



Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
(МИНОБРНАУКИ РОССИИ)  
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (ТГУ)  
Физико-технический факультет  
Кафедра математической физики

**МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА  
НОРМАЛЬНОЙ СКОРОСТИ ГОРЕНИЯ АЭРОЗОЛЯ КЕРОСИНА  
С ДОБАВЛЕНИЕМ НАНОРАЗМЕРНОГО ПОРОШКА  
АЛЮМИНИЯ**

МОИСЕЕВА КСЕНИЯ МИХАЙЛОВНА  
ПОРЯЗОВ ВАСИЛИЙ АНДРЕЕВИЧ  
КРАЙНОВ АЛЕКСЕЙ ЮРЬЕВИЧ

# Математическая модель горения аэрозоля суспензии керосина и наноразмерного алюминия. Основные предположения.

В трубке большого диаметра и длины с закрытым торцом слева и открытым справа находится аэрозоль суспензии нанопорошка алюминия в керосине.

## ***Основные предположения:***

- Распределение начальной массовой концентрации капель. Массовая концентрация порошка в керосине задана.
- На правом, открытом, торце трубки имеется высокотемпературный очаг зажигания.
- В зоне прогрева перед фронтом горения капли суспензии греются, керосин испаряется. Частицы алюминия освобождаются из капель керосина после достижения ими температуры кипения в процессе быстрого их испарения.
- При распространении фронта горения по аэрозоли происходит расширение газа и его движение.
- Капли суспензии, а после испарения керосина - частицы алюминия, увлекаются потоком воздуха и движутся в нем.
- Горение аэрозоля происходит в изобарических условиях;
- Наноразмерные частицы алюминия имеют известную начальную толщину слоя оксида.
- Пары керосина вступают в реакцию с кислородом воздуха.
- Частицы алюминия освобождаются из капель керосина после их полного испарения. Высвободившиеся частицы алюминия прогреваются, реагируют с кислородом воздуха через слой образующегося слоя оксида.
- Возможная диссоциация молекул газа при высокой температуре не учитывается.

уравнение неразрывности для газа:

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_2 v)}{\partial x} = -G_N + G_K, \quad (3)$$

уравнение баланса массы кислорода:

$$\frac{\partial \rho_o}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_o v)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \rho_2 D \frac{\partial(\rho_o / \rho_2)}{\partial x} \right) - G_N - \frac{\alpha_{O_2} \mu_{O_2}}{\mu_K} \Phi(T_2), \quad (4)$$

уравнение баланса массы паров керосина:

$$\frac{\partial \rho_f}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_f v)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \rho_2 D \frac{\partial(\rho_f / \rho_2)}{\partial x} \right) + G_K - \Phi(T_2), \quad (5)$$

уравнение баланса массы капель керосина:

$$\frac{\partial \rho_K}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_K w_K)}{\partial x} = -G_K, \quad (6)$$

уравнение баланса массы частиц алюминия:

$$\frac{\partial \rho_N}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_N w_N)}{\partial x} = G_N, \quad (7)$$

уравнение энергии газа:

$$c_2 \rho_2 \left( \frac{\partial T_2}{\partial t} + v \frac{\partial T_2}{\partial x} \right) = \lambda_2 \frac{\partial^2 T_2}{\partial x^2} + 4\pi \alpha_N r_N^2 n_N (T_N - T_2) + 4\pi \alpha_K r_K^2 n_K (T_K - T_2) \eta(t_{vap} - t) - \\ + G_K (c_K^v T_K - c_2 T_2) + Q_K \Phi(T_2), \quad (8)$$

уравнение энергии частиц:

$$c_N \rho_N \left( \frac{\partial T_N}{\partial t} + w_N \frac{\partial T_N}{\partial x} \right) = -4\pi \alpha_N r_N^2 n_N (T_N - T_2) + G_N Q_N \frac{4\mu_{Al}}{3\mu_{O_2}}, \quad (9)$$

уравнение энергии капель керосина:

$$c_K \rho_K \left( \frac{\partial T_K}{\partial t} + w_K \frac{\partial T_K}{\partial x} \right) = -4\pi\alpha_K r_K^2 n_K (T_K - T_2) - L_K G_K, \quad \text{при } T_K < T_{\text{vap}}, \quad (10)$$

$$T_K = T_{\text{vap}}, \quad \text{при } T_K = T_{\text{vap}},$$

уравнение движения частиц алюминия:

$$\frac{\partial w_N}{\partial t} + w_N \frac{\partial w_N}{\partial x} = -\tau_{fr,N}, \quad (11)$$

уравнение движения капель керосина:

$$\frac{\partial w_K}{\partial t} + w_K \frac{\partial w_K}{\partial x} = -\tau_{fr,K}, \quad (12)$$

уравнение счетной концентрации капель керосина:

$$\frac{\partial n_K}{\partial t} + \frac{\partial (n_K w_K)}{\partial x} = 0, \quad (13)$$

уравнение состояния газа:

$$p = \frac{1}{\mu_2} \rho_2 RT_2 = const, \quad (14)$$

счетная концентрации частиц алюминия определяется алгебраическим соотношением:

$$n_N = \frac{\rho_N}{4/3 \pi r_N^3 \rho_N^0}, \quad (15)$$

размер капель керосина определяется алгебраическим соотношением:

$$r_K = \sqrt[3]{\frac{\rho_K}{(4/3) \pi n_K \rho_K^0}}. \quad (16)$$

Начальные условия:

$$T_2(x,0) = \begin{cases} T_0, & 0 \leq x < x_b \\ T_b, & x_b \leq x \leq l \end{cases}, \quad T_N(x,0) = T_2(x,0), \quad T_K(x,0) = T_0, \quad \rho_2(x,0) = \frac{\mu_2 P}{RT_2(x,0)}, \quad \rho_O(x,0) = 0.2\rho_2(x,0),$$

$$\rho_N(x,0) = \rho_{N,0}, \quad \rho_K(x,0) = \rho_{K,0}, \quad \rho_f(x,0) = \rho_{f,0}, \quad v(x,0) = 0, \quad w_N(x,0) = 0, \quad w_K(x,0) = 0, \quad r_N(x,0) = r_{N,0},$$

$$r_K(x,0) = r_{K,0}. \quad (17)$$

Граничные условия:

$$\frac{\partial T_2(0,t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial T_2(\infty,t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial T_N(0,t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial T_K(0,t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \rho_2(0,t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \rho_O(0,t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \rho_O(\infty,t)}{\partial x} = 0,$$

$$\frac{\partial \rho_f(0,t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \rho_f(\infty,t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \rho_N(0,t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \rho_K(0,t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial r_N(0,t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial r_K(0,t)}{\partial x} = 0, \quad (18)$$

$$v(0,t) = 0, \quad w_N(0,t) = 0, \quad w_K(0,t) = 0.$$

$$G_K = -4\pi\alpha_K r_K^2 n_K \rho_K^0 \frac{dr_K}{dt}, \quad \frac{dr_K}{dt} = \begin{cases} \frac{\beta(\rho_f - \rho_{f,n})}{\rho_K^0}, & T_K < T_{vap}, \\ \frac{Nu_K \lambda}{r_K} (T_{vap} - T_2), & T_K = T_{vap}, \end{cases} \quad \rho_{f,0} = \frac{p_{f,0}}{R_K T_K}, \quad p_{f,0} = p \exp\left(-\frac{L_K}{R_K T_K} + \frac{L_K}{R_K T_{vap}}\right), \quad (19)$$

$$Nu = 2 + \sqrt{Nu_l^2 + Nu_t^2}, \quad Nu_l = 0,664 Re^{0,5}, \quad Nu_t = 0,037 Re^{0,8}, \quad Re = \frac{2r\rho_2|v-w|}{\eta},$$

$$\alpha = \frac{Nu\lambda_2}{2r}. \quad (20)$$

$$\beta = \frac{DSh}{r_K} = \frac{\lambda_2 Nu_K}{c_2 \rho_2 r_K}, \quad (21)$$

$$\tau_{fr} = \frac{F_{fr}}{4/3\pi r^3 \rho^0}, \quad F_{fr} = C_R S_m \frac{\rho_2 (w-v)|v-w|}{2}, \quad (22)$$

$$C_R = \frac{24}{Re} (1 + 0,15 Re^{0,682}), \quad Re = \frac{2r\rho_2|v-w|}{\eta},$$

$$\Phi(T_2) = k_{0,K} \rho_f \rho_O \exp\left(-\frac{E_K}{RT_2}\right). \quad (23)$$

Запишем уравнения диффузии кислорода и паров алюминия в шаровом слое оксида на поверхности чистого алюминия. Движение частицы алюминия относительно оси  $x$ , направленной вдоль трубки с аэрозолем от закрытого конца, со скоростью  $w_N(x, t)$  учтем в уравнениях конвективным слагаемым. Тогда уравнения диффузии с учетом движения частицы алюминия в потоке газа примут вид:

$$\frac{\partial \rho_{ON}}{\partial t} + u \frac{\partial \rho_{ON}}{\partial r} + w_N \frac{\partial \rho_{ON}}{\partial x} = D_0 \exp\left(-\frac{E_d}{RT_N}\right) \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \rho_{2N} \frac{\partial a_{ON}}{\partial r} \right) - \frac{3\mu_o}{2\mu_{Al}} \rho_{Al} \frac{\rho_{ON}}{\rho_{2N}} p k_{01} \exp\left(-\frac{E_N}{RT_N}\right), \quad (24)$$

$$\frac{\partial \rho_{Al}}{\partial t} + u \frac{\partial \rho_{Al}}{\partial r} + w_N \frac{\partial \rho_{Al}}{\partial x} = D_0 \exp\left(-\frac{E_d}{RT_N}\right) \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \rho_{2N} \frac{\partial a_{Al}}{\partial r} \right) - \rho_{Al} \frac{\rho_{ON}}{\rho_{2N}} p k_{01} \exp\left(-\frac{E_N}{RT_N}\right), \quad (25)$$

$$\text{Начальные условия} \quad \rho_{Al}(r, x, 0) = 0, \quad \rho_{ON}(r, x, 0) = 0. \quad (26)$$

На внешней поверхности слоя оксида:

$$D_0 \exp\left(-\frac{E_d}{RT_N}\right) \rho_{2N} \frac{\partial a_{ON}(r_0(t), x, t)}{\partial r} = -\beta (\rho_{ON}(r_0(t), x, t) - \rho_{O,\infty}), \quad (27)$$

где  $\beta$  – коэффициент массообмена,

На внутренней поверхности слоя оксида:

$$D_0 \exp\left(-\frac{E_d}{RT_N}\right) \rho_{2N} \frac{\partial a_{ON}(r_1(t), x, t)}{\partial r} = \rho_{ON}(r_1(t), x, t) K(T_N), \quad K(T_N) = \frac{\rho_{ON}}{\rho_2} p k_{02} \exp\left(-\frac{E_N}{RT_N}\right), \quad (28)$$

$$\text{Граничные условия для уравнения (25):} \quad \frac{\partial a_{Al}(r_0(t), x, t)}{\partial r} = 0, \quad \rho_{Al}(r_1(t), x, t) = \rho_{Al,1}. \quad (29)$$

Скорость движения внутренней границы слоя оксида  $u_1(x, t) = \frac{dr_1}{dt}$  определяется из соотношения, определяющего сохранение потоков массы алюминия и кислорода на этой границе:

$$-D_0 \exp\left(-\frac{E_d}{RT_N}\right) \rho_{2N} \frac{\partial a_{ON}(r_1(t), x, t)}{\partial r} \frac{2\mu_{Al}}{3\mu_O} + D_0 \exp\left(-\frac{E_d}{RT_N}\right) \rho_{2N} \frac{\partial a_{Al}(r_1(t), x, t)}{\partial r} = u_1(x, t) \rho_{liqAl}, \quad (30)$$

где  $\rho_{liqAl}$  – плотность расплавленного алюминия.

Скорость движения внешней границы слоя оксида  $u_0(x, t) = \frac{dr_0}{dt}$  определяется из соотношения:

$$u_0(x, t) = u_1(x, t) \frac{r_0^2}{r_1^2} - u_1(x, t) \frac{r_0^2}{r_1^2} \frac{2\mu_{Al} + 3\mu_O}{2\mu_{Al}}. \quad (31)$$

Выражение (31) определяет скорость нарастания радиуса частицы в предположении равенства плотностей расплавленного алюминия и слоя оксида. Скорость  $u_1(x, t)$  отрицательная, скорость  $u_0(x, t)$  положительная. Скорость перемещения внутренних точек слоя оксида определяется выражением:

$$u(r, x, t) = u_1(x, t) \frac{r_0^2}{r^2} - u_1(x, t) \frac{r_0^2}{r^2} \frac{2\mu_{Al} + 3\mu_O}{2\mu_{Al}}. \quad (32)$$

$$G_N = -4\pi r_1^2 \rho_{liqAl} u_1(x, t) n_N \frac{3}{4} \frac{\mu_{O_2}}{\mu_{Al}}. \quad (33)$$

для (3), (4), (7), (9).



## Исходные данные для расчета

Численное исследование горения аэрозоля суспензии нанопорошка алюминия в керосине проводилось для стехиометрической и ниже начальной массовой концентрации капель суспензии нанопорошка алюминия в керосине. Состав смеси формировался таким, чтобы конечная температура была не выше 3600 К. Начальная температура варьировалась в интервале  $T_0 = 293 \div 413 \text{ K}$ , при атмосферном давлении  $p = 0.1 \text{ МПа}$  и размере капель  $r_{K,0} = 0.01 \text{ мм}$ , содержащих наноразмерные частицы алюминия радиуса  $r_{Al,0} = 40 \text{ нм}$ .

Расчеты проводились при следующих значениях теплофизических и формально-кинетических величин:  $c_N = 903 \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{K})$ ,  $c_K = 2200 \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{K})$ ,  $c_2 = 1000 \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{K})$ ,  $\rho_N^0 = 2700 \text{ кг}/\text{м}^3$ ,  $\rho_K^0 = 800 \text{ кг}/\text{м}^3$ ,  $\rho_{liqAl} = 2700 \text{ кг}/\text{м}^3$ ,  $\rho_{Al,1} = 0,346 \text{ кг}/\text{м}^3$ ,  $R = 8.31 \text{ Дж}/(\text{моль} \cdot \text{K})$ ,  $\eta = 2 \cdot 10^{-5} \text{ Па} \cdot \text{с}$ ,  $\lambda_2 = 0.1 \text{ Вт}/(\text{м} \cdot \text{K})$ ,  $Q_N = 36 \text{ МДж}/\text{кг}$ ,  $\mu_{Al} = 0.027 \text{ кг}/\text{моль}$ ,  $\mu_{O_2} = 0.032 \text{ кг}/\text{моль}$ ,  $\mu_{air} = 0.029 \text{ кг}/\text{моль}$ ,  $\mu_K = 0.1 \text{ кг}/\text{моль}$ ,  $D_0 = 1.884 \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$ ,  $E_d = 10 \text{ кДж}/\text{моль}$ ,  $E_N = 71.6 \text{ кДж}/\text{моль}$ ,  $k_{01} = 4.37 \cdot 10^4 \text{ 1}/(\text{с} \cdot \text{Па})$ ,  $k_{02} = 4.37 \cdot 10^{-8} \text{ м}/(\text{с} \cdot \text{Па})$ ,  $E_K = 167.4 \text{ кДж}/\text{моль}$  [22],  $k_{0,K} = 4 \cdot 10^{11} \text{ м}^3/(\text{кг} \cdot \text{с})$ ,  $T_{vap} = 175 \text{ }^\circ\text{C}$ ,  $L_K = 222 \text{ кДж}/\text{кг}$ ,  $R_K = R/\mu_K$ ,  $Q_K = 40 \text{ МДж}/\text{кг}$ .

## Результаты расчета

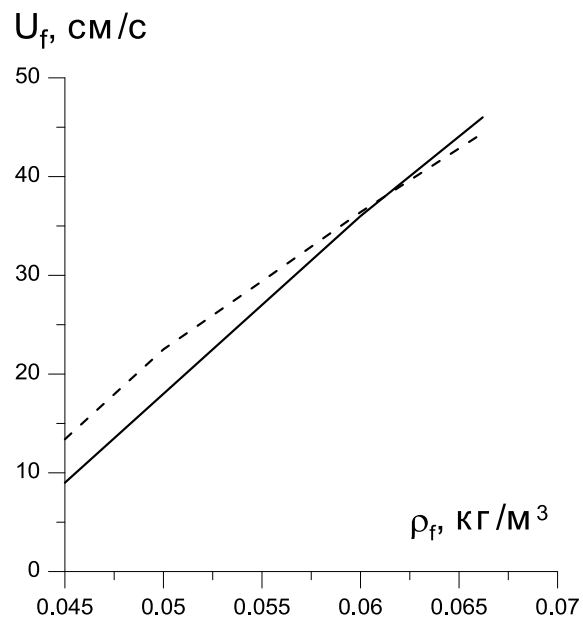


Рис. 2. Зависимость скорости горения от массовой концентрации керосина в аэрозоле. - - - - - результаты расчета по модели, — - - экспериментальные данные из [1]

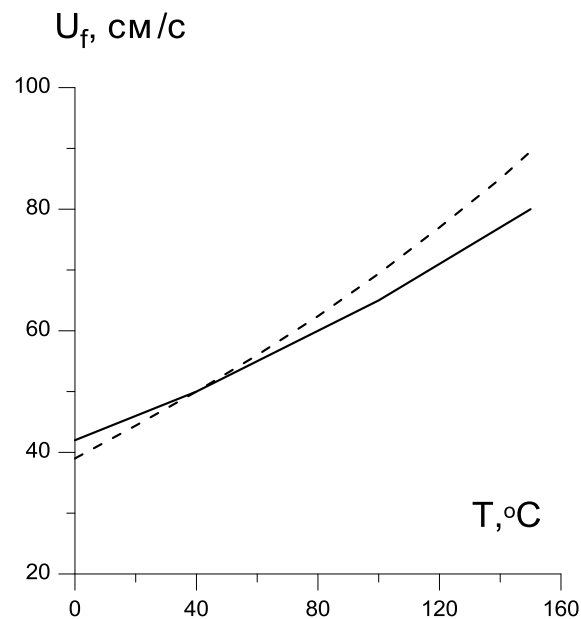
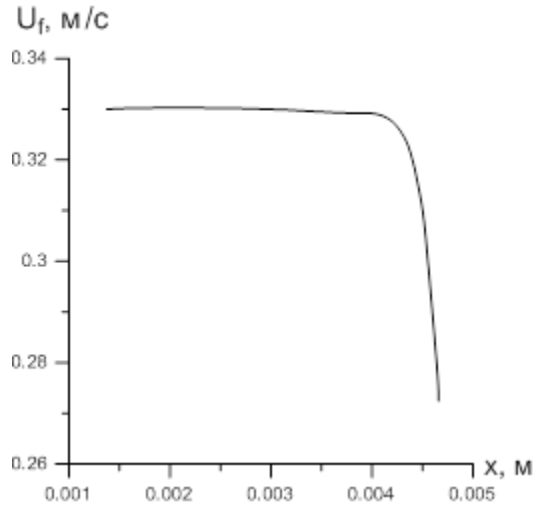


Рис. 3. Зависимость скорости горения от начальной температуры аэрозоля керосина. Коэффициент избытка горючего 0.95. - - - - - результаты расчета по модели, — - - экспериментальные данные из [1]

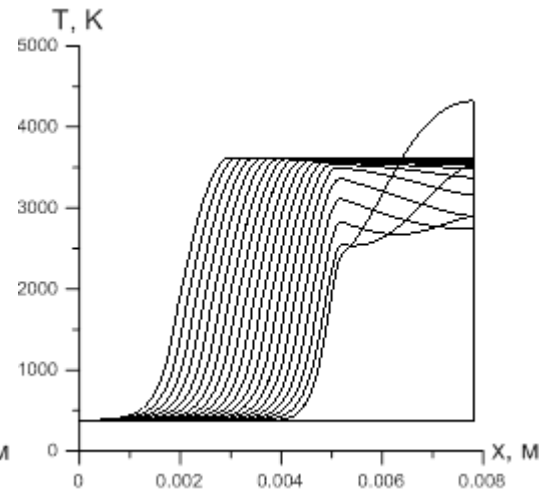
# Результаты расчета



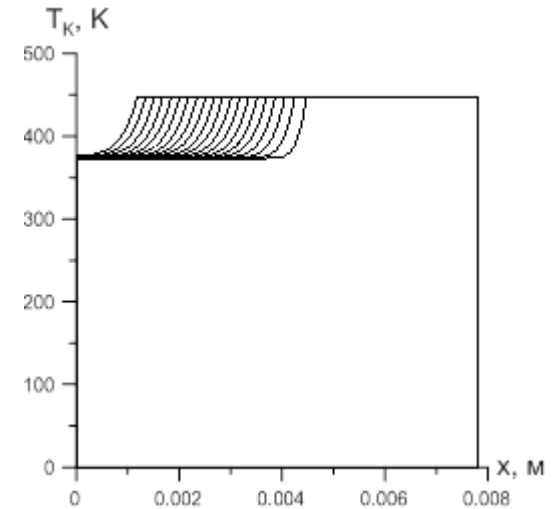
Зависимость скорости распространения фронта горения в аэрозоли суспензии нанопорошка алюминия в керосине. Фронт горения движется справа налево.

$$\rho_{N,0} = 0.0671 \text{ кг/м}^3,$$

$$\rho_{K,0} = 0.02 \text{ кг/м}^3, T_0 = 373 \text{ K}$$

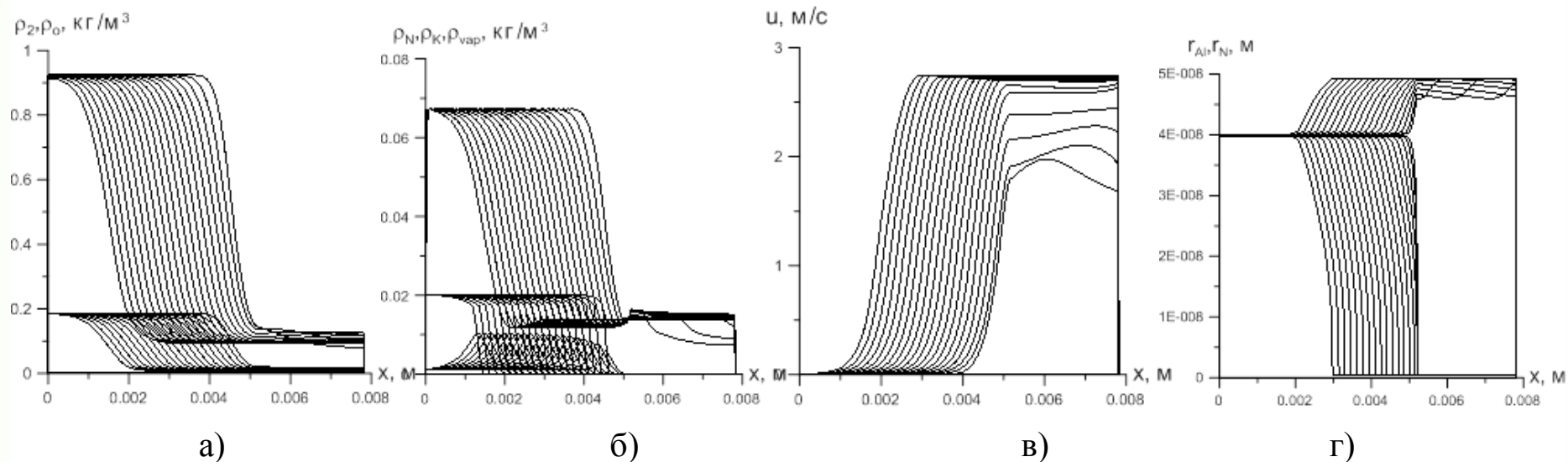


Распределения температуры газа и частиц в фиксированные моменты времени через 0.0005 с от начала процесса. Фронт горения движется справа налево.  $\rho_{N,0} = 0.0671 \text{ кг/м}^3$ ,  $\rho_{K,0} = 0.02 \text{ кг/м}^3$ ,  $T_0 = 373 \text{ K}$



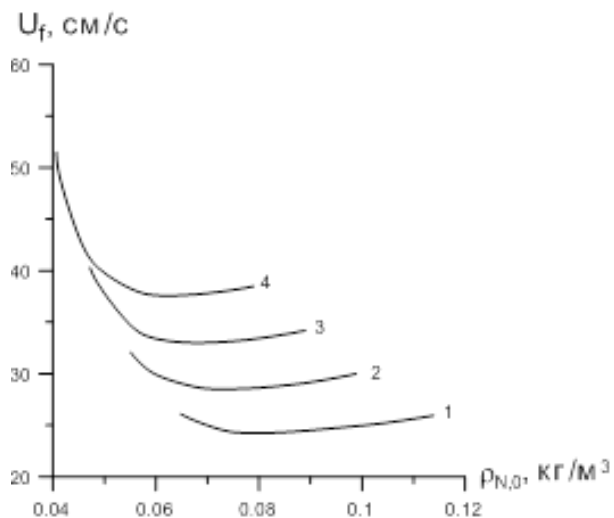
Распределения температуры капель в фиксированные моменты времени через 0.0005 с от начала процесса. Фронт горения движется справа налево.  $\rho_{N,0} = 0.0671 \text{ кг/м}^3$ ,  $\rho_{K,0} = 0.02 \text{ кг/м}^3$ ,  $T_0 = 373 \text{ K}$

## Результаты расчета

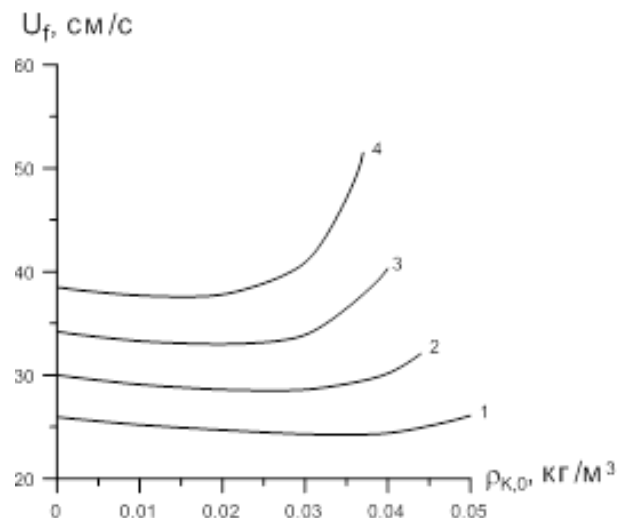


Распределения плотности газа и парциальной плотности кислорода (а), распределенной плотности частиц алюминия, распределенной плотности жидкого керосина, паров керосина (б), скорости газа (в), радиуса частиц и радиуса чистого алюминия под слоем оксида (г) в фиксированные моменты времени через 0.0005 с от начала процесса. Фронт горения движется справа налево.  $\rho_{N_2,0} = 0.0671 \text{ кг/м}^3$ ,  $\rho_{K,0} = 0.02 \text{ кг/м}^3$ ,  $T_0 = 373 \text{ K}$

## Результаты расчета



а)



б)

Зависимость скорости распространения фронта горения в аэрозоли суспензии нанопорошка алюминия в керосине от массовой концентрации нанопорошка (а), от массовой концентрации керосина (б). 1 –  $T_0 = 293$  К, 2 –  $T_0 = 333$  К, 3 –  $T_0 = 373$  К, 4 –  $T_0 = 413$  К

## Заключение

Разработана математическая модель горения аэрозоли суспензии нанопорошка алюминия в керосине. Для моделирования горения наноразмерных частиц алюминия используется локальная математическая модель диффузии окислителя через слой оксида алюминия на поверхности частицы с учетом его реакции с алюминием. Из решения локальных задач горения наноразмерных частиц алюминия для всей совокупности частиц в газе определяется скорость окисления наноразмерных частиц алюминия и связанная с ним скорость тепловыделения. Параметры состояния аэрозоли суспензии нанопорошка алюминия в керосине определяются из решения системы уравнений сохранения энергии газа, капель керосина, частиц, сохранения массы компонентов газодисперсной смеси, уравнений движения капель и частиц. Разработанная модель не требует задания температуры зажигания наноразмерных частиц алюминия. Решение системы уравнений математической модели проведено численно. Результаты расчета скорости распространения фронта горения в аэрозоли чистого керосина от его массовой концентрации и начальной температуры хорошо согласуются с экспериментальными данными. Определены зависимости скорости распространения фронта горения в аэрозоли суспензии нанопорошка алюминия в керосине от массовой концентрации керосина, нанопорошка алюминия в воздухе и от начальной температуры аэрозоли.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №17-79-20011).