

## ГОРЕНИЕ СМЕСЕВЫХ ГЕТЕРОГЕННЫХ СИСТЕМ С РАСПЛАВЛЕННЫМИ ПРОДУКТАМИ РЕАКЦИИ С УЧЕТОМ ВЛИЯНИЯ ЦЕНТРОБЕЖНЫХ СИЛ - КВАЗИГИДРОСТАТИЧЕСКАЯ МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

К.Г. Шкадинский<sup>1,2\*</sup>, Н.И. Озерковская<sup>1</sup>, П.М. Кришеник<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения им. А.Г. Мержанова Российской академии наук, Черноголовка, Россия

<sup>2</sup> Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем химической физики Российской академии наук, Черноголовка, Россия

\* [shkad@frcp.ac.ru](mailto:shkad@frcp.ac.ru)

Горение высококалорийных смесей используется в высокотемпературном синтезе [1] для получения целевых продуктов. Оно протекает в экстремальных условиях: высокие температуры и давления, разброс расплава, взрывоопасный динамический фронтальный режим. В предлагаемой математической модели выделены три основных стадии процесса: горение; гравитационная (или центробежная) сепарация среды (металлическая фаза, керамика, газ-окислитель); остывание и кристаллизация продуктов. Управление процессом достигается за счет изменения температуры химического взаимодействия; изменения давления или центробежных сил; изменения дисперсности и качества перемешивания смеси, плотности исходной смеси. В работе предложена математическая «сквозная модель», которая учитывает взаимное влияние стадий на динамику процесса высокотемпературного синтеза. Учитывается, что высокие температуры во фронте горения переводят среду в жидкое состояние, которое при воздействии центробежных сил меняет условия транспорта реагентов в зону реакции. Массоперенос изменяет воздействие силового поля на реагирующую среду и процесс разделения фаз.

Процесс экзотермического химического взаимодействия смеси конденсированных реагентов исследуется в рамках механики многокомпонентных химически активных сплошных сред [2]. Анализ проводится на примере взаимодействия ( $3\text{NiO} + 2\text{Al} \rightarrow \text{Al}_2\text{O}_3 + 3\text{Ni}$ ) с учетом распада твердого окисла NiO на металлический никель и кислород при температуре выше  $1503^{\circ}\text{K}$ . Учитывается, что к этому моменту в пористом составе в зоне прогрева фронта горения присутствует расплавленный Al. Предполагается, что в условиях воздействия центробежных сил тугоплавкая окисная пленка частично растворяется и разрушается, и частично восстанавливается при взаимодействии кислорода с алюминием. Учитывается формирование интерметаллида при взаимодействии никеля и алюминия. При

увеличении температуры изначально прочный скелет пористой массы превращается в подвижный жидкий расплав, который в условиях центрифуги поджимается к исходной пористой среде. Это приводит к изменению проницаемости исходной среды в зоне прогрева, фильтрации образовавшегося активного газа в низкотемпературную исходную среду и в жидкие продукты.

В условиях экзотермического превращения гетерогенной смесевой системы за фронтом горения формируется суспензия жидкого металла, жидкой керамики и окислителя с некоторыми характерными размерами компонент и индивидуальными скоростями перемещения. Участвующие в химическом взаимодействии реагенты изменяют свою массу, следовательно, изменяется и поле центробежных сил. В конденсированном состоянии диффузионный перенос сосредоточен в зоне реакции и частично учитывается макрокинетическим описанием скорости химического взаимодействия. Для учета влияния конвективного переноса компонентов гетерогенной смеси в процессе горения в математической модели выделены три группы, из которых состоит система: металл, керамика и газ-окислитель. Проводится анализ горения с помощью трехскоростной, трехтемпературной модели, полагая, что в каждой группе характеристики среды зависят от ее местоположения.

Законы сохранения импульса для металла, керамики и газа-окислителя в условиях низкоскоростного по сравнению со скоростью звука движения смесевой среды сводятся к балансу основных сил, воздействующих на среду. Для компоненты металла: градиент давления, умноженный на площадь поперечного сечения, уравнивается силами центробежного воздействия на частицы металла, находящиеся в эмульсии, и силами вязкого взаимодействия с другими компонентами эмульсии при их относительном движении. Математическая модель учитывает обмен импульса между компонентами при массообмене в процессе горения. Учитывается, что центробежная сила зависит от расстояния от оси центрифуги до открытой поверхности реактора. Аналогичные уравнения справедливы для керамики и газа.

Законы сохранения энергии характеризуются уравнениями теплопроводности для трех групп (металл, керамика, газ) с учетом подвижности компонент эмульсии и теплообмена между группами и внешней средой. В качестве основных источников тепловыделения учитывается экзотермический характер химического взаимодействия в группе, обмен энергией, обусловленный массопереносом между группами в ходе горения.

Для анализа задачи используется квазигидростатическое приближение, так как процесс горения реализуется при скоростях движения компонентов смеси существенно меньших скорости звука. Как и в [3], в предложенной модели возникает малый параметр, приводящий к ее сингулярности. Жидкие продукты горения переходят в напряженное состояние, меняющееся по мере изменения состава (плотности) и удаленности его от оси центрифуги. В условиях гидростатического равновесия в смеси в процессе горения определяется эволюция давления в подвижной среде. С помощью предложенной модели, численного анализа нелинейной системы уравнений с соответствующими краевыми условиями, определены скорости движения газа, металла и керамики.

Результаты численного моделирования динамики процесса горения представлены на пространственно-временных графиках температуры, удельной доли химических реагентов и скоростей их конвективного переноса. Иницирование процесса осуществляется высокотемпературным источником (спиралью) с открытого торца реактора ( $x = 0$ ). Формируется фронтальный процесс экзотермического химического взаимодействия смеси.

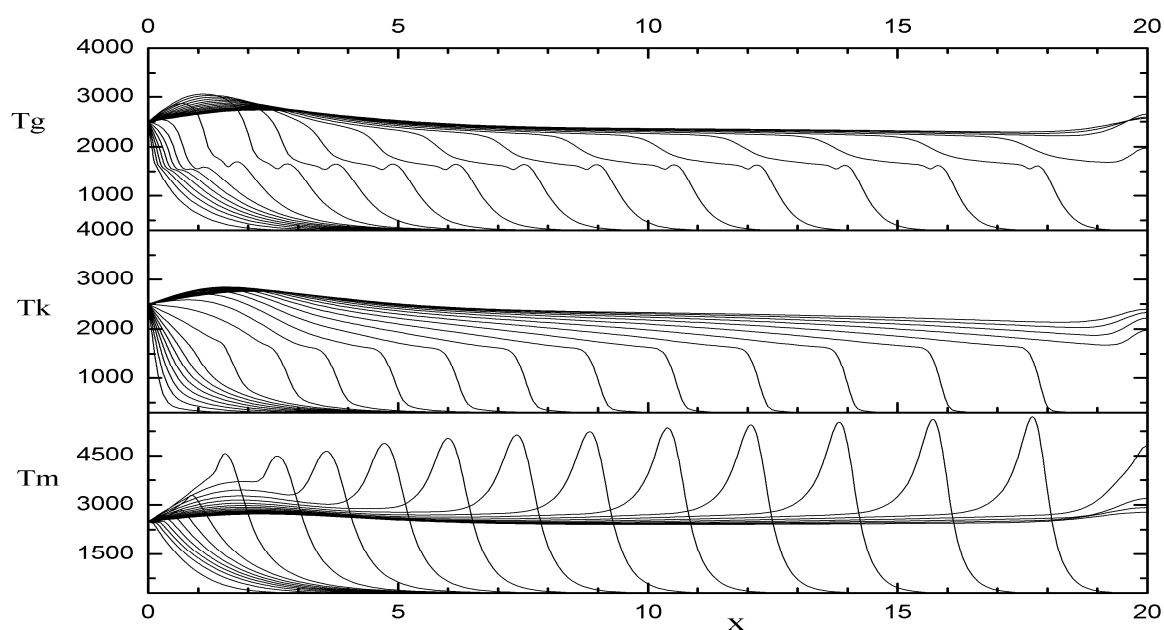


Рисунок 1. Пространственно-временное распределение полей температуры газа, керамики и металла:  $T_g$  – температура газа,  $T_k$  – температура керамики,  $T_m$  – температура металла.

На рисунке 1 представлены последовательные распределения (слева – направо) полей температуры газа, керамики и металла через постоянный промежуток времени. Из этих зависимостей следует, что под действием гравитационных сил в процессе горения формируется расширяющаяся направо высокотемпературная область среды. Структура правой кромки этой области (зона фронта) стабилизирует свои характеристики. В действительности они медленно меняются, поэтому фронт называется квазистационарным. Начальная стадия формирования (стадия зажигания) выделяется на фоне установившегося горения – это типичный режим индукционного зажигания среды относительно низкотемпературным источником. В период инициирования в системе создается избыток энтальпии, который передвигается вместе с фронтом. Избыток энтальпии играет существенную роль при анализе его устойчивости. Он влияет на распределение температуры среды при достижении фронтом донного торца реактора (окрестности  $x=20$ ). Определяющую роль в процессе горения смесевой среды играет экзотермическое превращение в металлической фазе. Единая структура фронта горения в смесевой системе зависит от теплообмена между металлической и керамической фазами. Отметим, что особенности распределения температуры керамики и газа объясняются не только классическим кондуктивным теплообменом, но и энергообменом, обусловленным межфазным массообменом. В условиях адиабатического стационарного горения (смесевая среда горит при отсутствии теплообмена с внешней средой (рис. 1)) за фронтом горения в продуктах устанавливается адиабатическая температура горения. В данном случае видно, что в металлической фазе в зоне реакции достигаются сверхадиабатические температуры. Это способствует увеличению скорости распространения фронта (рис. 2).

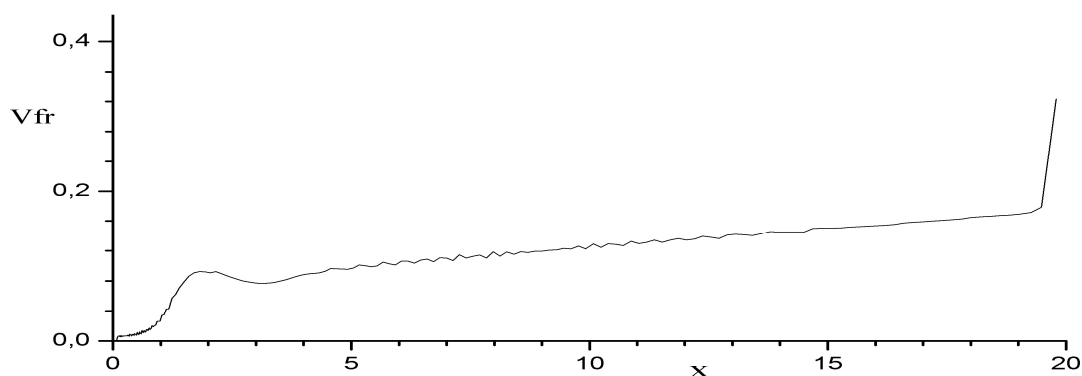


Рисунок 2. Квазистационарная скорость фронта горения:  $V_{fr}$  – скорость фронта.

Рисунок демонстрирует квазистационарный характер распространения фронта горения, обусловленный влиянием меняющегося поля центробежных сил. Поле зависит от перераспределения массы реагентов в процессе экзотермического взаимодействия (рис. 3).

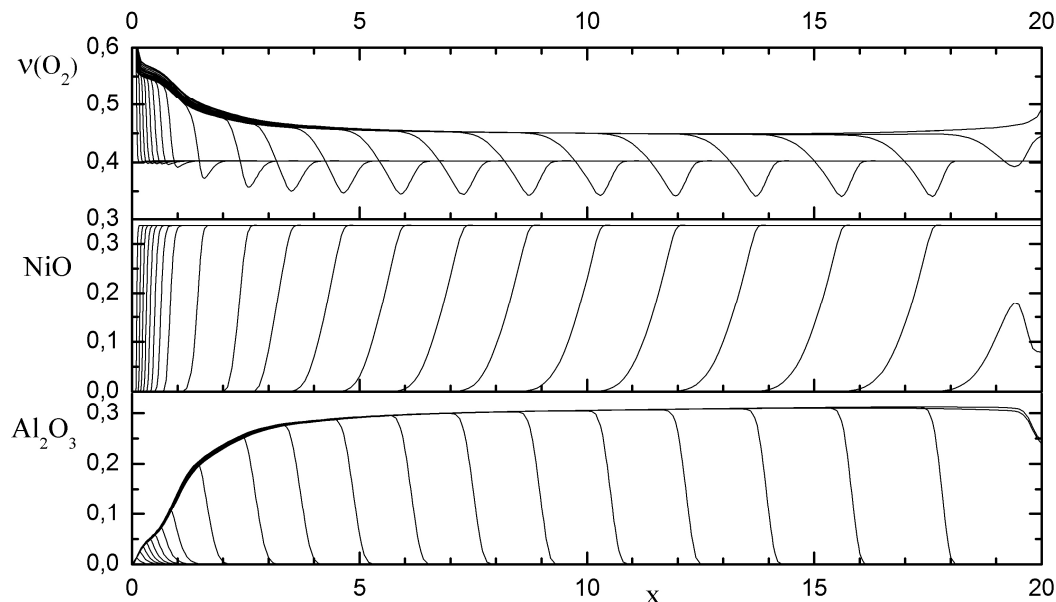


Рисунок 3. Пространственно-временное распределение удельных объемов реагентов металлической фазы в смесевой среде: кислорода, окиси никеля, окиси алюминия.

Состав смеси меняется в процессе распространения фронта за счет химического взаимодействия и конвективного переноса расплава под действием центробежных сил. Конвективный перенос представлен пространственно-временным распределением поля скоростей (рис. 4). На стадии зажигания (малые  $x$ ) формируются отрицательные значения скоростей движения среды, что соответствует наблюдавшемуся экспериментально разбросу среды. В дальнейшем наблюдается движение расплава, обусловленное процессами уплотнения насыщенной газом среды из-за воздействия центробежных сил.

Таким образом, получен значительный объем информации о процессе высокотемпературного синтеза. Прежде всего, следует отметить фронтальный характер распространения фронта в условиях влияния центробежных сил. Фиксируя момент времени и анализируя соответствующие ему пространственные распределения температур, химического состава, скоростей конвективного движения реагентов, получаем информацию о структуре и динамике распространения фронта

экзотермического взаимодействия. Из полученных результатов следует отметить локализацию окислителя в зоне реакции.

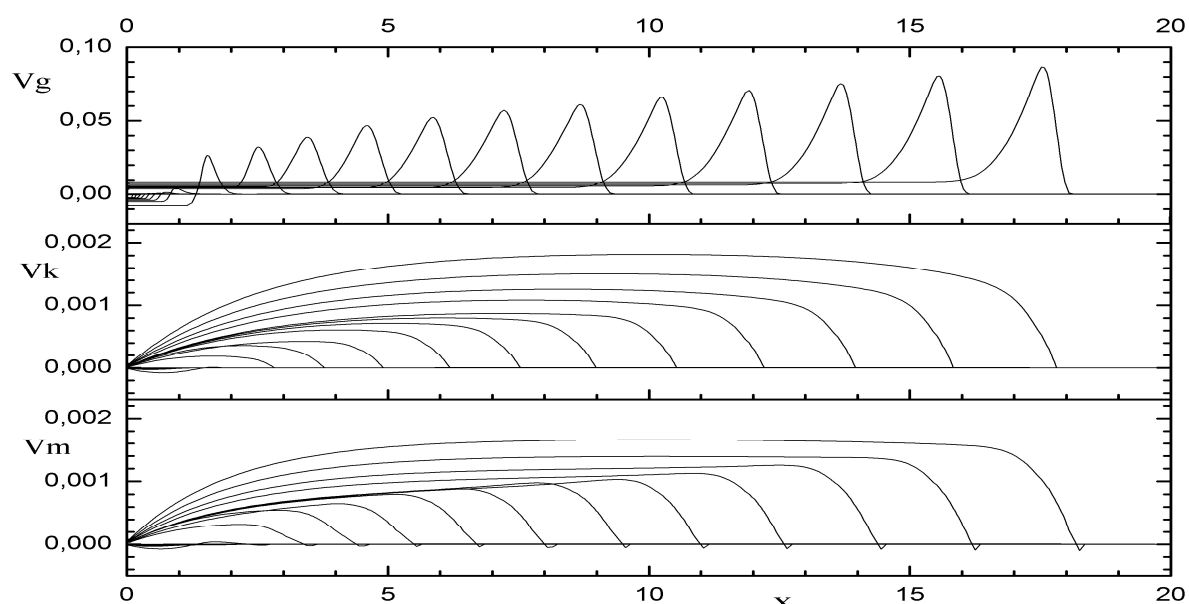


Рисунок 4. Пространственно-временное распределение поля скоростей реагентов в смесевой среде: газ, керамика, металл.

По мере движения волны горения меняется химический состав среды, ее плотность, которые в свою очередь, меняют распределение силового воздействия на многокомпонентную среду. Меняются условия химического взаимодействия, и фронт синтеза выходит на квазистационарный режим. В зависимости от дальнейшего температурного состояния продуктов осуществляется их сепарация. В адиабатических условиях происходит расслоение. В придонной части реактора сосредоточена тяжелая металлическая фаза. Выше располагается керамика, которая защищает металлическую фазу от контакта с газовой средой. Легкая газовая фаза вытесняется из расплава. Эти процессы описываются представленной моделью и реализуются в течении своих характерных времен.

## Литература

- [1] Е.А. Левашов, А.С. Рогачев, В.В. Курбаткина, Ю.М. Максимов, В.И. Юхвид, Перспективные материалы и технологии самораспространяющегося высокотемпературного синтеза, Изд. Дом МИСиС, Москва, 2011, С. 377.
- [2] Р.И. Нигматулин, Динамика многофазных сред. Ч. 1., Наука. Гл. ред. Физ.-мат. Лит, Москва, 1987, С. 464.
- [3] К.Г. Шкадинский, Хим. физика, 33 (6), (2014) 42–46.