

СТРУКТУРА ПЛОСКОГО ПЛАМЕНИ БЕДНЫХ СМЕСЕЙ CS_2-O_2 НАД ПОРИСТОЙ ОХЛАЖДАЕМОЙ ГОРЕЛКОЙ

Т. В. Быстрова, В. Б. Либрович

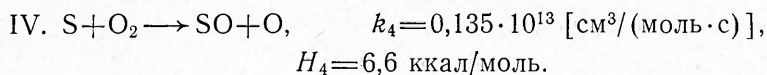
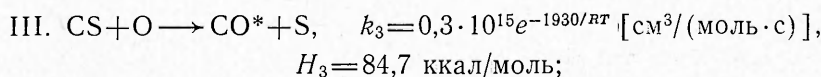
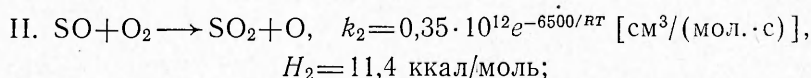
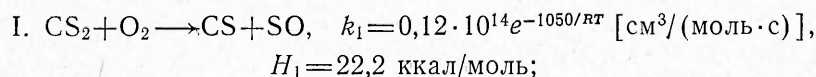
Реакция горения сероуглерода в кислороде изучалась во многих экспериментальных и теоретических работах. Достаточно хорошо исследован цепной кинетический механизм этой реакции [1, 2], включающий в себя большое число промежуточных продуктов и активных центров, и волновые процессы распространения реакции по объему смеси. Экспериментальное изучение распространения пламени в смеси CS_2-O_2 начато в [3], где отмечена способность сероуглеродного пламени к распространению в изотермических условиях. Теоретическое изучение пределов распространения такого пламени осуществлено в работе [4], в основу которой была положена упрощенная кинетическая схема реакции с положительным взаимодействием цепей.

В последнее время внимание к горению смеси CS_2-O_2 возросло в связи с созданием химических лазеров [5—7] с использованием неравновесно возбужденных продуктов реакции — молекулы окиси углерода. Представляет интерес теоретически исследовать структуру плоского пламени CS_2-O_2 , используемого для получения непрерывного лазерного излучения.

Постановка задачи

Рассматривается плоское ламинарное пламя в смеси сероуглерода с кислородом, стабилизированное на пористой охлаждаемой горелке. Через горелку в заданном соотношении подаются горючее CS_2 и окислитель O_2 с общей массовой скоростью подачи m . Поверхность горелки поддерживается при постоянной температуре T_0 . Над горелкой располагается зона химического превращения и выделения тепла, по окончании реакции образуются продукты с температурой T_R , которая зависит от состава газовой смеси и условий теплоотвода в горелку. Эта температура подлежит определению в ходе решения задачи.

Для описания структуры пламени CS_2-O_2 используется упрощенная кинетическая схема из четырех реакций с константами k_i и теплотами превращения H_i [1, 5]:



В этой схеме исходными веществами являются CS_2 и O_2 , конечными продуктами — CO^* , SO_2 , а промежуточными активными центрами — CS , O , S , SO . Она предлагалась для описания непрерывных CO -лазеров на смеси CS_2-O_2 авторами [5, 8].

Принятая кинетическая модель отличается от модели теоретического исследования [4], в котором определялась нормальная скорость рас-

пространения пламени и его пределы. Отличие заключается в том, что в рассматриваемой схеме отсутствуют реакции гибели активных центров на стенках сосуда и в тримолекулярных реакциях. Применительно к известным экспериментальным условиям работы [6], в которой наблюдалось вынужденное излучение CO^* ($p=10^{-2}$ атм, $T=1000$ К), оценка величины констант тройных соударений в расчете на один бимолекулярный акт $k_i^{TP} \cdot [M]$ показала, что скорости тримолекулярных реакций существенно ниже бимолекулярных процессов. При этом считалось, что инертной частицей M , участвующей в тримолекулярном акте, например в процессе $\text{O} + \text{O} + M \rightarrow \text{O}_2 + M$, может являться каждый компонент смеси. Для $p=10^{-2}$ атм $T=1000$ К, $[M] \approx 10^{-6}$ моль/см³. Реакциями гибели на стенках также можно пренебрегать, если размеры камеры сгорания значительно больше зоны горения. Вследствие того, что изучается стационарный процесс горения, можно также не рассматривать реакции зарождения цепей.

Перепад давления в пламени при ламинарном горении намного меньше абсолютной величины давления, так что, как обычно, будем считать $p = \text{const}$; в таком приближении поле скорости движения газа определяется уравнениями состояния, неразрывности и сохранения энергии, а уравнение движения служит для определения перепада давления в пламени в следующем приближении по числу Маха.

Структуру пламени будем описывать системой одномерных дифференциальных уравнений, в которую входят:

уравнение сохранения энергии

$$\rho \cdot \frac{du}{dt} + \rho v \cdot \frac{du}{dx} = \frac{\partial}{\partial x} \cdot (\lambda \cdot \frac{\partial T}{\partial x}) - \frac{\partial}{\partial x} \times \left(\rho \sum_i h_i Y_i V_i \right) - p \cdot \frac{\partial v}{\partial x}, \quad (1)$$

уравнение неразрывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho v)}{\partial x} = 0, \quad (2)$$

уравнение неразрывности потоков химических компонентов

$$\rho \cdot \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \rho v \cdot \frac{\partial Y_i}{\partial x} = \omega_i M_i - \frac{\partial}{\partial x} \cdot (\rho Y_i V_i) \quad (i=1, 2, \dots, N-1), \quad (3)$$

уравнение состояния

$$p = \rho RT / M_m. \quad (4)$$

Система уравнений (1) — (4) определяет $N+2$ независимых переменных, в качестве которых могут быть выбраны Y_i , ρ , T , v . Остальные величины могут быть выражены при помощи термодинамического тождества

$$u = \sum_i h_i Y_i - p/\rho, \quad (5)$$

калорического уравнения состояния

$$h_i = h_i^0 + \int_{T_0}^T c_{p_i} dt \quad (6)$$

и уравнения для скорости диффузии

$$V_i = - D_{ij} / Y_i \cdot \frac{\partial Y_i}{\partial x} - D_{ij} / M_m \cdot \frac{\partial M_m}{\partial x}. \quad (7)$$

Здесь v — линейная скорость газа; $\rho = \sum_i \rho_i$ — полная плотность газа, p — давление; λ — коэффициент теплопроводности; u — внутренняя энергия газа; x — координата вдоль камеры; t — время; R — газовая постоянная; $M_m = 1/\sum_i Y_i/M_i$ — средний молекулярный вес смеси; N — полное число компонентов; $Y_i, M_i, D_{ij}, V_i, c_{pi}, h_i, h_i^0$ — соответственно весовая доля, молекулярный вес, коэффициент диффузии, скорость диффузии, теплоемкость, тепловая функция и теплота образования компонента i ; ω_i — скорость изменения компонента i в химической реакции.

Уравнения (1)–(7) написаны для нестационарных явлений, хотя основная цель работы — исследование структуры пламени при стационарном горении. Производные по времени написаны в уравнениях главным образом потому, что при их численном решении используется метод установления — рассматривается выход на стационарный режим некоторого переходного процесса, который носит лишь вспомогательный характер.

Наибольший интерес для исследования представляют смеси со значительным избытком кислорода. Как показывают эксперименты [6, 7], именно в этих смесях наблюдаются существенные лазерные эффекты. При избытке кислорода можно ввести некоторые дополнительные упрощения: а) теплоемкость смеси определяется теплоемкостью кислорода ($c_p = c_{pO_2} = \sum_i Y_i c_{pi}$); б) средний молекулярный вес смеси слабо меняется в результате реакции ($dM_m/dt=0$); в) коэффициент диффузии каждого компонента не зависит от относительной концентрации других компонентов и определяется диффузией этого вещества в кислороде; г) теплопроводность среды определяется кислородом.

Считая, что в пламени температура не влияет на теплоемкость, а зависимость коэффициентов теплопроводности и диффузии от температур носит степенной характер [9]

$$\lambda = \lambda^* \left(\frac{T}{T^*}\right)^{0,67}, \quad D_i = D_i^* \left(\frac{T}{T^*}\right)^{1,67},$$

из (1)–(7) получим систему, определяющую поля температуры и концентраций,

$$\rho c_p \cdot \partial T / \partial t + \rho v c_p \cdot \partial T / \partial x = \partial / \partial x \cdot [\lambda^* (T/T^*)^{0,67} \cdot \partial T / \partial x] + Q, \quad (8)$$

$$\rho \cdot \partial n_i / \partial t + \rho v \cdot \partial n_i / \partial x = \partial / \partial x \cdot [\rho D_i^* (T/T^*)^{1,67} \cdot \partial n_i / \partial x] + \omega_i, \quad (9)$$

$$\rho = \rho^* (T/T^*)^{-1}, \quad (10)$$

$$\partial \rho / \partial t + \partial (\rho v) / \partial x = 0, \quad (11)$$

где $Q = -\sum_i h_i^0 \omega_i$ — суммарный тепловой эффект реакции горения; $n_i = Y_i/M_i$ — массовая доля компонента i ; ω_i — скорости изменения доли компонента i в химической реакции. ω_i для O, CS, CO, S, CS₂, CO, SO₂ и O₂ соответственно равны:

$$\omega_1 = \rho^2 (n_3 n_8 k_2 + n_4 n_8 k_4 - n_1 n_5 k_1 - n_1 n_2 k_3),$$

$$\omega_2 = \rho^2 (n_1 n_5 k_1 - n_1 n_2 k_3),$$

$$\omega_3 = \rho^2 (n_1 n_5 k_1 + n_4 n_8 k_4 - n_3 n_8 k_2),$$

$$\omega_4 = \rho^2 (n_1 n_2 k_3 - n_4 n_8 k_4),$$

$$\omega_5 = \rho^2 (-n_1 n_5 k_1),$$

$$\omega_6 = \rho^2 (n_1 n_2 k_3),$$

$$\omega_7 = \rho^2 (n_3 n_8 k_2),$$

$$\omega_8 = \rho^2 (-n_3 n_8 k_2 - n_4 n_8 k_4)$$

при этом $\sum_i \omega_i = 0$. В качестве граничных условий зададим постоянную температуру и полные (конвективные + диффузионные) потоки различных компонентов на горелку

$$x=0 \begin{cases} T = T_0, \\ mn_i^0(x=-0) = mn_i(x=+0) - \rho D_i \frac{\partial n_i}{\partial x} \end{cases} \quad (12)$$

($n_i^0 = 0$ для всех компонент, кроме CS_2 и O_2 , которыми определяется исходный состав горючей смеси) и постоянную температуру и состав смеси на бесконечности

$$x=\infty \quad dT/dx=0; \quad dn_i/dx=0 \quad i=1, 2, \dots, N. \quad (13)$$

Стационарное решение системы можно получить численно методом установления, положив $m = \rho v = \text{const}$. В начальный момент при $t=0$ должны быть заданы распределения температуры и заправочных активных центров, необходимых для начального развития цепного механизма, так как в принятой схеме химических реакций исключена реакция зарождения цепи. При решении использовались следующие начальные распределения:

$$\begin{aligned} T(x, 0) &= T^* + (T_0 - T^*) \exp(-\beta x), \\ n_1(x, 0) &= n_1^H \{1 - \exp(-\gamma x)\}, \\ n_5(x, 0) &= n_5^0, \\ n_i^H &= 0 \quad (i = 2, 3, 4, 6, 7). \end{aligned} \quad (14)$$

Здесь величина T^* соответствует некоторой характерной температуре смеси, которая будет выбрана ниже; начальное количество атомарного кислорода выбиралось так, чтобы за характерное время сдува смеси τ^* успевала развиваться цепная реакция. Концентрация O_2 рассчитывалась по балансу массы

$$M_8 n_8 = 1 - \sum_i M_i n_i.$$

Метод численного решения задачи

Численное решение задачи будем вести в безразмерных переменных, выбранных таким образом, чтобы отрезок пространственного изменения зависимых переменных, а также сами величины переменных не различались при разных вариантах расчета на многие порядки. Целесообразно выбрать следующие переменные:

$$a_i = n_i/n^*, \quad \Theta = T/T^*, \quad \tau = t/\tau^*, \quad y = x/l^*, \quad q_i = H_i n_i^*/c_p T^*,$$

$$\omega_i = \frac{D_i^*}{(v^*)^2 \tau^*} \quad (i = 1, 2, \dots, 7), \quad \omega = \kappa^*/(v^*)^2 \tau^*.$$

В качестве временного масштаба выбрана величина $\tau^* = 1/k^* n^* \rho^*$, соответствующая характерному времени реагирования компонентов в самой медленной реакции $SO + O_2 \rightarrow SO_2 + O$. Тогда характерной длиной задачи будет величина

$$l^* = v^* \tau^*.$$

Здесь n^* — концентрация подаваемого сероуглерода в горелке; ρ^* , v^* , D_i^* — соответственно плотность смеси, скорость и коэффициенты диффузии компонентов, κ^* — температуропроводность смеси при T^* .

Введем для каждой из реакций характерное время τ_i по формулам

$$\tau_1 = 1/k_1 n_1 \rho^*, \quad \tau_2 = 1/k_2 n_3 \rho^*, \quad \tau_3 = 1/k_3 n_1 \rho^*, \quad \tau_4 = 1/k_4 n_3 \rho^*.$$

В этих переменных система будет иметь вид

$$\begin{aligned} 1/\Theta \cdot \partial a_1 / \partial \tau + \partial a_1 / \partial y &= w_1 \cdot \partial / \partial y (\Theta^{0,67} \cdot \partial a_1 / \partial y) + \\ &+ \Theta^{-2} (\tau^* / \tau_2 \cdot a_3 + \tau^* / \tau_4 \cdot a_4 - \tau^* / \tau_1 \cdot a_5 - \tau^* / \tau_3 \cdot a_2), \\ 1/\Theta \cdot \partial a_2 / \partial \tau + \partial a_2 / \partial y &= w_2 \cdot \partial / \partial y (\Theta^{0,67} \cdot \partial a_2 / \partial y) + \Theta^{-2} (\tau^* / \tau_1 \cdot a_5 - \tau^* / \tau_3 \cdot a_2), \\ 1/\Theta \cdot \partial a_3 / \partial \tau + \partial a_3 / \partial y &= w_3 \cdot \partial / \partial y (\Theta^{0,67} \cdot \partial a_3 / \partial y) + \\ &+ \Theta^{-2} (\tau^* / \tau_1 \cdot a_5 + \tau^* / \tau_4 \cdot a_4 - \tau^* / \tau_2 \cdot a_3), \\ 1/\Theta \cdot \partial a_4 / \partial \tau + \partial a_4 / \partial y &= w_4 \cdot \partial / \partial y (\Theta^{0,67} \cdot \partial a_4 / \partial y) + \Theta^{-2} (\tau^* / \tau_3 \cdot a_2 - \tau^* / \tau_4 \cdot a_4), \\ 1/\Theta \cdot \partial a_5 / \partial \tau + \partial a_5 / \partial y &= w_5 \cdot \partial / \partial y (\Theta^{0,67} \cdot \partial a_5 / \partial y) + \Theta^{-2} (\tau^* / \tau_1 \cdot a_5), \\ 1/\Theta \cdot \partial a_6 / \partial \tau + \partial a_6 / \partial y &= w_6 \cdot \partial / \partial y (\Theta^{0,67} \cdot \partial a_6 / \partial y) + \Theta^{-2} (\tau^* / \tau_3 \cdot a_2), \\ 1/\Theta \cdot \partial a_7 / \partial \tau + \partial a_7 / \partial y &= w_7 \cdot \partial / \partial y (\Theta^{0,67} \cdot \partial a_7 / \partial y) + \Theta^{-2} (\tau^* / \tau_2 \cdot a_3), \end{aligned} \quad (15)$$

$$n^* \sum_{i=1}^8 a_i M_i = 1,$$

$$\begin{aligned} 1/\Theta \cdot \partial \Theta / \partial \tau + \partial \Theta / \partial y &= w \cdot \partial / \partial y (\Theta^{0,67} \cdot \partial \Theta / \partial y) + \\ &+ \Theta^{-2} (q \cdot \tau^* / \tau_1 \cdot a_5 + q_2 \cdot \tau^* / \tau_2 \cdot a_3 + q_3 \cdot \tau^* / \tau_3 \cdot a_2 + q_4 \cdot \tau^* / \tau_4 \cdot a_4). \end{aligned}$$

При известной температуре Θ плотность определится по формуле

$$\rho = \rho^* \Theta^{-1}.$$

Граничными условиями при $y=0$ и $y=\infty$ являются расход компонента i и постоянство температуры

$$\begin{aligned} y=0 & \begin{cases} a_i^0 = a_i - w_i \Theta^{0,67} \cdot \partial a_i / \partial y, \\ a_i^0 \neq 0 \quad (i=5,8), \\ \Theta = \Theta_0, \end{cases} \\ y=\infty & \begin{cases} \partial a_i / \partial y = 0, \\ \partial \Theta / \partial y = 0. \end{cases} \end{aligned} \quad (16)$$

В начальный момент времени $\tau=0$ выражения (14) примут вид

$$\begin{aligned} \Theta(y, 0) &= 1 + (\Theta_0 - 1) \exp(-\beta y), \\ a_i(y, 0) &= 0 \quad (i=2, 3, 4, 6, 7), \\ a_5(y, 0) &= a_5^0 = 1, \quad a_8(y, 0) = [1 - n^* (a_1 M_1 + M_5)] / n^* M_8, \\ a_1(y, 0) &= a_1^H \{1 - \exp(-\gamma y)\}. \end{aligned} \quad (17)$$

Уравнения (15)–(17) представляют систему параболических уравнений с переменными коэффициентами и нелинейной правой частью. Для решения таких уравнений целесообразно применение неявных схем. Будем считать, что уравнения заданы в области $0 \leq y \leq L$, $\tau \geq 0$. Разобьем отрезок $[0, L]$ на K равных частей (шагов), $r = L/K$. Точки разбиения будут иметь абсциссы $y_k = kr$, $k=0, 1, \dots, K$, ординаты $\tau_i = i d\tau$, где $d\tau$ — шаг по времени, который в дальнейшем определится устойчивостью метода счета; L определяется характерной длиной химического процесса.

Таким образом, задача сводится к численному счету уравнений типа

$$\begin{aligned} 1/\Theta \cdot \partial a_i / \partial \tau + \partial a_i / \partial y &= \omega_i \cdot \partial / \partial y \{d_i(\Theta) \cdot \partial a_i / \partial y\} + \Theta^{-2} \{\varphi_i(\Theta, a_i, a_j)\}, \\ 1/\Theta \cdot \partial \Theta / \partial \tau + \partial \Theta / \partial y &= \omega \cdot \partial / \partial y \{d(\Theta) \cdot \partial \Theta / \partial y\} + \Theta^{-2} \{\varphi(\Theta, a_i, a_j)\}. \end{aligned}$$

Используя четырехточечный шаблон, запишем в конечных разностях производные по времени и координатам

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Theta} \frac{\partial a_i}{\partial \tau} &\approx (\Theta^{-1})_k^l \left[\frac{(a_i)_{k+1}^{l+1} - (a_i)_k^l}{d\tau} \right], \quad \frac{1}{\Theta} \frac{\partial \Theta}{\partial \tau} \approx (\Theta^{-1})_k^l \left[\frac{\Theta_k^{l+1} - \Theta_k^l}{dt} \right], \\ \frac{\partial a_i}{\partial y} &\approx \frac{(a_i)_{k+1}^{l+1} - (a_i)_{k-1}^{l+1}}{2r}, \quad \frac{\partial \Theta}{\partial y} \approx \frac{(\Theta)_{k+1}^{l+1} - (\Theta)_{k-1}^{l+1}}{2r}, \\ \omega_i \frac{\partial}{\partial y} \left(d_i(\Theta) \frac{\partial a_i}{\partial y} \right) &\approx \frac{\omega_i}{r} \left\{ (d_i)_{+k}^l \left[\frac{(a_i)_{k+1}^{l+1} - (a_i)_k^l}{r} \right] - \right. \\ &\quad \left. - (d_i)_{-k}^l \left[\frac{(a_i)_k^l - (a_i)_{k-1}^{l+1}}{r} \right] \right\}, \quad (18) \\ \omega \frac{\partial}{\partial y} \left(d(\Theta) \frac{\partial \Theta}{\partial y} \right) &\approx \frac{\omega}{r} \left\{ d_{+k}^l \left[\frac{\Theta_{k+1}^{l+1} - \Theta_k^l}{r} \right] - d_{-k}^l \left[\frac{\Theta_k^l - \Theta_{k-1}^{l+1}}{r} \right] \right\}, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} (d_i)_{+k} &= \frac{(d_i)_{k+1}^l + (d_i)_k^l}{2}, \quad (d_i)_{-k} = \frac{(d_i)_k^l + (d_i)_{k-1}^l}{2}, \\ d_{+k} &= \frac{(d)_{k+1}^l + (d)_k^l}{2}, \quad d_{-k} = \frac{(d)_k^l + (d)_{k-1}^l}{2}. \end{aligned}$$

Значение коэффициентов при производных возьмем на нижнем слое по времени l . В уравнениях для концентраций функции источников также берутся на нижнем слое l , а в уравнении теплопроводности — линеаризованное значение функций тепловыделения

$$\begin{aligned} \Theta^{-2} \varphi(\Theta + \Delta \Theta) &\approx \Theta^{-2} \varphi(\Theta) + [\Theta^{-2} \varphi]_{\Theta}^l \Delta \Theta + O(\Delta \Theta^2) \approx (\Theta^{-2})_k^l \varphi(\Theta_k^l) + \\ &\quad + \left\{ \left[\frac{d\varphi}{d\Theta} \cdot \Theta^{-2} \right]_{\Theta}^l \right\} \cdot (\Theta_k^{l+1} - \Theta_k^l). \quad (19) \end{aligned}$$

Подставив приближенные выражения (18)–(19) в уравнения (15), получим систему конечно-разностных уравнений. Сгруппировав в них члены в точках $k-1$, k , $k+1$, получим для определения каждой искомой функции систему трехточечных линейных алгебраических уравнений

$$A_k G_{k-1} - C_k G_k + B_k G_{k+1} = -\varphi_k \quad (k=1, 2, \dots, K-1),$$

где G_k либо $(a_i)_{k+1}^{l+1}$, либо Θ_k^{l+1} . Коэффициенты A_k , B_k , C_k и свободный член φ_k берутся на нижнем слое и считаются заданными.

Эти уравнения имеют погрешность $O(\tau+r^2)$, поэтому и граничные условия целесообразно брать с той же точностью. Условие при $y=0$ для температуры Θ выполняется точно $G_0 = \Theta_0$, а граничные условия второго рода (16) при $y=0$ выписываются в конечных разностях по той схеме, которая дает нужный порядок аппроксимации. В нашем случае первую производную по y надо аппроксимировать по трем точкам [10]. Действительно, полагая

$$\begin{aligned} G_1 &= G(y_0 + r), \quad G_2 = G(y_0 + 2r), \\ G_{k-1} &= G(y_k - r), \quad G_{k-2} = G(y_k - 2r), \end{aligned}$$

по формуле Тейлора будем иметь

$$G_1 = G_0 + rG'_0 + \frac{r^2}{2} G''_0 + O(r^3),$$

$$G_2 = G_0 + 2rG'_0 + \frac{(2r)^2}{2} G''_0 + O(r^3),$$

$$G_{K-1} = G_K - rG'_K + \frac{r^2}{2} G''_K + O(r^3),$$

$$G_{K-2} = G_K - rG'_K + \frac{r^2}{2} G''_K + O(r^3).$$

Отсюда

$$G'_0 = \frac{-G_2 + 4G_1 - 3G_0}{2r} + O(r^2),$$

$$G'_K = \frac{3G_K - 4G_{K-1} + G_{K-2}}{2r} + O(r^2).$$

Результаты расчета и их обсуждение

При численном исследовании структуры пламени в бедных смесях CS_2-O_2 варьировались:

а) массовая скорость подачи смеси через пористую горелку $m = 5 \cdot 10^{-3} \div 5 \cdot 10^{-2}$ г/(см²·с), что соответствует изменению линейной скорости v^* от 150 до 1000 см/с;

б) состав смеси; коэффициент избытка кислорода α изменялся от 3 до 10 ($\alpha = 5/2$ — стехиометрическая смесь).

В качестве температуры T^* для расчетов была выбрана характерная для экспериментов в заданном интервале α $T^* = 1000$ К. Помимо констант скоростей элементарных химических актов цепного превращения и тепловых эффектов реакций, величины которых были приведены раньше, в расчетах использовались следующие значения параметров уравнений: теплоемкость смеси $c_p = 0,24$ кал/(г·К), плотность смеси $\rho^* = 3,85 \cdot 10^{-5}$ г/см³ и коэффициенты диффузии компонентов

	O	CS	SO	S	CS ₂	CO	SO ₂	O ₂
D_i^* , см ² /с	50	30,3	25,6	25	16,4	30,4	17,8	26,8

Значения D_i^* для компонент O_2 , CS_2 , SO_2 , O , CO рассчитывались по данным [9, 12], а для CS , SO , S выбирались из условия их химического сходства с веществами CO , O_2 и O .

На рис. 1—3 приведены результаты расчета зависимости концентраций компонентов, отнесенных к начальной концентрации $n^* = [CS_2]^0$, от безразмерной координаты $y = x/v^* \tau^*$. Из рисунков видно, что пламя делится на две зоны: зону реакций I, III, IV, имеющих сравнительно малые энергии активации и поэтому идущие с большими скоростями, и зону медленной реакции II со сравнительно большой энергией активации. На рис. 1 положение зон показано приблизительно штриховой линией; на рис. 1, а первая зона из-за малых расходов смеси практически сливается с поверхностью горелки. Как видно из кинетической схемы, основной тепловой эффект химического превращения падает на долю быстрых реакций, т. е. на первую зону, а вторая зона играет управляющую роль, поставляя диффузией необходимое для существования первой зоны количество активных центров O . Таким образом, в отличие от рассмотренных ранее режимов теплового управления [11] при горении CS_2 в O_2 имеет место диффузионное управление первой зоны второй.

При малых скоростях подачи горючей смеси (см. рис. 1, а) первая зона расположена так близко у поверхности горелки, что практически

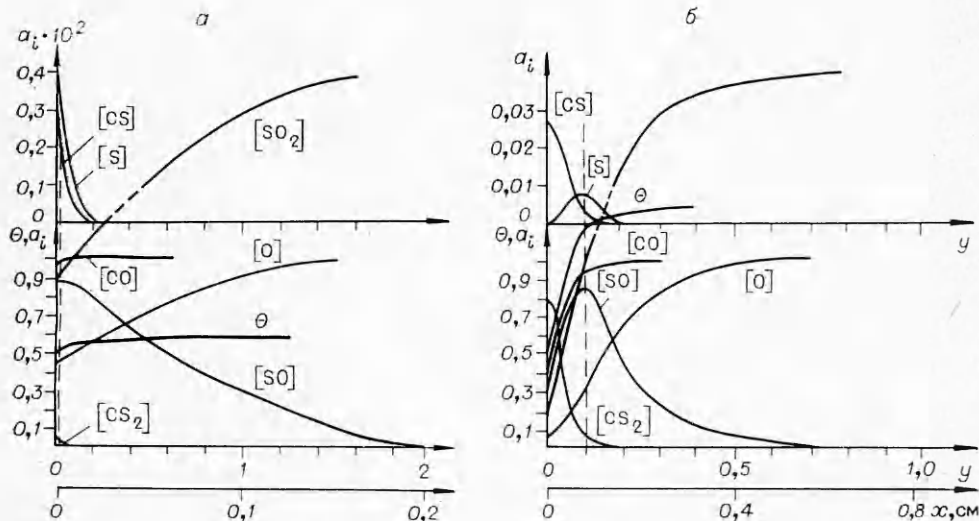


Рис. 1. Распределение концентраций компонентов и температуры в зоне пламени CS₂-O₂ при v*, равном 150 (а) и 800 см/с (б); α = 10, [CS₂]⁰ = n* = 0,2 · 10⁻² моль/г, T₀ = 500 К.

все тепло отводится в горелку и температура смеси остается близкой к T₀. С увеличением скорости подачи первая зона отдалается от горелки (см. рис. 1, б), уменьшается теплоотдача в нее и температура пламени приближается к адиабатической температуре горения. Увеличение скорости приводит также к тому, что уменьшается диффузия активных центров в область взаимодействия цепей (реакция III).

Было проведено исследование структуры пламени в зависимости от состава смеси α при фиксированном значении общей массовой скорости подачи. При приближении состава смеси к стехиометрическому, т. е. с уменьшением α, область горения существенно расширяется; реакция II, определяющая ширину второй зоны, замедляется из-за уменьшения концентрации кислорода (см. рис. 3). При этом из-за увеличения относи-

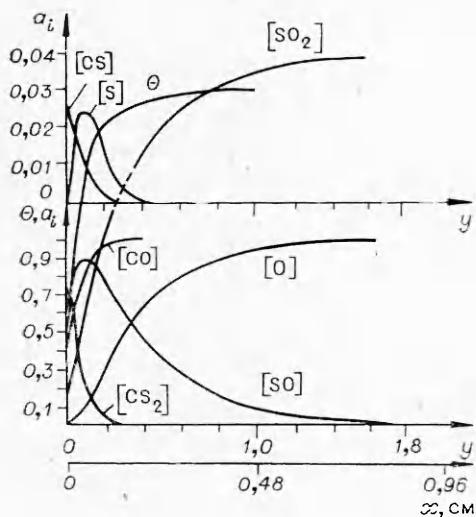


Рис. 2. Распределение концентраций и температуры в зоне пламени CS₂-O₂; α = 3, n* = 0,3 · 10⁻² моль/г, T₀ = 500 К, v* = 800 см/с.

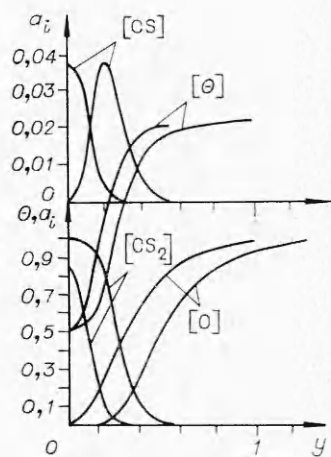


Рис. 3. Распределение концентраций компонентов CS₂, CS, O и температуры в момент отрыва пламени от горелки; v* = 10³ см/с, α = 10, T₀ = 500 К.

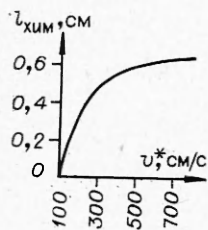


Рис. 4. Растяжение зоны химического превращения с увеличением скорости подачи горячей смеси; $\alpha=10$, $T_0=500$ К.

тельного содержания горючего (CS_2) сильно увеличивается температура горения.

При достижении скорости, близкой к скорости нормального распространения пламени в смеси CS_2-O_2 (характерное время диффузии $\tau_g = D^*/(v^*)^2$ становится больше времени реагирования $\tau_p = \tau_3 v^*$), происходит отрыв пламени от горелки. Этот эффект иллюстрирует рис. 3, на котором распределение концентраций и температуры показано в два момента времени, предшествующих отрыву. На рис. 4 показано растяжение зоны горения при увеличении скорости подачи горячей смеси $l_{хим}$, которая определяется полным расходом компонента SO .

Основываясь на полученных результатах, отметим некоторые особенности медленного горения смеси CS_2-O_2 при постоянном давлении, которые могут быть полезными при изучении лазерных эффектов.

1. С увеличением скорости подачи смеси в горелку зона химического реагирования расширяется и располагается все дальше от поверхности горелки. Это может способствовать увеличению размеров лазерной активной среды и уменьшать возможность дезактивации ведущих активных центров O неравновесно возбужденных молекул CO^* на поверхности горелки. Вместе с тем при увеличении скорости подачи происходит повышение температуры смеси, которая может вызывать заметное увеличение скорости столкновительной релаксации и непосредственно препятствовать образованию неравновесной заселенности колебательных уровней энергии активных молекул.

2. Снижения температуры в зоне реакции можно добиться увеличением коэффициента избытка кислорода, т. е. обеднением состава смеси. Однако уменьшение доли подаваемого горючего компонента приводит к уменьшению абсолютных концентраций продуктов реакции, в том числе и возбужденного CO^* . Кроме того, соответствующее увеличение доли молекулярного кислорода O_2 ускоряет реакцию II, что ведет к сужению зоны пламени.

Количественные оценки величины описанных положительных и отрицательных (в смысле получения индуцированного излучения) эффектов можно получить из приведенных в работе рисунков. Однако для полной информации, необходимой для получения непрерывного лазерного излучения на смеси CS_2-O_2 , следует выполнить исследование структуры пламени с привлечением кинетики колебательной релаксации и кинетики заселения колебательных уровней молекул CO^* в результате элементарного химического акта.

Институт прикладной механики
АН СССР,
Москва

Поступила в редакцию
30/1 1976

ЛИТЕРАТУРА

1. В. Н. Кондратьев. Кинетика и катализ, 1972, 13, 6.
2. D. W. Howgate, T. A. Bagg. J. Chem. Phys., 1973, 59, 6.
3. В. Г. Воронков, Н. Н. Семенов. ЖФХ, 1939, 13, 12.
4. Б. В. Новожилов, В. С. Посвянский. ФГВ, 1973, 9, 2.
5. H. S. Pillof, S. K. Searles, N. Djeu. Appl. Phys. Lett., 1971, 19, 1.

6. M. J. Linevsky, R. A. Carabetta. Appl. Phys. Lett., 1973, 22, 6.
7. Е. Б. Гордон, В. С. Павленко и др. ЖЭТФ, 1972, 63, 4.
8. G. Naucok, C. Morley, J. W. M. Smith. Chem. Phys. Lett., 1971, 12, 1.
9. Дж. Хиршфельдер, Ч. Кертис, Р. Берд. Молекулярная теория газов и жидкостей. М., ИЛ, 1961.
10. Б. П. Демидович, И. А. Марон, Э. З. Шувалова. Численные методы анализа. М., «Наука», 1967.
11. Р. М. Зайдель, Я. Б. Зельдович. ПМТФ, 1962, 4.
12. Дж. Хиршфельдер.— В сб.: Пламя и химическая кинетика. М., ИЛ, 1961.

ТЕПЛОВОЙ РЕЖИМ ФИЛЬТРАЦИОННОГО ГОРЕНИЯ

А. Д. Лебедев, Г. С. Сухов, Л. П. Ярин

Постановка задачи. Интенсивность процесса фильтрационного горения определяется кинетикой химических реакций, фильтрацией газообразного окислителя через слой пористого материала (исходного или продукта реакции) и теплоотводом в окружающую среду. В зависимости от условий, определяющих тепловое состояние системы, могут реализоваться различные режимы фильтрационного горения, отвечающие протеканию устойчивого процесса или потуханию.

Исследование теплового режима фильтрационного горения представляет весьма сложную задачу, решение которой связано с интегрированием системы нелинейных уравнений, описывающих гидродинамику течения и химические реакции в пористой среде. В общем случае при расчете фильтрационного горения следует учитывать также зависимость теплофизических характеристик от температуры и давления, изменение коэффициентов пористости и фильтрации в процессе реакции и т. д. На первой стадии исследования целесообразно, однако, отказаться от учета всей совокупности указанных выше факторов и рассмотреть упрощенные модели, отражающие существенные особенности явления.

Рассмотрим стационарный режим фильтрационного горения при следующей схеме организации процесса. Примем, что пористый материал с помощью шнека или иного устройства перемещается навстречу волне горения со скоростью, равной скорости ее распространения (рис. 1). Подвод газообразного окислителя к волне осуществляется с помощью вдува в холодную зону I и отсоса из горячей зоны II так, что на некотором расстоянии $\pm \delta$ от фронта горения давление равняется соответственно p_0 и p_k , причем $p_0 > p_k$.

В качестве примера рассмотрим простейшую реакцию окисления тугоплавкого пористого материала с образованием одного продукта — окисла, находящегося при конечной температуре в твердом состоянии. Будем считать, что в процессе реакции происходит полное превращение пористого вещества. При этом вне зоны горения в областях I и II газообразный окислитель фильтруется соответственно через слой исходного реагента и конечного продукта.

В дальнейшем будем полагать скорость фильтрации достаточно малой. В соответствии с этим в уравнении движения опустим нелинейные конвективные члены. Кроме того, не будем учитывать зависимость теплофизических констант от температуры и давления, а также изменение коэффициентов пористости и фильтрации при реакции.

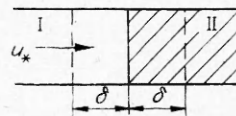


Рис. 1.