

[文章编号] 1004- 0609(2001)05- 0846- 06

Al-TiO₂-C 体系燃烧过程的研究与计算机模拟^①

杨 波, 张二林, 曾松岩, 戴圣龙, 刘伯操

(北京航空材料研究院 2 室, 北京 100095)

[摘 要] 利用快速图像采集技术研究了 Al-TiO₂-C 体系燃烧过程, 基于燃烧理论建立了 Al-TiO₂-C 三元 SHS 燃烧过程数学模型, 并进行了数值模拟工作, 模拟结果与实验结果得到了较好的吻合, 由此进一步分析了 Al-TiO₂-C 体系燃烧过程的特征及其转变规律。

[关键词] SHS; 燃烧过程; 计算机模拟

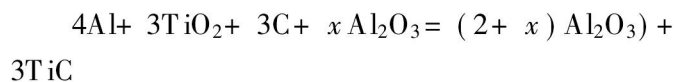
[中图分类号] TB 331

[文献标识码] A

早在 SHS 研究的初期, Merzhanov 等^[1~4]就基于一维稳态 SHS 过程进行了实验研究与数值计算工作。Bhattacharya 等^[3, 4]也进行了在凝聚单相系统中火焰前沿传播方式和稳定性现象的实验研究与数值计算。以后, Holt 和 Munir 采用数值计算方法得出了稳态和振荡燃烧方式。最近 Margolis 等^[5, 6]通过实验与数值模拟表明, 在凝聚系燃烧过程中可以出现多种燃烧模式。然而, 对于复杂的三元或多元体系进行实验研究与数值计算, 目前还报道较少, 尤其是对三元或多元体系出现的复杂燃烧问题, 就更少涉及^[7~10]。为此, 作者针对 Al-TiO₂-C 三元体系的燃烧过程进行实验研究与计算机模拟工作。

1 实验

将 TiO₂ (0.25 μm), Al (29 μm), C (0.5 μm), Al₂O₃ (50 μm) 粉末按以下方程式配料:



式中 x 为稀释剂 Al₂O₃ 加入量, 当 $x = 0$ 时, 称为标准配比。干混 24 h, 冷压成 $d 20 \text{ mm} \times 40 \text{ mm}$ 的试样, 而后置于图 1 所示装置中。抽真空, 将试样预热到不同温度后用钨丝引燃试样, 钨丝电偶测定的温度由 ADAM4018 八通道数据采集模块记录 (每秒 20 点)。同时利用快速图像采集系统 MPE-1000 (每秒 30 帧) 记录 SHS 燃烧过程及燃烧前沿形态。

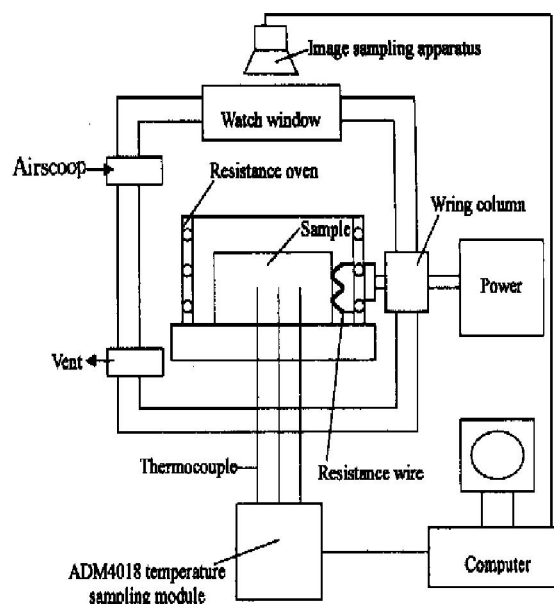


图 1 燃烧过程试验装置示意图

Fig. 1 Schematic of experimental device for study of combustion process

2 实验结果

3 种典型燃烧过程的特征分别为:

1) 图 2 为标准配比的试样在预热温度为 200 °C 时燃烧前沿推进过程的采集图像, 可以看出燃烧波前沿基本呈平面向前推进, 这是典型的平面燃烧模式。

2) 图 3 为加入 28% (质量分数, 下同) Al₂O₃ 稀释剂试样在常温下燃烧的情况。可以看出, 在燃烧前沿存在一个高温点绕试样以螺旋线形式向前推

① [收稿日期] 2000- 09- 05; [修订日期] 2001- 02- 06

[作者简介] 杨 波 (1973-), 男, 博士后。

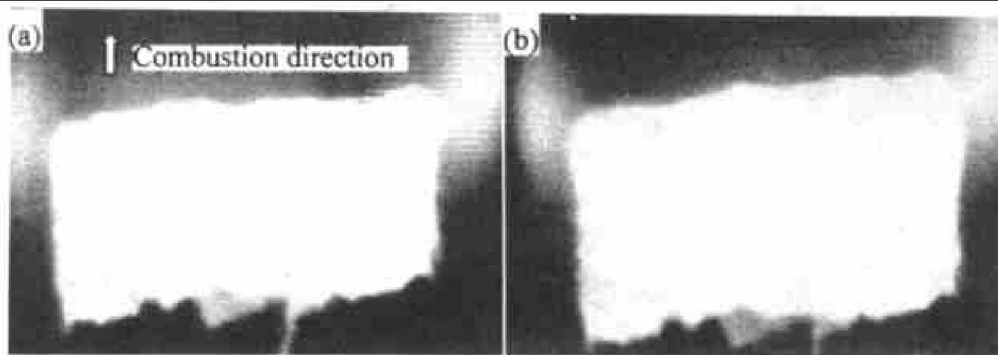


图 2 预热温度 200 °C 时标准配比试样燃烧过程采集图像(其中(a), (b) 前后相隔 0.2 s)

Fig. 2 Images collected from combustion process of samples with standard composition ratio at $\theta_0 = 200$ °C (time interval between (a) and (b) is 0.2 s)

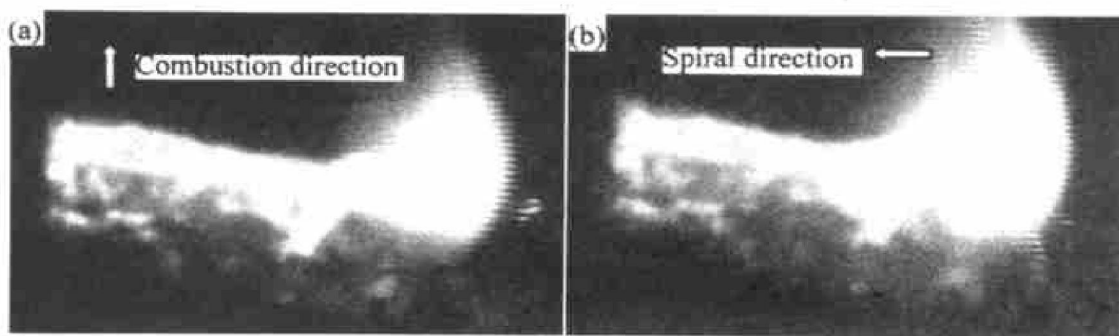


图 3 预热温度 25 °C 时加入 28% Al_2O_3 稀释剂试样燃烧过程采集图像(其中(a), (b) 前后相隔 0.2 s)

Fig. 3 Images collected from combustion process of samples with 28% dilute Al_2O_3 at $\theta_0 = 25$ °C (time interval between (a) and (b) is 0.2 s)

进, 这是典型的单点螺旋燃烧模式。

3) 图 4 为加入 15% Al_2O_3 稀释剂试样在常温下燃烧的情况。可以看出, 其燃烧形式较为特殊, 在燃烧前沿有多个高温点生成, 燃烧前沿呈锯齿状。观察燃烧前沿推进过程可以发现: 燃烧前沿生成的多个高温点在沿燃烧方向生长一定距离后(即突起部分增高, 见图 4(a), (b), (c), 随即沿水平方向彼此靠拢, 见图 4(c), (d), (e), 并最终合并, 而后又生成新的高温点(见图 4(f)), 继续以这种方式向前推进, 如此不断反复。这说明该类型燃烧具有明显的螺旋波特征。文献[2, 9]曾在 $\text{Al-Cr}_2\text{O}_3$ 燃烧中发现类似情况, 依据其特征, 实际可将此类蔓延形式看作为一种多点螺旋或多波燃烧形式, 而文献[5]将此类燃烧称为复杂或混沌燃烧。

3 $\text{Al-TiO}_2\text{-C}$ 体系燃烧过程的数值模拟

1) 燃烧过程的数学模型

无气燃烧非绝热自蔓延过程在二维方向上可用如下方程描述^[1~3]

$$c\rho\frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = K\left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}\right] + qw(\eta, T) - \alpha(T - T_0) \quad (1)$$

$$\rho\frac{\partial \eta}{\partial t} = w(\eta, T) \quad (2)$$

式中 c , ρ 分别为比热容($\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\text{K}^{-1}$) 和密度($\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$), q 为反应放热($\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$), K 为导热率($\text{J}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{s}$), T 为温度, t 为时间(s), $\frac{\partial \eta}{\partial t}$ 为反应速率, α 为对流换热系数($\text{J}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$)。

其中, $w(\eta, T)$ 可设为^[3]

$$w(\eta, T) = K_0(1 - \eta)\exp\left[-\frac{E^*}{RT}\right] \quad (3)$$

考虑到燃烧带内成分分布不均匀, 因而各微区反应进行程度不同, 放出热量的大小也不相同。但燃烧带内每一微区放出的热量应当是围绕体系反应平均放热值 $\bar{q}$ 上下波动的, 并且它的分布是随机的, 因而, 可以将式(1)中的 q 用式(4)代替^[10, 11]

$$q = \bar{q} + \Delta q \cdot \xi \quad (4)$$

式中 ξ 为一随机数, 其值在 $[-1, 1]$ 范围内波动, 为波动最大幅度。

考虑燃烧试样内孔隙均匀分布的情况, 可将其表示为^[9~11]

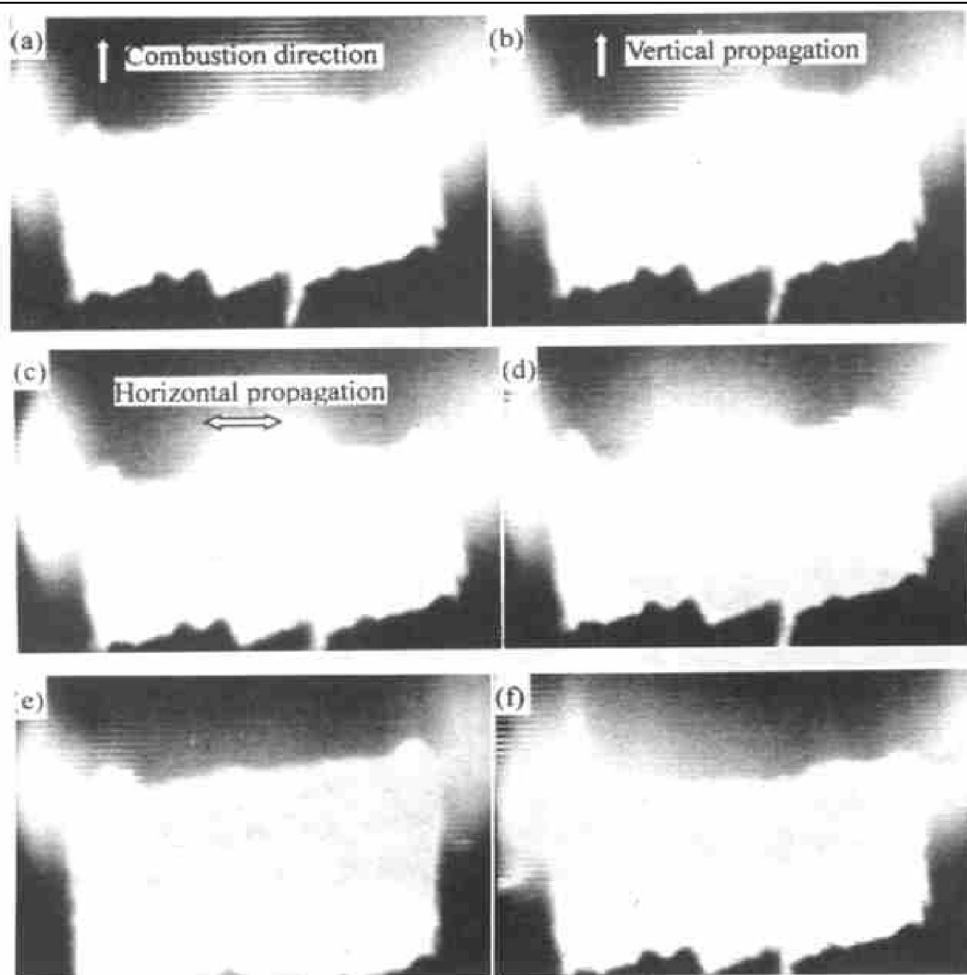


图 4 预热温度 25 °C 时加入 15% Al_2O_3 稀释剂试样燃烧过程采集图像(其中(a), (b), (c), (d), (e), (f) 间隔 0.1 s)

Fig. 4 Images collected from combustion process of samples with 15% dilute Al_2O_3 at $\theta_0 = 25$ °C (time interval between continuous two images is 0.1 s)

$$\Delta q = A \exp[-(\gamma - \beta/T_c)] \quad (5)$$

式中 A , γ 和 β 均为常数, 计算中的取值分别为 0.78, 1.2×10^4 和 $8.1^{[10, 11]}$, T_c 为燃烧温度。

相应的边界条件及初始条件为

$$t = 0 (x > 0, y > 0): T = T_0, \eta = 0;$$

$$t > 0: T(x, 0) = T_{ig},$$

$$\left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{x=d} = -\alpha(T - T'),$$

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{y=L} = -\alpha(T - T');$$

式中 T_{ig} 为点火温度, T' 为环境温度, T_0 为试样初始温度, L , d 分别为试样长度和直径。

以上数学模型中, 忽略了热辐射作用, 边界以对流换热为主, 且假设各物性参数不随温度变化。

采用等格差分, 将方程(1)离散化后为

$$\begin{aligned} T_P^1 = & T_P^0 + \frac{\Delta t}{\rho c R_{PN}} (T_N^0 - T_P^0) + \frac{\Delta t}{\rho c R_{PW}} (T_W^0 - \\ & T_P^0) + \frac{\Delta t}{\rho c R_{PE}} (T_E^0 - T_P^0) + \frac{\Delta t}{\rho c R_{PS}} (T_S^0 - \\ & T_P^0) + \frac{\Delta t}{\rho c} q_v \end{aligned} \quad (6)$$

式(6)中的各符号见图 5 所注, q_v 为单位体积

反应放热量, $R_{xy} = \frac{\Delta l}{K} + \frac{1}{\alpha}$ 表示单元的热阻, α 为界面换热系数。对于界面单元, $R_{xy} = \frac{\Delta l}{K} + \frac{1}{\alpha}$; 而

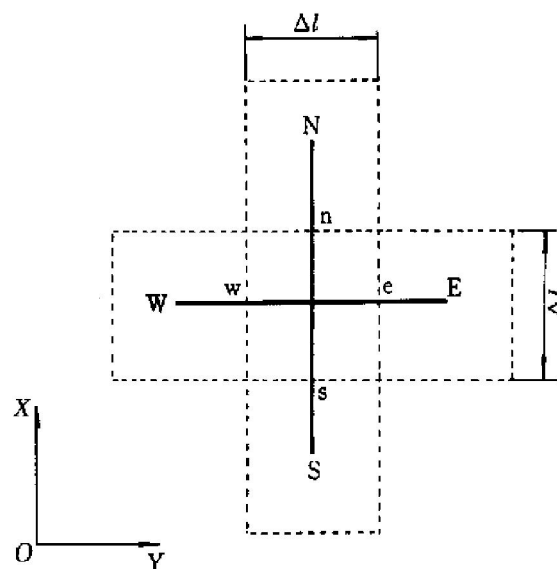


图 5 差分网格示意图

Fig. 5 Schematic representation of difference meshes

内部单元, $R_{xy} = \frac{\Delta l}{K}$ 。

反应放热项可表示为

$$q_v = \rho K_0 (1 - \eta_p^0) \exp(-\frac{E^*}{RT}) \Delta T (\bar{q} + \Delta q \zeta)$$

(7)

采用显示差分算法进行迭代计算, 其敛散性条件为

$$\Delta t \leq \frac{\rho c (\Delta l)^2}{4K}$$

(8)

计算所用各物性参数见表 1。

表 1 计算所用物性参数^[10~12]

Table 1 Physical properties for calculation^[10~12]

Parameters	Values
ρ	2 500 kg/m ³
K	81.5 (J·s)/(m·K)
K_0	1.0 × 10 ¹⁰
c_{product}	912 J/(kg·K)
c_{reactant}	854 J/(kg·K)
E	3.24 × 10 ⁵ J/mol
α	107 J/(m ² ·K)

2) 数值模拟计算结果

3 种典型燃烧过程的温度场

(a) 稳定平面燃烧温度场

图 6(a) 为预热温度 300 ℃、未加入 Al₂O₃ 稀释剂时, 计算所得温度场。从计算结果可以看出, 燃烧前沿呈平面向前推进, 由于边界热损失, 使试样心部的温度高于周围温度, 截面温度呈抛物线分布, 此时燃烧为典型的平面燃烧。计算所得燃烧温度为 2 500 K, 而实测燃烧温度为 2 280 K, 两者基本接近。

(b) 不稳定的多点螺旋燃烧温度场

图 6(b) 是在添加 15% Al₂O₃ 稀释剂, 常温下燃烧的计算结果。稀释剂的加入降低燃烧波前沿平均燃烧温度, 增加燃烧的不稳定性, 实测在该条件下燃烧为典型的多点螺旋燃烧, 燃烧温度为 1 980 K。由图 6(b) 可见, 燃烧带内出现了明显的后烧区, 在较宽的燃烧带中有多个高温燃烧点出现, 其位置是随机的, 这是典型的多点螺旋燃烧, 其燃烧波阵面温度在 2 100 K 左右。这里, 计算与实验结果是基本一致的。

(c) 不稳定的单点螺旋燃烧温度场

图 6(c) 为 Al₂O₃ 稀释剂含量增加到 35%, 常温下燃烧的计算结果。由图可以看到, 在燃烧前沿仅存在一个高温区正在向右前方推进, 这是典型的单点螺旋燃烧。需要指出的是, 这里的计算结果与实

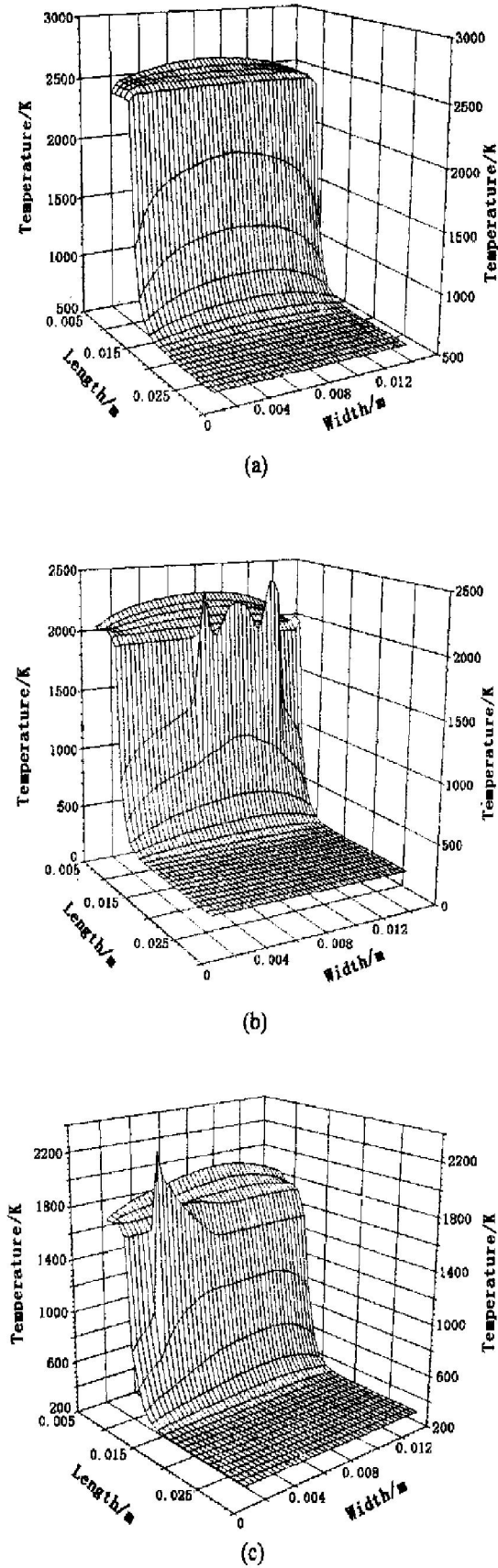


图 6 三种典型燃烧过程的温度场

Fig. 6 Three kinds temperature fields of combustion

- (a) —Temperature field of a stable planar combustion;
(b) —Temperature field of a unstable multi point spiral combustion; (c) —Temperature field of a unstable one point spiral combustion

验结果不太吻合。在实验中发现,当稀释剂 Al_2O_3 含量增加到 35%,燃烧已趋于熄灭。这是在计算中忽略了实际条件下辐射传热等热损失因素的结果。

图 7 为 $\text{Al-TiO}_2\text{-C}$ 体系燃烧模式随预热温度的

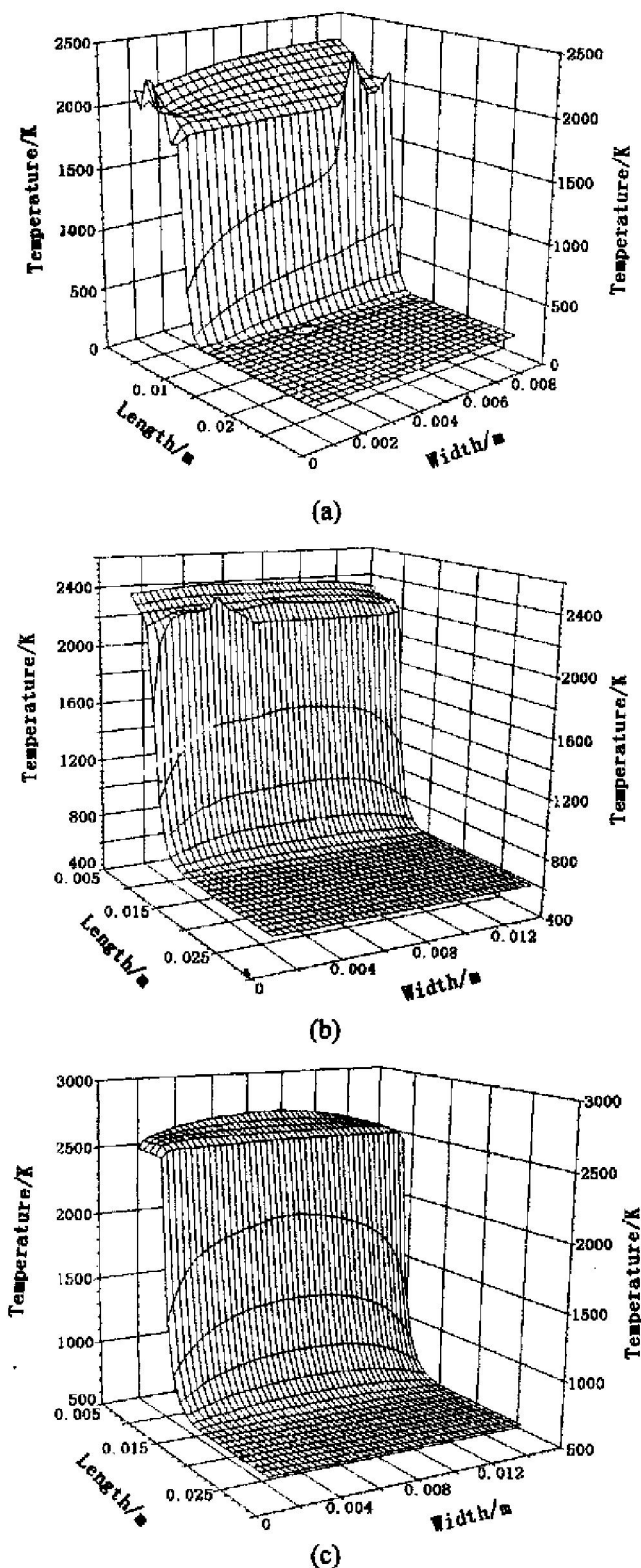


图 7 稀释剂为 20% Al_2O_3 时,不同预热温度下的计算结果

Fig. 7 Calculation results under conditions of 20% diluent Al_2O_3 at different preheating temperatures

(a) $-\theta_0 = 25\text{ }^\circ\text{C}$; (b) $-\theta_0 = 300\text{ }^\circ\text{C}$; (c) $-\theta_0 = 400\text{ }^\circ\text{C}$

变化规律。由图 7(a) 可见,在加入 20% Al_2O_3 稀释剂时,常温下其燃烧为典型的多点螺旋燃烧;而当预热温度 θ_0 提高到 $300\text{ }^\circ\text{C}$ 时,计算结果表明,燃烧的稳定性增加,燃烧前沿生成的高温燃烧区的数目及幅度都大大降低,如图 7(b) 所示;当预热温度达到 $400\text{ }^\circ\text{C}$ 时,燃烧转变为典型的平面稳定燃烧,如图 7(c) 所示。

图 8 是实验所得不同预热温度 θ_0 下燃烧过程的采集图像,可以看出,随预热温度升高,燃烧更加剧烈,燃烧过程逐渐变得稳定,燃烧由不稳定的多点螺旋形式向平面燃烧转化。由此可见,模拟计算结果所预测的变化趋势与实验结果是一致的。

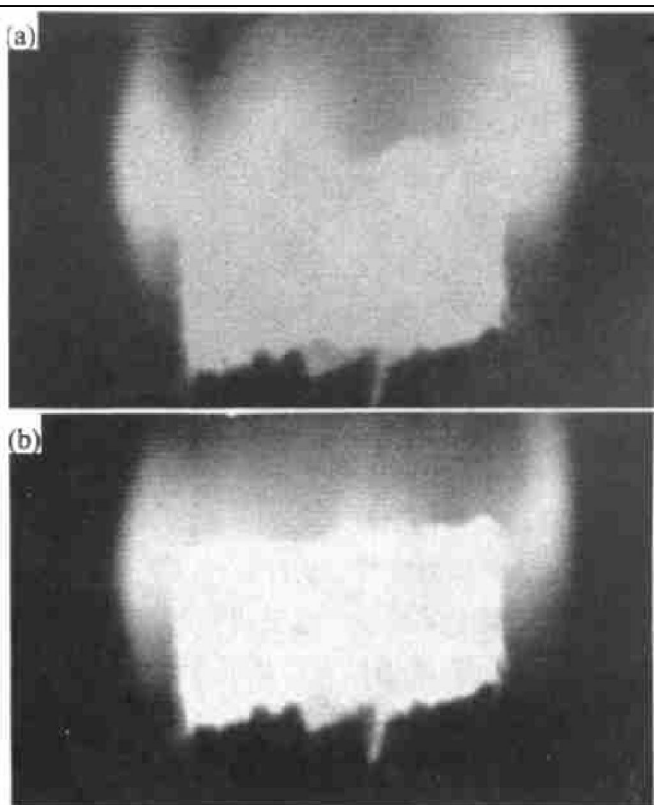


图 8 标准配比的试样在不同预热温度下燃烧的情况

Fig. 8 Photography showing combustion status of samples with standard composition ratio at different preheating temperatures
(a) $-\theta_0 = 25\text{ }^\circ\text{C}$; (b) $-\theta_0 = 150\text{ }^\circ\text{C}$

4 结论

1) 实验发现, $\text{Al-TiO}_2\text{-C}$ 体系存在 3 种燃烧模式: 稳定的平面燃烧、不稳定的多点螺旋燃烧和单点螺旋燃烧。

2) 基于无气非绝热燃烧二维数学模型对 $\text{Al-TiO}_2\text{-C}$ 体系燃烧过程进行了计算机数值模拟, 获得了不同条件下燃烧过程的温度场。尽管在理论上进行了适当的简化, 但计算表明, 模拟结果与实验结果是基本一致的。研究发现, 随着预热温度升

高, 燃烧逐渐由不稳定的多点螺旋燃烧向稳定的平面燃烧转变。

[REFERENCES]

- [1] Arldusin A B, Haekin B E. Structural transformations upon gasless combustion in the Ti-C and Ti-B systems [J]. *Physics of Combustion and Explosive*, 1975, 1: 128– 130.
- [2] Maksimov U M, Merzhanov A G, Bak A T. Combustion waves in homogeneous media [J]. *Physics of Combustion and Explosive*, 1981, 4: 51– 58.
- [3] Bhattacharya A K. Modelling of the effects of porosity and particle size on the steady-state wave velocity in combustion synthesis [J]. *J Mater Sci*, 1992, 27: 1521– 1527.
- [4] Zenin A A, Nersesyan G A, Merzhanov A G. Structure of thermal wave in some SHS processes [J]. *Dokl Akad Nauk SSSR*, 1980, 250(4): 880– 884.
- [5] Margolis S B, Matkowsky B J. Stead and pulsating model of sequential flame propagating [J]. *Combust Sci Tech*, 1982, 27: 193– 213.
- [6] Margolis S B. The transition to nonsteady deflagration in gasless combustion [J]. *Prog Energy Comb Sci*, 1991, 17: 135– 162.
- [7] WANG Hua-bin (王华彬), HAN Jie-cai (韩杰才), ZHANG Hua-yu (张化宇), et al. 自蔓延还原合成 BN 反应机理 [J]. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals* (中国有色金属学报), 2000, 10(3): 383– 387.
- [8] FANG Xin-xian (方信贤), SHUN Guo-xiong (孙国雄). Al-TiO_2 反应体系中熔剂的作用及 TiAl_3 形态 [J]. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals* (中国有色金属学报), 2000, 10(3): 383– 387.
- [9] Aldushin A P, Merzhanov A G. Gasless combustion with phase transitions [J]. *Dokl Akad Nauk SSSR*, 1979, 244: 76– 80.
- [10] Keldrsin A E, Makcemov U M, Merzhanov A G. Transport reaction in the mechanism of SHS combustion [J]. *Physics of Combustion and Explosive*, 1981, 6: 10– 15.
- [11] Merzhanov A G, Khaikin B I. Theory of combustion waves in homogeneous media [J]. *Prog Energy Comb Sci*, 1988, 14: 1– 98.
- [12] YE Da-lun (叶大伦). *Thermodynamic Data Manual of Inorganic Compound* (无机化合物热力学数据手册) [M]. Beijing: The Metallurgical Industry Press, 1981. 335– 400.

Combustion process and computer simulation in $\text{Al-TiO}_2\text{-C}$ system

YANG Bo, ZHANG Er-lin, ZENG Song-yan, DAI Sheng-long, LIU Bo-chao
(No2 Lab, Beijing Institute of Aeronautical Materials, Beijing 100095, P. R. China)

[Abstract] The combustion process in $\text{Al-TiO}_2\text{-C}$ system was studied by means of the rapid image sampling technique. Based on the combustion theories a mathematics model of the SHS combustion process in $\text{Al-TiO}_2\text{-C}$ system has been built and numerical simulation has been done. The calculation results are in good agreement with the experimental results. Then the characteristic and the changing law of the combustion process in $\text{Al-TiO}_2\text{-C}$ system have been analyzed.

[Key words] SHS; combustion process; computer simulation

(编辑 朱忠国)