

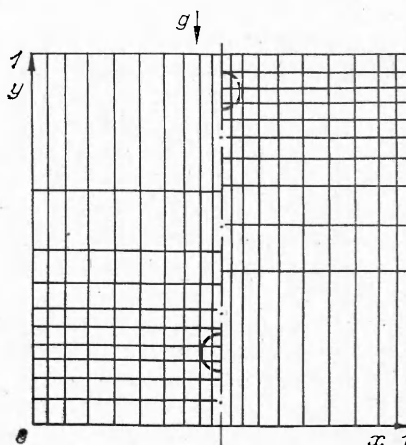
**ВЛИЯНИЕ ЕСТЕСТВЕННОЙ КОНВЕКЦИИ  
НА КОНЦЕНТРАЦИОННЫЕ ПРЕДЕЛЫ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ  
ГОРЮЧЕЙ СМЕСИ В ЗАКРЫТОМ СОСУДЕ**

*Г. Г. Копылов, Г. М. Махвиладзе  
(Москва)*

При определенных условиях, называемых критическими или предельными, воспламенение перемешанной горючей смеси оказывается невозможным — локальный очаг разогрева не способен вызвать значительное выгорание смеси. Поскольку в околопредельных смесях время развития химической реакции и время развития конвекции соизмеримы, пределы горения существенно зависят не только от физико-химических свойств горючей смеси, но и от характеристик возникающего конвективного течения, определяемых размерами и геометрией сосуда, формой, протяженностью и местонахождением источника зажигания. В настоящее время имеется обширный экспериментальный материал, свидетельствующий о влиянии конвекции на пределы воспламенения (распространения пламени) в больших ограниченных объемах (см., например, [1—4]).

Вместе с тем многие явления, наблюдавшиеся в околопредельных смесях, остаются невыясненными, что объясняется сложностью процессов, протекающих при развитии очага горения в условиях естественной конвекции и его взаимодействии со стенками сосуда. Из-за многообразия условий эксперимента и отсутствия измерений, позволяющих судить о локальных распределениях скорости газа, температуры и концентрации, возникают трудности при анализе и обобщении опытных данных и выработке теоретических представлений. В связи с этим представляется перспективным развитие методов численного моделирования очагового горения в больших объемах и проведение на его основе расчетов конвективных пределов воспламенения.

Принципиальная возможность численного моделирования развития очага горения в закрытом сосуде с использованием достаточно полных уравнений движения сжимаемого реагирующего газа показана в работах [5, 6]. Данное исследование посвящено расчету концентрационных пределов воспламенения горючей смеси, исходное состояние которой является докритическим, при инициировании химической реакции заданным очагом подогрева. С целью выяснения роли конвекции исследован достаточно широкий диапазон чисел Дамкеллера, характеризующих



*Рис. 1. Схема квадратной области и структура исходной расчетной сетки ( $x < 0,5$  — при зажигании снизу,  $x > 0,5$  — при зажигании сверху).*

отношение газодинамического времени к химическому, и проведено сравнение концентрационных пределов в поле внешней силы (силы тяжести) и при  $g = 0$ . Результаты расчета иллюстрируются на примере метановоздушной смеси.

Движение газовой горючей смеси в плоском сосуде квадратного сечения (рис. 1) описывается нестационарными двумерными уравнениями Навье — Стокса с учетом потребления реагирующего вещества, находящегося в недостатке, в экзотермической химической реакции первого порядка

$$\frac{\partial \rho}{\partial \tau} + \operatorname{div} \rho \vec{U} = 0, \quad p = \rho \Theta, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial \tau} + (\vec{U} \nabla) \vec{U} = - \frac{1}{\gamma \rho M^2} \nabla p - \vec{G} + \frac{1}{\rho \operatorname{Re}} \left( \frac{1}{3} \nabla (\nabla \vec{U}) + \Delta \vec{U} \right), \quad (2)$$

$$\frac{\partial \Theta}{\partial \tau} + (\vec{U} \nabla) \Theta = \frac{\gamma}{\rho \operatorname{Re} \operatorname{Pr}} \Delta \Theta - (\gamma - 1) \Theta \operatorname{div} \vec{U} + q \operatorname{Da} \alpha \varphi(\Theta), \quad (3)$$

$$\frac{\partial \alpha}{\partial \tau} + (\vec{U} \nabla) \alpha = \frac{1}{\rho \operatorname{Re} \operatorname{Sc}} \Delta \alpha - \operatorname{Da} \alpha \varphi(\Theta), \quad (4)$$

$$\begin{aligned} M^2 &= Lg/\gamma R_0 T_0, \quad \gamma = c_p/c_v, \quad \operatorname{Re} = L\sqrt{Lg}\rho_0/\eta, \quad \operatorname{Pr} = c_p\eta/\lambda, \\ \operatorname{Sc} &= \eta/\rho D_\alpha, \quad q = Q\alpha_0/c_v T_0, \quad \beta = R_0 T_0/E, \\ \operatorname{Da} &= \sqrt{Lg}/k_0 \exp(-E/RT_s), \end{aligned} \quad (5)$$

где  $\vec{G} = (0, g/g_0)$ ;  $\varphi(\Theta) = \exp \beta^{-1} (\Theta_s^{-1} - \Theta^{-1})$ ;  $\Delta = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2$ .

Начальные и граничные условия имеют вид

$$\tau = 0: \vec{U} = 0, \quad \Theta = 1, \quad \alpha = 1 \quad \text{при } (x, y) \notin F, \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \Theta = \Theta_s, \quad \alpha = 0 \quad \text{при } (x, y) \in F, \quad p = \exp(-\gamma M^2 y), \\ x = 0; 1: \vec{U} = 0, \quad \Theta = 1, \quad \partial \alpha / \partial x = 0, \\ y = 0; 1: \vec{U} = 0, \quad \partial \Theta / \partial y = 0, \quad \partial \alpha / \partial y = 0. \end{aligned} \quad (7)$$

Здесь  $\tau$  — время;  $x, y$  — декартовы координаты (начало координат в левом нижнем углу сосуда);  $\rho, p, \Theta$  — плотность, давление и температура;  $\alpha$  — концентрация реагирующего вещества,  $\vec{U}(u, v)$  — скорость газа.

При переходе к безразмерным переменным в качестве масштабов длины, времени, скорости, температуры, концентрации реагента и давления выбраны соответственно длина стороны сосуда  $L, \sqrt{Lg_0}$  ( $g_0$  — нормальное ускорение силы тяжести),  $\sqrt{Lg_0}$ , начальная температура и концентрация реагента вне очага  $T_0$  и  $\alpha_0$ , начальное давление газа у нижнего основания сосуда. Масштаб плотности  $\rho_0 = p_0/R_0 T_0$  выражается через  $p_0$  и  $T_0$  из уравнения состояния газа, где  $R_0$  — газовая постоянная.

В системе уравнений (1)–(4) и безразмерных комплексах (5) содержатся следующие величины:  $g$  — ускорение внешней силы;  $c_p$  и  $c_v$  — теплоемкости при постоянном давлении и объеме;  $\eta$  — динамическая вязкость;  $\lambda$  — коэффициент теплопроводности;  $D_\alpha$  — коэффициент диффузии;  $E, Q$  и  $k_0$  — энергия активации, тепловой эффект и предэкспоненциальный множитель химической реакции, зависимость скорости которой от температуры выражается аррениусовской экспонентой. Число Дамкеллера  $\operatorname{Da}$  построено по начальной температуре очага  $T_s$ , превышающей температуру исходной смеси. Считается, что коэффициенты  $\lambda, \eta$ , а также произведение  $\rho D_\alpha$  постоянны, молекулярные массы компонентов смеси не сильно отличаются друг от друга.

Начальный очаг подогрева в плоскости  $(x, y)$  представляет собой круг с центром в точке  $(x_0, y_0)$  и радиусом  $r$ :  $F = \{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 \leq r^2\}$ . Верхнее и нижнее основания сосуда теплоизолированы, боковые стенки поддерживаются при температуре  $T_0$ , границы непроницаемы для реагирующего вещества.

Решение задачи (1)—(7) позволяет получить информацию о развитии динамического, теплового и концентрационного полей, выяснить роль конвекции в формировании очага горения и определить критические условия воспламенения в зависимости от различных параметров. Цель расчета концентрационных пределов заключается в установлении зависимости числа Дамкеллера от параметра  $q$ , который характеризует начальный состав смеси (концентрация  $\alpha_0$  входит только в этот параметр). Искомая зависимость  $Da_*(q)$  или  $q_*(Da)$  в плоскости  $(Da, q)$  отделяет область воспламенения от области параметров исходной смеси, отвечающей медленной реакции при низкой температуре.

Задача (1)—(7) интегрировалась численно трехслойным экстраполяционным методом [7] с дополнениями, принятыми в [8]. Для расчета течений с объемными химическими реакциями этот метод использовался ранее в [5, 6, 9]. По сравнению с предыдущими работами [5, 6] численная методика существенно улучшена, благодаря чему удалось провести расчеты для смесей с достаточно высоким активационным барьером, исключив тем самым влияние реакции при начальной температуре. В данной работе использовались расчетная область вдвое меньшего размера в силу симметрии задачи относительно плоскости  $x = 0,5$  (центр очага всегда задавался в этой плоскости), неравномерная расчетная сетка, перестройка ячеек и другой способ аппроксимации ряда граничных условий.

Расчеты проводились для половины сосуда в расчетной области  $0,5 \leq x \leq 1,0$ ,  $0 \leq y \leq 1$ , причем на ее границе  $x = 0,5$  ставились условия симметрии

$$u = 0, \quad \partial v / \partial y = \partial \Theta / \partial y = \partial p / \partial y = \partial \alpha / \partial y = 0. \quad (8)$$

Для повышения локальной разрешающей способности сетки в областях резкого изменения температуры, плотности, концентрации реагента и скорости химической реакции в (1)—(7) вводилось преобразование координат:

$$\xi = \xi_* + \frac{1}{a_1} \operatorname{tg} [2z_1(x - 0,5) - \operatorname{arctg} a_1 \xi_*], \quad 0,5 \leq x \leq 1, \quad (9)$$

$$\zeta = \zeta_* + \frac{1}{a_2} [\operatorname{arctg} (z_2 y - \operatorname{tg} a_2 \zeta_*)], \quad 0 \leq y \leq 1, \quad (10)$$

где  $a_1$  и  $a_2$  — параметры сгущения; константы  $z_1$  и  $z_2$  подобраны так, чтобы исходная расчетная область отображалась на прямоугольную область размером  $0,5 \times 1$ :

$$z_1 = \operatorname{arctg} a_1 (0,5 - \xi_*) \operatorname{arctg} a_1 \xi_*,$$

$$z_2 = \operatorname{tg} a_2 (1 - \zeta_*) + \operatorname{tg} a_2 \zeta_*.$$

Равномерная пространственная сетка, введенная в координатах  $(\xi, \zeta)$  в соответствии с (9), (10), обеспечивает сгущение узлов по оси  $x$  вблизи плоскости симметрии и у боковой стенки сосуда, а по оси  $y$  — вблизи точки  $y_* = z_2^{-1} \operatorname{tg} a_2 \zeta_*$ . Задав  $\zeta_*$  так, чтобы  $y_* = y_0$ , можно обеспечить достаточно большое количество узлов в очаге на начальной стадии процесса. Исходная расчетная сетка показана на рис. 1 (до обеих осей нанесен каждый четвертый узел).

Поскольку очаг перемещается по объему сосуда, после каждых 100—120 временных шагов для более подробного описания областей с резко меняющимися по пространству градиентами осуществлялась перестройка ячеек по координате  $y$ . Эта перестройка заключалась в таком изменении  $\zeta_*$ , чтобы величина  $y_*$  стала равной текущей высоте очага, определяемой как вертикальная координата центра тяжести горячей области, ограниченной изотермой  $\Theta = 1,2$ . Чтобы неравномерность сетки оставалась примерно той же при перестройке узлов по вертикали, параметр сгущения при каждой такой процедуре вычислялся заново по формуле  $a_2 = A / \max(y_*, 1 - y_*)$ , где  $A$  — константа. При этом примерно

сохраняется и значение временного шага, рассчитываемого по формуле  $\Delta\tau = KMh$  ( $K$  — число Куранта,  $h$  — минимальный пространственный шаг). Значения сеточной функции в узлах измененной сетки находились с помощью квадратичной интерполяции.

Параметры расчетной сетки выбирались следующим образом:  $a_1 = 6$ ,  $\xi_* = 0,4$  ( $\xi_*$  соответствует точке  $x_* = 0,842$ , в которой шаг по  $x$  максимален),  $A = 1,3 \div 1,4$  (при стремлении  $A \rightarrow \pi/2$  неравномерность сетки по вертикали увеличивается, на рис. 1  $A = 1,3$ ). В расчетах использовалась сетка  $41 \times 41$ ,  $K = 1 \div 4$ . Минимальный шаг сетки по горизонтали был постоянным —  $h = 0,007$ , а по вертикали менялся в пределах  $0,01—0,006$ .

Граничные условия типа  $\partial\varphi/\partial n = 0$  (например, условия симметрии в (8) или условие адиабатичности верхней стенки) аппроксимировались с помощью двухточечной формулы  $\varphi_n = \varphi_{n+1}$  [10] ( $\varphi_n$  и  $\varphi_{n+1}$  — значения функции на границе и в ближайшем к границе узле), которая обеспечивает вычисление величины  $\varphi_n$  со вторым порядком точности. Начальные распределения температуры и концентрации (6) для улучшения качества счета сглаживались с помощью гладких, но резко меняющихся функций. Точность расчетов контролировалась путем измельчения пространственно-временной сетки и проверки выполнения баланса массы.

Расчеты проводились при  $M^2 = 0,05$ ,  $\gamma = 1,4$ ,  $Re = 3600$ ,  $Pr = Sc = 1$ ,  $1/\beta = 32$ ,  $r = 0,05$ ,  $\Theta_0 = 6,33$ ,  $g = g_0$  и  $g = 0$ ,  $Da = 0 \div 200$ ,  $q = 3,5 \div 5,3$ ,  $x_0 = 0,5$ ,  $y_0 = 0,2$  (зажигание снизу),  $y_0 = 0,9$  (зажигание сверху).

Основные закономерности развития очага горения в околопредельных смесях, согласующиеся с экспериментальными наблюдениями, установлены в [5, 6]. При зажигании снизу всплывающий очаг горячего газа охлаждается и обогащается реагирующим веществом из-за конвективного тепло- и массообмена с окружающим газом. Конвективное движение образовано двумя симметричными цилиндрическими вихрями, увеличивающимися в размерах. В смесях, параметры которых отвечают большому удалению от области воспламенения, скорость химической реакции невелика, очаг ведет себя как в химически инертном газе и рассасывается в объеме газа. При приближении к области воспламенения скорость тепловыделения увеличивается, очаг достигает верхней стенки сосуда, после чего затухает. В воспламеняющихся смесях наблюдается трехстадийная схема процесса: подъем очага, растекание его вдоль верхней границы, распространение образовавшегося фронта пламени сверху вниз. При большом удалении в область воспламенения вследствие интенсивной химической реакции очаг быстро увеличивается в размерах, стадия подъема отсутствует. В случае зажигания сверху после кратковременного подъема, который сопровождается возникновением конвекции в верхней части сосуда, очаг растекается вдоль верхней стенки; при воспламенении образуется фронт пламени.

На рис. 2 показаны зависимости среднеобъемной температуры  $\langle\Theta\rangle$ , максимальной по пространству температуры  $\Theta_m$  и минимальной концентрации  $\alpha_m$  от времени при фиксированном значении числа Дамкеллера в смесях различного состава, зажигаемых снизу. В допредельных смесях максимальная температура стабилизируется при подъеме очага и длительное время, включая и начальную стадию растекания, остается постоянной (кривые 2 и 2'). Затем максимальная и средняя температуры уменьшаются. Реагирующее вещество, которое сначала отсутствует в очаге, постепенно заполняет остывающую область: минимальная концентрация в очаге возрастает до величины, близкой к  $\alpha_0$  (кривая 2''). В воспламеняющихся смесях максимальная температура на стадии подъема принимает значение, несколько большее адиабатической температуры горения при постоянном давлении и далее не меняется (кривая 1). Средняя температура (кривая 1') тем не менее монотонно возрастает, так как выделяющееся в очаге тепло разносится конвективными потоками по всему сосуду. Минимальная концентрация (кривая 1'') отлична от нуля только в течение небольшого промежутка времени, пока развивается химическая реакция.

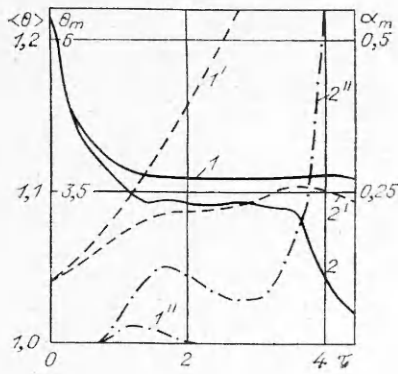


Рис. 2. Временные зависимости локальных и интегральных характеристик при зажигании околоредельных смесей в нижней части сосуда ( $Da = 150$ ).  
 —  $\Theta_m(\tau)$ ; —  $\langle \theta \rangle \tau$ ; - - -  $\alpha_m(\tau)$ .  
 1, 1', 1'' —  $q = 5$ ; 2, 2', 2'' —  $q = 4,75$ .

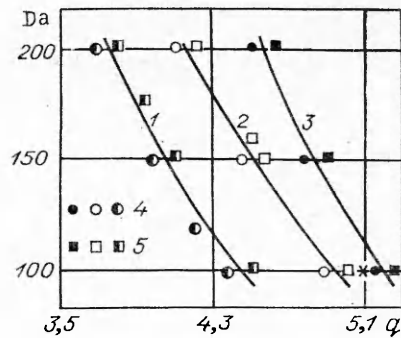


Рис. 3. Концентрационные пределы воспламенения при зажигании сверху ( $g = 0$  (1),  $g = g_0$  (2)) и снизу (3).  
 4 — медленная реакция; 5 — воспламенение.

Интересно отметить, что при очаговом воспламенении в движущихся средах существует высокотемпературный квазистационарный участок зависимости  $\Theta_m(\tau)$ , отвечающий равенству скорости тепловыделения и скорости теплопотерь. При воспламенении максимальная температура остается постоянной почти до полного выгорания реагента, в допредельных смесях растекание завершается резким падением температуры. В неподвижных средах также имеется длительный участок квазистационарного протекания реакции, но при низкой (а не при высокой) температуре и в допредельных составах. Это различие обусловлено механизмом тепловых потерь из очага: конвективное охлаждение быстрее кондуктивного, поэтому помимо низкотемпературного возможен квазистационарный тепловой режим очага при высокой температуре, обеспечивающей большую скорость тепловыделения.

В результате анализа решений, полученных для смесей различного состава при нескольких фиксированных значениях числа Дамкеллера, на плоскости параметров ( $Da, q$ ) найдены предельные кривые — концентрационные пределы воспламенения при зажигании снизу и сверху (рис 3).

Так же, как и в опытах (см., например, [11]), четкая граница между областями, отвечающими медленной реакции и воспламенению, отсутствует: имеется переходная зона, границы которой и определялись в расчетах. В качестве критерия классификации режимов протекания реакции, использовалось поведение зависимостей, представленных на рис. 2. С помощью этих зависимостей можно довольно быстро, еще при небольшой средней степени выгорания (для представленного на рис. 2 расчета с  $Da = 150$  и  $q = 5$  при  $\tau = 5$  среднеобъемная концентрация  $\langle \alpha \rangle = 0,92$ ) установить, произойдет воспламенение или нет, что существенно при проведении большой серии расчетов. Обычно расчет ограничивался временами  $\tau \sim 5 \div 10$ . При приближении к предельной кривой время выхода на тот или иной режим протекания реакции затягивается и в этих случаях проводились длительные расчеты до большой глубины превращения реагирующего вещества (при воспламенении) или до значительного охлаждения очага (при затухании реакции).

На рис. 3 нанесены результаты расчетов при  $Da = 100, 150, 200$  только для тех значений  $q$ , которые ближе всего располагаются к предельным кривым, определяя тем самым их положение на плоскости. Кривые воспламенения  $Da_*(q)$  проведены через середины отрезков, соединяющих отмеченные точки, которые с полной определенностью можно отнести к одному из возможных режимов реакции. Ширина переходной области при фиксированном  $Da$  не превышает 3% от критического значения  $q$ . Поведение кривых воспламенения объясняется тем, что в смеси

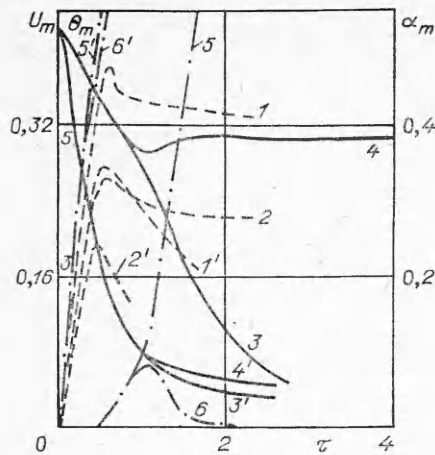


Рис. 4. Временные характеристики процесса развития очага в одной и той же смеси при разном положении источника зажигания ( $Da = 100, q = 5,1$ ). —  $\Theta_m(\tau)$ ; - - - -  $U_m(\tau)$ ; - · - · -  $\alpha_m(\tau)$ . 1, 3, 5 — зажигание снизу; 2, 4, 6 — сверху; штрих у цифр отвечает случаю  $Da = 0$ .

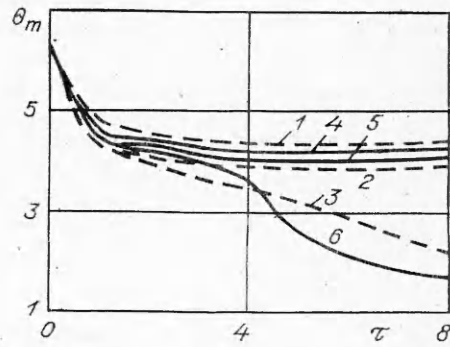


Рис. 5. Зависимость максимальной температуры очага от времени при нормальном ускорении силы тяжести и при  $g = 0$  ( $Da = 200, y_0 = 0,9$ ). —  $g = g_0$ ; - - - -  $g = 0$ .  $q$ : 3,75 (3), 3,8 (2), 4,1 (6), 4,2 (5), 4,3 (1, 4).

данного состава (фиксировано  $q$ ) воспламенение происходит при больших скоростях реакции, т. е. в области больших  $Da$ . При фиксированном  $Da$  воспламенение достигается при увеличении  $q$ , так как обогащение смеси эквивалентно увеличению теплового эффекта реакции и, следовательно, скорости тепловыделения.

Интересно сравнить также относительное положение границ воспламенения при обеих схемах зажигания. Из-за влияния естественной конвекции область воспламенения, ограниченная кривой 3, лежит внутри области воспламенения, задаваемой кривой 2, т. е. концентрационные пределы при зажигании сверху шире, чем при зажигании снизу. Для иллюстрации этого обстоятельства на рис. 4 представлены временные зависимости некоторых величин, характеризующих развитие очага в одной и той же смеси, но при различном положении источника зажигания, а также в химически инертном газе. Выбранные параметры горючей смеси отвечают точке, расположенной между кривыми воспламенения 2 и 3 на рис. 3 (она отмечена звездочкой).

В развитии очага определяющую роль играет конвективный тепло- и массообмен с окружающим газом. Интенсивность возникающего конвективного движения характеризуется зависимостью максимальной по объему сосуда скорости газа  $U_m$  от времени (см. рис. 4, 1, 2, 1', 2'), свидетельствующей о быстром развитии конвекции и примерно одинаковом времени «разгона» движения (момент, в который достигается  $U_m$ ) для обеих схем зажигания в горючей смеси и в инертном газе —  $\tau = 0,55$ . Возникающий конвективный поток способствует переносу реагирующего вещества в очаг, в котором оно сначала отсутствует (см. (6)), и развитию химической реакции. В горячем очаге происходит быстрое выгорание реагента и выделение тепла, в результате чего минимальная концентрация  $\alpha_m$  ниже (ср. кривые 5 и 5', 6 и 6'), а  $\Theta_m$  выше (ср. кривые 3 и 3', 4 и 4'), чем в инертном газе. Поскольку конвективный поток холодного газа, поступающий в очаг, приводит к его охлаждению, температура в очаге уменьшается (кривые 3, 3', 4' и начальный участок кривой 4 на рис. 4).

Развитию конвекции при верхнем положении очага препятствует верхняя стенка сосуда, поэтому кривые 1 и 2, а также 1' и 2' (см. рис. 4) начинают расходиться при  $\tau \sim 0,22$ . Свободное развитие конвекции при нижнем положении очага приводит к вовлечению в конвективное движение большей массы газа и к большей его интенсивности: максимальная



скорость газа после участка разгона движения примерно в 1,5 раза больше, чем для верхнего очага. Интенсивность конвекции в реагирующей смеси выше из-за выделения тепла химического превращения. В нереагирующем газе вследствие отсутствия химической реакции и быстрого охлаждения очага  $U_m$  после участка разгона быстро падает (см. рис. 4, 1', 2').

Различие в интенсивности конвекции и структуре конвективных движений при нижнем и верхнем положении очага начинает сказываться на поведении зависимостей  $\Theta_m(\tau)$  и  $\alpha_m(\tau)$  к моменту  $\tau \approx 1$ , когда верхний очаг растекается вдоль верхней стенки. В растекающемся очаге скорость тепловыделения равна скорости конвективных теплопотерь, растекание происходит при высокой и практически постоянной температуре и завершается формированием фронта пламени. Нижний очаг из-за интенсивного конвективного теплообмена с окружающим холодным газом остывает и насыщается реагентом (кривые 3 и 5) и, в конце концов, прекращает свое существование.

Таким образом, конвективные движения, которые определяют материальный и тепловой баланс очага, при зажигании сверху и снизу имеют различную интенсивность и структуру, что приводит к различию между пределами воспламенения. Влияние естественной конвекции ярко проявляется при сравнении предельных кривых, полученных в поле силы тяжести ( $g = g_0$ ) и при  $g = 0$ , «включаемой» одновременно с возникновением в газе, покоящемся в поле силы тяжести, очага подогрева (начальное условие (6) не меняется, в уравнении (2)  $\vec{G} = 0$ ). При  $g = 0$  (расчет проводился для  $y_0 = 0,9$ ) движение газа, возникающее из-за его теплового расширения вследствие выделения тепла химического превращения и под действием начального перепада давления, характеризуется меньшей интенсивностью по сравнению со случаем  $g = g_0$ ; соответственно скорость охлаждения очага меньше, а  $\Theta_m$  выше (рис. 5). Воспламенение происходит при меньших  $q$  — концентрационные пределы при  $g = 0$  расширяются (см. кривые 1 и 2 на рис. 3).

Следует отметить, что относительное положение концентрационных пределов при зажигании сверху и снизу, установленное в результате проведенных исследований, имеет место только при отсутствии теплообмена между газом и верхней стенкой сосуда. Естественно, пределы могут измениться, если, например, верхняя стенка хорошо проводит тепло и способна охлаждать газ. Пределы воспламенения существенным образом зависят от начальных и граничных условий, т. е. от применяемых схем зажигания и тепловых режимов стенок сосуда. Поэтому каждая конкретная ситуация, реализующаяся в опыте, требует отдельного анализа с учетом специфики начальных и граничных условий.

Проиллюстрируем полученные результаты на примере конкретной смеси. Согласно [4], в метановоздушной смеси, содержащей 10%  $\text{CH}_4$ , энергия активации  $E = 167$  кДж/моль, скорость пламени с адиабатической температурой  $T_b = 2228$  К при  $T_0 = 295$  К равна  $u_n = 40$  см/с. По формуле Зельдовича — Франк-Каменецкого [12] можно оценить предэкспоненциальный множитель в суммарном кинетическом законе, описывающем скорость реакции:  $k_0 = 4,735 \cdot 10^6$  с<sup>-1</sup> при 1 атм (при оценке использовалась также температурная зависимость для температуропроводности смеси  $\kappa \sim T^{1,85}$ ,  $\kappa(T_0) = 0,214$  см<sup>2</sup>/с). Пусть длина стороны сосуда  $L = 310$  см (начальный радиус очага 15,5 см), начальные температура и давление  $T_0 \sim 630$  К,  $p = 0,012$  атм ( $k_0 \sim p$ ). Оценивая вязкость смеси по данным для воздуха (при давлении 1 атм и температуре 630 К  $\eta/\rho_0 = 0,56$  см<sup>2</sup>/с), можно убедиться, что число Рейнольдса соответствует значению, использованному в расчетах (решение слабо зависит от числа Маха, поэтому моделирование по этому параметру не обязательно);  $Da = 200$ . При  $T_0 = 630$  К  $q = 4,3$ . На плоскости  $(Da, q)$  точка, соответствующая выбранным параметрам, лежит между кривыми 2 и 3 на рис. 3, т. е. смесь 10%  $\text{CH}_4$  с воздухом будет воспламеняться при «верхнем» зажигании; при зажигании снизу воспламенения не произойдет.

Таким образом, в данной работе усовершенствована численная методика, позволяющая моделировать процесс развития очага горения в закрытом сосуде на основе достаточно полных нестационарных двумерных уравнений движения реагирующего газа и производить расчет пределов воспламенения горючей смеси, исходное состояние которой является докритическим. Показано, что развитие конвекции приводит к различным концентрационным пределам при зажигании горючей смеси в верхней и нижней частях сосуда: в случае теплоизолированной верхней стенки сосуда пределы при зажигании сверху шире, чем при зажигании снизу. Конвективная природа предела воспламенения газовой горючей смеси в большом объеме подтверждена с помощью расчетов в отсутствие внешней силы. Полученные результаты свидетельствуют о возможности теоретического определения конвективных пределов воспламенения. Разработанная методика может быть приспособлена для расчета пределов в горючих смесях с учетом детальной кинетики многостадийного химического превращения.

Поступила в редакцию 18/VIII 1982

#### ЛИТЕРАТУРА

1. I. A. Lovachev, V. S. Babkin et al. Combust. Flame, 1973, 20, 259.
2. В. С. Бабкин, А. В. Вьюн. ФГВ, 1976, 12, 2, 222.
3. I. A. Lovachev. Combust. Sci. and Techn., 1979, 20, 209.
4. В. Н. Кривулин, Е. А. Кудрявцев и др. ФГВ, 1981, 17, 1, 47.
5. Г. М. Махвиладзе, И. П. Николова. Препринт ИПМ АН СССР, № 189, 1981.
6. Г. М. Махвиладзе, И. П. Николова. ФГВ, 1982, 18, 5.
7. Г. М. Махвиладзе, С. Б. Щербак. Препринт ИПМ АН СССР, № 113, 1978.
8. И. М. Желева, Г. М. Махвиладзе, Х. И. Христов. Теоретична и приложна механика, 1979, 3, 76.
9. Г. М. Махвиладзе, И. П. Николова. Изв. АН СССР, МЖГ, 1981, 5, 3.
10. П. Роуч. Вычислительная гидродинамика. М.: Мир, 1980.
11. В. С. Бабкин, А. В. Вьюн.— В кн.: Горение и взрыв. М.: Наука, 1972.
12. Я. Б. Зельдович, Г. И. Баренблатт и др. Математическая теория горения и взрыва. М.: Наука, 1980.

### ВОСПЛАМЕНЕНИЕ ДИСПЕРСНЫХ ГЕТЕРОГЕННЫХ СИСТЕМ С ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫМИ РЕАКЦИЯМИ

А. Н. Золотко, Я. И. Вовчук

(Одесса)

Во многих практически важных случаях гетерогенного горения и катализа конечный продукт образуется через промежуточную стадию. Такие процессы можно схематически представить двумя последовательными реакциями:



При анализе процессов с последовательными реакциями, как отмечалось в работе [1], основная задача состоит в том, чтобы найти критерии, которые позволяют установить, какая из реакций является ведущей. В настоящей работе эта задача решается применительно к проблеме воспламенения дисперсных гетерогенных систем (ДС) — одиночная частица, конгломерат частиц, газовзвесь частиц — с учетом их отличительных особенностей.

Пусть на поверхности сферических частиц, составляющих дисперсную систему, протекает двухстадийный процесс, первая стадия которого сильно экзотермична ( $Q_1 \gg 0$ ), причем накопление продукта  $Y$  вызывает торможение этой стадии по степенному закону, а реакция (II) имеет нулевой порядок по продуктам  $Y$  и  $Z$  ( $Q_2 \cong 0$ ).