

ционности процессов, протекающих на поверхности катализатора. Изучена структура допустимой области значений искомых параметров.

Пользуясь случаем, автор выражает глубокую признательность Ю. Ш. Матросу за обсуждение результатов работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. О. В. Киселев, Ю. Ш. Матрос. ФГВ, 1980, 16, 2, 25.
2. О. В. Киселев, Ю. Ш. Матрос.— В кн.: Математическое моделирование химических реакторов. Новосибирск: Наука, 1984.
3. Я. Б. Зельдович. ЖФХ, 1948, 22, 1, 27.
4. А. П. Алдушин, В. Д. Луговой, А. Г. Мержанов и др. Докл. АН СССР, 1978, 243, 6, 1434.

Поступила в редакцию 27/XII 1985

О ГОРЕНИИ БЕЗГАЗОВЫХ СОСТАВОВ ПРИ НАЛИЧИИ ТЕПЛОПТЕРЬ

А. Н. Фирсов, К. Г. Шкадинский
(Черноголовка)

Процесс распространения фронта горения безгазовых составов в реальных условиях, как правило, неадиабатичен. Фундамент современных представлений о роли теплопотерь сформулирован Я. Б. Зельдовичем в [1]. Потери тепла при горении могут быть обусловлены излучением, конвекцией и кондуктивной теплопроводностью. К настоящему времени в литературе опубликован ряд теоретических и экспериментальных работ, посвященных как строгому обоснованию результатов [1], так и переносу их на другие классы горючих веществ и условий теплообмена [2—20].

Теплопотери вызывают перестройку структуры фронта горения (вплоть до срыва горения), могут изменить его геометрию (делая ее существенно неоднородной), влияют на устойчивость стационарного фронта горения и являются одной из причин неполноты превращения.

Настоящая работа посвящена анализу методами численного моделирования неоднородных факторов воздействия теплопотерь на горение конденсированных безгазовых составов: искривленности фронта горения, недогорания, динамики пульсаций при потере устойчивости стационарного режима.

Постановка задачи. Процесс неадиабатического распространения фронта горения в пластине безгазового состава можно описать следующей системой безразмерных уравнений:

$$\frac{\partial \Theta}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \Theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Theta}{\partial y^2} + \frac{1}{\gamma} \frac{\partial \eta}{\partial \tau} \quad (1)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial \tau} = \gamma (1 - \eta) \exp(\Theta/(1 + \beta\Theta)), \quad (2)$$

удовлетворяющей краевым

$$\frac{\partial \Theta}{\partial y} \Big|_0 = 0, \quad \frac{\partial \Theta}{\partial y} \Big|_L = -\alpha (\Theta - \Theta_n), \quad (3)$$

$$\Theta(-\infty, y) = \Theta(+\infty, y) = \Theta_n \quad (4)$$

и начальным условиям

$$\Theta(x, y, 0) = f(x, y), \quad \eta(x, y, 0) = g(x, y). \quad (5)$$

Безразмерные параметры: $\tau = t/t_0$ — время, $x = \bar{x}/x_0$, $y = \bar{y}/x_0$ — пространственные переменные, $\beta = RT_*/E$, $\gamma = \frac{cRT_*^2}{QE}$, $\alpha = \bar{\alpha}x_0/\lambda$ — пара-

метры, L — полутолщина пластины, $\Theta = \frac{(T - T_*)E}{RT_*^2}$ — температура;

$f(x, y)$, $g(x, y)$ — начальное распределение температуры и глубины превращения; η — глубина превращения; R — газовая постоянная; c , λ , $a = \lambda/(c\rho)$ — коэффициенты теплоемкости, теплопроводности, температуропроводности среды; ρ — плотность среды; α — коэффициент теплоотдачи; k — предэкспонент; E , Q — энергия активации и тепловой эффект химической реакции; T_n , T_* — начальная и характерная температуры горения; $T_r = T_n + Q/c$ — адиабатическая температура горения; x_0 , t_0 , u_0 — эталоны координат времени и скорости горения. В задаче они вы-

браны в виде $T_* = T_r$, $x_0 = \gamma a/u$, $t_0 = x_0^2/a$, $u_0 = u/\gamma$, где $u^2 = \frac{k\lambda RT_r^2}{\rho Q E} \times$

$\times \exp\left[-\frac{E}{RT_r}\right]$ — адиабатическая скорость горения. Такой выбор характерной температуры и эталонов предложен в [19], он удобен при численном решении задачи. В этих переменных $\Theta_r = 0$, $\Theta_n = -1/\gamma$, приближенное значение безразмерной скорости равно γ .

Связь характеристик двумерной и одномерной моделей горения. В дальнейшем будем сопоставлять полученные результаты с данными анализа простейшей одномерной модели, поэтому полезно установить связь между характеристиками моделей. Один из способов установления такой связи — метод усреднения (см. [20], с. 309).

Введем средние температуры и глубину превращения:

$$T(x, \tau) = \int_0^L \Theta(x, y, \tau) \Omega(y) dy, \quad \eta(x, \tau) = \int_0^L \eta(x, y, \tau) \Omega(y) dy,$$

где весовая функция $\Omega(y)$ — первая собственная функция задачи Штурма — Лиувилля, соответствующая одномерному уравнению теплопроводности по поперечной координате y в области $[0, L]$ и условию нормировки

$$\int_0^L \Omega(y) dy = 1; \quad \frac{\partial^2 \Omega(y)}{\partial y^2} = -\mu^2 \Omega(y), \quad \frac{\partial \Omega(0)}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial \Omega(L)}{\partial y} = -\alpha \Omega(L),$$

отвечающая первому собственному значению μ_1 , которое является решением уравнения

$$\operatorname{ctg}(\mu L) = \mu/L. \quad (6)$$

В итоге с точностью до малых второго порядка получаем известную одномерную постановку задачи

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{1}{\gamma} \frac{\partial \eta}{\partial \tau} - \mu_1^2 (T - T_n),$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial \tau} = \gamma (1 - \eta) \exp[T/(1 + \beta T)], \quad T(\pm \infty) = T_n = -1/\gamma.$$

Таким образом, эффективный коэффициент теплопотерь μ_1^2 связан с α коэффициентом теплоотдачи двумерной задачи и поперечным размером L соотношением (6). Приближенное выражение для критических теплопотерь, согласно [1], имеет вид

$$\mu_{кр}^2 \approx \gamma^3/(2e), \quad (7)$$

с учетом (6) оно трансформируется в ограничения на параметры двумерной задачи α и L .

Качественные представления о геометрической структуре стационарного фронта горения. Представление о структуре стационарного фронта горения дают изолинии температуры, глубины превращения и функции тепловыделения, перемещающиеся по веществу с постоянной скоростью. В зоне прогрева, где тепловыделение за счет химической реак-

ции несущественно, характеристики стационарного температурного поля приближенно определяются из следующей задачи:

$$-u \frac{\partial \bar{\Theta}}{\partial x} = \frac{\partial^2 \bar{\Theta}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{\Theta}}{\partial y^2},$$

$$\frac{\partial \bar{\Theta}(x, 0)}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial \bar{\Theta}(x, L)}{\partial y} = -\alpha \bar{\Theta}(x, L), \quad \bar{\Theta}(+\infty, y) = 0, \quad \bar{\Theta}(0, y) = D \cos(\mu_1 y),$$

где $\bar{\Theta} = \Theta - \Theta_n$; u — стационарная скорость горения. О геометрии фронта будем судить по изотерме $\bar{\Theta}(x, y) = \text{const}$ частного решения этой задачи вида

$$\bar{\Theta}(x, y) = D \cos(\mu_1 y) e^{\lambda x},$$

где $\lambda = -\frac{u}{2} - \sqrt{\frac{u^2}{4} + \mu_1^2}$; D — некоторая постоянная; μ_1 — первый корень уравнения (6). С точностью до аддитивной постоянной она имеет вид $x = (1/\lambda) \ln \cos(\mu_1 y)$.

В [3] фронт горения вплоть до критических теплопотерь считался плоским. В дальнейшем для определенности полагаем фронт плоским, если максимальное отклонение его координаты при $y = L$ от плоскости не более 10% полутолщины, т. е. его координаты удовлетворяют неравенству

$$x = \frac{1}{\lambda} \ln \cos(\mu_1 y) |_{y=L} \leq 0, \quad 1L. \quad (8)$$

В противном случае фронт горения считаем неодномерным. Следует отметить, что из-за сильной зависимости скорости химической реакции от температуры при $\alpha \rightarrow \infty$ (температура поверхности стремится к температуре внешней среды) вблизи поверхности пластины образуется непрореагировавший слой исходного вещества. Здесь фронт горения существенно неодномерный, и вопрос применимости усредненной модели становится открытым.

При $\Theta(x, L) = \Theta_n$ также возможны приближенные подходы (см., например, [14]) для оценки критических характеристик: скорости горения, толщины непрореагировавшего слоя, поперечных размеров пластины, при которых еще возможно распространение фронта. Так, интерпретируя непрореагировавший слой как инертную оболочку, которая изменяет уровень теплопотерь из стационарного фронта горения, для внутренней части образца можно, используя [1], получить критический размер полутолщины пластины

$$L_{кр} \approx 2\sqrt{2e/\gamma^3} \quad (9)$$

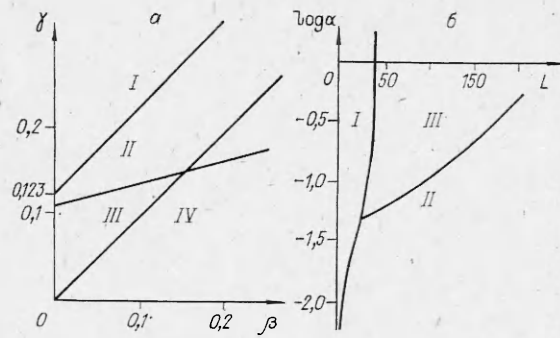
и соответствующий ему непрореагировавший слой толщиной

$$L_{неп} \approx L_{кр}/2, \quad (10)$$

при этом максимальная температура во фронте отличается от адиабатической температуры горения на один характерный интервал, а скорость горения в \sqrt{e} раз меньше адиабатической скорости.

Результаты численного моделирования. Рассмотренные выше приближенные характеристики фронта горения дают априорную информацию, необходимую для целенаправленного проведения численного эксперимента в параметрической области β, γ, α, L . При выборе параметров ориентиром служили области, представленные на рис. 1, а. Область I отвечает вырождению процесса горения, здесь существенно превращение вещества перед фронтом [17]. Граница, разделяющая стационарное горение (область II) от колебательных режимов горения (III), получена в [6]. Участок рис. 1, IV соответствует начальным температурам ниже абсолютного нуля и поэтому нефизичен. Что же касается α и L , характеризующих условия теплообмена и размер безгазового состава с параметрами β и γ , где возможно горение, то для них можно указать

Рис. 1. Области изменения параметров β, γ (а) и α, L (б), определяющих различное поведение фронта горения (для $\gamma = 0,2$).



на плоскости (L, α) три области (см. рис. 1, б): I — горение отсутствует из-за теплопотерь, II — где ожидается распространение одномерного фронта горения, III — неоднородное распространение фронта горения.

Границы раздела последних определяются формулами (6) — (10).

Для малых поперечных размеров фронт горения одномерный вплоть до критических значений теплопотерь, превращение вещества во фронте полное (неполнота может быть обусловлена макрокинетикой превращения [16]), процесс удовлетворительно описывается теорией [1].

Сравнительно просто дать в этом случае приближенное аналитическое описание, подобно исследованию адиабатического горения (здесь нагляднее это сделать в размерном виде). Для анализа структуру фронта удобно разбить на три зоны: прогрева, экзотермического превращения и охлаждения. В первой и третьей можно пренебречь тепловыделением и представить решение в аналитическом виде, а в зоне реакции, выделяя существенные факторы, установить приближенное подобие глубины превращения и градиента температуры

$$\eta_{\max} - \eta = \frac{\lambda}{\rho Qu} \frac{dT}{dx},$$

где u — скорость горения; η_{\max} — глубина превращения к моменту достижения T_{\max} . Такая связь позволяет свести анализ к одному нелинейному уравнению теплопроводности, как это делалось для адиабатического горения.

Сращивая решения в трех зонах, легко получить следующее параметрическое представление решения полной задачи (рассматривается случай реакции первого порядка). Для любого $\kappa = 4\alpha\lambda / (c\rho u)^2$ (здесь α — коэффициент теплоотдачи в одномерной задаче) определяются из условий сопряжения $\eta_{\max} = 0,5(1 + 1/\sqrt{1 + \kappa})$ и $T_{\max} = T_0 + \frac{Q}{c\sqrt{1 + \kappa}}$,

а затем

$$u^2 = \frac{\lambda RT_{\max}^2 \exp(-E/RT_{\max})}{\rho QE [1 - (1 - \eta_{\max})] [1 - \ln(1 - \eta_{\max})]} \approx \frac{\lambda RT_{\max}^2 \exp(-E/RT_{\max})}{\rho QE}.$$

Далее находим коэффициент теплообмена α , отвечающий выбранному κ и полученному решению. Заметим, что такое параметрическое представление позволяет сравнительно просто получить всю неоднозначную зависимость $u(\alpha)$. Более того, здесь можно рассматривать и более сложные зависимости коэффициентов теплообмена от параметров, включая и скорость горения. На рис. 2 представлена зависимость пронормированной скорости горения от уровня теплопотерь, полученная с помощью параметрического представления. Нижняя ветвь неоднозначной связи абсолютно неустойчива, устойчивость верхней зависит от определяющих параметров β, γ и уровня теплопотерь. При наличии устойчивости параметрическое представление с удовлетворительной точностью характеризует критический уровень теплопотерь:

$$\alpha_{кр} = \frac{(c\rho u_{кр})^2 cRT_{кр}^2}{2e\lambda QE}.$$

Если стационарный фронт теряет устойчивость и устанавливается пуль-

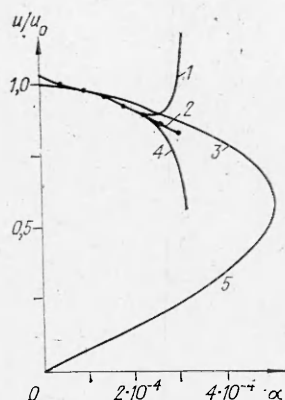


Рис. 2. Зависимость скорости горения от теплопотерь; $c = 0,838$ кДж/(кг·град), $\lambda = 16,74$ Вт/(м·град), $\rho = 2 \cdot 10^3$ кг/м³, $T_n = 900$ К, $T_r = 1500$ К, $k = 5 \cdot 10^8$ 1/с; $E = 251,4$ кДж/моль, $Q = 502,8$ кДж/кг, $\gamma = 0,125$, $\beta = 0,05$.

1 — максимальная скорость пульсирующего горения; 2 — средняя скорость пульсирующего горения; 3 — устойчивая ветвь; 4 — минимальная скорость пульсирующего горения; 5 — абсолютно неустойчивая ветвь.

сирующий режим горения, то срыв горения достигается при более низком уровне теплопотерь. На том же графике точками указаны результаты численного эксперимента. Пока стационарное горение устойчиво, наблюдается хорошее совпадение значений скоростей горения. Начиная с определенного уровня теплопотерь нарушается устойчивость, поэтому на графике представлены скорости горения средняя, максимальная и минимальная. Справедливо утверждение, что срыв горения происходит в момент депрессии и когда мгновенные характеристики фронта удовлетворяют условиям срыва, т. е. максимальная температура падает на один характерный интервал, а скорость уменьшается в \sqrt{e} раз. Именно этот факт отражен на рис. 2.

При больших поперечных размерах образцов горение возможно для любого уровня теплопотерь, вплоть до постоянной температуры поверхности ($\alpha \rightarrow \infty$). По мере роста теплопотерь фронт искривляется вблизи поверхности и становится существенно неоднородным. Температура в приповерхностных слоях снижается, глубина превращения падает, и в пределе появляется непрореагировавший слой исходного вещества толщиной порядка ширины адиабатического фронта горения, который служит тепловым экраном для внутренней высокотемпературной зоны. Если рассмотреть процесс с помощью усредненной модели, то эффективный коэффициент теплообмена окажется меньше критического значения и тем самым принципиальные выводы о возможности горения на основе одномерной теории [1] оказываются справедливыми и для существенно неоднородных процессов. Однако с позиций анализа полноты превращения состава во фронте горения необходим учет неоднородности. Образующийся непрореагировавший приповерхностный слой усредненной моделью не учитывается.

Рассмотрим теперь влияние факторов неустойчивости стационарного режима горения. Они проявляются для составов, параметры β и γ которых лежат либо в области неустойчивости, либо вблизи ее. Известно [7], что теплопотери способствуют возникновению неустойчивости стационарного фронта и что на его месте устанавливается новый периодический динамический режим горения. Факторы неустойчивости проявляются в приповерхностной части, участок зоны горения которой испытывает наибольшее тепловое воздействие. Приповерхностные слои горят неустойчиво в пульсирующем режиме, тогда как внутренние — устойчиво и являются стабилизирующим фактором. С изменением β и γ в областях неустойчивости или увеличения теплопотерь колебания становятся все более релаксационными. Горение в приповерхностных слоях прекращается, тогда как по внутренним слоям распространяется фронт. Несмотря на теплопотери, внутренний слой прогревает приповерхностный, и уже по прогретому веществу быстро распространяется фронт горения. После сгорания приповерхностного слоя наступает очередная депрессия, во время которой по внутренней части перемещается зона горения в сторону свежего состава, и т. д.

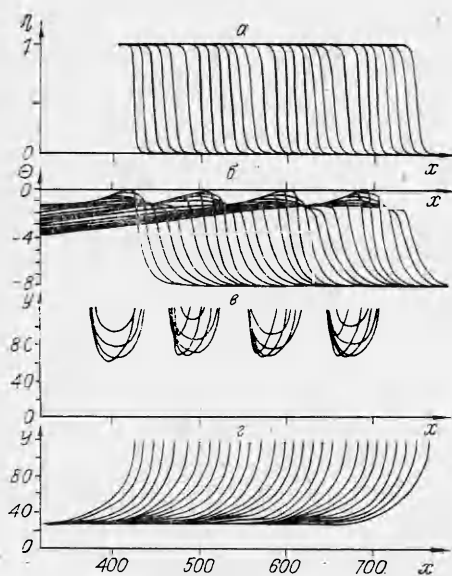


Рис. 3. Пространственно-временное распределение характеристик пульсирующего фронта горения при $\gamma = 0,125$, $\beta = 0,05$, $\alpha = 1,0$, $L = 120$.

а, б) поля глубины превращения и температуры на оси симметрии образца; в, г) изолинии $\Theta = -1,0$ и $\eta = 0,5$.

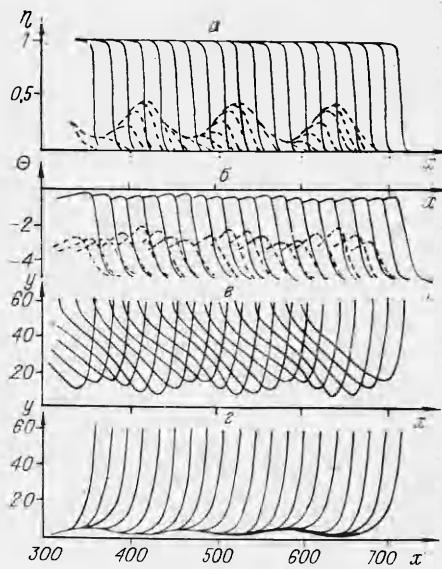


Рис. 4. Пространственно-временное распределение характеристик фронта горения вблизи срыва горения при $\gamma = 0,2$, $\beta = 0,18$, $\alpha = 0,08$, $L = 60$.

а, б) поля глубины превращения и температуры на оси симметрии образца; в, г) изолинии $\Theta = -1,0$ и $\eta = 0,5$.

Вычислительный эксперимент позволил проследить динамику пульсаций и выявить лимитирующие факторы явления. Полученная в процессе вычислений информация обрабатывалась и выдавалась графически в виде временной последовательности поля температур и глубины превращения внутри образца и на его поверхности. Кроме того, выдавались изотермы, отвечающие температуре, меньшей T_r на один характерный интервал, и изолинии $\eta = 0,5$. На рис. 3 представлен автоколебательный режим горения, соответствующий максимальным теплотерям, когда температура поверхности образца равна температуре окружающей среды. Колебания T и η наблюдаются лишь внутри образца. Заметим, что упомянутая выше область малых поперечных размеров образца определялась из соображений десятипроцентного отклонения фронта от плоского, а область больших поперечных размеров ограничивалась снизу таким размером, для которого не существует срыва горения при температуре, равной внешней.

Диапазон средних поперечных размеров образца — в определенном смысле переходный. Ему присущи некоторые черты явлений, наблюдаемых в крайних областях. Так, здесь отмечены критические явления потухания, свойственные области малых поперечных размеров. Однако геометрия фронта вблизи критической величины теплотеря существенно неоднородна, возможно явление недогорания. Особенно усложняется анализ процесса, когда стационарный фронт горения теряет устойчивость и срыв горения реализуется уже на динамических режимах.

Пример такого установившегося докритического режима изображен на рис. 4. Здесь в последовательные моменты времени представлены поля глубин превращения и температуры (сплошными линиями в центре образца, штриховыми — на поверхности) и изолинии T и η . Приближенный анализ расчетов, проведенных для β и γ , показал, что срыв горения наступает, когда с ростом теплотеря максимальная температура в образце станет меньше адиабатической на один характерный интервал, а максимальная скорость горения — в \sqrt{e} раз.

В заключение заметим, что процесс горения безгазовых составов с теплотерями в общем случае определяется из решения сопряженной

задачи с учетом влияния внешней среды. Для упрощения исследования рассмотрен важный, но частный теплообмен по закону Ньютона и изучена правомочность описания неоднородных процессов в рамках одномерной модели. Выделение областей параметров L , α , где такой подход справедлив, представляется полезным и интересным. Отметим также, что детальное исследование двумерной задачи в широкой области параметров с позиций влияния теплопотерь сопряжено со значительными трудностями и вряд ли целесообразно. Однако информация, полученная с помощью выборочных численных экспериментов, дает представление о сложной неоднородной структуре неустойчивого фронта горения и динамике процесса в условиях теплопотерь, особенно на грани срыва горения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Я. Б. Зельдович. ЖЭТФ, 1941, 11, 1, 159.
2. Я. Б. Зельдович. ЖЭТФ, 1942, 12, 498.
3. Y. B. Zeldovich, G. L. Varenblatt. Comb. Flame, 1959, 3, 61.
4. J. Buckmaster. Comb. Flame, 1976, 26, 2, 151.
5. G. Joulin, P. Clavin. Acta astronaut., 1976, 3, 3/4, 223.
6. К. Г. Шкадинский, Б. И. Хайкин, А. Г. Мержанов. ФГВ, 1971, 7, 1, 19.
7. К. Г. Шкадинский, Б. И. Хайкин.— В кн.: Горение и взрыв. М.: Наука, 1972.
8. К. Г. Шкадинский, М. И. Лебедева. ФГВ, 1975, 11, 4, 530.
9. Б. Н. Кондриков, Б. В. Новожилов. ФГВ, 1974, 10, 5, 661.
10. А. А. Зенин, О. И. Лейпунский, С. В. Писковский и др. ФГВ, 1976, 12, 2, 179.
11. Г. М. Махвиладзе, Б. В. Новожилов. ПМТФ, 1971, 5, 51.
12. Б. И. Хайкин.— В кн.: Процессы горения в химической технологии и металлургии. Черноголовка, 1975.
13. С. Л. Али, Р. Б. Симпсон. РТК, 1979, 17, 1, 66.
14. С. С. Рыбанин, С. Л. Соболев. Докл. АН СССР, 1983, 269, 6, 1394.
15. А. П. Алдушин, С. Г. Каспарян. ФГВ, 1981, 17, 2, 74.
16. А. П. Алдушин, Т. Е. Мартемьянова, А. Г. Мержанов и др. ФГВ, 1972, 8, 2, 202.
17. А. П. Алдушин, В. Д. Луговой, А. Г. Мержанов и др. Докл. АН СССР, 1978, 243, 1434.
18. В. В. Александров, А. А. Давыденко, А. Ф. Еремин и др. ФГВ, 1984, 20, 6, 79.
19. Д. А. Франк-Каменецкий. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М.: Наука, 1967.
20. А. И. Вольперт, С. И. Худяев. Анализ в классах разрывных функций и уравнения математической физики. М.: Наука, 1975.

Поступила в редакцию 25/II 1986,
после доработки — 5/VI 1986

УСТОЙЧИВОСТЬ ГОРЕНИЯ БЕЗГАЗОВЫХ СИСТЕМ ПРИ НАЛИЧИИ ТЕПЛОПОТЕРЬ

*А. Г. Струнина, Л. К. Демидова, А. Н. Фирсов, А. Г. Мержанов
(Черноголовка)*

Вопрос об устойчивости горения безгазовых систем рассматривался аналитически для бесконечно узкой зоны горения без каких-либо предположений о характере реакции [1—4] и численным счетом — для конечной ширины зоны на модели реакции первого порядка [5, 6]. Численным счетом изучалась также устойчивость горения сложных гетерогенных систем, характеризующихся торможением скорости реакции нарастающим слоем продукта [7, 8]. Для иных кинетических схем исследование не проводилось.

В данной работе обобщены результаты численных решений одномерных уравнений горения, направленные на определение области устойчивых режимов при различных уровнях теплопотерь для ряда кинетических схем процесса (простые реакции первого и второго порядков, реакции с самоускорением, сложные реакции с торможением по мере роста глубины превращения). Изучено влияние искривлений темпера-