ПМТФ, № 5, 1972

УДК 534. 2

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА СРАЩИВАЕМЫХ АСИМПТОТИЧЕСКИХ РАЗЛОЖЕНИЙ К РАСЧЕТУ СТАЦИОНАРНОГО ТЕПЛОВОГО РАСПРОСТРАНЕНИЯ ФРОНТА ЭКЗОТЕРМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ В КОНДЕНСИРОВАННОЙ СРЕДЕ

В. С. Берман, Ю. С. Рязанцев

(Москва)

В работе методом сращиваемых асимптотических разложений устанавливается двучленная формула для скорости распространения фронта экзотермической реакции в конденсированной среде, теплофизические характеристики которой зависят от концентрации реагирующего вещества и температуры. Параметром разложения является отношение температуры активации к адиабатической температуре горения. Результаты применяются к случаю горения нелетучих конденсированных систем. Проводится сравнение полученной приближенной формулы с результатами численного интегрирования.

1. Формулировка задачи. Метод решения. Задача о стационарном тепловом распространении фронта одноступенчатой экзотермической реакции в конденсированной фазе может быть сформулирована в виде (например, [1,3,4])

$$\frac{d}{dx}\left(\frac{\lambda}{c}\frac{dT}{dx}\right) - m\frac{dT}{dx} + \frac{h}{c}\rho^n(1-y)^n\Phi(T) = 0 \tag{1.1}$$

$$m\frac{dy}{dx} - \rho^n(1-y)^n\Phi(T) = 0 \tag{1.2}$$

$$T = T_-, \quad y = 0, \qquad x = -\infty \tag{1.3}$$

$$dT / dx = 0, \qquad y = 1, \ x = \infty \tag{1.4}$$

Здесь x — координата, T — температура, y — концентрация продукта реакции, $h = \text{const}$ — тепловой эффект реакции, m — массовая скорость распространения фронта реакции, которая является собственным значением задачи, $c = \text{const}$ — теплоемкость, $\rho = \rho(T, y)$ — плотность среды, $0 < n < 2$ — порядок реакции, $\lambda = \lambda(T, y)$ — коэффициент теплопроводности среды, $\Phi(T)$ — зависимость скорости химической реакции от температуры, T_- — начальная температура.

Задача (1.1)—(1.4) имеет первый интеграл

$$\frac{\lambda}{c}\frac{dT}{dx} + m\left[T - T_- - \frac{h}{c}(1-y)\right] = 0, \quad T_+ = T_- + \frac{h}{c} \tag{1.5}$$

Индексом минус и плюс обозначены величины на холодной и горячей границах зоны горения соответственно.

Уравнение (1.5) теперь будет использоваться вместо уравнения (1.1).

Примем, что скорость химической реакции зависит от температуры по закону Аррениуса

$$\Phi(T) = B \exp(-E / RT) \tag{1.6}$$

Здесь E — энергия активации, R — газовая постоянная, B — предэкспоненциальный множитель.

Следует отметить, что для существования решения задачи (1.1)—(1.4), как и в теории теплового распространения пламени в газе [2], необходимо принять, что функция $\Phi(T)$ не равна нулю и определяется формулой (1.6), везде, кроме малого интервала температур вблизи $T = T_-$ [3-5]. В данной работе используется приближенная форма основных уравнений, в которой необходимость в явном использовании этого предположения не возникает.

В задаче (1.2)—(1.4), (1.5) целесообразно ввести новую переменную и неизвестные функции

$$\tau = \frac{c(T - T_-)}{h} \quad (0 \leqslant \tau \leqslant 1), \qquad P = \frac{\lambda}{c}\frac{d\tau}{dx} \tag{1.7}$$

Из уравнения (1.5) получим

$$P = m(\tau - y) \tag{1.8}$$

С учетом (1.8) вместо (1.2)—(1.4) можно записать

$$M^2(\tau - y)\frac{dy}{d\tau} = (1 - y)^n K(\tau, y) \exp\frac{-\beta(1-\tau)}{\tau + \sigma} \tag{1.9}$$

$$K = B\rho^n \frac{\lambda}{c}, \quad \beta = \frac{E}{RT_+}, \quad \sigma = \frac{T_-}{T_+ - T_-}, \quad M = m \exp\frac{\beta}{2}$$

$$\tau = 0, \quad y = 0 \tag{1.10}$$

$$\tau = 1, \quad y = 1 \tag{1.11}$$

Уравнение (1.9) содержит параметр β, значения которого обычно на порядок величины больше единицы. Это позволяет при решении задачи воспользоваться методом сращиваемых асимптотических разложений [6,7]. С учетом большой величины β интервал независимой переменной $0 \leqslant \tau \leqslant 1$ может быть разбит на две области. В области, примыкающей к $\tau = 0$ (внешняя область), правая часть уравнения существенно меньше левой. В области, примыкающей к $\tau = 1$ (внутренняя область), большая величина β в показателе экспоненты компенсируется малостью множителя $(1 - \tau)$ и обе части уравнения становятся сравнимыми по величине. Во внутренней области введем переменную $\tau_* = \beta(1 - \tau)$. Вместо (1.9), (1.11) получим

$$M^2\left(y + \frac{\tau_*}{\beta} - 1\right)\beta\frac{dy}{d\tau_*} = K\left(y, 1 - \frac{\tau_*}{\beta}\right)(1 - y)^n \exp\frac{-\tau_*}{\sigma + 1 - \beta^{-1}\tau_*} \tag{1.12}$$

$$\tau_* = 0, \quad y = 1 \tag{1.13}$$

Будем искать приближенное решение задачи в виде разложений по степеням малого параметра β^{-1}. Во внутренней области

$$y(\tau_*) = F_0(\beta)\, y_0(\tau_*) + F_1(\beta)\, y_1(\tau_*) \tag{1.14}$$

Во внешней области

$$y(\tau) = f_0(\beta)\, y^{(0)}(\tau) + f_1(\beta)\, y^{(1)}(\tau) \tag{1.15}$$

Разложение для собственного значения задачи M будет одинаковым в обеих областях

$$M = \alpha_0(\beta) M_0 + \alpha_1(\beta) M_1 \tag{1.16}$$

Зависящие от β степенные коэффициенты в разложениях (1.14)—(1.16) при $\beta \to \infty$ должны удовлетворять условиям

$$\frac{F_1(\beta)}{F_0(\beta)} \to 0, \quad \frac{f_1(\beta)}{f_0(\beta)} \to 0, \quad \frac{\alpha_1(\beta)}{\alpha_0(\beta)} \to 0$$

Функции $y^{(0)}$, $y^{(1)}$, и y_0, y_1 будут последовательно определяться из (1.9), (1.10), и (1.12), (1.13) соответственно. Остающиеся при этом неопределенными члены ряда (1.16) для собственного значения M будут находиться из условия сращивания внутреннего (1.14) и внешнего (1.15) разложений, которое выражается в требовании совпадения соответствующих, членов разложения $y(\tau_*)$ при $\tau_* \to \infty$ и членов разложения $y(\tau)$ при $\tau \to 1$. Вид коэффициентов $F_{0,1}$ и $f_{0,1}$, $\alpha_{0,1}$ устанавливается из граничных условий и условия сращивания.

2. Два приближения для m. Подставим разложения (1.15), (1.16) в уравнение (1.9). Так как при $\beta \to \infty$ выполняется соотношение

$$\exp(-\beta) / f_{0,1}(\beta) \to 0, \qquad \exp(-\beta) / \alpha_{0,1}(\beta) \to 0$$

из (1.9), (1.10) следует, что во внешней области

$$y^{(0)}(\tau) = 0, \quad y^{(1)}(\tau) = 0 \tag{2.1}$$

Из (2.1) видно, что условие сращивания внутреннего и внешних разложений в данном случае заключается в требовании

$$y_0(\tau_*) \to 0, \qquad y_1(\tau_*) \to 0 \qquad \text{при} \qquad \tau_* \to \infty \tag{2.2}$$

Из граничного условия (1.11), которому должно удовлетворять разложение (1.14), следует:

$$F_0(\beta) = 1, \qquad y_0(0) = 1, \qquad y_1(0) = 0 \tag{2.3}$$

Подставим разложения (1.14) и (1.16) в уравнение (1.12). Из анализа порядка величин отдельных слагаемых с учетом условий (2.2), (2.3) устанавливаем, что

$$\alpha^2{}_0(\beta) = \beta^{-1}$$

Сгруппировав члены минимального порядка по β^{-1} получим уравнение для

$$M_0{}^2 \frac{dy_0}{d\tau_*} = -K(y_0, 1)(1-y_0)^{n-1} \exp \frac{-\tau_*}{1+\sigma} \tag{2.4}$$

Из уравнения (2.4) и граничного условия (2.3) найдем

$$M_0{}^2 \int\limits_{y_0(\tau_*)}^{1} \frac{(1-z)^{1-n}}{K(z, 1)} dz = (1+\sigma)\left[1 - \exp\left(-\frac{\tau_*}{1+\sigma}\right)\right] \tag{2.5}$$

Соотношение (2.5) определяет нулевое приближение для функции $y(\tau_*)$ во внутренней области.

Из (2.5) и условия сращивания (2.2) получим формулу для расчета нулевого приближения собственного значения задачи

$$M_0{}^2 = (1+\sigma)\left[\int\limits_0^1 \frac{(1-z)^{1-n}\, dz}{K(z, 1)}\right]^{-1} \tag{2.6}$$

Найдем следующее приближение. Подставив (1.14), (1.16) в уравнение (1.12), из сравнения порядков величин отдельных слагаемых с учетом (2.2), (2.3) и (2.4) находим, что $F_1 = \beta^{-1}$, $\alpha_1 = \beta^{-3/2}$. При этом для функции $y_1(\tau_*)$ получим уравнение

$$\frac{dy_1}{d\tau_*} = \frac{K^0}{M_0{}^2}(1-y_0)^{n-1} \exp\left(-\frac{\tau_*}{1+\sigma}\right)\left\{\left[\frac{n-1}{1-y_0} - \left(\frac{\partial \ln K}{\partial y}\right)^0\right] y_1 + \right.$$
$$\left. + \frac{2M_1}{M_0} + \tau_*\left(\frac{\partial \ln K}{\partial \tau}\right)^0 + \frac{\tau_*{}^2}{(1+\sigma)^2} - \frac{\tau_*}{1-y_0}\right\} \tag{2.7}$$

Здесь функция $y_0(\tau_*)$ и величина M_0 определены формулами (2.5) и (2.6), аргументы функций, отмеченных градусом равны

$$y = y_0(\tau_*),\quad \tau = 1$$

Решение уравнения (2.7), удовлетворяющее граничному условию (2.3), может быть записано в виде

$$y_1(\tau_*) = \frac{(1-y_0)^{n-1}}{M_0^2} e^{F(\tau_*)} \int\limits_0^{\tau_*} K^\circ \left[\frac{2M_1}{M_0} + \frac{x^2}{(1+\sigma)^2} + x\left(\frac{\partial \ln K}{\partial \tau}\right)^\circ - \frac{x}{1-y_0}\right] \times$$
$$\times \exp\left[\frac{-x}{1+\sigma} - F(x)\right] dx$$
$$F(x) \equiv \int\limits_0^{y_0(x)} \left(\frac{\partial \ln K}{\partial y}\right)^\circ dy \qquad (2.8)$$

Воспользовавшись условием сращивания (2.2), из (2.8) получим выражение для первого члена разложения собственного значения

$$\frac{2M_1}{M_0} = -\int\limits_0^\infty K^\circ \left[\frac{x^2}{(1+\sigma)^2} + x\left(\frac{\partial \ln K}{\partial \tau}\right)^\circ - \frac{x}{1-y_0}\right] \exp\left[\frac{-x}{1+\sigma} - F(x)\right] dx \times$$
$$\times \left[\int\limits_0^\infty K^\circ \exp\left[\frac{-x}{1+\sigma} - F(x)\right] dx\right]^{-1} \qquad (2.9)$$

Таким образом, двучленное разложение по β^{-1} массовой скорости распространения фронта экзотермической реакции в конденсированной фазе имеет вид

$$m = M_0 e^{-\beta/2}\beta^{-1/2}\left(1 + \beta^{-1}\frac{M_1}{M_0}\right) \qquad (2.10)$$

где величины M_0 и M_1 определяются формулами (2.6) и (2.9).

3. Частные случаи. Применим полученные результаты к описанию горения нелетучих конденсированных систем с сильным диспергированием, когда образование газообразных продуктов, изменение объема и теплопроводности конденсированной среды в ходе химической реакции может быть описано в рамках модели, предложенной в [8, 9]. В соответствии с [8,9] будем считать, что плотность и теплопроводность конденсированной среды изменяются с изменением массовой доли продуктов реакции и температуры по законам

$$\frac{\rho}{\rho_0} = \left[1 + yz\left(\rho_0 \frac{RT}{\mu p} - 1\right)\right]^{-1},\quad \frac{\lambda}{\lambda_1} = \left[1 + yz\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\frac{\rho_0 RT}{\mu p} - 1\right)\right] \times$$
$$\times \left[1 + yz\left(\frac{\rho_0 RT}{\mu p} - 1\right)\right]^{-1} \qquad (3.1)$$

Здесь λ_1, λ_2 — коэффициенты теплопроводности конденсированной фазы и газообразных продуктов реакции, ρ_0 — начальная плотность конденсированной фазы, R — газовая постоянная, μ — молекулярный вес газообразных продуктов реакции, p — давление, z — доля газа в продуктах реакции.

Будем считать, что в конденсированной системе протекает химическая реакция первого порядка ($n=1$). Выражение для функции $K^\circ \equiv K(y_0, 1)$

примет вид

$$K^\circ = \frac{B\lambda_1\rho_0}{c}\frac{(1+by_0)}{(1+ay_0)^2}, \quad a \equiv z\left(\frac{\rho_0 RT_+}{\mu p} - 1\right), \quad b \equiv z\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\frac{\rho_0 RT_+}{\mu p} - 1\right) \quad (3.2)$$

Подставив (3.2) в соотношения (2.5), (2.6), после интегрирования при $n = 1$ найдем

$$1 - \frac{I(y_0)}{I(0)} = \exp\frac{-\tau_*}{1+\sigma}, \qquad M_0{}^2 = \frac{B\lambda_1\rho_0(1+\sigma)}{cI(0)} \quad (3.3)$$

$$I(y_0) = \frac{(b-a)^2}{b^3}\ln\frac{1+b}{1+by_0} + 2\frac{a}{b}(1-y_0) - \frac{a^2}{b^3}\frac{(1+by_0)(by_0-3)}{2} + $$

$$+ \frac{a^2}{b^3}\frac{(1+b)(b-3)}{2}$$

Соотношения (3.3) определяют функцию $y_0(\tau_*)$ и нулевое приближение M_0 для собственного значения задачи.

Выражение для m можно представить в виде

$$m^2 = \frac{B\rho_0\lambda_1}{h}\frac{RT_+{}^2}{E}\left[\frac{(b-a)^2}{b^3}\ln(1+b) + \frac{a}{b}\left(2 - \frac{a}{b} + \frac{a}{2}\right)\right]^{-1}\exp\frac{-E}{RT_+} \quad (3.4)$$

Формула (3.4), определяющая в нулевом приближении скорость стационарного распространения фронта горения, совпадает с формулой, полученной в [8, 9] методом Зельдовича — Франк - Каменецкого.

Для второго члена разложения собственного значения задачи из (2.9) в рассматриваемом случае можно получить

$$\frac{M_1}{M_0} = -1 + \frac{1}{2}\int_0^1 \frac{M_0^2}{K^\circ}\left[\left(\frac{\partial \ln K}{\partial\tau}\right)^\circ - \frac{1}{1-y_0}\right]\ln\left[1 - \frac{I(y_0)}{I(0)}\right]dy_0 \quad (3.5)$$

$$\left(\frac{\partial \ln K}{\partial \tau}\right)^\circ \equiv \frac{zy_0}{1+\sigma}\left[\frac{b+z}{1+by_0} - \frac{2(a+z)}{1+ay_0}\right]$$

Если коэффициенты теплопроводности конденсированной и газовой фаз равны между собой, формула (3.5) упрощается.

Полагая в (3.5) $\lambda_1 = \lambda_2$, т. е. $b = a$, после интегрирования найдем

$$\frac{M_1}{M_0} = -1 + \frac{a+z}{a+2}\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{a} + \frac{2}{a^2}\ln\frac{a+2}{2}\right) +$$

$$+ \frac{1+\sigma}{a+2}\left[(1+a)\frac{\pi^2}{3} - 2a + 2\ln\frac{a+2}{2} + (1+a)J\left(\frac{2}{2+a}\right)\right]$$

$$J(\alpha) = \int_0^\alpha \frac{\ln t\, dt}{1-t}, \qquad J(1) = -\frac{\pi^2}{6} \quad (3.6)$$

В частном случае распространения фронта экзотермической реакции в среде с неизменными теплофизическими характеристиками из (3.3) и (3.6), полагая $z = 0$ ($b = a = 0$), найдем

$$M_0 = \left[\frac{B\lambda_1\rho_0(1+\sigma)}{c}\right]^{1/2}, \qquad \frac{M_1}{M_0} = (1+\sigma)\frac{\pi^2}{12} - 1 \quad (3.7)$$

Здесь первое равенство определяет нулевое приближение для скорости стационарного распространения фронта реакции, которое совпадает с найденным в [1, 4]. Второе равенство определяет первую поправку к нулевому приближению.

Сравним результаты расчета скорости горения конденсированной системы по установленной в данной работе двучленной формуле (2.10), (3.3), (3.6) с точным решением задачи о скорости стационарного распространения фронта горения [8,9]. Расчеты в [8,9] проводились при $b = a$ ($z = 1$) и больших числовых значениях параметра a, поэтому вместо (3.3), (3.6) целесообразно воспользоваться предельными выражениями для M_0 и M_1 / M_0, справедливыми при больших a.

Из (3.3), полагая $b = a$, при $a \gg 1$ получим

$$M_0^2 = 2B\lambda_1\rho_0 (1 + \sigma)/ca \tag{3.8}$$

Из (3.6) при $a \gg 1$ найдем

$$M_1 / M_0 = -1/2 + (1 + \sigma) (1/3\, \pi^2 - 2) \tag{3.9}$$

Двучленное приближение для скорости стационарного горения в рассматриваемом предельном случае будет определяться формулами (2.10), (3.8), (3.9).

Результаты сравнения представлены в виде таблицы.

a	β	σ	Δ_0	Δ_1
734	19.37	0.337	6.167	0.26
735	19.37	0.337	6.983	1.1
72.5	19.37	0.337	4.493	−1.3
1387	10.3	0.258	11.53	1.9
468	30.3	1.564	11.6	3.44
325	43.85	0.776	1.14	−2.87
6.4	19.37	0.337	1.18	−2.8
1246	11.46	0.13	11	3.4
$1.47\cdot10^8$	9.688	0.337	12	0.4
$5.5\cdot10^6$	25.76	2.02	19	8
29	19.42	0.837	7	1.1
106	13.4	0.937	6.5	−9

В таблице через Δ_0 обозначено выраженное в процентах отклонение значения массовой скорости горения, найденного по формуле для нулевого приближения, от значения, определенного из численного решения задачи; через Δ_1 обозначено процентное отклонение значения массовой скорости, вычисленного по двучленной приближенной формуле, от значения, найденного из численного решения. Видно, что нулевое приближение всегда дает заниженное значение скорости стационарного горения. Второй член в двучленной формуле всегда положителен. Учет второго приближения в большинстве случаев приводит к существенному уменьшению отклонения значения скорости, найденного приближенным аналитическим методом от полученного численным интегрированием.

Отметим, что различные приближенные методы расчета скорости стационарного распространения фронта экзотермической реакции в конденсированной среде предлагались в ряде работ (например, [1,4,10,11]).

Метод сращиваемых асимптотических разложений, апробированный во многих задачах механики, позволяет при помощи стандартной процедуры получить приближенное аналитическое решение задачи, которое обеспечивает хорошее соответствие с точным решением. По аналогии с другими задачами механики, например с задачей о ламинарном обтекании сферы [6], можно полагать, что полученные результаты будут достаточно близки к точному решению и при не слишком больших значениях параметра разложения.

Поступила 15 VI 1972

ЛИТЕРАТУРА

1. Новожилов Б. В. Скорость распространения фронта экзотермической реакции в конденсированной фазе. Докл. АН СССР, 1961, т. 141, № 1.
2. Зельдович Я. Б., Франк-Каменецкий Д. А. Теория теплового распространения пламени. Ж. физ. химии, 1938, т. 12, стр. 100.
3. Новиков С. С., Рязанцев Ю. С. К теории горения конденсированных систем. Докл. АН СССР, 1964, т. 157, № 6.
4. Новиков С. С., Рязанцев Ю. С. К теории стационарной скорости распространения фронта экзотермической реакции в конденсированной среде. ПМТФ. 1965, № 3.
5. Новиков С. С., Рязанцев Ю. С. Анализ математических моделей горения конденсированной фазы. Докл. АН СССР, 1964, т. 157, № 5.
6. Ван-Дайк М. Методы возмущений в механике жидкости. М., «Мир», 1967.
7. Берман В. С., Рязанцев Ю. С. К анализу задачи о тепловом распространении пламени методом сращиваемых асимптотических разложений. ПММ, 1972, № 4.
8. Максимов Э. И., Мержанов А. Г. Об одной модели горения нелетучих взрывчатых веществ. Докл. АН СССР, 1964, т. 157, № 2.
9. Максимов Э. И., Мержанов А. Г. К теории горения конденсированных веществ. Физика горения и взрыва, 1966, т. 1, № 1.
10. Любченко И. С. К теории теплового распространения пламени в конденсированной среде. Инж.-физ. ж., 1968, т. 14, № 5.
11. Ваганов Д. А., Худяев С. И. Об одной стационарной задаче теории горения. Физика горения и взрыва, 1969, т. 5, № 2.