

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ МИКРОЧАСТИЦ ЖЕЛЕЗА

В.В. Лещевич¹, О.Г. Пенязьков², Ж.-К. Ростен³, А.В. Федоров⁴, А.В. Шульгин⁵

Представлены экспериментальные и численные исследования самовоспламенения и горения микрочастиц железа в кислороде. Параметры высокотемпературной газовой среды были созданы при помощи установки быстрого сжатия. Изучались порошки с размерами частиц от 1 до 125 мкм при давлении кислорода от 0,5 до 28 МПа и температуре от 500 до 1100 К. Время задержки воспламенения измерялось с помощью регистрации излучения с боковой стенки камеры сгорания и измерения давления на торцевой стенке. Критические условия самовоспламенения микрочастиц железа определяются в зависимости от размера частиц, температуры и давления кислорода. Для описания механизмов воспламенения предложена точечная полуэмпирическая математическая модель, позволившая удовлетворительно описать экспериментальные данные по зависимости времени задержки воспламенения насыпки частиц железа от температуры окружающей среды с учетом зависимости предельных температур воспламенения от давления.

Ключевые слова: микрочастицы железа, кислород, установка быстрого сжатия, время задержки воспламенения, математическое моделирование.

Введение

Мелкодисперсные частицы металлов нашли широкое применение в различных областях промышленности. В настоящее время металлические порошки используются в качестве каталитических добавок, улучшающих эффективность сгорания обычных топлив и подавляющих образование вредных веществ в энергетических установках [1–3]. Кроме того, процесс сжигания металлических частиц рассматривается как возможный способ синтеза ультрадисперсных порошков оксидов металлов [4]. Изучение воспламенения и горения металлов представляет собой комплексную научную задачу, включающую различные аспекты неравновесных фазовых превращений и химических реакций. Эти механизмы отличаются большим разнообразием вследствие различий в физико-химических характеристиках исходных веществ. Многочисленные работы были посвящены исследованию взрывных характеристик взвешенной в среде окислителя металлической пыли [5–7]. В камере постоянного объема осуществлялось воспламенение облака пыли с помощью мощных искровых инициаторов, а также на ударных трубах, в которых пылевая взвесь создавалась при прохождении падающей ударной волны, а воспламенение происходило за отраженной волной. Информация, имеющаяся в этой области, ограничена в основном формальными кинетическими данными по скоростям горения. Другой немаловажной задачей является изучение воспламенения и горения частиц, свободнолежащих в виде тонкого слоя в среде нагретого окислителя. Локальное самовоспламенение может быстро распространиться и вызвать медленное тлеющее горение всего слоя. Моделирование данного процесса – это физико-химическая задача, объединяющая как кинетические процессы окисления отдельных частиц, так и процессы теплообмена в системах «частица–частица» и «частица–газ». Поэтому для построения и проверки адекватности таких моделей необходимы исходные данные, в частности, критические параметры газовой среды, при которых происходит самовоспламенение, их зависимость от материала и раз-

¹ Лещевич Владимир Владимирович – младший научный сотрудник, Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова Национальной академии наук Беларуси

² Пенязьков Олег Глебович – член-корреспондент Национальной академии наук Беларуси, директор, Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова Национальной академии наук Беларуси

³ Ростен Жан-Кристоф – Центр исследований КО Дером, Франция

⁴ Федоров Александр Владимирович – доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией, Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук

⁵ Шульгин Алексей Валентинович – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук

E-mail: shulgin@itam.nsc.ru

мера частиц. Как известно, проведение экспериментальных исследований в широких диапазонах начальных параметров системы зачастую представляется экономически затратным. Поэтому представляет интерес построение математических моделей, позволяющих дать прогноз поведения соответствующих засыпок металла в установку быстрого сжатия (УБС). В [8, 9] представлена физико-химическая математическая модель для описания явления самовоспламенения в рамках точечного подхода, описывающая некоторые критические параметры рассматриваемой системы.

В настоящей работе экспериментально исследованы критические условия и время самовоспламенения микрочастиц железа в кислороде, получены данные о температуре, развивающейся при горении. Для описания данного явления модифицирована полуэмпирическая точечная модель, позволяющая описать тепловую историю системы частиц, подвергающуюся воздействию в устройстве быстрого сжатия.

Экспериментальная установка

Для создания нагретой окислительной среды с температурой 500–1100 К и давлением 0,5–28 МПа использовалась УБС, цилиндр сжатия которой схематично изображен на рис. 1. В тестовую камеру вмонтированы высокотемпературный пьезоэлектрический датчик давления Kistler 6031U18 (4), соединенный с усилителем заряда Kistler 5015A (11), клапан для вакуумирования и напуска кислорода (5) и кварцевое окно (6). Для регистрации светового излучения использовались два фотоэлектронных умножителя (ФЭУ), соединенные с окном при помощи сдвоенного оптоволоконного кабеля. Перед фотокатодом одного из ФЭУ был установлен нейтральный светофильтр (оптическая плотность $D = 3,74$). Это позволило одновременно регистрировать слабое свечение при локальном самовоспламенении с помощью ФЭУ без фильтра и свечение всего горящего порошка с помощью ФЭУ с фильтром. Для регистрации положения поршня в ходе такта сжатия, т. е. значения текущего объема, использовался оптический датчик отражения, реагирующий на отметки, нанесенные на штоке через каждые 5 мм. Все сигналы записывались на цифровой осциллограф с временным разрешением 0,8 мкс. Температура сжатого кислорода рассчитывалась по уравнению адиабатического сжатия с учетом измеренного увеличения давления, начальной температуры и полиномиальной зависимости теплоемкости от температуры.

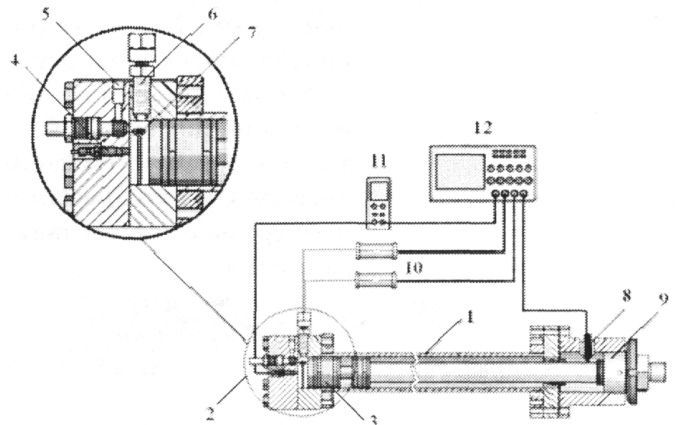


Рис. 1. Принципиальная схема измерений: 1 – цилиндр сжатия, 2 – тестовая камера, 3 – сжимающий поршень, 4 – датчик давления, 5 – клапан, 6 – кварцевое окно, 7 – керамическая чашка с образцом металлического порошка, 8 – оптический датчик отражения, 9 – конический фиксатор поршня в конечном положении, 10 – фотоумножители (или спектрометр и пирометр), 11 – усилитель заряда, 12 – цифровой осциллограф

Результаты гранулометрического анализа порошков железа

Таблица 1

Порошок	Диапазон размеров (min–max), мкм	Основная фракция		Средний размер	
		по количеству частиц (горизонтальная / вертикальная проекция), мкм	по массе, мкм	по количеству частиц (длина/ширина), мкм	по массе, мкм
Мелкодисперсные порошки железа	0,2–9,2	1–3/1–3	2–4	2,59/2,16	3,4
	0,2–16,4	1–5/1–3	4–5	4,01/3,08	4,7
Порошки, разделенные с помощью сит с размером ячеек, мкм	9,0–98,1	20–40/30–40	30–60	42,92/30,56	43,8
	6,7–180,3	60–90/70–90	70–90	82,76/59,01	80,6
	32,8–268,1	110–140/100–110	130–160	155,48/114,8	140,2

Изучались два мелкодисперсных порошка железа, основная фракция которых состояла из частиц размером 1–3 и 1–5 мкм соответственно. Кроме того, в работе были использованы порошки, разделенные с помощью сит с размерами ячеек 45, 56, 63, 80 и 125 мкм. Для уточнения диапазона размеров частиц в полученных порошках и определения размеров основной фракции проведен гранулометрический анализ с помощью сертифицированного сканера изображения «Mini-Magiscan». Результаты анализа приведены в табл. 1. Порошки помещались в керамическую чашку 7, установленную в тестовую камеру. Масса образца во всех экспериментах была 0,05 г.

Результаты

В ходе экспериментов были определены критические условия самовоспламенения микропорошков железа (рис. 2). Параметры газовой фазы, при которых наблюдалось самовоспламенение частиц железа, нанесены зачерненными символами, незачерненными отмечены условия, при которых воспламенение не было зарегистрировано. Для наглядности точки, соответствующие минимальным (критическим) параметрам самовоспламенения, соединены линиями. Установлено, что порошок железа, состоящий из частиц размером до сотен микрометров, способен легко самовоспламениться в кислородной среде с температурой ниже температуры плавления железа, причем самовоспламенение порошка микрочастиц железа сильно зависит как от давления, так и от температуры кислорода. Характер этой зависимости существенно изменяется с уменьшением размера частиц. Так, порошок, состоящий из частиц размером 1–3 мкм, воспламеняется при температуре кислорода ниже 620 К и давлении выше 10 МПа.

Зависимость предельного давления кислорода P_{lim} от предельной температуры кислорода T_{lim} в плоскости (T, P) определяет границу области воспламенения. Эта зависимость может быть аппроксимирована выражением вида

$$T_{lim} = c \exp\left(-\frac{d}{P_{lim}}\right). \quad (1)$$

Значения c и d , полученные в результате аппроксимации экспериментальных данных, приведены в табл. 2, а соответствующие кривые – на рис. 2. Для частиц 20–40 мкм аппроксимация разбита на два интервала по предельным давлению и температуре в виду того, что она имеет два участка: один со слабым изменением предельного давления от температуры, второй – с резким.

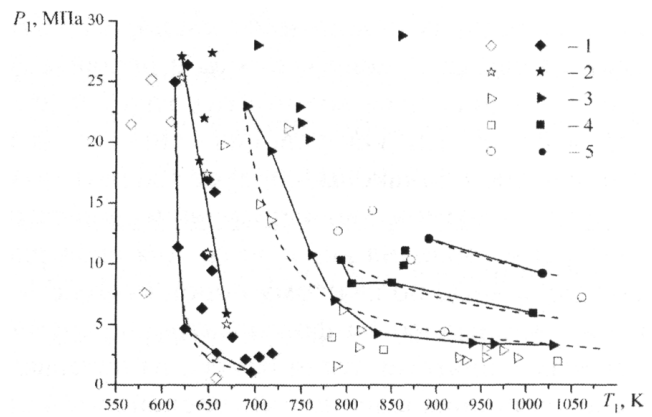


Рис. 2. Давление и температура кислорода при наличии (зачерненные символы) и отсутствии (незачерненные символы) самовоспламенения порошков железа. Размеры частиц основной фракции: 1 – 1–3 мкм; 2 – 1–5; 3 – 20–40; 4 – 60–90; 5 – 100–140. Штриховые линии — аппроксимации по формуле (1)

Таблица 2

Значения параметров c и d для аппроксимации (1)

Радиус частиц, мкм	c	d
1–3	610,3383651	–0,1390938854
20–40	651,1730614,	–1,427623342,
	690 < T ≤ 835, 4 < P ≤ 30	690 < T ≤ 835, 4 < P ≤ 30
	471,7423449,	–2,429618523,
	835 < T ≤ 1030, 3,1 ≤ P ≤ 4	835 < T ≤ 1030, 3,1 ≤ P ≤ 4
60–90	582,9068176	–3,157251589
100–140	577,7477786	–5,233353630

Кроме информации, касающейся условий самовоспламенения частиц железа в окислительной среде, для ряда практических приложений необходимы данные о характерных временах таких процессов. Воспламенение порошка, состоящего из частиц различного размера, представляет

собой случайный процесс. Как обнаружено, мелкие частицы способны воспламеняться при более низких температурах и давлениях кислорода, поэтому следует ожидать, что первыми будут воспламеняться самые мелкие частицы в порошке. Возможность и время воспламенения всего порошка будут зависеть от количества этих более мелких частиц, а также от условий теплоотвода из зоны реакции. Так как условия теплоотвода в камере сгорания установки быстрого сжатия всегда примерно одинаковы, следует ожидать повторяемости времени воспламенения порошка и, как следствие, возможности получения зависимости длительности индукционного периода от температуры и давления кислорода. Для проверки этого предположения были собраны экспериментальные данные по каждому порошку железа примерно для одинаковых давлений кислорода. Путем обработки сигнала фотоэлектронного умножителя, с установленным перед фотокатодом нейтральным фильтром, были измерены интервалы времени от окончания такта сжатия до появления свечения определенной интенсивности в камере. Результаты данных измерений представлены на рис. 3 в виде зависимости логарифма измеренного времени задержки самовоспламенения от обратной температуры кислорода. Как и ожидалось, время воспламенения сильно зависит

от размера частиц в порошке, а также от температуры и давления кислорода.

Сплошными линиями на рис. 3 представлены линейные аппроксимации результатов измерений для порошков 20–40 и 1–3 мкм, полученных для различных диапазонов давлений кислорода. Поскольку угол наклона линий для каждого порошка примерно одинаков, влияние давления кислорода на время воспламенения порошка железа можно найти с помощью сдвига линии вдоль оси температур на определенную величину. В качестве примера на рис. 3 приведены штриховые линии для промежуточных значений давления 13,9 МПа (порошок 20–40 мкм) и 5,625 МПа (порошок 1–3 мкм), которые получены линейной интерполяцией по соответствующим крайним значениям температуры и давления. Такой подход позволяет грубо прогнозировать время воспламенения порошка для других начальных условий.

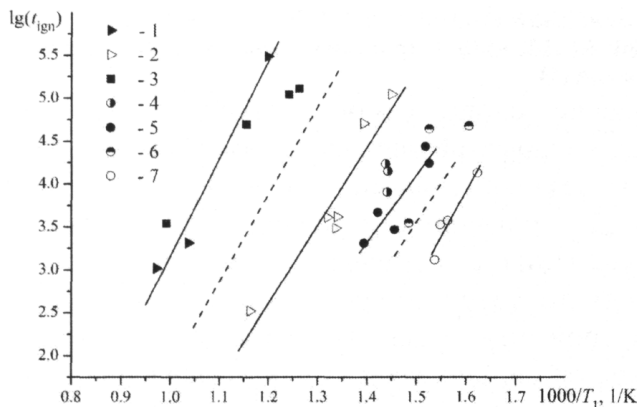


Рис. 3. Зависимость времени самовоспламенения порошков железа от температуры и давления кислорода. Точки – экспериментальные данные для порошков: 1 – 20–40 мкм при давлении 3,2–4,2 МПа; 2 – 20–40 мкм при 19,4–28,8 МПа; 3 – 60–90 мкм при 5,8–10,4 МПа; 4 – 1–3 мкм при 1–1,2 МПа; 5 – 1–3 мкм при 2–2,9 МПа; 6 – 1–3 мкм при 3,5–4,7 МПа; 7 – 1–3 мкм при 6,3–11,3 МПа; сплошные линии – линейные аппроксимации экспериментальных данных для порошка 20–40 мкм (точки 1 и 2) и для порошка 1–3 мкм (точки 5 и 7), штриховые – аппроксимации для промежуточных значений давления

Физико-математическая модель

Процесс воспламенения порошка железа, находящегося в керамической чашке УБС, будем моделировать воспламенением «приведенного» сферического объема – частицы, которую получим путем осреднения по массе всех частиц, засыпанных в данную чашку. В результате для насыпки массой 0,05 г имеем такую оценку радиуса «приведенной» частицы $r_p = 1,148 \cdot 10^{-3}$ м. Поскольку масса насыпки во всех экспериментах одинакова, то радиус «приведенной частицы» также будет одинаков для всех экспериментов. Различие будет в количестве частиц n_p в насыпке. Так, для насыпки из частиц размером 20–40 мкм или в среднем 30 мкм $n_p \approx 56\,150$, а для 1–3 мкм или в среднем 2 мкм $n_p \approx 1,8 \cdot 10^8$. Уравнения математической модели для описания процесса воспламенения «приведенной» частицы в рамках точечного подхода были предложены в [10–12] и могут быть записаны в следующем виде

$$\frac{d\bar{T}_p}{dt} = -\frac{3}{2} \text{Nu} (\bar{T}_p - \bar{T}_1) + 3 \frac{q\rho_3}{\lambda_1 T_n} \frac{K}{h} (\bar{T}_b - \bar{T}_p) \exp\left(-\frac{\bar{E}}{\bar{T}_p}\right), \quad (2)$$

$$\frac{d\bar{h}}{dt} = \frac{\rho_2 c_2}{\lambda_1} \frac{K}{h} \exp\left(-\frac{\bar{E}}{\bar{T}_p}\right), \quad \bar{T}_p(0) = 1, \quad \bar{h}(0) = \bar{h}_0, \quad (3)$$

где

$$\bar{t} = t/t_0, \bar{T}_p = T_p/T_n, \bar{h} = h/r_p, \bar{E} = E/(RT_n),$$

T_p, T_1, T_b, T_n – температуры «приведенной» частицы, кислорода, кипения железа, нормальная соответственно, Nu – число Нуссельта, q – тепловой эффект реакции, отнесенный к массе оксида, ρ_2, ρ_3 – плотности железа и окисной пленки, h – толщина оксидной пленки, λ_1 – теплопроводность кислорода, c_2 – теплоемкость железа, E – энергия активации, K – предэкспоненциальный множитель, R – универсальная газовая постоянная, $t_0 = \rho_2 c_2 r_p^2 / \lambda_1$ – временной масштаб. Энергия активации была взята равной $E = 3,1 \cdot 10^6$ Дж/кг [8, 9], величина теплового эффекта реакции задавалась равной $q = 3 \cdot 10^6$ Дж/кг [13].

Задача (2), (3) решалась численно методом, реализующим формулы обратного дифференцирования, с переменными шагом и порядком, предназначенным для решения жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка [14].

Будем считать, что предэкспонентный множитель K является функцией температуры кислорода T_1 , отражающей опосредованно его зависимость от плотности кислорода. Эта функция является неизвестной и определяется на основе экспериментальных данных путем решения последовательности прямых задач, дающих близкие к экспериментальным значения времени задержки воспламенения t_{ign} в зависимости от температуры окружающей среды. Экспериментальные значения времен задержки воспламенения получены на основе линейной аппроксимации зависимостей логарифма времени задержки воспламенения от температуры окружающей среды (рис. 3).

Определение параметров математической модели

Экспериментальные и полученные в результате расчета времена задержки воспламенения t_{ign} , значения предэкспонента K в зависимости от температуры кислорода T_1 приведены в табл. 3. Таким образом, в результате численных расчетов получены значения функции $K(T_1)$ при фиксированных значениях радиуса частиц и давлениях в УБС, при которых экспериментальные и расчетные данные по временам задержки воспламенения совпадают с высокой точностью.

Таблица 3

Значения времен задержки воспламенения и предэкспонента при различных температурах

T_1, K	$t_{ign}, \text{мкс}$		$K, \text{м}^2/\text{с}$
	эксперимент	расчет	
Радиус частиц 20–40 мкм, давление 3,2–4,2 МПа			
1050	390	391	113 952
990	1708	1709	33 251
935	7851	7850	9784
900	26 053	26 029	2425
865	99 508	99 490	773
Радиус частиц 20–40 мкм, давление 19,4–28,8 МПа			
875	115	116	382 432
840	372	371	121 743
800	1231	1233	42 541
770	3311	3311	20 294
740	10 000	10 001	7850
710	30 196	30 187	2752
Радиус частиц 1–3 мкм, давление 2–2,9 МПа			
720	1482	1478	37 545
690	4576	4573	15 628
670	11 212	11 225	7054
650	25 707	25 715	3213

Радиус частиц 1–3 мкм, давление 6,3–11,3 МПа			
655	1413	1417	38 474
635	4072	4073	17 250
620	9781	9778	8052
615	16 603	16 608	4875

Таблица 4

Значения коэффициентов a_K, b_K в аппроксимации предэкспонента (4)

частицы, мкм; давление, МПа	a_K	b_K
20–40; 3,2–4,2	$0,1178315524 \cdot 10^{16}$	24 201,24516
20–40; 19,4–28,8	$0,8630520001 \cdot 10^{15}$	18 890,19191
1–3; 2–2,9	$0,1102057198 \cdot 10^{19}$	20 311,21190
1–3; 6,3–11,3	$0,1026538333 \cdot 10^{15}$	15 690,52785

Для проведения численных расчетов соответствующих задач Коши в промежуточных точках по температуре кислорода найдем аналитическое представление предэкспонента от температуры кислорода в виде

$$K = a_K \exp\left(-\frac{b_K}{T_1}\right). \quad (4)$$

Здесь величины a_K и b_K являются искомыми и определяются по предельным значениям функции K и ее аргумента на основе данных табл. 2 и они приведены в табл. 4.

Аппроксимация (4) позволяет экспоненциальный член в уравнении (2) представить в виде

$$a_K \exp\left[-\left(\frac{b_K}{T_1} + \frac{E}{RT_p}\right)\right], \quad (5)$$

что удобно при численной реализации. Результат аппроксимации численных значений K представлен на рис. 4. Как видим, использование данной формулы дает удовлетворительное описание численных значений $K(T_1)$.

Были проведены расчеты времени задержки воспламенения с численным (табл. 3) и аппроксимированным экспоненциальной функцией (4) предэкспонентом. Оказалось, что в крайних точках температурных интервалов значения t_{ign} совпадают полностью (что и должно быть, поскольку

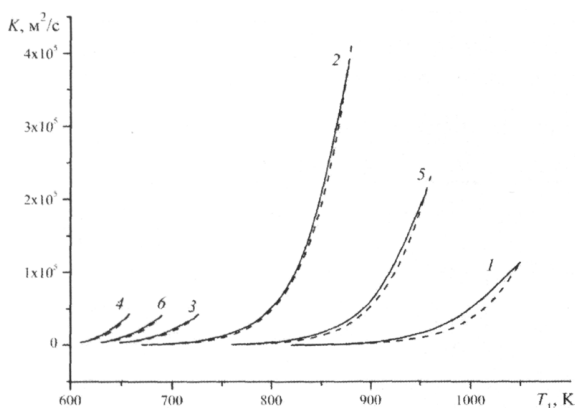


Рис. 4. Вычисленные и аппроксимирующие значения предэкспонента. Сплошные линии – результаты расчета (см. табл. 1), штриховая – экспоненциальная аппроксимация (3). 1 – радиус 20–40 мкм при давлении 3,2–4,2 МПа, 2 – 20–40 мкм при 19,4–28,8 МПа, 3 – 1–3 мкм при 2–2,9 МПа, 4 – 1–3 мкм при 6,3–11,3 МПа, 5 – 20–40 мкм при 13,9 МПа, 6 – 1–3 мкм при 5,625 МПа

по этим точкам и строилась аппроксимация (4)), а в промежуточных точках значительно отличаются при различных значениях давления окружающей среды.

Следующий шаг в разработке модели заключается во внесении в зависимость $K(T_1)$ давления окружающей среды. Приведем пример этого для значений давления 5,625 и 13,9 МПа.

Проводя численный расчет, находим значения предэкспонента $K(T_1)$, соответствующие временам задержки воспламенения при промежуточных значениях давления (см. рис. 3). Затем находим аппроксимацию (4) для полученных значений предэкспонента: для насыпки из частиц 20–40 мкм при давлении 13,9 МПа $b_K = 21\,241,57995$, $a_K = 0,942161303610^{15}$, а для частиц 1–3

мкм при давлении 5,625 МПа $b_K = 17\,434,27789$, $a_K = 0,3939796530 \cdot 10^{16}$. Как видно, вновь найденные постоянные примерно соответствуют среднесрифметическому значению от базовых (см. табл. 4). Соответствующие зависимости приведены на рис. 4.

Таким образом, используя линейную интерполяцию зависимости логарифма времени задержки воспламенения от температуры окружающей среды и предельные значения давления можно найти зависимость предэкспонента от текущей температуры окружающей среды, то есть полностью определить параметры полумпирической математической модели. При этом зависимость от давления является параметрической.

На основе зависимости (1) модифицируем выражение для предэкспоненциального множителя следующим образом [15]

$$K(T_1, P_1) = \begin{cases} K(T_1), & T_1 \geq T_{lim} \\ 0, & T_1 < T_{lim} \end{cases} \quad (6)$$

Здесь $K(T_1)$ это экспоненциальная зависимость (4), приведенная выше для различных значений параметра P_1 . Таким образом, если при фиксированном значении давления кислорода его температура T_1 меньше, чем предельная температура воспламенения $T_{lim}(P_1)$, то химическая реакция окисления несущественна и не принимается во внимание в математической модели. То есть вклад тепловыделения от химической реакции не приводит систему к воспламенению. Условно можно полагать, что толщина окисной пленки не изменяется, разогрев частицы осуществляется только за счет конвективного теплообмена с окружающей средой и в пределе температура совокупности частиц стремится к температуре окружающей среды T_1 . То есть в этом случае воспламенения частицы не происходит.

Привлекательным является построение аналитической зависимости предэкспонента от (T_1, P_1) . Нами предлагается следующий алгоритм построения предэкспонента в случае нелинейной зависимости (1). Фиксируется предельное давление, определяется по формуле (1) соответствующая предельная температура и в плоскости $(1000/T_1, \log(t_{ign}))$ проводится прямая воспламенения. А затем можно определить и вид $K(T_1)$. В табл. 5 приведены как результаты расчета по

Таблица 5
Зависимость времени задержки воспламенения от температуры окружающей среды для различных давлений

P, МПа	T _{lim} , К	T ₁ , К	t _{ign} , мкс	
			расчет	эксперимент
24	691	650	—	—
		700	50 939	49 930
		710	30 188	30 196
		740	10 007	10 000
		750	7708	7632
		770	3311	3312
		795	1237	1231
		800	1065	1064
		840	372	372
		850	228	236
		875	116	115
4	865	850	—	—
		870	99 490	99 508
		895	26 019	26 033
		900	25 012	24 914
		940	7850	7851
		950	5514	5564
		990	1709	1708
		1000	1324	1326
		1050	388	385

модифицированной модели, так и полученные выше данные (без корректировки (6)) для частиц с радиусом в диапазоне 20–40 мкм. При значениях температуры среды, близких к предельному, времена задержки воспламенения на порядки выше по сравнению с более высокими значениями температуры кислорода.

Выше с использованием линейной интерполяции были определены предельные температуры воспламенения для промежуточных значений давления. Теперь найдем эти предельные температуры на основе аппроксимации экспериментальных данных по формуле (1). Они приведены на рис. 5. На рис. 5 приведены также экспериментальные предельные кривые воспламенения для частиц 20–40 мкм. Как видим, для более мелких частиц оба подхода аппроксимации близки, а для крупных частиц линейная аппроксимация не является удовлетворительной. Поэтому расчеты нами были проведены по экспоненциальной зависимости.

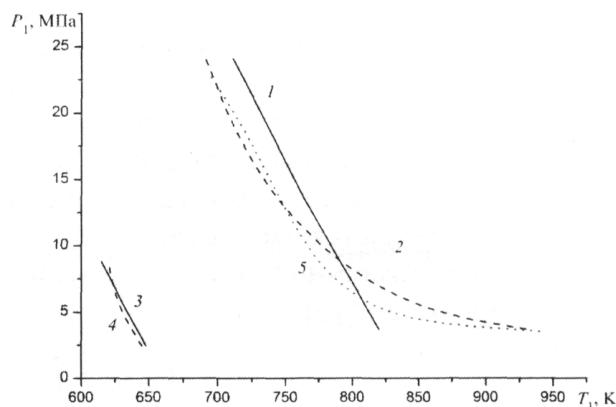


Рис. 5. Зависимость предельной температуры от давления окружающей среды. Сплошные линии (1, 3) – линейная интерполяция, штриховые (2, 4) – экспоненциальная интерполяция по формуле (5). 1, 2 – 30 мкм, 3, 4 – 2 мкм, 5 – экспериментальные данные

Выводы

Таким образом, в работе определены критические условия для самовоспламенения микропорошков железа в устройстве быстрого сжатия. Установлено, что порошок железа с размером до сотен микрон способен легко самовоспламениться в кислородной среде с температурой ниже температуры плавления железа. С увеличением давления среды температура самовоспламенения существенно снижается. Определена длительность задержки воспламенения при различных давлениях и температурах кислорода. Показано, что максимальная температура при горении ограничена, по всей видимости, температурами кипения железа и разложения оксидов.

Полученная экспериментальная информация важна для оценки безопасности технологических процессов, при которых могут образовываться мелкодисперсные частицы железа, и производств, использующих кислород высокого давления.

Предложена и верифицирована с использованием этих данных полуэмпирическая физико-химическая точечная математическая модель для описания процесса воспламенения насыпки железных частиц, принимающая во внимание зависимость предельных температур воспламенения от давления при изменении давлений в диапазоне 2–25 МПа и температур 600–1100 К и удовлетворительно описывающая времена задержки воспламенения.

Литература

1. Allen, C.M. Energetic-nanoparticle enhanced combustion of liquid fuels in a rapid compression machine / C.M. Allen, T. Lee // Proc. 47th AIAA Aerospace Sciences Meeting Including The New Horizons Forum and Aerospace Exposition. – 2009. – AIAA 2009-227.
2. Trunov, M.A. Ignition of aluminum powders under different experimental conditions / M.A. Trunov, M. Schoenitz, E.L. Dreizin // Propellants, Explosives, Pyrotechnics. – 2005. – Vol. 30. – P. 36–43.
3. Utilization of iron additives for advanced control of NO_x emissions from stationary combustion sources / V.V. Lissianski, P.M. Maly, V.M. Zamansky, W.C. Gardiner // Ind. Eng. Chem. Res. – 2001. – Vol. 20, № 15. – P. 3287–3293.
4. Синтез нанооксидов в двухфазных ламинарных пламенах / А.Н. Золотко, Я.И. Вовчук, Н.И. Полстасв и др. // Физика горения и взрыва. – 1996. – Т. 32, № 3. – С. 24–34.
5. Cashdollar, K.L. Explosion temperatures and pressures of metals and other elemental dust clouds / K.L. Cashdollar, I.A. Zlochower // Journal of Loss Prevention in the Process Industries. – 2007. – Vol. 20. – P. 337–348.

6. Dynamics of dispersion and ignition of dust layers by a shock wave / V.M. Boiko, A.N. Papyrin, M. Wolinski, P. Wolanski // *Progress in Astronautics and Aeronautics*. – 1984. – Vol. 94. – P. 293–301.
7. Ignition of dust suspensions behind shock waves / A.A. Borisov, B.E. Gel'fand, E.I. Timofeev *et al.* // *Progress in Astronautics and Aeronautics*. – 1984. – Vol. 94. – P. 332–339.
8. Photoemission measurements of soot particles temperature at pyrolysis of ethylene / Y.A. Baranyshyn, L.I. Belaziorava, K.N. Kasparov, O.G. Penyazkov // *Nonequilibrium Phenomena: Plasma, Combustion, Atmosphere*. – Moscow: Torus Press Ltd, 2009. – P. 87–93.
9. Optical properties of gases at ultra high pressures / Yu.N. Ryabinin, N.N. Sobolev, A.M. Markevich, I.I. Tamm // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. – 1952. – Vol. 23, № 5. – P. 564–575.
10. Альтман, И.С. Об определении температуры частиц по спектру излучения / И.С. Альтман // *Физика горения и взрыва*. – 2004. – Т. 40, № 1. – С. 75–77.
11. Федоров, А.В. О воспламенении железной насыпки в устройстве быстрого сжатия / А.В. Федоров, А.В. Шульгин // *Физика горения и взрыва*. – 2011. – Т. 47, № 6. – С. 98–100.
12. Условия и время задержки самовоспламенения микрочастиц железа в кислороде / В.В. Лещевич, О.Г. Пенязьков, А.В. Федоров и др. // *Инженерно-физический журнал*. – 2012. – Т. 85, № 1. – С. 139–144.
13. Болобов, В.И. Расчетный анализ условий воспламенения металлических компактных образцов и фольги в кислороде / В.И. Болобов, Н.А. Подлевских // *Физика горения и взрыва*. – 2001. – Т. 37, № 6. – С. 46–55.
14. Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений / под ред. Дж. Холла, Дж. Уатта. – М.: Мир, 1979. – 312 с.
15. Федоров, А.В. Воспламенение частицы алюминия / А.В. Федоров, Ю.В. Харламова // *Физика горения и взрыва*. – 2003. – Т. 39, № 5. – С. 65–68.

EXPERIMENTAL AND MATHEMATICAL SIMULATION OF AUTO-IGNITION OF IRON MICRO PARTICLES

V.V. Leschevich¹, O.G. Penyazkov², J.-C. Rostaing³, A.V. Fedorov⁴, A.V. Shulgin⁵

The experimental and numerical studies of autoignition and burning of iron microparticles in oxygen were introduced. Parameters of high-temperature gas environment were created by rapid compression machine. Powders with a particle size 1–125 microns were studied at the oxygen pressure of 0,5–28 MPa and the temperature of 500–1100 K. Ignition delay time was measured by registration of radiation from the side wall of the combustion chamber and by measuring the pressure on the end wall. Critical auto-ignition conditions are determined according to size of the particles, oxygen temperature and pressure. For description of ignition mechanisms a punctual semiempirical simulator was introduced. The simulator gave the opportunity to describe the experimental data on dependence of ignition delay time of iron particles on the ambient temperature, taking into account correlations of critical ignition temperatures with pressure.

Keywords: iron micro particles, oxygen, rapid compression machine, ignition delay time, mathematical simulation.

¹ Leschevich Vladimir Vladimirovich is Junior Researcher, A V Luikov Heat and Mass Transfer Institute of the National Academy of Sciences of Belarus

² Penyazkov Oleg Glebovich is Corresponding Member of the National Academy of Sciences of Belarus, director, A V Luikov Heat and Mass Transfer Institute of the National Academy of Sciences of Belarus

Rostaing Jean-Christophe is L'Air Liquide Centre de Recherche Claude-Delorme, France

⁴ Fedorov Alexander Vladimirovich is Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Head of Laboratory S A Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences

⁵ Shulgin Alexey Valentinovich is Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher, S A Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences

E-mail: shulgin@itam.nsc.ru

References

1. Allen C.M., Lee T. Energetic-nanoparticle enhanced combustion of liquid fuels in a rapid compression machine // *Proc. 47th AIAA Aerospace Sciences Meeting Including The New Horizons Forum and Aerospace Exposition*. 2009. AIAA 2009-227.
2. Trunov M.A., Schoenitz M., Dreizin E.L. Ignition of aluminum powders under different experimental conditions. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*. 2005. Vol. 30. pp. 36–43.
3. Lissianski V.V., Maly P.M., Zamansky V.M., Gardiner W.C. Utilization of iron additives for advanced control of NO_x emissions from stationary combustion sources. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2001. Vol. 20, no. 15. pp. 3287–3293.
4. Zolotko A.N., Vovchuk Ya.I., Poletaev N.I., Frolko A.V., Al'tman I.S. *Fizika gorennya i vzryva*. 1996. Vol. 32, no. 3. pp. 24–34. (in Russ.).
5. Cashdollar K.L., Zlochower I.A. Explosion temperatures and pressures of metals and other elemental dust clouds. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*. 2007. Vol. 20. pp. 337–348.
6. Boiko V.M., Papyrin A.N., Wolinski M., Wolanski P. Dynamics of dispersion and ignition of dust layers by a shock wave. *Progress in Astronautics and Aeronautics*. 1984. Vol. 94. pp. 293–301.
7. Borisov A.A., Gel'fand B.E., Timofeev E.I., Tsyganov S.A., Khomic S.V. Ignition of dust suspensions behind shock waves. *Progress in Astronautics and Aeronautics*. 1984. Vol. 94. pp. 332–339.
8. Baranyshyn Y.A., Belaziorava L.I., Kasparov K.N., Penyazkov O.G. Photoemission measurements of soot particles temperature at pyrolysis of ethylene. *Nonequilibrium Phenomena: Plasma, Combustion, Atmosphere*. Moscow: Torus Press Ltd, 2009. pp. 87–93.
9. Ryabinin Yu.N., Sobolev N.N., Markevich A.M., Tamm I.I. Optical properties of gases at ultra high pressures. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 1952. Vol. 23, no. 5. pp. 564–575.
10. Al'tman I.S. *Fizika gorennya i vzryva*. 2004. Vol. 40, no. 1. pp. 75–77.
11. Fedorov A.V., Shul'gin A.V. *Fizika gorennya i vzryva*. 2011. Vol. 47, no. 6. pp. 98–100.
12. Leshchevich V.V., Penyaz'kov O.G., Fedorov A.V., Shul'gin A.V., Rosten Zh.-K. *Inzhenerno-fizicheskiy zhurnal*. 2012. Vol. 85, no. 1. pp. 139–144. (in Russ.).
13. Bolobov V.I., Podlevskikh N.A. *Fizika gorennya i vzryva*. 2001. Vol. 37, no. 6. pp. 46–55. (in Russ.).
14. Khollo Dzh. (ed.), Uatta Dzh. (ed.) *Sovremennyye chislennyye metody resheniya obyknovennykh differentsial'nykh uravneniy* (Contemporary numerical methods of solution of ordinary differential equation). Moscow: Mir, 1979. 312 p. (in Russ.). [Hall G., Watt J.M. *Modern Numerical Methods for Ordinary Differential Equations*. Oxford: Clarendon press. 312 p.]
15. Fedorov A.V., Kharlamova Yu.V. *Fizika gorennya i vzryva*. 2003. Vol. 39, no. 5. pp. 65–68. (in Russ.).

Поступила в редакцию 8 мая 2013 г.