

3. Горохов В. М., Ковальченко М. С. // Реологические модели и процессы деформирования пористых порошковых и композиционных материалов.— Киев: Наук. думка, 1985.
4. Буцацкий Л. М., Столин А. М., Худяев С. И. Уплотнение порошкового материала при неоднородном распределении плотности для различных режимов горячего прессования/АН СССР. ОИХФ.— Препр.— Черноголовка, 1986.
5. Вилсон Д. Р. Структура и свойства жидких металлов и сплавов.— М.: Металлургия, 1973.
6. Зельдович Я. Б., Баренблатт Г. И. и др. Математическая теория горения и взрыва.— М.: Наука, 1980.
7. Chong T. S., Christiansen E. B., Baer A. D. Polim. Sci., 1971, 15, 2007.
8. Хайкин Б. И. // Процессы горения в химической технологии и металлургии.— Черноголовка, 1975.
9. Чудновский А. Ф. Теплофизические характеристики дисперсных материалов.— М.: Физматгиз, 1962.
10. Дульнев Г. Н., Заричняк Ю. П. Теплопроводность смесей и композиционных материалов.— Л.: Энергия, 1974.
11. Миснар А. Теплопроводность твердых тел, жидкостей, газов и их композиций.— М.: Мир, 1968.
12. Александров В. В., Давыденко А. А., Коваленко Ю. А. и др. ФГВ, 1984, 20, 1, 27.
13. Шкадинский К. Г., Лебедева М. И. ФГВ, 1975, 11, 4, 530.

*Поступила в редакцию 5/1 1988,  
после доработки — 12/IV 1988*

УДК 536.46 : 533.6 + 534.222.2

## О РАСПРОСТРАНЕНИИ ФРОНТА ЭКЗОТЕРМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ В СПОНТАННОМ РЕЖИМЕ И ВОЗМОЖНОСТЯХ МОДЕЛИРОВАНИЯ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ

*Н. И. Кидин, В. Б. Либрович, И. А. Филлимонов*  
(Москва)

1. Вопрос о спонтанном режиме распространения экзотермической реакции рассмотрен в [1, 2] для плоского, движущегося с постоянной скоростью фронта при линейной зависимости скорости реакции от температуры и начальном распределении экспоненциального вида. В [3] исследовано асимптотическое решение задачи для общего случая нестационарного, искривленного фронта с линейной по температуре скоростью химического тепловыделения. При некоторых условиях решение может быть найдено и в точном виде, если известно начальное распределение концентрации  $a_0(\vec{x})$  и температуры  $T_0(\vec{x})$  в среде.

Пусть функция скорости тепловыделения химической реакции удовлетворяет соотношению

$$\left| \frac{\text{grad } T_b}{\Phi(T_b)} - \frac{\text{grad } T_0}{\Phi(T_0)} \right| \gg \left| \frac{c}{Q} \text{grad } T_t \int_{T_0(\vec{x})}^{T_b(\vec{x})} \frac{1}{\Phi^2} \left( \frac{\partial \Phi}{\partial a} \right)_T (dT) \right|, \quad (1)$$

т. е. считаем, что влиянием концентрации реагента на  $\Phi(a[T, \vec{x}], T)$  можно пренебречь по сравнению с температурной зависимостью (это часто имеет место на практике) или что температура кажущегося фронта спонтанной волны  $T_b$  постоянна ( $\text{grad } T_b = 0$ ). В соответствии с определением спонтанной скорости фронта [1, 2]

$$u_{sp} = \frac{\text{grad } t_i}{(\text{grad } t_i)^2}, \quad t_i = \int_{T_a(\vec{x})}^{T_b(\vec{x})} \frac{cdT'}{\Phi(T', a)}; \quad (2)$$

дифференцируя выражение для периода индукции  $t_i$  по пространствен-

ной переменной  $\vec{x}$  (здесь параметр), получим в общем виде

$$\vec{u}_{sp} = - \frac{\text{grad}(T_0)/\Phi(T_0) - \text{grad}(T_b)/\Phi(T_b)}{\{\text{grad}(T_0)/\Phi(T_0) - \text{grad}(T_b)/\Phi(T_b)\}^2} \frac{1}{c}. \quad (3)$$

Если справедливо неравенство

$$\left| \frac{\Phi(T_b) \text{grad} T_0}{\Phi(T_0) \text{grad} T_b} \right| \gg 1, \quad (4)$$

то формула (3) совпадает с асимптотическим решением, полученным ранее (см. [3]). Выражение (3) позволяет определить  $\vec{u}_{sp}(\vec{x})$  по заданным полям  $T_0(x)$  и  $a_0(x)$ . Выполнение соотношения (4) обеспечивается в двух важных реальных ситуациях: когда во фронте поддерживается постоянной  $T_b$  и когда функция тепловыделения  $\Phi$  резко возрастает с увеличением температуры:

$$\frac{\Phi(T_b)}{\Phi(T_0)} \gg 1, \quad \text{когда} \quad \left| \frac{\text{grad} T_0}{\text{grad} T_b} \right| \simeq 1. \quad (5)$$

В работе [3] рассматривался случай, соответствующий условию (5). При этом для определения  $\vec{u}_{sp}$  оказалось достаточным знать лишь исходное поле температуры  $T(x)$ .

Положим далее:

$$\begin{aligned} \Phi(T) &= k(T - T_{00}), \quad T_{00} \leq T < T_b, \\ \Phi(T) &\equiv 0, \quad T \geq T_b, \end{aligned} \quad (6)$$

где  $T_{00}$  — температура бесконечно удаленных точек. Исследуем задачу в условиях подобия исходных полей концентрации и температуры:

$$T_b = T_0(\vec{x}) + \frac{Q a_0(\vec{x})}{c} \equiv \text{const}, \quad \text{grad} T_b = 0. \quad (7)$$

Из (2) найдем

$$t_i = \frac{c}{k} \ln \left\{ \frac{T_b - T_{00}}{T_0(\vec{x}) - T_{00}} \right\}, \quad (8)$$

причем минимальное значение  $t_i = t_i^{\min}$  достигается в точках максимума начального распределения  $T_0^{\max}(\vec{x})$ ; это означает, что в этих точках фронт появится раньше, чем в других. Отметим, что говорить о фронте реакции, определяемом соотношением (1), в моменты времени, предшествующие  $t_i^{\min}$ , не имеет смысла, так как во всей реагирующей среде еще нет точек, в которых было бы достигнуто конечное состояние — температура  $T_b$ .

Для распространения кажущегося фронта химического превращения с  $|\vec{u}_{sp}| = \text{const}$  можно выразить период индукции  $t_i$  согласно определению  $\vec{u}_{sp}$  (2):

$$t_i = t_i^{\min} + \frac{|\vec{x} - \vec{x}_\Phi^0|}{u_{sp}}, \quad (9)$$

где  $\vec{x}_\Phi^0$  — положение фронта при  $t_i = t_i^{\min}$ , и из выражений (8) и (9) получить, что процесс с постоянной скоростью возможен лишь тогда, когда в начальный момент температура распределена в пространстве по закону

$$T_0(\vec{x}) = T_{00} + (T_0^{\max} - T_{00}) \exp \left\{ - \frac{k |\vec{x} - \vec{x}_\Phi^0|}{u_{sp} c} \right\}. \quad (10)$$

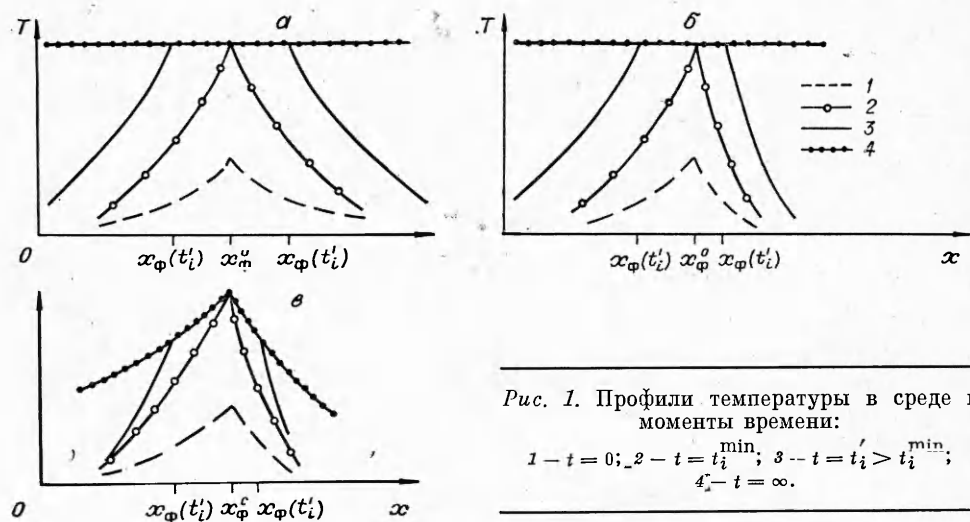


Рис. 1. Профили температуры в среде в моменты времени:

1 -  $t = 0$ ; 2 -  $t = t_i^{\min}$ ; 3 -  $t = t_i' > t_i^{\min}$ ; 4 -  $t = \infty$ .

Предполагается для простоты, что распределение  $T_0(\vec{x})$  имеет только один максимум. В частном случае плоского фронта выражение (10) согласуется с начальным профилем температуры, полученным в [1, 2].

Чтобы определить, каким образом изменяется со временем поле температуры, будем вести отсчет времени  $t$  от момента, когда  $t_i = t_i' \geq t_i^{\min}$ , и найдем

$$T(\vec{x}, t_i) = T_{00} + (T_b - T_{00}) \exp \left\{ - \frac{k |\vec{x} - \vec{x}_\phi(t_i')|}{u_{sp} c} \right\}, \quad (11)$$

где

$$|\vec{x} - \vec{x}_\phi^0| > |\vec{x} - \vec{x}_\phi(t_i')|, \quad |\vec{x}_\phi(t_i') - \vec{x}_\phi^0| = u_{sp}(t_i' - t_i^{\min}).$$

Выражение (11) описывает эволюцию начального распределения (10). Можно выделить два этапа: на первом за конечное время  $t_i^{\min}$  формируется фронт волны и достигается максимальная температура  $T_b$ , на втором фронт распространяется с постоянной скоростью  $u_{sp}$  и  $T_b = \text{const}$  в виде концентрических окружностей (на плоскости) или сфер (в пространстве). Процесс образования и распространения фронта в одномерном случае проиллюстрирован на рис. 1, а.

Если необходимо получить кажущийся фронт с переменной, изменяющейся по определенному закону скоростью

$$\vec{u}_{sp} = \vec{u}_{sp}(\vec{x}), \quad (12)$$

то величина периода индукции химической реакции должна будет удовлетворять более общему, чем выражение (9), соотношению

$$t_i = t_i^{\min} + \int_{\vec{x}_\phi}^{\vec{x}} \frac{\vec{u}_{sp} d\vec{x}'}{u_{sp}^2(\vec{x}')}, \quad \vec{u}_{sp}(\vec{x}) d\vec{x} \geq 0. \quad (13)$$

Такая же ситуация имеет место при неравномерном распределении в пространстве температуры конечного состояния  $T_b(\vec{x})$ , когда соотношение (7) не выполняется.

Приведем результаты для  $T_b = \text{const}$ :

$$T_0(\vec{x}) = T_{00} + (T_0^{\max} - T_{00}) \exp \left\{ - \frac{k}{c} \int_{\vec{x}_\phi}^{\vec{x}} \frac{\vec{u}_{sp} d\vec{x}'}{u_{sp}^2(\vec{x}')} \right\}, \quad (14)$$

$$T(\vec{x}, t_i) = T_{00} + (T_b - T_{00}) \exp \left\{ -\frac{k}{c} \int_{\vec{x}_\Phi(t_i)}^{\vec{x}} \frac{\vec{u}_{sp} d\vec{x}'}{u_{sp}^2(\vec{x}')} \right\} \quad (15)$$

и равномерного исходного распределения реагента в среде, когда

$$T_b = T_b(\vec{x}) = T_0(\vec{x}) + Q/c, \quad a_0(\vec{x}) \equiv 1, \quad (16)$$

$$T_0(\vec{x}) = T_{00} + \left[ \exp \left\{ \frac{k}{c} \int_{\vec{x}_0}^{\vec{x}} \frac{\vec{u}_{sp} d\vec{x}'}{u_{sp}^2(\vec{x}')} \right\} \left( 1 + \frac{Q/c}{T_0^{\max} - T_{00}} \right) - 1 \right]^{-1}, \quad (17)$$

$$T(\vec{x}, t_i) = T_{00} + (T_b(\vec{x}) - T_{00}) \exp \left\{ -\frac{k}{c} \int_{\vec{x}_\Phi(t_i)}^{\vec{x}} \frac{\vec{u}_{sp} d\vec{x}'}{u_{sp}^2(\vec{x}')} \right\}. \quad (18)$$

Здесь  $\vec{x}_\Phi(t_i)$  — положение кажущегося фронта в момент времени  $t_i = t_i' \geq t_i^{\min}$ .

На рис. 1, б, в представлены распределения температуры в различные моменты времени, соответствующие выражениям (14), (15), (17), (18). Несмотря на существенное отличие от случая распространения фронта с постоянной скоростью  $u_{sp}$ , эволюция температурных профилей происходит в два этапа. Однако теперь волновой фронт представляет собой несимметричные в общем случае кривые или поверхности. При этом различные точки фронта могут как замедляться, так и ускоряться в процессе движения. Критерием различия этих режимов является неравенство

$$\frac{d|\vec{u}_{sp}|}{dn_{sp}} \geq 0, \quad (19)$$

$$\vec{n}_{sp} = \frac{\vec{u}_{sp}}{|\vec{u}_{sp}|}. \quad (20)$$

При положительной величине производной (19) фронт химической реакции будет ускоряться в рассматриваемой области реагирующей среды, а при отрицательной — замедляться. Равенство отвечает распространению спонтанной волны в данной малой области пространства с постоянной скоростью.

В задаче о спонтанном распространении фронта экзотермической химической реакции критерию (19), согласно соотношению (3), соответствуют условия: ускорение

$$(g/f) > 1,$$

замедление

$$(g/f) < 1, \quad (21)$$

где

$$g = \text{grad } \vec{n}_{sp} \left( \frac{1}{|\text{grad } T_0|} \right) = \frac{(\text{grad } |\text{grad } T_0|) \text{grad } T_0}{|\text{grad } T_0|^3},$$

$$f = \frac{1}{\Phi_e} \left( \frac{d\Phi_e}{dT_0} \right), \quad \Phi_e = \begin{cases} \Phi(T_0) & \text{при } T_b = \text{const}, \\ [1/\Phi(T_0) - 1/\Phi(T_b)]^{-1} & \text{при } a_0 \equiv 1. \end{cases}$$

К аналогичному выводу можно прийти и из простых качественных физических соображений, поскольку ясно, что чем меньше перепад исходной температуры в некоторой области в направлении распространения фронта, тем больше его скорость в этой области. С другой стороны, чем меньше скорость тепловыделения, тем медленнее распространяется волна. Поэтому при более быстром, чем скорость тепловыделения, уменьше-

нии перепада температуры скорость фронта химической реакции будет расти, а в случае преобладающего уменьшения функции тепловыделения с расстоянием скорость кажущегося фронта будет падать, что соответствует условиям (21).

В заключение этого пункта отметим, что проведенное исследование не исчерпывает вопроса о распространении спонтанных волновых структур, поскольку во многих случаях важную роль играют газодинамические эффекты, и тогда необходим учет сжимаемости реагирующей среды. Кроме того, представляет интерес случай совершенно произвольных исходных полей концентрации и температуры, а также возможность моделирования волновых фронтов заданной формы.

2. В [1—3] показано, что задача о распространении спонтанного фронта экзотермической химической реакции может быть поставлена двумя способами, отличающимися друг от друга исходными данными и искомыми величинами. Так, если в начальный момент времени в реагирующем пространстве задано распределение температуры и концентрации реагента, то по нему можно определить поле скорости фронта спонтанной волны в последующие моменты времени (см. выше). Если же известным считается поле скорости фронта химического превращения (или форма фронта волны как функция времени), то искомыми величинами будут начальное распределение температуры и концентрации в среде, обеспечивающие требуемую скорость фронта. Ниже основное внимание уделяется именно последнему случаю, т. е. определению полей температуры и концентрации реагентов в среде, обеспечивающих заданную скорость и форму распространения фронта волны экзотермической реакции в спонтанном режиме [1, 2].

Рассмотрим две наиболее простые ситуации: когда необходимо получить волновой фронт, распространяющийся, сохраняя подобие, в форме эллипса и в форме параболы. Это позволит на конкретных примерах показать, каким образом решается задача моделирования заданной формой и скоростью фронта спонтанной волны.

**Распространение фронта в форме эллипса.** Требование подобия в процессе распространения фронта в пространстве приводит к необходимости рассматривать также фронты, отдельные точки которых движутся с различными скоростями, являющимися функциями координат плоскости —  $u_{sp} = u_{sp}(x, y)$ . Предположим также, что имеется подобие полей исходных распределений температуры и концентрации реагирующего вещества; тогда температура продуктов  $T_b = \text{const}$  [2, 3].

Итак, пусть в начальный момент времени  $t_0$  волновой фронт представляет собой эллипс с полуосями  $a$  и  $b$ . Уравнение фронта запишется в виде

$$\frac{x_0^2}{a^2} + \frac{y_0^2}{b^2} = 1, \quad b < a. \quad (22)$$

Условие подобия при распространении волны в форме эллипса означает, что отношение его полуосей остается постоянным на протяжении всего процесса химического превращения. Тогда в любой последующий момент времени уравнение фронта химической реакции находится по выражению

$$\left(\frac{b}{a}\right)^2 \frac{x^2}{(ut)^2} + \frac{y^2}{(ut)^2} = 1, \quad t > 0, \quad (23)$$

где  $u$  — минимальная скорость распространения точек фронта. В данную точку пространства фронт волны реакции придет за время

$$t = \frac{b}{u} \sqrt{\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2}}. \quad (24)$$

С другой стороны, период индукции химической реакции определяется выражением (2). Причем в рассматриваемом случае функция скорости

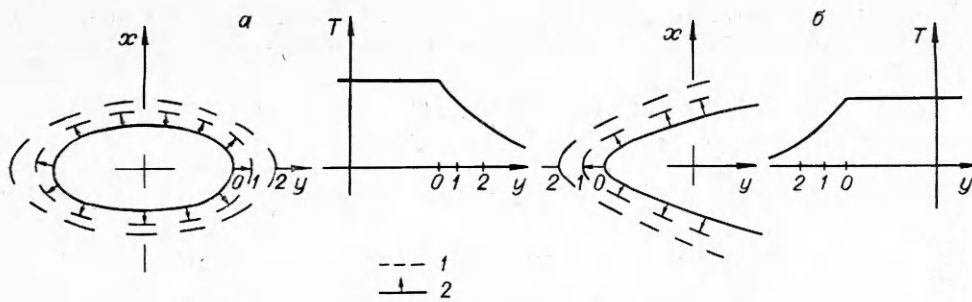


Рис. 2. Эллиптический (а) и параболический (б) фронты пламени.  
1 — изотермы; 2 — вектор скорости точки волнового фронта.

тепловыделения  $\Phi$  считается зависящей только от одной переменной  $T$  в силу подобия начальных распределений концентрации и температуры. Для облегчения математических выкладок рассмотрим снова  $\Phi(T)$  линейного вида (6), что, однако, не вносит принципиальных изменений в ход решения (см. [3]). Совокупность уравнений (2), (6), (24) позволяет найти искомое начальное распределение температуры

$$T_0(x, y) = T_{00} + (T_b - T_{00}) \exp \left\{ -\frac{kb}{u} \left( \sqrt{\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2}} - 1 \right) \right\}. \quad (25)$$

Легко заметить, что поле распределения температуры (6) имеет изотермы в виде подобных эллипсов, значение температуры на которых уменьшается по мере удаления от фронта по экспоненциальному закону (рис. 2, а).

Используя определение (2), можно вычислить скоростное поле  $u_{sp}(x, y)$  точек фронта спонтанной волны

$$u_{sp,x} = u \frac{x}{a^2 b} \frac{\sqrt{\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2}}}{\left( \frac{x^2}{a^4} + \frac{y^2}{b^4} \right)}, \quad u_{sp,y} = u \frac{y}{b^3} \frac{\sqrt{\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2}}}{\left( \frac{x^2}{a^4} + \frac{y^2}{b^4} \right)}. \quad (26)$$

Общий вид годографа скорости для некоторого положения фронта химической реакции в рассматриваемом случае показан на рис. 2. Заметим, что задание формы фронта как функции времени (24) равносильно заданию поля скоростей  $u_{sp}(x, y)$  (26).

**Параболический фронт, сохраняющий подобие в процессе распространения.** Если форма фронта пламени в начальный момент времени определяется уравнением

$$y_0 = \frac{x_0^2}{a} - b, \quad t = t_0, \quad (27)$$

то впоследствии должно быть

$$y + u_0 t = \frac{x^2}{a}, \quad u_0 t_0 = b. \quad (28)$$

Соотношение (28) отражает сдвиг исходной параболы (27) вдоль оси  $Oy$  с некоторой постоянной характерной скоростью  $u_0$  (см. рис. 2, б), при этом условие подобия формы волнового фронта заведомо выполняется. Начальное распределение температуры, обеспечивающее распространение фронта в форме (28), может быть получено из решения системы уравнений (2), (6), (28). Изотермами исходного поля температуры будут параболы

$$T_0(x, y) = T_{00} + (T_b - T_{00}) \exp \left[ -\frac{k}{cu_0} \left( \frac{x^2}{a} - y - b \right) \right], \quad (29)$$

значение температуры на которых также экспоненциально уменьшается с удалением от фронта в область непрореагировавшей среды (см. рис. 2, б).

Параболической форме распространяющейся волны реакции соответствует поле скоростей  $\vec{u}_{sp}(x, y)$ :

$$u_{sp,x} = u_0 \frac{2(x/a)}{1 + 4(x/a)^2}, \quad u_{sp,y} = -u_0 \frac{1}{1 + 4(x/a)^2}, \quad (30)$$

его вид для точек фронта в некоторый момент времени представлен на рис. 2, б.

В том, что исходные температурные распределения (25), (29) действительно обеспечивают соответствующие скорости фронта спонтанной волны (26), (30), можно убедиться, если решить прямую задачу, т. е. считать заданными начальные распределения (25) или (29), и с помощью соотношения (3), положив в нем  $T_b = \text{const}$  (так как начальные поля температуры и концентрации подобны), вычислить соответствующие пространственные распределения скорости спонтанного фронта  $\vec{u}_{sp}$ , совпадающие с выражениями (26), (30).

Проведенный анализ свидетельствует о том, что вопрос о получении заданных пространственных волновых конфигураций может быть разрешен путем создания в начальный момент определенного поля температуры и концентрации в реагирующей среде. Актуальность постановки такой задачи вызвана развитием лазерной техники и, в частности, возможностью организации начальных неравномерных распределений температуры и реагента при помощи резонансного лазерного облучения газовой среды. Экспериментально показано [4], что таким способом можно инициировать в потоке углекислого газа пространственные волновые распределения, распространяющиеся в среде по механизму, аналогичному спонтанному.

Таким образом, существует практическая возможность получения спонтанных волновых структур и использования их для создания и моделирования сложных газодинамических эффектов, возникающих при столкновении ударных и детонационных волн, движении тел сложной формы в газе с большими скоростями и т. д.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Зельдович Я. Б. Классификация режимов экзотермической реакции в зависимости от начальных условий/АН СССР. ОИХФ.—Препр.—Черноголовка, 1978.
2. Зельдович Я. Б., Баренблатт Г. И., Либрович В. Б. и др. Математическая теория горения и взрыва.— М.: Наука, 1980.
3. Филимонов И. А. // Химическая физика процессов горения и взрыва. Кинетика и горение: Материалы VIII Всесоюз. симп. по горению и взрыву.— Черноголовка, 1986.
4. Козлов Г. И., Кузнецов В. И. Квантовая электроника, 1982.

Поступила в редакцию 2/XI 1987