

ВОСПЛАМЕНЕНИЕ
В СОСУДЕ С УЧЕТОМ ВЫГОРАНИЯ
И ТЕПЛОТДАЧИ

Л. Ю. Артюх, П. Г. Ицкова, А. Т. Лукьянов

(Алма-Ата)

При исследовании теплового воспламенения наиболее широкое применение нашли два приближенных аналитических метода, относящихся к стационарной [1] и нестационарной [2] теориям. Стационарная теория хорошо предсказывает критические условия взрыва. В работе [3] прямым численным интегрированием получено решение задачи о тепловом воспламенении. Это позволило показать, что наряду с воспламенением в центре сосуда возможно существование зажигания вблизи нагретых стенок. Различие критических условий зажигания и самовоспламенения может быть выявлено лишь во взаимном влиянии начальных и граничных условий. При тепловом воспламенении и зажигании выгорание существенно [4], но в дальнейшем оно должно играть немаловажную роль в установлении теплового режима в сосуде. В данной работе исследуется термическое разложение паров метилнитрата с учетом диффузии и конечной скорости реакции. Для решения применяется метод статического моделирования с применением плоской электропроводной среды [4].

Рассмотрим плоскопараллельный сосуд с бесконечными стенками, заполненный парами метилнитрата.

Задача записывается в виде

$$(1) \quad \begin{aligned} Fo > 0, \quad 0 < X < 1, \\ \frac{\partial \theta}{\partial Fo} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial X^2} + \eta \delta \exp\left(\frac{\theta}{1 + u\theta}\right), \\ \frac{\partial \eta}{\partial Fo} = Le \frac{\partial \eta}{\partial X^2} - \eta \delta \sigma \exp\left(\frac{\theta}{1 + u\theta}\right); \\ Fo = 0, \quad 0 \leq X \leq 1, \quad \theta = 0, \quad \eta = 1; \\ Fo > 0, \quad X = 0, \quad \frac{\partial \theta}{\partial X} = 0, \quad \frac{\partial \eta}{\partial X} = 0; \\ Fo > 0, \quad X = 1, \end{aligned}$$

$$(2) \quad -\frac{\partial \theta}{\partial X} = Bi(\theta - \theta_w), \quad \frac{\partial \eta}{\partial X} = 0,$$

$$\text{где } \theta = \frac{E}{RT_0^2}(T - T_0); \quad \eta = \frac{c}{c_0};$$

$$\delta = \frac{E}{RT_0^2} \frac{Q_p}{\lambda} l^2 k_0 c_0 \times \exp\left(-\frac{E}{RT_0}\right); \quad Bi = \frac{\alpha}{\lambda} l;$$

$$\sigma = \frac{RT_0^2}{E} \frac{c_v \rho}{Q_p c_0}; \quad Le = \frac{D}{a}; \quad u = \frac{RT_0}{E};$$

$$X = x/l; \quad Fo = at/l^2,$$

Bi, Fo, Le — соответственно критерии Био, Фурье, Льюиса, E — энергия активации, Q_p — тепловой эффект реакции, T_0 — начальная тем-

пература, равная температуре стенки T_w , c_0 — начальная концентрация вещества, k_0 — предэкспоненциальный множитель, R — универсальная газовая постоянная, l — поперечный размер сосуда, λ , c_v , a , D , ρ , α — соответственно коэффициенты теплопроводности, удельной теплоемкости, температуропроводности, диффузии, плотности, теплообмена.

Кинетические данные термического разложения паров метилнитрата взяты из [5].

Исходная задача (1)–(2) аппроксимировалась разностными уравнениями

$$\begin{aligned}
 (3) \quad \theta_n^{k+1} &= \frac{\Delta Fo}{\Delta X^2} (\theta_{n+1}^k + \theta_{n-1}^k) + \left(1 - 2 \frac{\Delta Fo}{\Delta X^2}\right) \theta_n^k + \\
 &+ \eta_n^k \delta \Delta Fo \exp\left(\frac{\theta_n^k}{1 + u \theta_n^k}\right); \\
 \eta_n^{k+1} &= \frac{\Delta Fo}{\Delta X^2} (\eta_{n+1}^k + \eta_{n-1}^k) + \left[1 - 2 \frac{\Delta Fo}{\Delta X^2} - \right. \\
 &\left. - \delta \sigma \Delta Fo \exp\left(\frac{\theta_n^k}{1 + u \theta_n^k}\right)\right] \eta_n^k, \\
 (n &= 1, \dots, N-1; k = 1, 2 \dots); \\
 \theta_n^0 &= 0, \quad \eta_n^0 = 1, \quad \theta_0^{k+1} = \theta_1^{k+1}, \quad \eta_0^{k+1} = \eta_1^{k+1}, \\
 (4) \quad \theta_N^{k+1} &= \frac{\theta_{N-1}^{k+1} + \theta_{N-1}^k + 2Bi \Delta X \theta_w + (M-1 - Bi \Delta X) \theta_N^k}{1 + M + Bi \Delta X}, \\
 \eta_N^{k+1} &= \eta_{N-1}^{k+1}.
 \end{aligned}$$

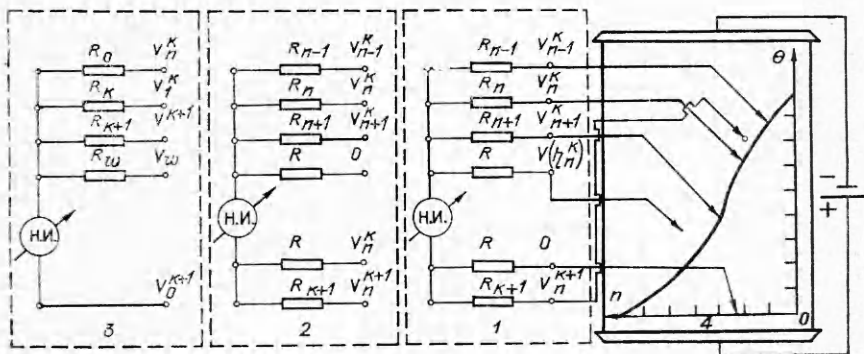
Условия устойчивости для уравнений (3)

$$(5) \quad \frac{1}{M} = \frac{\Delta Fo}{\Delta X^2} \leq \frac{1}{2};$$

$$(6) \quad 1 - 2 \frac{\Delta Fo}{\Delta X^2} - \delta \sigma \Delta Fo \exp\left(\frac{\theta_n^k}{1 + u \theta_n^k}\right) > 0.$$

В расчетах использовалось условие (6), более жестко ограничивающее по сравнению с (5) параметры сеточной области ΔFo и ΔX .

Для выполнения (6) в ходе вычислений при заданном ΔX производилось уменьшение шага ΔFo в соответствии с ростом скорости реакции.



Ф и г. 1

Переход от условия (2) к формуле (4) осуществлялся на основе метода элементарных тепловых балансов [6].

Перед началом решения арифметический элемент структурно программировался в соответствии с выбранной разностной схемой [4] (фиг. 1), 1-3 — решающие элементы для интегрирования уравнений (3) и (4). Значения резисторов выбирались равными

$$(1) \quad R_{n-1} = R_{n+1} = 1, \quad R_n = \frac{1}{M-2}, \quad R_{k+1} = \frac{1}{M},$$

$$R = \frac{1}{\delta \Delta X^2 \exp\left(\frac{\theta_n^k}{1 + u\theta_n^k}\right)};$$

$$(2) \quad R_{n-1} = R_{n+1} = 1; \quad R_n = \frac{1}{M-2}; \quad R_{k+1} = \frac{1}{M};$$

$$R = \frac{1}{\delta \sigma \Delta X^2 \exp\left(\frac{\theta_n^k}{1 + u\theta_n^k}\right)};$$

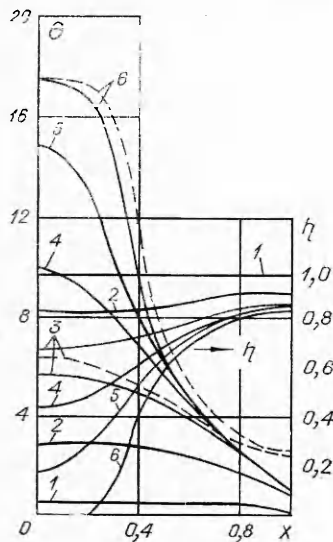
$$(3) \quad R_k = R_{k+1} = 1; \quad R_0 = \frac{1}{M-1 - \text{Bi} \Delta X};$$

$$R_w = \frac{1}{2 \text{Bi} \Delta X}.$$

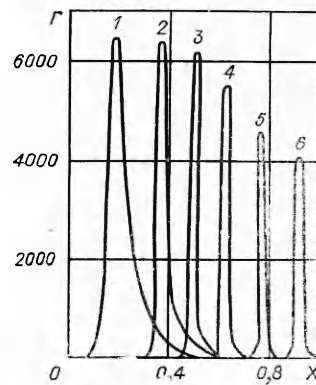
Величина шага по временной координате регулируется изменением резисторов R_n , R_{k+1} , R_0 .

Применение плоской электропроводной среды (см. фиг. 1, 4) позволяет получать решение непосредственно в графической форме, минуя промежуточные записи.

На фиг. 2 представлены нестационарные поля температуры и концентрации (кривые 1-6 соответствуют $\text{Fo}=0,025, 0,0625, 0,07, 0,0710, 0,07125, 0,07142$), а на фиг. 3 — нестационарное поле скорости реакции (кривые 1-6 соответствуют $\text{Fo}=0,06746, 0,06764, 0,06814, 0,06912, 0,07066, 0,07299$) при значениях параметров $\delta=17,0688$, $\sigma=0,0574$, $\text{Bi}=4,8$, $\theta_w=0$. Для сравнения на фиг. 2 штриховой линией нанесены распреде-



Ф и г. 2



Ф и г. 3

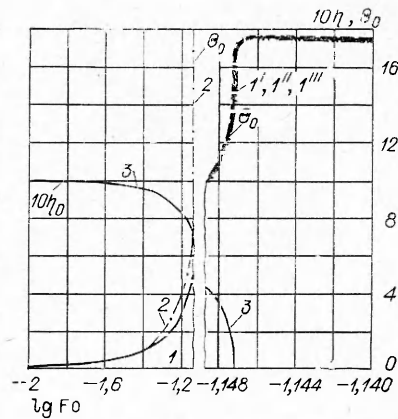
ления температуры при адиабатическом горении ($Fo=0,07$ и $Fo=0,07142$), когда наблюдается подобие полей температуры и концентрации

$$\theta(X) = \frac{1}{\sigma} [1 - \eta(X)].$$

Из сопоставления кривых видно, что наличие теплообмена нарушает это подобие. Наиболее сильное расхождение наблюдается вблизи стенок сосуда. Это объясняется тем, что из-за теплоотвода в окружающую среду температура вблизи стенок ниже, чем в центре сосуда, а так как скорость реакции зависит от температуры по закону Аррениуса, то в центре разложение происходит быстрее, чем у стенок (см. фиг. 2). При этом область выгорания расширяется (см. фиг. 3).

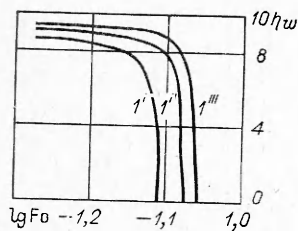
На фиг. 4 показано изменение температуры и концентрации по оси сосуда со временем (1, 3). В рассматриваемом интервале времени температура θ_0 возрастает только до некоторой максимальной θ_{om} . (Как показывают расчеты, величина θ_{om} соответствует T_m , совпадающей с теоретически возможной адиабатической температурой горения)

$$T_m = T|_{t=0} + \frac{Q_p}{c_p}.$$



Ф и г. 4

Зависимость температуры на оси $\theta_0(\lg Fo)$ сравнивается с аналогичной зависимостью, полученной без учета выгорания вещества (кривая 2). Сравнение показывает, что в начальный период различие между кривыми незаметно (выгорание мало, см. фиг. 4). Далее 2, описывающая явление теплового взрыва, располагается над 1, что соответствует более высоким температурам. Начиная с некоторого момента времени, взрывная температура возрастает экспоненциально (в [3] аналогичное решение получено для цилиндрического слоя вещества), а различие между 1 и 2 становится очень большим. Фиг. 5 иллюстрирует изменение концентрации на стенках сосуда во времени в зависимости от условий теплообмена (Bi). Из фиг. 4 следует, что время воспламенения не зависит от величины Bi . Полное время горения, когда исчезает исходное вещество, несколько возрастает при увеличении теплоотдачи в окружающую среду (см. фиг. 5). Кривые 1'—1''' получены соответственно для $Bi=0; 4,8; \infty$. Учет выгорания позволяет определить полное время горения и проследить формирование фронта пламени. Так как при воспламенении концентрация практически остается постоянной, то можно ожидать, что выгорание не изменит критических пределов воспламенения.



Ф и г. 5

Учет изменения плотности и давления с температурой, вызывающего свободную конвекцию в газе [7], не приводит, как показало сравнение с нашими результатами, к качественному изменению профилей температуры и концентрации.

Применение метода статического моделирования с использованием плоской электропроводной среды для решения задач теории горения позволяет наглядно и с достаточной точностью (0,5—1%) получить картину исследуемого явления.

Поступила 13 III 1974

ЛИТЕРАТУРА

1. Франк-Каменецкий Д. А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М., «Наука», 1967.
2. Конторова Т. А., Тодес О. М. К тепловой теории взрыва. Журн. физ. химии, 1933, т. 4, вып. 1, с. 90.
3. Мержанов А. Г., Абрамов В. Г., Гонтовская В. Т. О закономерностях перехода от воспламенения к зажиганию. Докл. АН СССР, 1963, т. 148, № 1, с. 156.
4. Джолдасбеков У. А., Лукьянов А. Т., Панкратова О. И., Панчишин В. И. Статический интегратор для решения уравнений в частных производных. Авт. свид. по заявке 162 6286/18—24.
5. Апин А., Тодес О., Харитон Ю. Термическое разложение и вспышка паров метилнитрата. Журн. физ. химии, 1936, т. 8, вып. 6, с. 866.
6. Бэк. Численная аппроксимация конвективного граничного условия. Теплопередача. Труды Американского общества инженеров-механиков, рус. перев. 1962, т. 84, № 1, с. 109.
7. Гришин А. М., Зеленский Е. Е., Якимов А. С. Режимы воспламенения реагирующей смеси газов в электрическом поле. ФГВ, 1974, т. 10, № 1, с. 74.

Зав. редакцией Попова Ж. П.
Художественный редактор В. И. Желмин
Технический редактор Т. К. Овчинникова
Корректоры К. И. Сергеева, В. В. Борисова

Слано в набор 12 ноября 1974 г. Подписано в печать 17 февраля 1975 г. МН 02662. Формат 70×108/16. Бумага машиномелованная. 12,25 печ. л., 17,1 усл.-печ. л., 15,4 уч.-изд. л. Тираж 2065 экз. Заказ 254. Цена 1 руб. 65 коп.

Издательство «Наука», Сибирское отделение, 630099, Новосибирск, 99, Советская, 18.
4-я типография издательства «Наука». 630077, Новосибирск, 77, Станиславского, 25.