математическая модель воспламенения и горения одиночных частиц диборида алюминия

© П.В. Папырин, А.В. Сухов, Д.А. Ягодников

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

Разработана единая математическая модель воспламенения и горения одиночной частицы диборида алюминия в газообразной окислительной среде. Принято, что частица диборида алюминия представляет собой сплав бора и алюминия, причем доля поверхности, занимаемая каждым из элементов, пропорциональна их мольной доле в сплаве, а на соответствующих поверхностях частицы, пропорциональных мольной доле каждого элемента в сплаве, протекают параллельные химические реакции окисления алюминия и бора. Модель основана на экспериментальных зависимостях кинетики реакций окисления и горения одиночных частиц бора и алюминия. Установлены критерии воспламенения частиц. Получены зависимости времени индукции воспламенения и времени горения от начальных значений температуры среды и диаметра частиц диборида алюминия.

Ключевые слова: диборид алюминия, одиночная частица, воспламенение, горение, параллельные реакции, математическая модель

Введение. Применение порошкообразных металлических горючих в качестве добавок к топливам позволяет повысить габаритно-массовые и энергетические характеристики прямоточных воздушно-реактивных двигателей (ПВРД) и ракетно-прямоточных двигателей (РПД) традиционных схем, а также комбинированных ПВРД и РПД, для которых перспективным представляется использование борсодержащих горючих [1, 2]. В общем цикле разработки ПВРД и РПД важное значение имеет математическое моделирование отдельных стадий рабочего процесса с учетом их взаимосвязи, конструктивных особенностей, а также начальных значений основных режимных характеристик, что позволяет выработать рекомендации по достижению максимальной полноты сгорания топлива.

Математическая модель [3] достаточно сложно описывает процесс воспламенения отдельных частиц диборида алюминия, требует знания коэффициентов диффузии и не позволяет описать процесс горения частиц металла. Целью настоящей статьи является создание единой математической модели воспламенения и горения одиночных частиц диборида алюминия.

Математические модели газодинамики горения включают в себя дифференциальные уравнения баланса массы, количества движения и энергии, в которые входят источниковые члены, определяющие

скорости изменения массы реагентов и тепловыделения в результате протекающих химических реакций. В случае использования порошкообразного металлического горючего, в частности бора или его соединений с алюминием, для моделирования источниковых членов возможно применение эмпирических зависимостей, определяющих массовые скорости горения и тепловыделения, или реализация в математической модели алгоритма расчета характеристик воспламенения и горения одиночных частиц металлического горючего, который основан на макрокинетических физико-химических процессах взаимодействия горючего и окислителя.

Описание математической модели. Рассмотрим описание математической модели воспламенения и горения в воздухе одиночной частицы горючего, в качестве которого выбран диборид алюминия AlB_2 . Перспектива использования его определяется высокими значениями плотности ($\rho_k \sim 3000 \text{ кг/м}^3$) и теплоты сгорания ($\Delta H_{AlB_2} \sim 46,1 \text{ МДж/кг}$).

В модели воспламенения сферической частицы диборида алюминия в воздухе на основе теории параллельных химических реакций [4, 5] приняты следующие допущения.

1. Частица диборида алюминия представляет собой равномерно перемешанный сплав бора и алюминия, причем доля поверхности, занимаемая каждым из элементов, пропорциональна их мольной доле в сплаве.

2. Параллельные химические реакции окисления алюминия и бора протекают на соответствующих поверхностях частицы, пропорциональных мольной доле в сплаве (рис. 1).

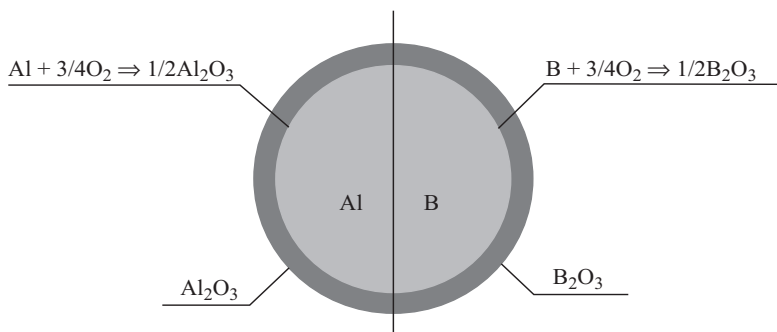


Рис. 1. Схема модели воспламенения частицы диборида алюминия

3. Оксидные пленки оксида алюминия и оксида бора покрывают всю поверхность частицы.

4. Все физико-химические процессы при горении происходят в пределах центрально-симметричной приведенной пленки, радиус которой определяется условием теплообмена с окружающей газовой средой.

5. В процессе воспламенения и горения не учитываются макрокинетические процессы, связанные с изменением фазового состава диборида алюминия.

6. Температура частицы одинакова по всему объему.

7. Газ в пределах приведенной пленки считается оптически прозрачным, что позволяет пренебречь его излучением и поглощением.

Используя данные работ [6, 7], уравнение для определения скорости изменения радиуса частицы при воспламенении можно записать в виде

$$\frac{dr_k}{dt} = a_{Al} \frac{\beta \rho_{Al_2O_3}}{\rho_{Al}} K n_{O_2} e^{-\frac{E_1}{R_{\mu} T_k}} + a_B \left(1,44 \cdot 10^{-11} T_k^2 n_{O_2} \frac{\rho_{Воз}}{\rho_B \delta_{B_2O_3}} e^{-\frac{E_2}{R_{\mu} T_k}} \right), \quad (1)$$

где a_{Al} и a_B — доли площади поверхности частицы, занимаемые алюминием и бором соответственно; $\beta = \frac{2\mu_{Al_2O_3}}{3\mu_{O_2}}$ — стехиометрический коэффициент; K — предэкспоненциальный множитель; n_{O_2} — относительная концентрация кислорода в воздухе; E_1, E_2 — энергии активации для алюминия и бора соответственно; R_{μ} — универсальная газовая постоянная; T_k — температура частицы; $\delta_{B_2O_3}$ — толщина оксидной пленки бора; ρ — плотность воздуха (воз), бора (B) и алюминия (Al).

Скорость изменения толщины оксидной пленки алюминия на доле поверхности, пропорциональной доле алюминия в сплаве, при воспламенении определяется [6] выражением

$$\frac{d\delta_{Al_2O_3}}{dt} = K n_{O_2} a_{Al} e^{-\frac{E_1}{R_{\mu} T_k}}. \quad (2)$$

Скорость изменения толщины оксидной пленки бора на доли поверхности, пропорциональной доле бора в сплаве, можно определить, учитывая скорости ее образования и испарения $I_{B_2O_3}^V$ [7]:

$$\frac{d\delta_{B_2O_3}}{dt} = \frac{1}{\rho_{B_2O_3}} a_B \left[4,636 \cdot 10^{-11} T_k^2 n_{O_2}^{\rho_{B_2O_3}} \frac{\rho_B}{\delta_{B_2O_3}} e^{-\frac{E_2}{R_{\mu} T_k}} - I_{B_2O_3}^V \left(1 + \frac{\delta_{B_2O_3}}{r_k} \right)^2 \right], \quad (3)$$

$$I_{\text{B}_2\text{O}_3}^v = \frac{2,23 \cdot 10^{10} \sqrt{T_{\text{K}}} e^{-\frac{44000}{T_{\text{K}}}} \left(1 - \frac{p_{\text{B}_2\text{O}_3}}{p_{\text{B}_2\text{O}_3}^v}\right)}{T_{\text{K}} + 1800 p_{\text{B}_2\text{O}_3} (r_{\text{K}} + \delta_{\text{B}_2\text{O}_3}) / \text{Nu}}, \quad (4)$$

где Nu — число Нуссельта; $p_{\text{B}_2\text{O}_3}$ — давление воздуха. $p_{\text{B}_2\text{O}_3}^v$ — давление насыщенного пара B_2O_3 .

Скорость изменения температуры частицы при воспламенении определяют следующим образом:

$$\frac{dT_{\text{K}}}{dt} = \left(\rho_{\text{K}} \frac{dr_{\text{K}}}{dt} \Delta H_{\text{AlB}_2} + Q_{\lambda} + Q_{\text{R}} - Q_{\text{v}} \right) \frac{3}{c_{\text{K}} r_{\text{K}} \rho_{\text{K}}}, \quad (5)$$

где c_{K} , ρ_{K} — теплоемкость и радиус частицы; ΔH_{AlB_2} — тепловыделение в результате окисления для диборида алюминия.

Плотность тепловых потоков определяются из выражений

$$Q_{\lambda} = \frac{\text{Nu}}{2r_{\text{K}}} \lambda (T_{\text{B}_2\text{O}_3} - T_{\text{K}}), \quad (6)$$

$$Q_{\text{R}} = \varepsilon \sigma (T_{\text{B}_2\text{O}_3}^4 - T_{\text{K}}^4), \quad (7)$$

$$Q_{\text{v}} = a_{\text{B}} I_{\text{B}_2\text{O}_3}^v H_{\text{B}_2\text{O}_3}^v, \quad (8)$$

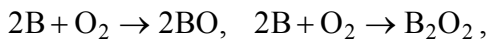
где λ — коэффициент теплопроводности; $T_{\text{B}_2\text{O}_3}$ — температура воздуха; ε — степень черноты поверхности частицы; σ — постоянная Стефана — Больцмана; $\Delta H_{\text{B}_2\text{O}_3}^v$ — теплота испарения оксида бора.

В качестве критерия окончания стадии воспламенения и начала стадии горения принята реализация одного из условий, определяющих величину $\tau_{\text{и}}$: температура частицы превышает температуру плавления $\text{Al}_2\text{O}_3 \sim 2300$ К или толщина оксидной пленки бора меньше 1 нм.

Модель горения при использовании эмпирических данных работ [8, 9] описывается формулой

$$\frac{dr_{\text{K}}}{dt} = a_{\text{Al}} \frac{n_{\text{O}_2} T_{\text{B}_2\text{O}_3}^{0,2}}{69 \cdot 10^3 r_{\text{K}}^{0,5}} + a_{\text{B}} \cdot 0,676 (I_{\text{B}_2\text{O}_2} + I_{\text{BO}}) n_{\text{O}_2} \frac{\rho_{\text{B}_2\text{O}_3}}{\rho_{\text{B}}}, \quad (9)$$

где $I_{\text{B}_2\text{O}_2}$, I_{BO} — скорости расходования кислорода в протекающих параллельно реакциях



определяемые соответственно из выражений:

$$I_{B_2O_2} = K_1 \exp\left(-\frac{E_3}{R_{\mu} T_k}\right), \quad I_{BO} = K_2 \exp\left(-\frac{E_4}{R_{\mu} T_k}\right),$$

где K_1, K_2 — предэкспоненциальные множители; E_3, E_4 — энергии активации химических реакций.

Скорость изменения температуры частицы при горении следует рассчитывать по уравнению

$$\frac{dT_k}{dt} = \left(\rho_k \frac{dr_k}{dt} \Delta H_{AlB_2} + Q_{\lambda} + Q_R \right) \frac{3}{c_k r_k \rho_k}, \quad (10)$$

где

$$Q_{\lambda} = \frac{Nu}{2r_k} \lambda (T_{\text{воз}} - T_k), \quad (11)$$

$$Q_R = \varepsilon \sigma (T_{\text{воз}}^4 - T_k^4). \quad (12)$$

Здесь ΔH_{AlB_2} — тепловой эффект химической реакции сгорания диборида алюминия.

На основе уравнений (1)–(12) разработаны программа и алгоритм расчета характеристик процессов воспламенения и горения одиночных частиц диборида алюминия с использованием языка программирования C++. Систему уравнений решают методом Рунге — Кутты.

В качестве исходных данных для расчета приняты следующие параметры:

- Температура воздуха $T_{\text{воз}}, \text{K}$ 1800; 2100; 2400; 2700
- Начальный радиус частицы $r_{k0}, \text{мкм}$ 5; 10; 15; 20
- Шаг интегрирования по времени, с 10^{-6}

Начальная температура частицы принята равной 300 K, начальная толщина оксидной пленки — 10^{-8} м.

Результаты расчета характеристик процесса воспламенения. Проведенные расчеты позволили получить данные по изменению толщины оксидной пленки бора, образующейся на части поверхности a_B , и температуры частицы по времени при различных температурах окружающей среды (рис. 2).

По данным на рис. 2 видно, что вначале толщина оксидной пленки увеличивается и ее испарение начинается при достижении определенной температуры. Установлено также, что оксидная пленка бора не успевает испариться прежде, чем частица прогревается до температуры, равной температуре плавления оксида алюминия (2300 K). Поэтому критерием воспламенения (и, соответственно, временем индукции воспламенения $\tau_{\text{и}}$) является равенство T_k температуры плавления оксидной пленки алюминия. Аналогичные результаты получены при расчете частиц радиусом 5, 15 и 20 мкм.

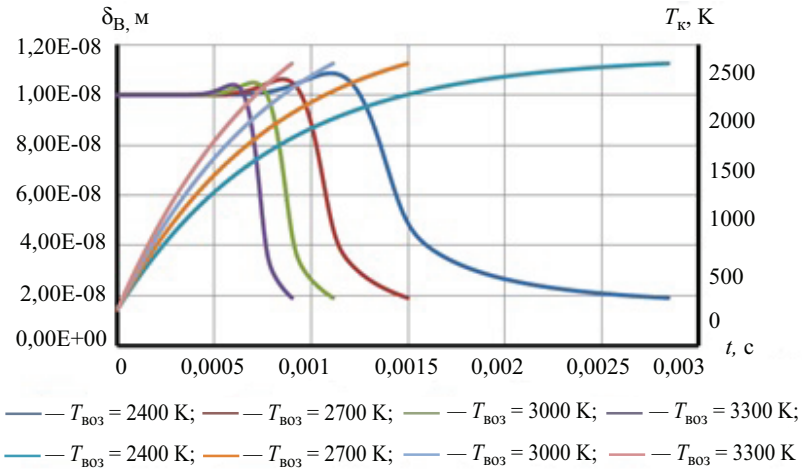


Рис. 2. Изменение толщины оксидной пленки бора и температуры частицы по времени, $r_{к0} = 10 \text{ мкм}$

Полученные расчетные данные свидетельствуют об увеличении $\tau_{и}$ с ростом размера частиц (рис. 3), причем для температуры среды 2400 К зависимость $\tau_{и}$ от начального радиуса частицы аппроксимируется кривой $\tau_{и} = 0,0583r_{к}^{1,6847}$. Видно, что с возрастанием $r_{к0}$ увеличивается влияние на время индукции воспламенения температуры окружающей среды.

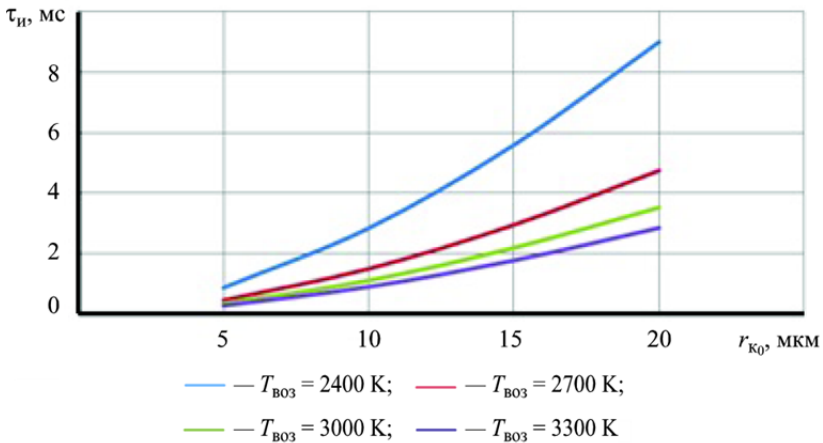


Рис. 3. Зависимость $\tau_{и}$ от начального радиуса частицы

Анализируя зависимость времени индукции воспламенения частицы от температуры окружающей среды (рис. 4), можно заключить, что уменьшение $\tau_{и}$ объясняется более быстрым прогревом частицы, а значит, ускорением испарения оксидной пленки с ее поверхности.

Причем при высоких температурах окружающей среды степень влияния радиуса частицы на время индукции воспламенения снижается.

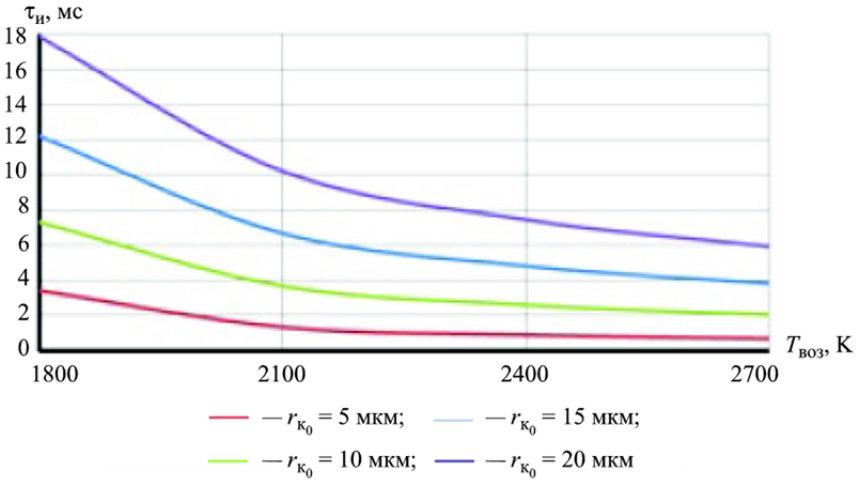


Рис. 4. Зависимость $\tau_{\text{и}}$ от температуры окружающей среды

Результаты расчета времени горения частиц диборида алюминия. Изменение радиуса частицы начального значения $r_{k_0} = 10 \text{ мкм}$ по времени (время отсчета берется с момента начала взаимодействия частицы с окружающей средой, т. е. с момента начала стадии воспламенения) в зависимости от температуры окружающей среды приведено на рис. 5.

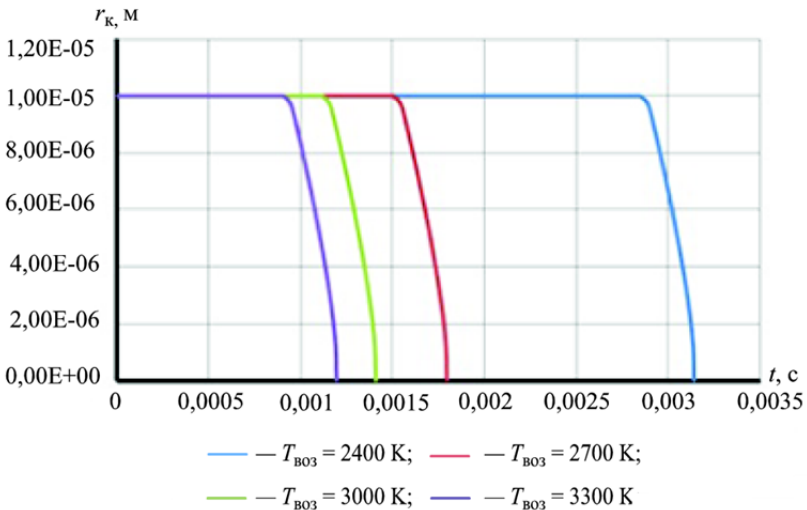


Рис. 5. Изменение радиуса частицы по времени ($r_{k_0} = 10 \text{ мкм}$)

Так, на стадии поверхностных реакций (до начала газозафазного горения) радиус частицы практически не изменяется, а после испарения оксидной пленки бора и начала стадии горения — интенсивно уменьшается.

Зависимость времени горения τ_r от начального радиуса частицы для различных температур окружающей среды приведена на рис. 6.

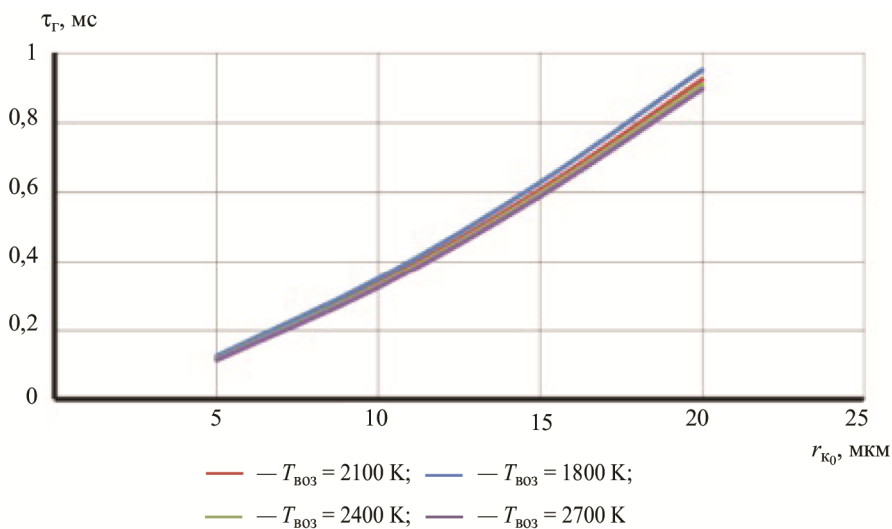


Рис. 6. Зависимость τ_r от начального радиуса частицы

Результаты свидетельствуют о том, что на величину τ_r большее по сравнению с температурой окружающей среды влияние оказывает размер частиц диборида алюминия. В частности, полученная для температуры воздуха 2400 К кривая аппроксимируется выражением $\tau_r = 0,0109r_k^{1,46}$, для алюминия при тех же начальных условиях — $\tau_{r_{Al}} = 0,065r_k^{1,5}$, для бора — $\tau_{r_B} = 0,3058r_k^{1,34}$. Видно, что показатель степени в законе горения частицы диборида алюминия меньше, чем у алюминия, но больше, чем у бора, что свидетельствует о большей химической активности диборида алюминия по сравнению с бором.

Эти результаты согласуются с экспериментальными данными работы [10], в которой определено время горения одиночных частиц диборида алюминия в пламени пропан-кислородной горелки, а также установлено, что частицы диборида алюминия начального радиуса 25 и 55 мкм имеют характерное время преобразования (которое отождествляется с суммарным временем индукции воспламенения и горения) 13...18 мс, причем время их горения меньше времени горения одиночных частиц бора при прочих равных условиях.

Заключение. Разработана математическая модель воспламенения и горения одиночных частиц диборида алюминия, которую можно применить при имитационном моделировании рабочего процесса в высокоскоростных камерах сгорания РПД, использующих топливо на основе бора или его соединений с алюминием. Установлено, что для частиц диборида алюминия в качестве критерия воспламенения может быть принято условие срыва теплового равновесия частицы при достижении температуры частицы 2300 К, соответствующей плавлению оксида алюминия. Определены значения времени индукции воспламенения и горения частиц диборида алюминия в зависимости от температуры окружающей среды и начального радиуса частиц. Получен расчетный закон изменения радиуса частицы диборида алюминия $\tau_r = 0,0109r_k^{1,46}$. Предложенная модель может найти применение при решении сложных задач моделирования, когда проводят оптимизацию рецептуры топлива и оптимизацию схемных и конструктивных решений РПД одновременно и когда отсутствует полная информация о законе горения частиц конденсированного горючего.

Работа выполнена в соответствии с грантом Президента Российской Федерации по государственной поддержке ведущих научных школ Российской Федерации, проект НШ-9774.2016.8.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Сорокин В.А., Ягодников Д.А., Хомяков И.И., Сучков С.А., Сухов А.В. Математическое моделирование рабочих процессов в камере дожигания РПД на пиротехническом составе. *Наука и образование*, 2014, № 6. DOI: 10.7463/0614.0713972
- [2] Ягодников Д.А., Хомяков И.И., Бурков А.С. Визуализация и анализ изображений процесса истечения продуктов сгорания пиротехнического состава из модельного газогенератора. *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Машиностроение*, 2014, № 3, с. 101–109.
- [3] Ягодников Д.А., Папырин П.В., Сухов А.В. Математическая модель воспламенения одиночной частицы диборида алюминия. *Наука и образование*, 2014, № 12. DOI: 10.7463/1214.0739006
- [4] Золотко А.Н., Ушакова Н.А., Демирова М.В. Гетерогенное воспламенение одиночной частицы с параллельными химическими реакциями на ее поверхности. *Физика аэродисперсных систем*, 2010, вып. 47, с. 91–99.
- [5] Золотко А.Н., Клячко Л.А. Критические условия в гетерогенных системах с параллельными реакциями. *Физика горения и взрыва*, 1979, т. 15, № 3, с. 3–10.
- [6] Гуревич М.А., Озеров Е.С., Юринов А.А. О влиянии пленки оксида на характер воспламенения алюминия. *Физика горения и взрыва*, 1978, т. 14, № 4, с. 50–55.
- [7] King M.K. Boron Ignition and Combustion in Air-Augmented Rocket Afterburners. *Combustion, Science and Technology*, 1972, vol. 5, no. 4, pp. 155–164.

- [8] Вовчук Я.И., Золотко А.Н., Клячко Л.А. Время горения частиц бора с учетом влияния диффузионного и кинетического факторов. *Химическая физика процессов горения и взрыва. Горение конденсированных систем*, Черноголовка, 1977, с. 90–93.
- [9] Бекстед М.В. Анализ данных по времени горения частиц алюминия. *Физика горения и взрыва*, 2005, т. 41, № 5, с. 55–69.
- [10] Яковлева Т.А., Киро С.А., Киро А.Н. и др. Горение частиц диборидов металлов (титана и алюминия) в пламени газовой горелки. *Макроскопическая кинетика, химическая и магнитная газовая динамика: Тез. докладов III Всесоюзной школы-семинара*. Томск, 1991, ч. 2, с. 43–44.

Статья поступила в редакцию 21.02.2017

Ссылку на статью просим оформлять следующим образом:

Папырин П.В., Сухов А.В., Ягодников Д.А. Единая математическая модель воспламенения и горения одиночных частиц диборида алюминия. *Инженерный журнал: наука и инновации*, 2017, вып. 6.

<http://dx.doi.org/10.18698/2308-6033-2017-6-1651>

Папырин Павел Витальевич — аспирант кафедры «Ракетные двигатели», инженер НИИ ЭМ МГТУ им. Н.Э. Баумана. e-mail: stpelok91@gmail.com

Сухов Алексей Васильевич — д-р техн. наук, профессор кафедры «Ракетные двигатели» МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор более 150 научных, учебно-методических работ и изобретений в области ракетных двигателей.

Ягодников Дмитрий Алексеевич — д-р техн. наук, профессор, заведующий кафедрой «Ракетные двигатели» МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор более 180 научных работ в области экспериментально-теоретических исследований рабочих процессов и разработки бесконтактных методов диагностики ракетных и реактивных двигателей. e-mail: daj@bmstu.ru

Unified mathematical model of ignition and combustion of single particles of aluminum diboride

© P.V. Papyrin, A.V. Sukhov, D.A. Yagodnikov

Bauman Moscow State Technical University, Moscow, 105005, Russia

The study focuses on the unified mathematical model of ignition and burning of a single particle of aluminum diboride in a gaseous oxidizing medium. It is assumed that particle of aluminum diboride is an alloy of boron and aluminum, wherein the part of the surface occupied by each of the elements is proportional to their mole fraction in the alloy, and on the particle surface on the respective surfaces proportional to the mole fraction of each element in the alloy there occur competing reactions of aluminum and boron oxidation. It is generally thought that between the particle and the environment there occurs radiative and convective heat transfer. The model is based on the experimental dependences of kinetics of oxidation and combustion reactions of single particles of boron and aluminum. In our research we identified the ignition criteria of particles conglomerate and obtained the dependences of ignition induction time and combustion time on the initial values of the ambient temperature and aluminum diboride particle diameter.

Keywords: aluminum diboride, single particle, ignition, combustion, competing reactions, mathematical model

REFERENCES

- [1] Sorokin V.A., Yagodnikov D.A., Khomyakov I.I., Suchkov S.A., Sukhov A.V. *Nauka i obrazovanie — Science and Education*, 2014, no. 6. DOI: 10.7463/0614.0713972
- [2] Yagodnikov D.A., Khomyakov I.I., Burkov A.S. *Vestnik MGTU im. N.E. Baumana. Ser. Mashinostroenie — Herald of the Bauman Moscow State Technical University. Series Mechanical Engineering*, 2014, no. 3, pp. 101–109.
- [3] Yagodnikov D.A., Papyrin P.V., Sukhov A.V. *Nauka i obrazovanie — Science and Education*, 2014, no. 12. DOI: 10.7463/1214.0739006
- [4] Zolotko A.N., Ushakova N.A., Demirova M.V. *Fizika aerodispersnykh sistem — Physics of aerodisperse systems*, 2010, no. 47, pp. 91–99.
- [5] Zolotko A.N., Klyachko L.A. *Fizika goreniia i vzryva — Combustion, Explosion and Shock Waves*, 1979, vol. 15, no. 3, pp. 3–10.
- [6] Gurevich M.A., Ozerov E.S., Yurinov A.A. *Fizika goreniia i vzryva — Combustion, Explosion and Shock Waves*, 1978, vol. 14, no. 4, pp. 50–55.
- [7] King M.K. Boron Ignition and Combustion in Air-Augmented Rocket Afterburners. *Combustion, Science and Technology*, 1972, vol. 5, no. 4, pp. 155–164.
- [8] Vovchuk Ya.I., Zolotko A.N., Klyachko L.A. *Vremya goreniya chastits bora s uchetom vliyaniya diffuzionnogo i kineticheskogo faktorov. Khimicheskaya fizika protsessov goreniya i vzryva. Gorenje kondensirovannykh sistem* [Burning time of boron particles with the influence of the diffusion factors and kinetic factors. Chemical physics of combustion and explosion. Combustion of condensed matter]. Chernogolovka, 1977, pp. 90–93.
- [9] Beksted M.V. *Fizika goreniia i vzryva — Combustion, Explosion and Shock Waves*, 2005, vol. 41, no. 5, pp. 55–69.

- [10] Yakovleva T.A., Kiro S.A., Kiro A.N. et al. Gorenje chastits diboridov metallov (titana i aliuminiya) v plameni gazovoy gorelki. Makroskopicheskaya kinetika, khimicheskaya i magnitnaya gazovaya dinamika [The Combustion of metal diboride particles (titanium and aluminum) in the gas burner. Macroscopic kinetics, chemical and magnetic gas dynamics]. *Tez. докладov III Vses. shkoly-seminara* [Theses of the reports of the Third All-Union School-Seminar]. Tomsk, 1991, part 2, pp. 43–44.

Papyrin P.V. (b. 1991) graduated from Bauman Moscow State Technical University in 2014. Post-graduate student of the Department of Rocket Engines, BMSTU, engineer of the Research Institute of Power Engineering at BMSTU. e-mail: ctpelok91@gmail.com

Sukhov A.V. (b. 1937) graduated from Bauman Moscow Higher Technical School in 1961. Dr. Sc. (Eng.), Professor of the Department of Rocket Engines, Bauman Moscow State Technical University. Author of over 150 scientific and educational works and inventions in the field of rocket engines.

Yagodnikov D.A. (b. 1961) graduated from Bauman Moscow Higher Technical School in 1984. Dr. Sc. (Eng.), Professor, Head of the Department of Rocket Engines Department, Bauman Moscow State Technical University. Author of over 180 scientific papers in the field of experimental and theoretical studies of working processes and the research of non-contact methods of diagnostics of rocket and jet engines. e-mail: daj@bmstu.ru