

*На правах рукописи*

РОГАЧЁВ СЕРГЕЙ АЛЕКСАНДРОВИЧ

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГОРЕНИЯ СТРУКТУРНО  
НЕОДНОРОДНЫХ СРЕД ПРИ ФИЛЬТРАЦИОННОМ ПОДВОДЕ  
АКТИВНЫХ ГАЗОВ**

Специальность 01.04.17 —

«химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний  
вещества»

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Черноголовка – 2013

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте структурной макрокинетики и проблем материаловедения РАН.

Научный руководитель	Доктор физико-математических наук, профессор <b>Кришеник Петр Михайлович</b>
Официальные оппоненты	Доктор физико-математических наук <b>Соболев Сергей Леонидович</b>  Доктор физико-математических наук <b>Марков Андрей Алексеевич</b>
Ведущая организация	Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химической физики им. Н.Н.Семенова Российской академии наук

Защита диссертации состоится « 25 » декабря 2013 г. в 12<sup>00</sup> ч. на заседании диссертационного совета Д 002.092.01 Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте структурной макрокинетики и проблем материаловедения РАН по адресу: 142432, г. Черноголовка, Московской области, ул. Ак. Осипьяна, д.8.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института структурной макрокинетики и проблем материаловедения РАН.

Автореферат разослан « 22 » ноября 2013 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета Д 002.092.01  
к.ф.-м.н.



И.С. Гордополова

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

### **Актуальность темы исследования.**

Горение гетерогенных (в том числе пористых) сред составляет основу многих природных и технологических процессов. К ним относятся горение торфяных пластов (торфяные пожары), промышленное сжигание мусора, горение угля в энергетических установках теплоэлектростанций и в металлургических производствах, самораспространяющийся высокотемпературный синтез материалов (СВС) и другие. В зависимости от конкретного процесса, актуальной задачей может являться подавление горения, оптимизация энергетического выхода или выхода целевого продукта синтеза. Для решения любой из этих задач требуется знание механизмов горения и основных внешних и внутренних параметров, управляющих процессом. Поэтому исследования в данной области знаний активно ведутся во многих научных организациях в России и за рубежом.

Важным классом гетерогенных реакционных сред являются порошковые заготовки. Порошки металлов и неметаллов, а также их смеси в виде свободной засыпки или спрессованных до заданной пористости заготовок используются для синтеза различных неорганических соединений и материалов методом СВС. В зависимости от агрегатного состояния исходных реагентов, различают безгазовые и гибридные СВС-системы. К безгазовым относятся порошковые смеси, которые реагируют без заметного влияния газофазных реакций: исходные компоненты, промежуточные и конечные продукты находятся в конденсированном (твердом или жидком) состоянии. В горении гибридных систем наряду с твердыми порошковыми реагентами участвует один или более газообразный реагент, который подводится в зону реакции путем фильтрации через поры гетерогенной среды. Несмотря на значительное число экспериментальных и теоретических работ, многие важные аспекты горения порошковых систем остаются недостаточно изученными. Необходима количественная оценка влияния размеров и формы порошковых частиц, а также их распределения по размерам, на режимы, форму фронта и скорость горения гетерогенных систем.

Как правило, фильтрационное горение гетерогенных сред реализуется с участием многокомпонентных газовых реагентов, содержащих активные и инертные компоненты, что усложняет процессы массопереноса, инициирования и горения пористых сред. Этот вопрос также недостаточно изучен. Для анализа этих процессов широко применяются методы математического моделирования, которые позволяют изучить физические механизмы развития процессов горения в сложных гетерогенных системах с учетом их структурной неоднородности.

Таким образом, исследование процессов горения гетерогенных сред с учетом их структурной неоднородности в потоке многокомпонентного газа с помощью методов математического моделирования является актуальной темой.

### **Цели и задачи.**

Целью данной работы является проведение анализа процессов горения гетерогенных сред с учетом неоднородности их структуры и сложного состава твердой и газовой фаз методами математического моделирования. Исследовать особенности макрокинетики взаимодействия во фронте горения, процессы массопереноса и влияние внешних возмущений. А также сопоставить полученные результаты с экспериментальными данными.

Для достижения этой цели, в диссертационной работе решаются следующие задачи.

1. Разрабатываются квазиизобарические подходы анализа горения пористых гетерогенных систем. Для этого создаются одномерная и двумерная модели нестационарного горения пористой среды в квазиизобарическом потоке трехкомпонентного газа.

2. Исследуются закономерности распространения волны экзотермического превращения по структурно-неоднородным гетерогенным средам. Для этого разрабатываются одномерная и двумерная модели, учитывающие неоднородность структуры среды по размерам и расположению частиц.

### **Научная новизна.**

1. На примере горения двухслойной системы предложена и обоснована применимость квазиизобарической модели горения для анализа горения высокопористых гетерогенных сред. Впервые методом математического моделирования исследовано горение пористого состава в квазиизобарическом потоке газа, состоящего из двух химически активных и инертного компонентов. Показано, что в зависимости от соотношения реагентов возможна реализация двухстадийного режима горения в режиме управления. Изучены характеристики фронта, выявлена роль инертных газовых компонент на режимы горения, процессы инициирования, параметрическую область устойчивости двухстадийной волны горения. Исследованы нестационарные режимы горения в области потери устойчивости квазиизобарического фронта. Установлены критические условия перестройки режимов горения при изменении концентрации инертного газа и пористости начальной смеси.

2. Разработана двумерная математическая модель горения пористой среды при квазиизобарическом переносе многокомпонентного газа для анализа пространственно-неоднородных волновых режимов горения гетерогенных сред. С помощью этой модели проведен анализ процессов структурированности квазиизобарического фронта горения гетерогенных пористых сред. Установлено качественное соответствие экспериментального исследования процессов структурированности фронта горения в пористых средах с полученными результатами с помощью предложенной модели.

3. С помощью разработанных математических моделей горения, учитывающих распределение размеров реакционных частиц (по нормальному и логнормальному законам) и их случайное расположение в пространстве, впервые методами математического моделирования исследовано влияние дисперсии распределения размеров частиц на характеристики горения микронеоднородных гетерогенных сред. Установлена зависимость тепловой устойчивости фронта от дисперсии распределения размеров частиц.

4. Разработан численный алгоритм для реконструкции характеристик фронта горения внутри цилиндрических образцов различной геометрии и поперечного сечения.

### **Практическая значимость работы.**

Практическая значимость работы определяется, прежде всего, возможностью использования результатов компьютерного моделирования для синтеза материалов методами СВС, как в режимах фильтрационного, так и безгазового горения. Установленные зависимости процесса горения от распределения частиц по размерам и от малых примесей газового реагента могут быть научной основой для оценки качества исходных порошковых и газовых реагентов для синтеза материалов. Полученные результаты полезны также для решения задач управления процессами горения гетерогенных сред в пиротехнике, энергетике и других областях.

### **Положения, выносимые на защиту.**

1. Критерии применимости квазиизобарического приближения процессов горения высокопористых сред.

2. Исследования структуры многостадийного фронта фильтрационного горения в квазиизобарическом приближении, условия перестройки режимов горения при фильтрационном подводе трехкомпонентного газа, в зависимости от концентрации инертного газа и пористости смеси.

3. Разработанные двумерные математические модели для изучения пространственно неоднородных фильтрационных режимов горения в слабо

градиентных полях давления, описывающие динамику распространения неоднородной структуры фронта горения.

4. Влияние полидисперсности смеси на структуру фронта в параметрической области перестройки квазигомогенного режима горения в эстафетный, а именно зависимости режимов горения от дисперсии распределения частиц по размерам.

5. Возникновение высокотемпературных очагов за зоной горения тонкодисперсного компонента, которые оказывают стабилизирующее влияние на устойчивость плоского фронта.

**Личный вклад автора.** Разработка компьютерных программ, исследование моделей методами численного эксперимента, а также проведение физических экспериментов по горению гетерогенных составов выполнены автором самостоятельно. Автор принимал непосредственное участие в обсуждении моделей, постановке задач исследований и написании статей.

#### **Апробация результатов.**

Основные результаты и положения диссертации докладывались и обсуждались на: 9,10-Всероссийских с международным участием Школах-семинарах по структурной макрокинетике для молодых ученых (г.Черноголовка, 2011,2012,2013 гг.); Международной Конференция “Неизотермические явления и процессы: от теории теплового взрыва к структурной макрокинетике.” (г.Черноголовка, 2011 г.); VI Всероссийской конференции Энергетические конденсированные системы , (г.Черноголовка, 2013 г.); II-ой Всероссийской молодежной конференции Успехи химической физики (г.Черноголовка, 2013), XII International Symposium on SHS (Texas,USA,2013).

#### **Публикации.**

Основные результаты по теме диссертации изложены в 11 печатных изданиях, 5 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК

**Структура диссертации.** Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения и списка цитируемой литературы. Полный объем диссертации-153 стр.; общее количество рисунков – 43; список использованных источников – 94.

## **ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ**

**Во введении** раскрываются проблемы по исследованию процессов горения гетерогенных пористых сред. Ставятся цели и задачи работы, обсуждается научная новизна и практическая ценность представленных исследований в этой области.

**В первой главе** представлен обзор литературы по анализу фильтрационных режимов горения гетерогенных сред, устойчивости распространения фильтрационного фронта горения. Обсуждаются различные экспериментальные и теоретические подходы исследования фильтрационных режимов в зависимости от механизмов тепло и массопереноса во фронте горения. Проведен анализ работ по влиянию микронеоднородности сред на режимы горения гетерогенных систем.

**Вторая глава** посвящена исследованию процессов горения пористых гетерогенных сред при фильтрации трехкомпонентного газа. Экзотермическое превращение горения таких систем зависит от множества факторов: характера тепло и массопереноса, химического тепловыделения, начальной структуры смеси, состава фильтрующегося газа. Предложена и обоснована применимость квазиизобарической модели, одна из важных особенностей которой учет стадийного характера взаимодействия конденсированной фазы с фильтрующейся многокомпонентной газовой смесью. Упрощенная брутто-схема такого процесса имеет следующий вид:  $A + C_1 \rightarrow B_1$  (реакция 1) и  $A + C_2 \rightarrow B_2$  (реакция 2), где  $B_1$  и  $B_2$  продукты взаимодействия пористой среды с активными реагентами  $c_1$  и  $c_2$  соответственно. Схема такого процесса представлена на рис 1.

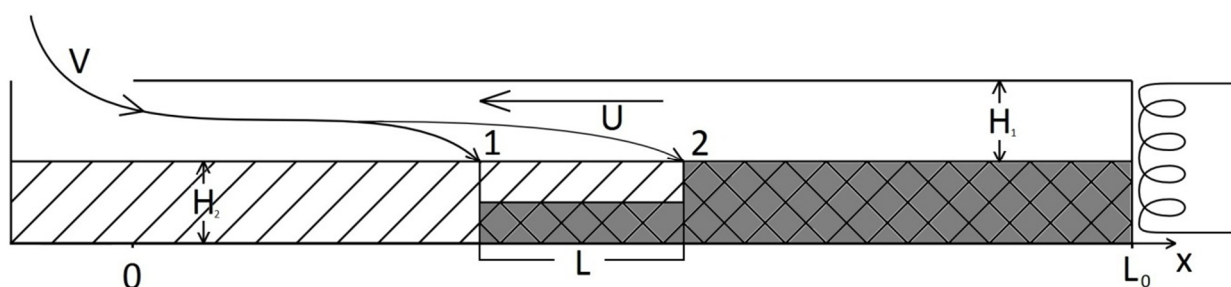


Рисунок 1. Схема распространения двухстадийной волны горения в щели: 1 - зона первой реакции, 2 - зона второй реакции,  $U$  - скорость распространения фронта,  $V$  - скорость потока газа,  $H_1$  - толщина воздушного зазора,  $H_2$  - толщина слоя порошка,  $x$  - пространственная координата,  $L_0$  - длина образца,  $L$  - расстояние между зонами реакций

Система дифференциальных уравнений, описывающая математическую модель, отражает фундаментальные законы сохранения.

Давление в газовой смеси зависит от физических характеристик каждой компоненты:

$$P(x, t) = R[\rho_{g1}/\mu_1 + \rho_{g2}/\mu_2 + \rho_{g3}/\mu_3]T \approx P_0$$

Закон сохранения активной массовой газовой компоненты с концентрацией  $c_1$ :

$$\frac{\partial \rho_g c_1}{\partial t} + \text{div}(\pi \rho_g c_1 s V) = -v_1 \rho_k (1 - \eta_\Sigma) (1 - \pi) c_1 K_1 \exp\left(-\frac{E_1}{RT}\right)$$

Закон сохранения активной массовой газовой компоненты с концентрацией  $c_2$ :

$$\frac{\partial \pi \rho_g c_2}{\partial t} + \text{div}(\pi \rho_g c_2 sV) = -v_2 \rho_k (1 - \eta_\Sigma)(1 - \pi) c_2 K_2 \exp\left(-\frac{E_2}{RT}\right)$$

Закон сохранения массы инертной газовой компоненты:

$$\frac{\partial \pi \rho_g c_3}{\partial t} + \text{div}(\pi \rho_g c_3 sV) = 0$$

Уравнения макрокинетики превращения конденсированного вещества для первой и второй реакций:

$$\frac{\partial \eta_1}{\partial t} = (1 - \eta_\Sigma) c_1 K_1 \exp\left(-\frac{E_1}{RT}\right)$$

$$\frac{\partial \eta_2}{\partial t} = (1 - \eta_\Sigma) c_2 K_2 \exp\left(-\frac{E_2}{RT}\right)$$

Уравнение переноса тепла:

$$\overline{c\rho} \frac{\partial T}{\partial t} + c_g \pi \rho_g sV \text{div}(T) = \Delta(\bar{\lambda}T) + Q_1 \rho_k c_1 K_1 (1 - \pi)(1 - \eta_\Sigma) \exp\left(-\frac{E_1}{RT}\right) + Q_2 \rho_k c_2 K_2 (1 - \pi)(1 - \eta_\Sigma) \exp\left(-\frac{E_2}{RT}\right) - \alpha(T - T_0)$$

где  $\overline{c\rho} = ((c_k \rho_k + c_g \rho_k (\eta_1 v_1 + \eta_2 v_2))(1 - \pi) + c_g \rho_g \pi)$ .  $\lambda = (1 - \pi)\lambda_k + \pi\lambda_g$ ,  $\eta_\Sigma = \eta_1 + \eta_2$ .  $c_1 + c_2 + c_3 = 1$ .

Условия иницирования высокотемпературным импульсом:  $T|_{x=L} = T_w$ , если  $t < t_i$ ,  $T'|_{x=L} = 0$ , если  $t > t_i$ , где  $T_w$  - температура иницирования,  $t_i$  - время теплового импульса.

На открытом для внешней среды торце:  $\bar{\lambda} \text{div}(T)|_{x=0} - c_g \pi \rho_s V(T - T_0)|_{x=0} = 0$ , при  $V(0) > 0$ ;  $\bar{\lambda} \text{div}(T)|_{x=0} = 0$ , при  $V(0) < 0$

На закрытом торце  $x = L_0: V(L_0) = 0$

Начальные данные:  $t = 0, x \in (0, L): T(x) = T_0, P(x) = P_0, \eta_1(x) = \eta_2(x) = 0, c_1(x) = c_{10}, c_2(x) = c_{20}, \rho(x) = \rho_{g0}, c(x) = c_1(x) + c_2(x) + c_3(x) = c_{10} + c_{20} + c_{30} = 1$

Параметры  $c_k, c_g, \rho_k, \rho_g$  - теплоемкости и плотности конденсированной и газовой среды соответственно,  $\rho_{gi}, \mu_i, c_{i0}$  - плотности, молекулярные массы и начальные концентрации газовых компонент ( $i = 1, 2, 3$ ),  $\rho_{g0}$  - начальная плотность газа,  $V$  - скорость газового потока,  $\bar{\lambda}$  - теплопроводность пористой среды,  $Q_1$  и  $Q_2$  - тепловые эффекты химических реакций,  $K_1$  и  $K_2$  - предэкспоненциальные факторы,  $E_1$  и  $E_2$  - энергии активации,  $R$  - газовая



постоянная,  $\nu_1$  и  $\nu_2$  - стехиометрические коэффициенты реакций,  $T_0$  - начальная температура,  $t$  - время,  $x$  - координата. Для численного анализа режимов горения используются следующие безразмерные переменные:  $\theta$  - температура,  $\tau = t/t^*$  - время,  $\xi = x/x^*$  - пространственная переменная,  $\eta$  - глубина превращения экзотермической реакции,  $\gamma$ ,  $\beta$  - параметры задачи, связанные с размерными переменными и параметрами системы соотношениями  $\theta = \frac{E_1}{RT_*^2}(T - T_*)$ ,  $\beta = \frac{RT_*}{E_1}$ ,  $\gamma = \frac{RT_*^2 c_k}{E_1 Q_1}$ ,  $t_* = \frac{\gamma}{K_1} \exp \frac{1}{\beta}$  - характерное время,  $x_* = \sqrt{\frac{\bar{\lambda} t_*}{c_k \rho_k}}$  - характерная длина,  $\rho_* = \rho_k$ . Возьмем характерную температуру  $T_* = T_0 + (c_{10} Q_1 + c_{20} Q_2)/c_k$ . Также введем  $\delta_E = \frac{E_2}{E_1}$ ,  $\delta_Q = \frac{Q_2}{Q_1}$ ,  $\delta_K = \frac{K_2}{K_1}$ ,  $\delta_{eE} = \exp \frac{1}{\beta} (1 - \delta_E)$ .

Как правило, для достижения полного превращения конденсированной среды требуется газового реагента по массе сравнимой с массой исходного конденсированного вещества. Так как масса газа в пористой среде при нормальных давлениях  $P$  незначительная, то в установившемся волновом режиме фильтрационный массоперенос газа в зоны реагирования из окружающего пространства является одним из лимитирующих процессов.

На рисунке 2 представлена детальная структура зоны подогрева и реакции: пространственные зависимости температуры  $\theta$ , скорости фильтрационного потока  $\nu$ , концентраций газовых реагентов  $c_1, c_2, c_3$ , скоростей тепловыделения  $F_1$  и  $F_2$ , глубин превращения  $\eta_1, \eta_2$ . При экзотермическом превращении гетерогенной системы формируется фильтрационный перенос компонент активного газа извне, начальная концентрация которых  $c_{10}, c_{20}$ .

На рисунке 2 а) б) происходит экзотермическое превращение с полным потреблением газовой компоненты  $c_1$  в зоне реакции (1) по кинетическому маршруту  $A + C_1 \rightarrow B_1$ , а газовые компоненты  $c_2, c_3$  "проскакивают" эту высокотемпературную зону и попадают в зону реакции (2) и продуктов. Из-за активного потребления газа концентрация  $c_1$  изменяется от  $c_{10}$  перед зоной реакции (1), до 0 за зоной реагирования (рис. 2б)). Глубина превращения исходного конденсированного вещества в этой зоне меняется от 0 до  $\eta_1^*$ . На расстоянии  $l$  от первой зоны по кинетическому маршруту  $A \rightarrow B_2$  происходит превращение вещества  $A$  с частичным расходом газообразного компонента  $c_2$ . В высокотемпературной зоне продуктов накапливается инертный газ  $c_3$  и непрореагировавший активный газ  $c_2$ . Из-за потребления активных газов в реакционных зонах возникает фильтрационный газовый поток извне. Скорость потока  $\nu_0$ , за зонами превращения скорость  $\nu = 0$ , давление  $p(\xi) \approx p_0$ . Между реакционными зонами в области теплового взаимодействия между стадиями концентрации газов и глубина превращения конденсированной компоненты удовлетворяют соотношениям:  $c_1 = 0$ ,  $c_2 + c_3 = 1$ ,  $\eta_1 = \eta_1^*$ ,  $\eta_2 = 0$ . В области

продуктов глубина превращения  $\eta_{\Sigma} = \eta_1^* + \eta_2^* = 1$ , где  $\eta_2^*$  изменение глубины превращения в зоне реакции (2). Представленная волновая структура относится к режиму полного выгорания исходного конденсированного вещества.

С увеличением концентрации инертной компоненты  $c_{30}$  происходит перестройка режимов реагирования пористой системы - реализуется режим неполного превращения конденсированного вещества. В этом случае в зоне продуктов накапливается инертный газ, который препятствует фильтрации активного газа в зоны реакций (рисунок 2 в)г)). Из-за изменения характера массопереноса, скорость фильтрационного

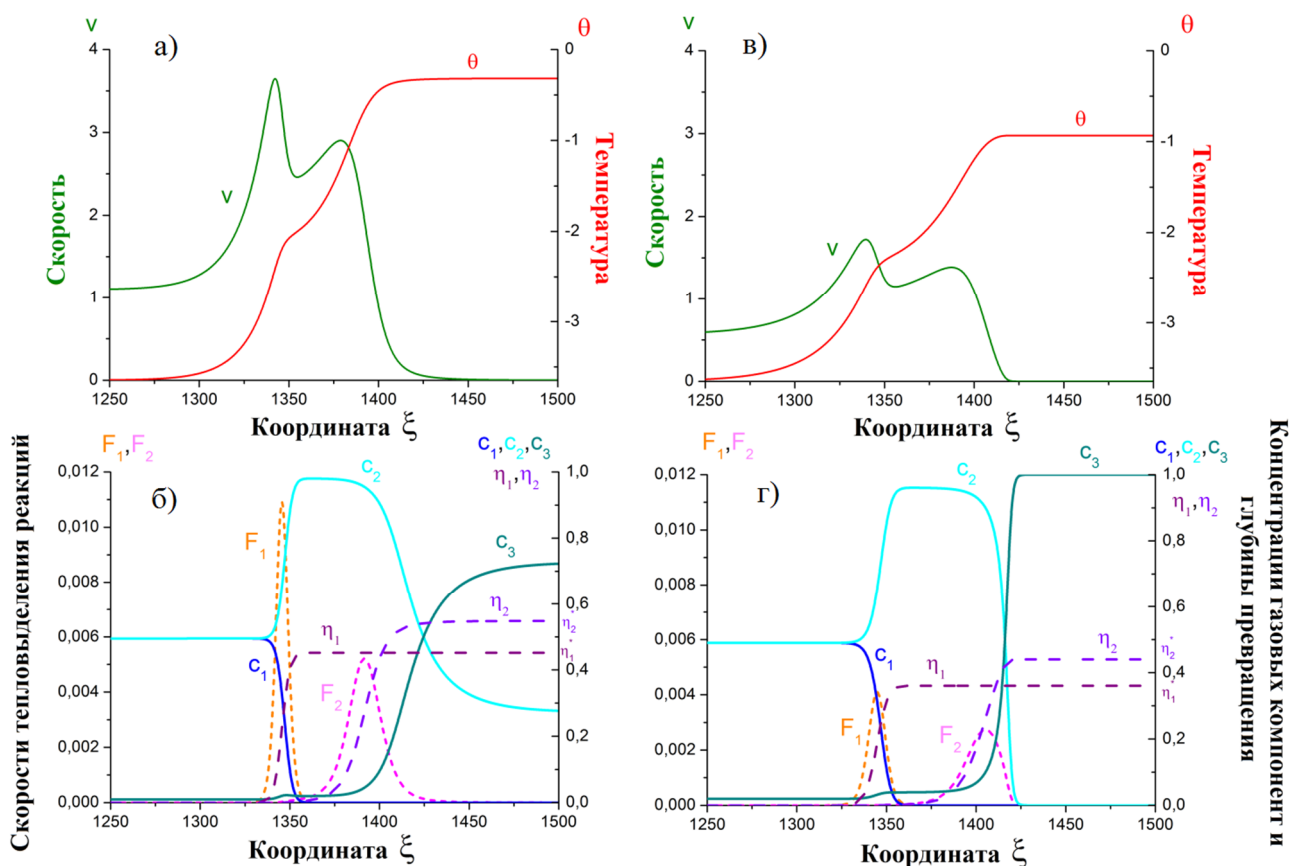


Рисунок 2.  $\theta_0 = -3.646$ ,  $\beta = 0.24$ ,  $\gamma = 0.288$ ,  $\delta_E = 1.5$ ,  $\delta_Q = 1.1$ ,  $\delta_{eE} = 0.1245$ ,  $v_1 = 0.11$ ,  $v_2 = 0.09$ ,  $\mu_2/\mu_1 = 1.0$ ,  $\mu_3/\mu_1 = 1.0$ ,  $k_2/k_1 = 0.1$ ,  $\pi = 0.5$ ,  $\rho_{g0}/\rho_k = 0.01$  а)  $\tau_1 = 19350$ ,  $c_{10} = 0.495$ ,  $c_{20} = 0.495$ ,  $c_{30} = 0.01$  б)  $\tau_1 = 30000$ ,  $c_{10} = 0.49$ ,  $c_{20} = 0.49$ , а) б)  $c_{30} = 0.01$ , в) г)  $c_{30} = 0.01$

подвода газа  $v_0$ , температура продуктов и скорость фронта горения  $u$  уменьшаются. Активные газы  $c_1$  и  $c_2$  полностью расходуется в зонах реакций (1) и (2). Глубина превращения конденсированной фазы  $\eta_{\Sigma} = \eta_1^* + \eta_2^* < 1$ . В отличие от режима полного выгорания конденсированного вещества, давление  $p_0$  в зоне продуктов поддерживается только за счет инертного газа, концентрация которого

$c_3 = 1$ . Переход на режим неполного превращения сопровождается уменьшением температур в зонах реакций и скорости фильтрации газа.

Анализ задачи позволяет определить критическое значение концентрации инертного газа  $c_{30}^*$ , разделяющее режимы горения пористой среды. При  $c_{30} \leq c_{30}^*$  реализуются режимы полного выгорания конденсированного вещества:  $\eta_\Sigma = 1$ , при  $c_{30} > c_{30}^*$  режим неполного выгорания конденсированного вещества:  $\eta_\Sigma < 1$ . Таким образом, начальная концентрация инертного газа  $c_{30}$  в рассматриваемых системах является одним из управляющих параметров процесса горения. Изучена зависимость безразмерных параметров фронта и расстояния между зонами реакций от  $c_{30}$ . Аналогичными методами найдено критическое значение пористости среды, при которой происходит переход из режима полного превращения в режим неполного.

Было проведено исследование структурных особенностей и устойчивости двухстадийного фронта фильтрационного горения, распространяющегося в пористой среде в режиме управления. Показано, что увеличение массового содержания инертного газа приводит к стабилизации неустойчивого фронта горения, когда массовый поток газа в зоны реакций уменьшается, соответственно

падает скорость двухстадийного фронта.

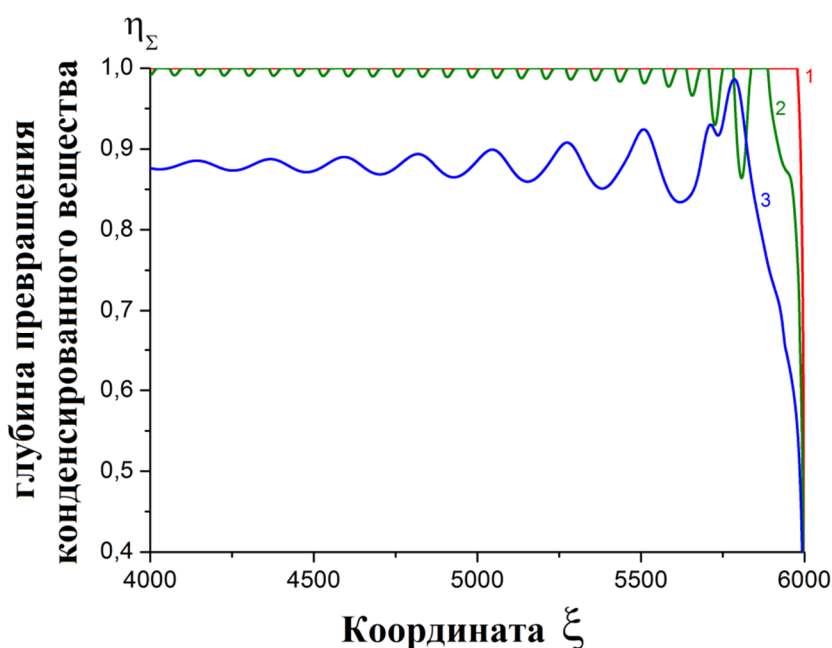


Рисунок 3.  
Пространственное распределение суммарной глубины превращения около нагретой стенки при различных начальных концентрация инертного газа Кривая 1:  $c_{10} = 0.4975$ ,  $c_{20} = 0.4975$ ,  $c_{30} = 0.005$ , Кривая 2:  $c_{10} = 0.495$ ,  $c_{20} = 0.495$ ,  $c_{30} = 0.01$ ,

Кривая 3:  $c_{10} = 0.4925$ ,  $c_{20} = 0.4925$ ,  $c_{30} = 0.015$ . Остальные параметры:  $\theta_0 = -3.24$ ,  $\beta = 0.275$ ,  $\gamma = 0.309$ ,  $\delta_E = 2.15$ ,  $\delta_Q = 1$ ,  $\delta_{eE} = 0.0153$ ,  $\nu_1 = 0.09$ ,  $\nu_2 = 0.11$ ,  $\mu_2/\mu_1 = 1.0$ ,  $\mu_3/\mu_1 = 1.0$ ,  $k_2/k_1 = 10$ ,  $\pi = 0.5$ ,  $\rho_{g0}/\rho_k = 0.01$

Исследован процесс инициирования волнового режима превращения двухстадийной волны фильтрационного горения. На рисунке 3 представлено пространственное распределение глубины превращения  $\eta_{\Sigma}$  при инициировании горения конденсированной среды при разных значениях концентрации инертного газа  $c_{30}$ . Напомним, что система инициируется с правого торца. При незначительной концентрации инертного газа (кривая 1) происходит выход на волновой режим полного выгорания. С увеличением концентрации  $c_{30}$  (кривые 2,3) размеры зоны недогорания растут и происходит переход от автоколебательного режима горения на устойчивый режим горения с неполнотой превращения конденсированной фазы.

**В третьей главе** предложена двумерная математическая модель для изучения пространственно неоднородных фильтрационных режимов горения. Проведен численный анализ нелинейных процессов инициирования, распространения и структурированности фронта горения в пористых средах в режиме естественной фильтрации газа в слабоградиентных полях давления. Для упрощения численного анализа предполагается, что газ двухкомпонентный  $C_1 = C_2$ , кинетика экзотермического превращения одностадийная.

Исследовалась структура фронта горения, которая являлась промежуточной асимптотикой процесса экзотермического химического взаимодействия. Структура фронта “забывает” детали процесса инициирования. Для инициирования фронта использовался высокотемпературный источник с синусоидальными возмущениями. В случае устойчивости плоского фронта горения возмущения быстро усредняются и не оказывают влияния на пространственную структуру фронта горения.

На рисунке 4 приведены безразмерные распределения поля глубины превращения, температуры, поперечной и продольной скоростей фильтрации, характеризующие фронтальные процессы экзотермического химического взаимодействия тонкого пористого слоя твердого реагента с активным газом (вид сверху). Поле глубины превращения за фронтом горения неоднородно (рисунок 3а)). В центральной части реагирующей области достигаются максимальные скорости реагирования и соответственно полноты превращения конденсированной фазы. Тем не менее, в представленном режиме в “узкой” зоне реакции максимальная глубина превращения остается меньше единицы  $\eta < 1$ . В центральной части создаются более благоприятные тепловые условия “доставки” активного газа за счет выпуклости фронта в зону реакции. За зоной реакции аккумулируется инертный газ. В области продуктов, из-за уменьшения активной газовой компоненты и понижения температуры (из-за теплопотерь) формируются области, где процесс превращения значительно тормозится. Интенсивное потребление активного газа в центральной части образца приводит к изменению поля скоростей газов. Формирование поперечных потоков газа в центральную

часть реагирующей поверхности приводит к его недостатку в периферийных областях. На рисунке 3 г), где представлены пространственное распределение поперечной скорости  $V_y$ . Скорость потока на рисунке 3 г) имеет красный цвет, если она направлена вверх вдоль оси  $\psi$ , и синий цвет, если она направлена в противоположном направлении. Интенсивность реагирования газа с конденсированной фазой растет за счет “откачки” активного газа из периферийных областей. Здесь мы наблюдаем режим горения распространяющийся по свежей пористой смеси на встречу потока газа. Поле температур перестраивается за счет кондуктивной теплопередачи и конвективного переноса тепла за счет сформировавшегося поля скоростей газа в условиях теплопотерь. В зоне продуктов, где в основном содержится инертный газ, теплопотери приводят к падению температуры газа и соответственного снижения давления. В результате формируется процесс догорания смеси за счет потока активного газа через высокотемпературную “узкую” зону, то есть формируется “угасающий” режим в зоне продуктов.

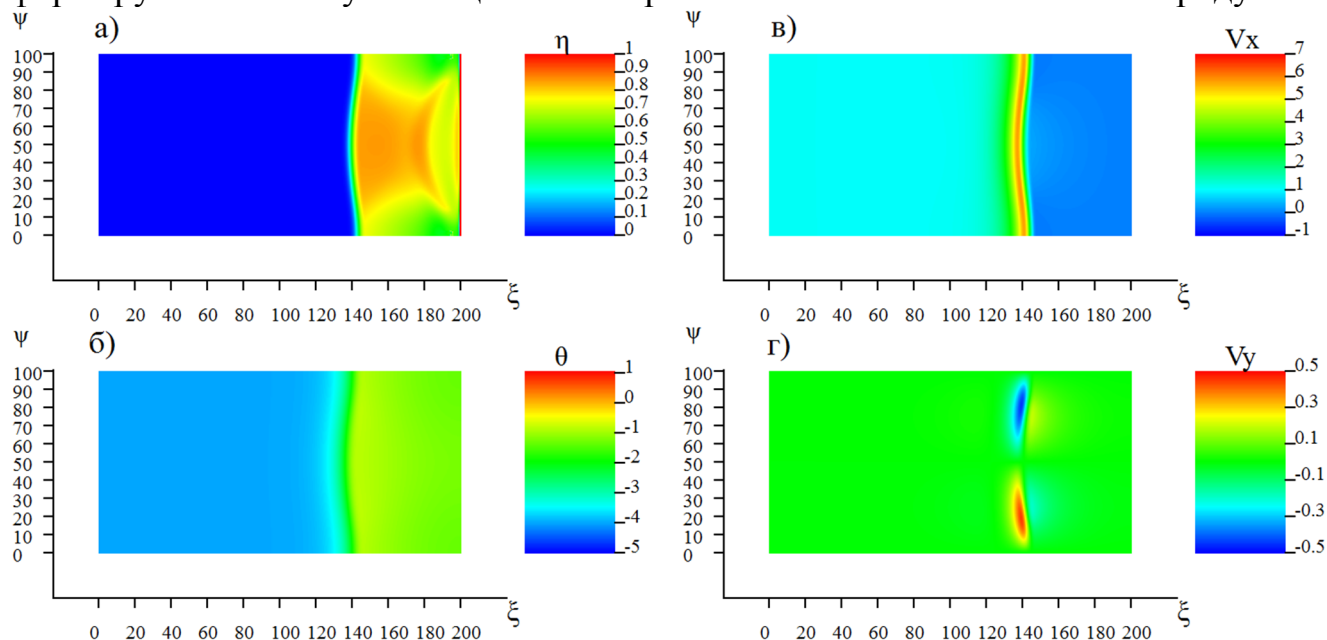


Рисунок 4. Характеристики фронта фильтрационного горения при  $\theta_0 = -4.$ ,  $\beta = 0.22$ ,  $\gamma = 0.245$ ,  $\delta_E = 1.$ ,  $\delta_Q = 1$ ,  $\delta_{eE} = 1.$ ,  $\nu_1 = 0.1$ ,  $\nu_2 = 0.1$ ,  $\mu_2/\mu_1 = 1.0$ ,  $\mu_3/\mu_1 = 1.0$ ,  $k_2/k_1 = 1$ ,  $\pi = 0.5$ ,  $\rho_{g0}/\rho_k = 0.01$ ,  $c_{10} = 0.491$ ,  $c_{20} = 0.4971$ ,  $\alpha = 0.0002$

**В четвертой главе** на основе математических моделей типа “сендвич”, исследуется фронт горения в дискретной гетерогенной системе в предположении случайного распределения частиц по размерам. В этом случае гетерогенная система представляет собой смесь частиц химически активного реагента и инертного веществ, схематически такая ситуация представлена на рисунке 5.

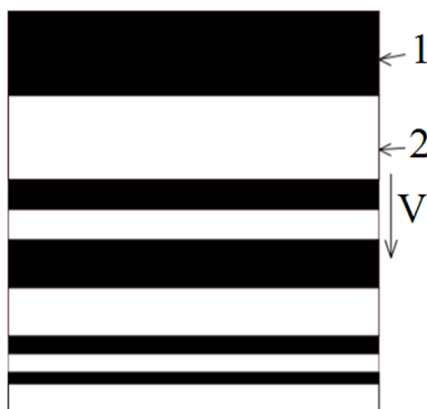


Рисунок 5.

1 – химически активный слой, 2 – инертный слой.

Для учета полидисперсности среды предполагаем, что распределение частиц по размерам характеризуется функцией плотности распределения  $\rho(r)$ . Рассматриваем два закона распределения частиц по размерам

Нормальный закон распределения

$$\rho(r) = \begin{cases} A \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(r-\mu)^2}{2\sigma^2}\right), & 0 < r \\ 0, & r \leq 0 \end{cases},$$

где  $A = \sqrt{2\pi} \frac{1}{\int_0^\infty \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) dx}$

Логнормальный закон распределения

$$\rho(r) = \begin{cases} \frac{1}{r\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(\ln(r) - \mu)^2}{2\sigma^2}\right), & 0 \leq r \\ 0, & r < 0 \end{cases}$$

Предполагаем, что размер инертного слоя согласован с размером химически активной компоненты, то есть  $l(i)/\delta(i) = a$ , где  $a$  - постоянная величина,  $l(i)$  - толщина химически активного слоя, а  $\delta(i)$  - толщина инертного слоя. Толщина гетерогенной ячейки  $r(i) = l(i) + \delta(i)$  переменная величина и намного меньше диаметра общей сборки.

Установлены достаточные условия реализации квазигомогенного режима горения полидисперсной конденсированной смеси, связанные с дисперсией распределения частиц по размерам. Показано, что распределение частиц по размерам приводит к изменению температурных режимов превращения слоев. На рисунке 6 представлено пространственно-временное распределение температуры при "волновом" превращении монодисперсной и полидисперсной многослойной системы. В монодисперсной гетерогенной системе (рис. 6 а))  $\sigma = 0$  реализуется квазигомогенный режим волнового экзотермического превращения. Учет возможной полидисперсности структуры изменяет характер распространения фронта, и чем больше среднее квадратичное отклонение размера частиц, тем сильнее проявляется эстафетный механизм горения. Учет распределения частиц по размерам приводит к изменению температурных режимов превращения слоев.

Также исследовано влияние дисперсии случайного распределения на тепловую неустойчивость горения, закономерности перестройки квазигомогенного режима в эстафетный неупорядоченный режим. Показано, что с увеличением дисперсии распределения  $\sigma$  существенно нарушается квазигомогенный характер превращения, и горение переходит в нерегулярный колебательный режим. Динамика развития неустойчивого горения в

многослойных средах определяются не только возмущениями, связанными с тепловой потерей устойчивости, но и структурными характеристиками системы.

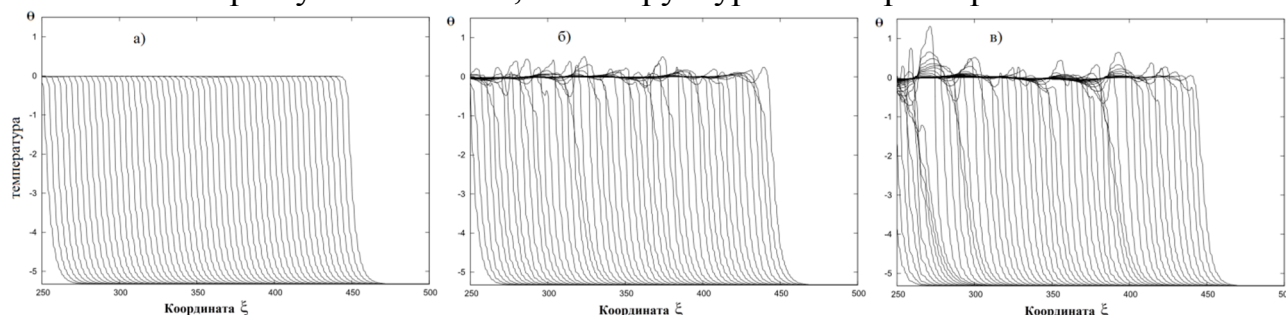


Рисунок 6. Пространственно-временное распределение температуры в многослойной системе при  $\beta = 0.15$ ,  $\gamma = 0.094$ ,  $\theta_0 = -5.32$ ,  $\sigma_{c\rho} = 1.0$ ,  $\sigma_\lambda = 0.17$ ,  $a = 1.0$  для систем с а) постоянным размером слоев  $l(i) = \delta(i) = 0.9$  б) распределенных по нормальному закону  $\mu = 0.9$ ,  $\sigma = 0.3$  в) распределенных по логнормальному закону  $\mu = -1.58$ ,  $\sigma = 0.325$  (те же значения среднего и дисперсии, что и в б))

**В пятой главе** для анализа влияния полидисперсности структуры на пространственные характеристики пламени предложена двумерная математическая модель горения гетерогенных систем. Изучено влияние масштаба гетерогенности в полидисперсной гетерогенной смеси на характер экзотермического превращения, в первую очередь на структуру пламени и устойчивость фронта превращения.

Базовым элементом такой системы является ячейка круглой формы, которая окружена теплопроводящим инертным материалом. Структура такой среды показана на рисунке 7.

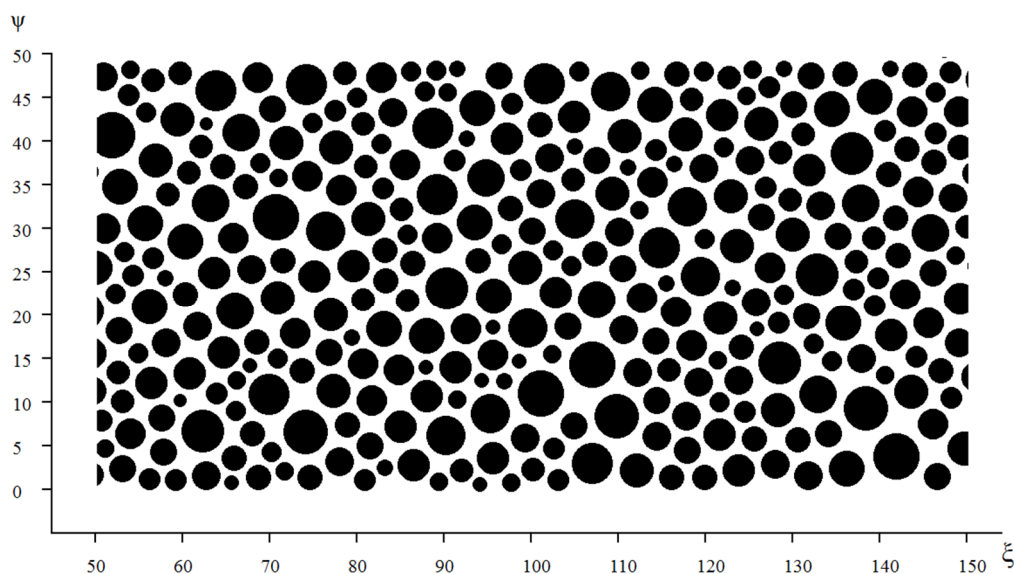


Рисунок 7. Структура гетерогенной смеси при  $\mu = 3.0$  и  $\sigma = 1.0$



Размеры химически активных ячеек задавались в предположении полидисперсности структуры и нормального закона случайного распределения. Между химически активной компонентой и инертным веществом в процессе горения происходит теплообмен

Показано, что формируется фронт горения с высокотемпературными очагами за зоной реакции мелкодисперсной компоненты, что связано с перестройкой квазигомогенного режима горения крупно-дисперсных частиц в эстафетный.

Сверхадиабатическое превращение крупно-дисперсной компоненты происходит за ведущей зоной горения. Тепловой поток из высокотемпературных очагов направлен как в зону реакции мелкодисперсной компоненты, так и в продукты горения. Установлено, что с увеличением дисперсии распределения все существеннее проявляется двухстадийный характер волнового превращения, формируется фронт с разделенными в пространстве зонами химического превращения (см рисунок 8).

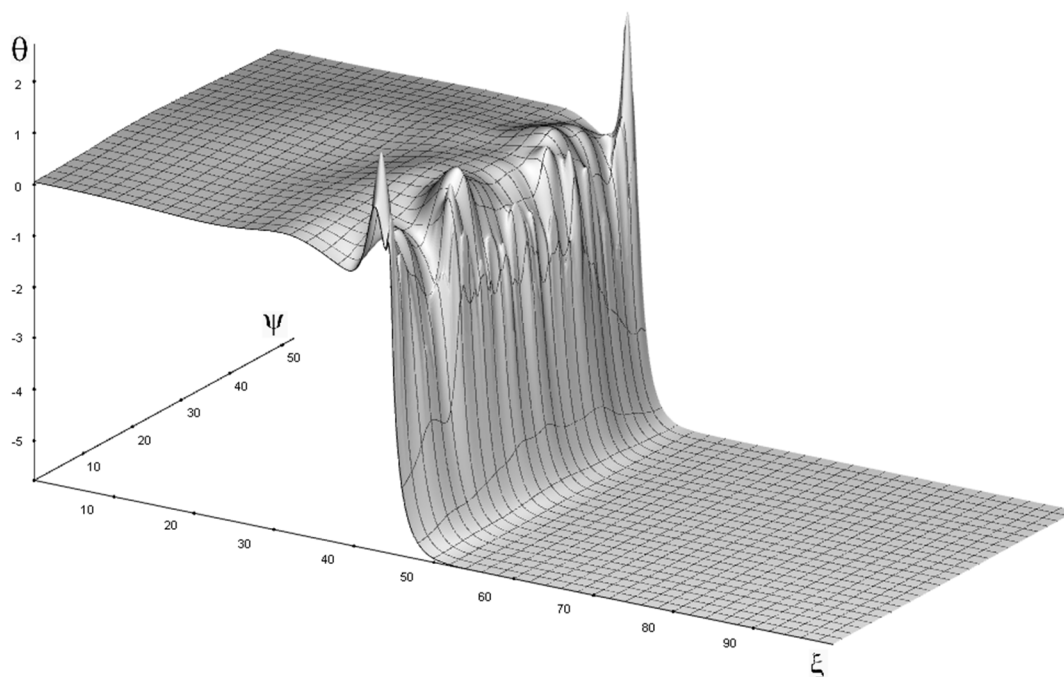


Рисунок 8 Пространственное распределение температуры при волновом превращении гетерогенной смеси:  $\sigma = 0.3$ ,  $a_c = 0.647$ ,  $\tilde{r}_0 = 1.0$ ,  $\sigma_\lambda = 0.5$ ,  $\sigma_{c\rho} = 1.0$ ,  $\theta_0 = -5.77$ ,  $\gamma = 0.112$ ,  $\beta = 0.149$  ( $\tilde{r}_0$  – средний радиус частиц  $\tilde{r}_0 = \mu/2$ )

Численно исследовалось влияние дисперсии распределения на среднюю скорость распространения фронта пламени (рисунок 9). С увеличением дисперсии распределения происходит падение средней скорости распространения фронта.



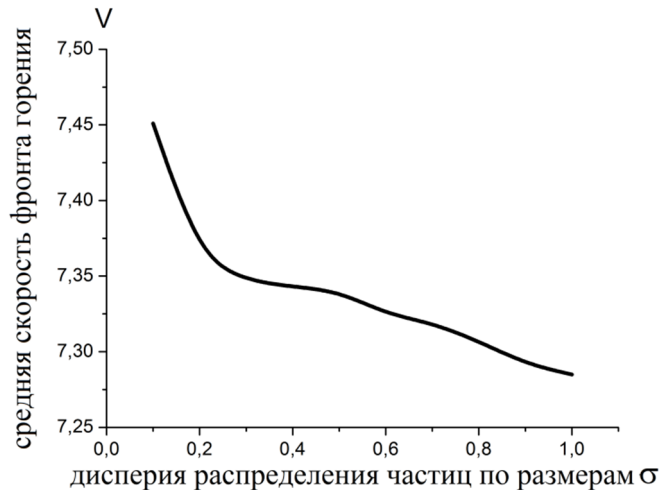


Рисунок 9 Зависимость средней скорости фронта горения от дисперсии гетерогенной смеси с параметрами  $a_c = 0.5$ ,  $\tilde{r}_0 = 1.5$ ,  $\sigma_\lambda = 1.$ ,  $\sigma_{c\rho} = 1.0$ ,  $\theta_0 = -5.917$ ,  $\gamma = 0.0845$ ,  $\beta = 0.13$

**В шестой главе** проодится качественное сравнение полученных теоретических данных анализа влияния микронеоднородности на характеристики фронтального превращения с экспериментальными исследованиями режимов горения.

Показан способ восстановления трехмерной структуры фронта горения идущего по пористому образцу.

Было выполнено экспериментальное исследование зависимости скорости горения от размеров и распределения по размерам частиц среды. Для экспериментального исследования были выбраны две системы: безгазовая Ti – Si и гибридная (фильтрационная) Ti – N<sub>2</sub>. Было показано, что распределение частиц Ti по размерам наилучшим образом соответствует логнормальному распределению.

Было проведено измерение средней скорости фронта монодисперсной смеси в зависимости от размера частиц.

Для экспериментального исследования процессов горения в масштабе отдельных частиц использовались те же порошки и их фракции, что и для макроскопических измерений, и тот же лабораторный реактор постоянного давления. Показано, что сгорание локальной области происходит не в виде мгновенной вспышки или теплового взрыва, а сопровождается распространением светящейся волны. Сгорание такой же по составу смеси с грубодисперсным титаном происходит по схожему механизму, но при этом толщина фронта еще меньше и фронт практически совпадает с границами частиц титана.

Экспериментальные исследования процессов безгазового и фильтрационного горения на уровнях макро- и микро-структуры среды, показывают хорошее качественное согласие с допущениями принятыми в математических моделях, используемыми в данной работе.

## **ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ И ВЫВОДЫ**

1. Предложена и обоснована применимость квазиизобарической модели для анализа процессов горения высокопористых сред.
2. Исследована структура и характеристики двухстадийной волны горения в режиме управления при перестройке режимов превращения конденсированной фазы. Определена ее зависимость от концентрации инертного газа в исходной газовой смеси. Показано существование критических условий перестройки режимов горения при изменении пористости гетерогенной системы.
3. Изучен характер потери устойчивости двухстадийных режимов горения в потоке трехкомпонентного газа с учетом теплового взаимодействия между стадиями. Установлено, что с ростом концентрации инертной газовой компоненты в газовой смеси параметрическая область устойчивости горения расширяется. Установлена связь нестационарных характеристик процесса зажигания пористой системы накаливаемой поверхностью от концентрации инертного газа с учетом стадийности экзотермического превращения конденсированной фазы.
4. На основе разработанной двумерной математической модели изучены пространственно неоднородные фильтрационные режимы превращения. Фильтрационный транспорт газовой многокомпонентной смеси реализуется в квазиизобарических условиях. Показано, что в параметрической области потери устойчивости плоского фронта формируются новая устойчивая фронтальная структура с высокотемпературными очагами.
5. Разработаны одномерные и двумерные математические модели горения гетерогенных сред, учитывающих случайное распределение размеров частиц по нормальному и логнормальному законам. Доказано, что полидисперсность оказывает существенное влияние на структуру фронта в параметрической области перестройки квазигомогенного режима горения в эстафетный. С увеличением дисперсности среды область существования квазигомогенного режима горения сокращается, амплитуды колебаний характеристик фронта в области перехода от квазигомогенного горения в эстафетный приобретают нерегулярный характер. Получены условия существования устойчивого квазигомогенного режима горения в полидисперсных средах.

6. Установлено, что формирование высокотемпературных очагов, связанных с развитием горения на отдельных частицах, оказывает стабилизирующее влияние на тепловую устойчивость фронта горения.

## СПИСОК РАБОТ, ОПУБЛИКОВАННЫХ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

### Статьи опубликованные в реферируемых журналах

1. Krishenik P. M., Rogachev S. A., Shkadinsky K. G. Combustion of multilayer systems with random layer thickness distribution: Mathematical modeling // International Journal of Self-Propagating High-Temperature Synthesis. 2012. Vol. 21, No. 2. Pp. 83–88.

2. Krishenik P. M., Rogachev S. A., Shkadinsky K. G. Unsteady transformations in thin two-component films: A model taking into account random particle size distribution // International Journal of Self-Propagating High-Temperature Synthesis. 2012. Vol. 21, No. 2. Pp. 75–82.

3. Kostin S. V., Krishenik P. M., Rogachev S. A., Shkadinsky K. G.. Combustion of Porous Solid Reagent in Quasi-Isobaric Flow of Three-Component Gaseous Reagent // International Journal of Self-Propagating High-Temperature Synthesis. 2013. Vol. 22, No. 3. p. 129–134.

4. Рогачев А.С., Барас Ф., Рогачев С.А. Режимы безгазового горения вблизи концентрационных пределов погасания. // Доклады Академии Наук, 2008 т. 422, №6, с. 747-749 (Физика).

5. Рогачев А.С., Барас Ф., Рогачев С.А. Режимы безгазового горения и макроструктура фронта (на примере системы Ti—Si). // Физика горения и взрыва, 2009, т.45, №4, с.147-155.

### Статьи в сборниках научных конференций

6. Кришеник П.М., Рогачев С.А., Шкадинский К.Г.. Нестационарные режимы горения гетерогенных сред с учетом случайного распределения частиц по размерам // Труды Международной Конференции “Неизотермические явления и процессы: от теории теплового взрыва к структурной макрокинетике”. Черно-голова. 27-30 ноября 2011 года. с. 80–81.

7. Костин С.В., Кришеник П.М., Рогачев С.А., Шкадинский К.Г. Нестационарное горение пористых систем в фильтрационном потоке много-компонентного газа // Труды VI Всероссийской конференции Энергетические конденсированные системы. Черногловка, 13-16 Ноябрь 2012 года. с. 43–47.

8. Рогачев С.А., Кришеник П.М., Шкадинский К.Г.. Фильтрационное горение пористого состава в многокомпонентной газовой среде // Успехи химической физики Сборник тезисов докладов на II Всероссийской молодежной конференции. Черноголовка, 19-24 мая 2013. с. 28
9. Krishenik P. M., Rogachev S.A., Shkadinsky K. G., — Mathematical modeling of combustion metal powders in a quasi-isobaric flow of three-component gaseous reagent // Book of abstracts. XII international symposium on self-propagating high-temperature synthesis. 21 – 24 October 2013. p. 31–33. South Padre Island, Texas, USA.
10. Рогачев С.А. Нестационарные режимы горения гетерогенных систем с учетом их структурной неоднородности / IX Всероссийская Школа-семинар по структурной макрокинетике для молодых ученых. 23 – 25 ноября, 2011, Черноголовка, Россия.
11. Рогачев С.А., Кришеник П.М., Шкадинский К.Г. Фильтрационное горение пористого состава в многокомпонентной газовой среде в квазиизобарическом приближении / X всероссийская с международным участием школа-семинар по структурной макрокинетике для молодых ученых. 21–23 ноября 2012. Черноголовка, Россия.