

О КРИТИЧЕСКОМ УСЛОВИИ ЗАЖИГАНИЯ
ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ ГОРЯЧИМ ОЧАГОМ
И ЗАКОНОМЕРНОСТЯХ УСТАНОВЛЕНИЯ РЕЖИМА
СТАЦИОНАРНОГО РАСПРОСТРАНЕНИЯ ПЛАМЕНИ

В. Н. Виллюнов

(Томск)

Фронт пламени в смеси возникает в результате локального источника зажигания (например, искры), который инициирует реакцию в небольшом объеме газа и от которого затем происходит распространение пламени. Если линейный размер (или энергия) поджигающего источника меньше некоторой минимальной величины, то распространение пламени невозможно. Вопросы потухания и зажигания качественно исследовал Сполдинг [1—3], а режим установления плоского пламени расчетным путем изучен Я. Б. Зельдовичем и Г. И. Баренблаттом [4].

В настоящей статье в развитие работы [4] расчетным путем исследуются режимы установления стационарного пламени в газовой смеси, а также находятся границы потухания и зажигания. Рассматриваются три случая: сферически-симметричный, цилиндрический и плоский.

Зажигание горячим объемом газа. Пусть в некотором объеме радиуса r_0 находятся горячие продукты реакции, имеющие температуру $T_m = \frac{Q}{c} + T_n$. В момент времени $t=0$ горячий объем вносится в безграничное пространство, заполненное горючей газовой смесью (температуры $T_n < T_m$). Требуется определить тепловой режим газовой смеси в последующие моменты времени.

Можно ожидать, что воспламенение смеси произойдет в том случае, когда горячий объем обладает достаточным запасом энергии, либо когда радиус объема превышает некоторое критическое значение.

Процесс установления стационарного режима распространения пламени описывается системой нелинейных уравнений параболического типа. Одно из них — уравнение теплопроводности, другие — уравнения диффузии, описывающие диффузию исходных, промежуточных и конечных продуктов реакции в зоне пламени.

Ниже рассматриваются простые реакции, когда концентрации исходных, промежуточных и конечных продуктов связаны линейными соотношениями. Система уравнений имеет вид:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{m}{r} \cdot \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{Q}{\rho c} (1 - \eta)^n z e^{-\frac{E}{RT}};$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 \eta}{\partial r^2} + \frac{m}{r} \frac{\partial \eta}{\partial r} \right) + \frac{z}{\rho} (1 - \eta)^n e^{-\frac{E}{RT}},$$

где z — предэкспонент, зависящий от давления; ρ — плотность; c — теплоемкость; n — порядок химической реакции; E — энергия активации; κ — температуропроводность; D — коэффициент диффузии; η — глубина выгорания; r — пространственная координата; t — время; T — температура. Для плоского пламени $m=0$, цилиндрического $m=1$, сферического $m=2$.

Начальные условия: $t \leq 0, T = T_m, \eta = 1$ при $0 \leq r \leq r_0$; $T = T_n, \eta = 0$ при $r > r_0$.

Краевые условия:

$$1) \text{ при } r = 0 \quad \frac{\partial T}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial \eta}{\partial r} = 0, \quad t \geq 0;$$

$$2) \text{ при } r \rightarrow \infty \quad \frac{\partial T}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial \eta}{\partial r} = 0, \quad t \geq 0.$$

В момент времени $t=0$ имеется разрыв в начальных условиях.

Перейдем в уравнениях, а также в дополнительных условиях к безразмерным переменным:

$$\theta = \frac{E}{RT_m^2} (T_m - T), \quad \tau = t/t_a, \quad \xi = x/x_a,$$

где t_a — время адиабатического периода индукции, а x_a — тепловая ширина релаксации:

$$t_a = \frac{RT_m^2 c \rho}{E Q z} e^{\frac{E}{RT}}; \quad x_a = \sqrt{\kappa t_a}.$$

В безразмерных переменных уравнения и дополнительные условия имеют следующий вид:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} + \frac{m}{\xi} \frac{\partial \theta}{\partial \xi} - (1 - \eta)^n e^{-\frac{\theta}{1 - \eta^\theta}}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial \tau} = \text{Le} \left(\frac{\partial^2 \eta}{\partial \xi^2} + \frac{m}{\xi} \frac{\partial \eta}{\partial \xi} \right) + \frac{(1 - \eta)^n}{\theta_n} e^{-\frac{\theta}{1 - \eta^\theta}}. \quad (2)$$

Начальные условия: $\theta(\xi, 0) = 0, \eta(\xi, 0) = 1, 0 \leq \xi \leq \xi_0$;
 $\theta(\xi, 0) = \theta_n, \eta(\xi, 0) = 0, \xi > \xi_0$.

Краевые условия:

$$1) \quad \frac{\partial \theta(0, \tau)}{\partial \xi} = 0, \quad \frac{\partial \eta(0, \tau)}{\partial \xi} = 0, \quad \tau \geq 0;$$

$$2) \quad \frac{\partial \theta(\infty, \tau)}{\partial \xi} = 0, \quad \frac{\partial \eta(\infty, \tau)}{\partial \xi} = 0, \quad \tau \geq 0.$$

Решение поставленной задачи зависит от шести безразмерных параметров:

$$\theta_n = \frac{E}{RT_m^2} \frac{Q}{c}, \quad \xi_0 = \frac{r_0}{x_a}, \quad \gamma = \frac{RT_m}{E}, \quad \text{Le} = \frac{D}{\kappa}, \quad m, \quad n,$$

т. е. $\theta = \theta(\xi, \tau, \theta_n, \xi_0, \gamma, \text{Le}, m, n)$; $\eta = \eta(\xi, \tau, \theta_n, \xi_0, \gamma, \text{Le}, m, n)$.

Чтобы определить скорость распространения фронта пламени (если,

конечно, она существует), необходимо проследить за скоростью перемещения фиксированной точки профиля безразмерной температуры или концентрации. Разрешая, например, уравнение изотермы

$$\theta(\xi, \tau, \theta_n, \xi_0, \gamma, Le, m, n) = \text{const}$$

относительно ξ и дифференцируя по τ , получим

$$\frac{d\xi}{d\tau} = \varphi(\tau, \theta_n, \xi_0, \gamma, Le, m, n),$$

где φ — безразмерная скорость распространения пламени.

Переходя к размерным переменным, найдем:

$$u = \sqrt{\frac{\lambda E Q z}{R T_m^2 c \rho} e^{-\frac{E}{RT_m}} \cdot \varphi(\tau, \theta_n, \xi_0, \gamma, Le, m, n)}.$$

Очевидно, если существует стационарная скорость распространения пламени, то предельный вид функции φ не будет практически зависеть от ξ_0, m , поэтому

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \varphi = \varphi_c(\theta_n, \gamma, Le, n),$$

а следовательно, стационарная скорость распространения пламени определяется выражением

$$u_c = \sqrt{\frac{\lambda E Q z}{R T_m^2 c \rho} e^{-\frac{E}{RT_m}} \cdot \varphi_c(\theta_n, \gamma, Le, n)}. \quad (3)$$

В настоящее время вид функции φ_c установлен только в одном частном случае для плоского пламени. Я. Б. Зельдович и Д. А. Франк-Каменецкий [5—7] нашли, что если $Le=1, \gamma=0, n$ — целое, то

$$\varphi_c = \sqrt{\frac{2n!}{\theta_n^{n+2}}}. \quad (4)$$

В общем случае выражение для (3) может быть найдено только численно. При этом возможны два пути: либо решение задачи на собственное значение для обыкновенных нелинейных уравнений (метод указан в [7]), либо решение нестационарной системы (1). Последний путь дает больше информации, ибо позволяет исследовать особенности распространения пламени вблизи границ потухания и зажигания. Это обстоятельство также отмечается в работах [1, 4].

Если значение безразмерной ширины очага ξ_0 меньше некоторого критического, то $\lim_{\tau \rightarrow \infty} \varphi \rightarrow 0$. Это означает, что в данном случае по исходной смеси пламя не распространяется, а следовательно, критический размер горячего объема определяется функциональной связью

$$\xi_0^* = f(\theta_n, \gamma, Le, n, m),$$

т. е. зависит от пяти безразмерных параметров. После перехода к размерным переменным получаем

$$r_0^{*2} = V \lambda t_a \cdot f(\theta_n, \gamma, Le, n, m),$$

но из (3) имеем

$$\sqrt{\frac{t_a}{\lambda}} = \frac{1}{u_c} \cdot \varphi_c(\theta_n, \gamma, Le, n).$$

Таким образом, устанавливается связь между критическим размером и стационарной скоростью распространения пламени:

$$r_0^* = \frac{\lambda}{u_c} \cdot f(\theta_n, \gamma, Le, n, m) \cdot \varphi_c(\theta_n, \gamma, Le, n).$$

Закономерности установления стационарного плоского пламени. Рассмотрим простейший пример распространения плоского пламени от горячего источника бесконечной протяженности. Для простоты анализа полученных результатов и возможности их сравнения с аналитической зависимостью φ_c , найденной Я. Б. Зельдовичем и Д. А. Франк-Камецеком, расчет проводился при следующих значениях параметров: $Le=1$, $\gamma=0$, $n=1$, $m=0$.

Для этого частного случая исходная задача записывается в виде:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} - (1 - \eta) e^{-\theta}, \quad (5)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \eta}{\partial \xi^2} + \frac{(1 - \eta)}{\theta_n} e^{-\theta}, \quad (6)$$

$$\theta(\xi, 0) = 0, \quad \eta(\xi, 0) = 1, \quad \xi < 0; \quad \theta(\xi, 0) = \theta_n, \quad \eta(\xi, 0) = 0, \quad \xi > 0;$$

$$\frac{\partial \theta(-\infty, \tau)}{\partial \xi} = \frac{\partial \theta(\infty, \tau)}{\partial \xi} = \frac{\partial \eta(-\infty, \tau)}{\partial \xi} = \frac{\partial \eta(\infty, \tau)}{\partial \xi} = 0.$$

Складывая (5) и (6), приходим к обычному линейному уравнению теплопроводности

$$\frac{\partial (\theta + \eta \theta_n)}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 (\theta + \eta \theta_n)}{\partial \xi^2},$$

которое при выбранных дополнительных условиях имеет тривиальное решение (интеграл Я. Б. Зельдовича)

$$\theta + \eta \theta_n = \theta_n.$$

Линейная связь между θ и η позволяет свести задачу к одному уравнению

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} + \frac{\theta}{\theta_n} e^{-\theta}.$$

Вводя новые масштабы $\tau' = \frac{\tau}{\theta_n}$, $\xi' = \frac{\xi}{\sqrt{\theta_n}}$, получаем

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau'} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi'^2} - \theta e^{-\theta}. \quad (7)$$

Уравнение (7) решалось численно по неявной схеме, прогонка в оба конца ($\xi' \rightarrow -\infty$ и $\xi' \rightarrow \infty$) осуществлялась по заданной точности.

В результате расчета ($\theta_n = 10$) были получены профили распределения температуры в различные моменты времени (рис. 1), путь (рис. 2) и скорость (рис. 3) двух фиксированных температур безразмерного профиля горячей области

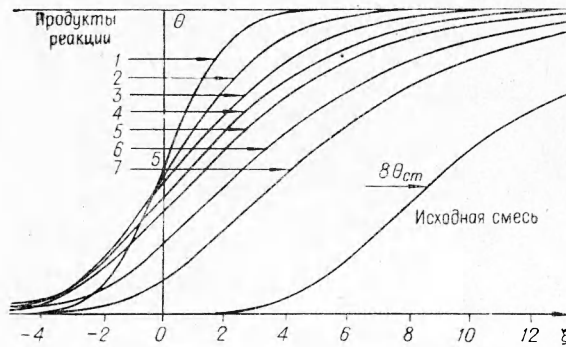


Рис. 1. Распределение $\theta(\xi)$ в разные моменты времени:
 τ равно: 1 — 1,25; 2 — 3,75; 4 — 11,25; 5 — 15; 6 — 25; 7 — 35;
 8 — 68,5.

($\theta=1$) и холодной ($\theta=9$). Из рисунков четко виден характер установления стационарного режима распространения пламени.

В таблице приводятся некоторые результаты расчета установившейся скорости распространения фиксированных точек, профили температур (горячей области $\theta=1$ и холодной $\theta=9$ для $\theta_n = 10$; $\theta=14$ для

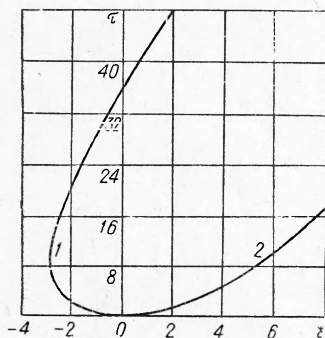


Рис. 2. Характер изменения пути фиксированных точек профиля температур.
1 — $\xi_1(\tau)$, $\theta = 1$; 2 — $\xi_9(\tau)$, $\theta = 9$.

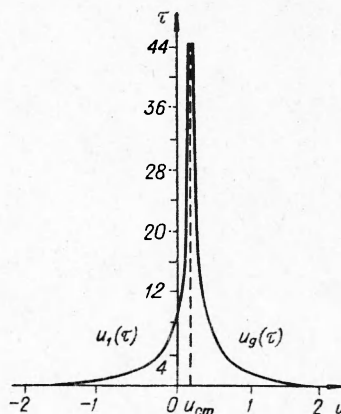


Рис. 3. Выход скорости на стационарный режим горения.

$\theta_n = 15$; $\theta = 19$ для $\theta_n = 20$), условное время установления стационарного режима и сравнение численного счета с формулой Я. Б. Зельдовича и Д. А. Франк-Каменецкого [4].

Из таблицы следует, что формула Я. Б. Зельдовича и Д. А. Франк-Каменецкого для достаточно больших θ_n дает хороший результат.

Критический размер потухания. Минимальный (критический) размер, при котором еще возможно зажигание, находился из численного решения системы (1), (2) методом проб и ошибок. Диапазон изменения параметров: $1 \leq n \leq 2$, $0 \leq m \leq 2$, $5 \leq \theta_n \leq 20$, $0 \leq \gamma \leq 0,05$, $0,5 \leq \frac{x}{D} \leq 2$.

На рис. 4 показан характер изменения температуры от времени при $\xi = \xi_0$ для $\theta_n = 10$; $n = 1$; $\gamma = 0$; $m = 0$. Четко усматривается граница потухания и зажигания ($\xi_0 = 12,25$). На основании более чем ста расчетов получена аппроксимационная зависимость ξ_0^* от θ_n , γ , n , m , $\frac{x}{D}$

$$\xi_0^* = (0,495 - 0,105n) (1 + 1,18m) (1 + 3,2\gamma) \cdot \left(\frac{x}{D}\right)^n \cdot \theta_n^{\frac{n+2}{2}} \quad (8)$$

Результаты расчетов вскрыли весьма принципиальный факт, что представление Льюиса и Эльбе [8—10] об «избыточной энтальпии» в

Параметры	θ_n		
	10	15	20
φ (горячая)	0,05247	0,02595	0,01543
φ (холодная)	0,05269	0,02608	0,01544
$\varphi_{ср}^*$	0,05288	0,02601	0,01544
φ (теория)	0,04172	0,02434	0,01581
Ошибка, %	-15	-6,4	+2,4
$\tau_{см}^{***}$	180	234	238

* На рис. 1, 2, 3 использованы ξ' и τ' координаты. Между φ' и φ существует связь $\varphi' = \sqrt{\theta_n} \cdot \varphi$.

** Здесь под временем установления режима $\tau_{см}$ подразумевается то время, при котором скорости «холодной» и «горячей» части пламени отличаются \sim на 0,5%.

