

## ВЛИЯНИЕ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ ДИФФУЗИИ НА НОРМАЛЬНУЮ СКОРОСТЬ ГОРЕНИЯ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ

А. М. Гришин, Е. Е. Зеленский

(Томск)

В настоящее время теория ламинарного пламени может считаться достаточно разработанной. Как отмечается в [1], имеющиеся расхождения между экспериментами и теорией для отдельных пламен объясняются, видимо, недостаточными знаниями кинетики данных реакций или ошибками эксперимента.

Тем не менее представляет интерес исследование влияния погрешности в определении коэффициентов переноса на точность определения нормальной скорости горения. В частности, интересен анализ известного допущения [1] о равенстве эффективных чисел Льюиса — Семенова единице.

Это исследование может быть полезно, например, при решении обратной задачи об определении термокинетических постоянных (энергии активации и предэкспонента) по известной скорости горения, так как при более точном вычислении коэффициентов переноса ошибка в определении термокинетических постоянных будет, очевидно, менее значительной.

В данной работе при помощи ЭВЦМ изучено влияние многокомпонентной диффузии и неточности в определении коэффициентов переноса на нормальную скорость горения окиси углерода и разложения окиси этилена для двух потенциалов взаимодействия: потенциала Леннарда—Джонса и твердых сфер соответственно.

### Постановка задачи и метод вычисления

Задача о вычислении нормальной скорости распространения пламени в многокомпонентной газовой смеси сводится к нахождению собственного значения следующей краевой задачи:

$$\frac{d\varepsilon_\alpha}{d\theta} = \frac{\lambda}{m^2} \frac{R_\alpha}{\sum_{\alpha=1}^n \left\{ \frac{h_\alpha^0}{T_\infty} (\varepsilon_\alpha - \varepsilon_{\alpha\infty}) + c_{p\alpha} [\varepsilon_\alpha (\theta - \theta_0) - \varepsilon_{\alpha\infty} (1 - \theta_0)] \right\}}, \quad \alpha = 1, 2, \dots, n-1, \quad (1)$$

$$\frac{dx_\alpha}{d\theta} = \frac{\lambda RT}{p} \frac{\sum_{k=1}^n \frac{1}{D_{\alpha k}} \left( x_\alpha \frac{\varepsilon_k}{M_k} - x_k \frac{\varepsilon_\alpha}{M_\alpha} \right)}{\sum_{\alpha=1}^n \left\{ \frac{h_\alpha^0}{T_\infty} (\varepsilon_\alpha - \varepsilon_{\alpha\infty}) + c_{p\alpha} [\varepsilon_\alpha (\theta - \theta_0) - \varepsilon_{\alpha\infty} (1 - \theta_0)] \right\}}, \quad (2)$$

$$\sum_{\alpha=1}^n \varepsilon_\alpha = 1, \quad \sum_{\alpha=1}^n x_\alpha = 1, \quad (3)$$

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon_\alpha &= \varepsilon_{\alpha 0}, & x_\alpha &= x_{\alpha 0}, & \theta &= \theta_0 \\ \varepsilon_\alpha &= \varepsilon_{\alpha \infty}, & x_\alpha &= x_{\alpha \infty}, & \theta &= 1 \end{aligned} \right\}$$

Здесь  $\varepsilon_\alpha$  — доля потока массы,  $\alpha$  — компонента,  $\lambda$  — коэффициент теплопроводности смеси,  $m$  — массовая скорость горения,  $R_\alpha$  — массовая скорость образования  $\alpha$ -компонента,  $T$  — температура,  $\theta = \frac{T}{T_\infty}$  — безразмерная температура,  $h_\alpha^0$ ,  $c_{p\alpha}$ ,  $x_\alpha$  — соответственно стандартная энтальпия

образования, удельная теплоемкость при постоянном давлении и молярная концентрация  $\alpha$ -компонента,  $p$  — давление,  $R$  — универсальная газовая постоянная,  $\mu$  — число компонентов системы,  $D_{\alpha k}$  — коэффициент бинарной диффузии,  $M_\alpha$  — молекулярный вес  $\alpha$ -компонента, нижние индексы 0 и  $\infty$  относятся к «холодной» смеси и продуктам сгорания соответственно.

Уравнения (1)–(2) получены в предположении, что  $c_{p\alpha}$  постоянны и не равны друг другу. При одинаковых теплоемкостях из (1)–(2) получаем обычные уравнения Кармана–Гиршфельдера [1–4].

Значения  $\varepsilon_{\alpha 0}$  в «холодной» смеси даются следующим выражением

$$\varepsilon_{\alpha 0} = \frac{x_{\alpha 0} M_\alpha}{M_0}, \quad \left( M = \sum_{\alpha=1}^{\mu} x_\alpha M_\alpha \right).$$

Величины  $\varepsilon_{\alpha \infty}$  и  $x_{\alpha \infty}$  в продуктах сгорания определяются из условий полного химического и теплового равновесия:

$$R_\alpha(x_{\alpha \infty}, T_\infty) = 0, \quad \varepsilon_{\alpha \infty} = \frac{x_{\alpha \infty} M_\alpha}{M_\infty}, \quad (4)$$

$$T_\infty = T_0 + \frac{\sum_{\alpha=1}^{\mu} h_\alpha^0 (\varepsilon_{\alpha 0} - \varepsilon_{\alpha \infty})}{\sum_{\alpha=1}^{\mu} c_{p\alpha} \varepsilon_{\alpha \infty}}.$$

Коэффициенты бинарной диффузии  $D_{\alpha k}$  и теплопроводности  $\lambda$  вычисляются на основании формул кинетической теории газов [5]:

$$D_{\alpha k} = \frac{0,001858 T^{3/2}}{p \sigma_{\alpha k}^2 \Omega_{\alpha k}^{(1,1)*}} \left( \frac{M_\alpha + M_k}{M_\alpha M_k} \right)^{1/2},$$

$$\lambda = \sum_{\alpha=1}^{\mu} \frac{\lambda_\alpha}{1 + \sum_{k=1}^{\mu} A_{\alpha k} \frac{x_k}{x_\alpha}},$$

$$\lambda_\alpha = \lambda_\alpha^0 \left( 0,115 + 0,354 \frac{c_{p\alpha}}{R} \right),$$

$$\lambda_\alpha^0 = 1981 \cdot 10^{-7} \sqrt{T M_\alpha^{-1}} \left[ \sigma_{\alpha\alpha}^2 \Omega_{(\alpha)}^{(2,2)*} \right]^{-1},$$

$$A_{\alpha k} = \frac{1,065}{2 \sqrt{2}} \left( 1 + \frac{M_\alpha}{M_k} \right)^{-0,5} \left[ 1 + \left( \frac{\lambda_\alpha^0}{\lambda_k^0} \right)^{0,5} \left( \frac{M_\alpha}{M_k} \right)^{0,25} \right]^2,$$

Здесь  $p$  — давление в атм,  $\Omega_{\alpha k}^{(1,1)*}$  и  $\Omega_{\alpha\alpha}^{(2,2)*}$  — интегралы столкновений, являющиеся функциями  $\frac{kT}{\varepsilon_{\alpha k}^0}$  и  $\frac{kT}{\varepsilon_\alpha^0}$  соответственно,  $k$  — постоянная

Больцмана,  $\sigma_{\alpha k}$  и  $\varepsilon_{\alpha k}^0$  — силовые постоянные, которые для потенциала взаимодействия Леннарда–Джонса определяются формулами [5]:

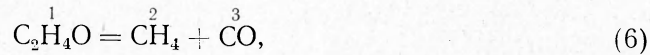
$$\sigma_{\alpha k} = 0,5(\sigma_\alpha + \sigma_k), \quad \varepsilon_{\alpha k}^0 = \sqrt{\varepsilon_\alpha^0 \varepsilon_k^0}.$$

Значения постоянных  $\sigma_\alpha$  и  $\varepsilon_\alpha^0$  для  $\text{CO}$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CH}_4$  были взяты из работы [5]. Для окиси этилена значения указанных постоянных вычислялись на основании формул [5]:

$$\frac{\varepsilon^0}{k} = 0,77 T_{кр}, \quad \sigma = 0,833 V_{кр}^{1/3},$$

где  $T_{кр}$  и  $V_{кр}$  — критические температура и удельный объем, значения которых для окиси этилена даны в [5].

Суммарные уравнения реакций горения окиси углерода и разложения окиси этилена без учета обратных реакций имеют вид:



где индексами 1, 2, 3 обозначены номера компонентов реагирующей системы, которые в дальнейшем будут приписываться соответствующим термодинамическим параметрам.

В качестве суммарной скорости реакции (5) использовалась следующая зависимость, справедливая при  $x_2 > 0,05$ , [1]:

$$-\frac{dy_1}{dt} = k_0 x_1 x_2^{0,25} T^{-2,25} \exp\left(-\frac{23\,000}{RT}\right), \quad (7)$$

где  $k_0 = (1,1-2,5) \cdot 10^9$ .

Для скорости реакции (6) имеем следующее выражение [6]:

$$-\frac{dy_1}{dt} = 1,5 \cdot 10^{13} \frac{p}{RT} x_1 \exp\left(-\frac{52\,700}{RT}\right). \quad (8)$$

В выражениях (7) и (8)  $y_\alpha$  есть молярно-объемная концентрация  $\alpha$ -компонента. Массовая скорость образования  $\alpha$ -компонента

$$R_\alpha = M_\alpha \frac{dy_\alpha}{dt}.$$

Для реакции (5) рассматривались горючие смеси с избытком окислителя, что связано только со специфическим видом выражения (7). В этом случае на «горячей» границе  $x_1 = \varepsilon_1 = 0$  и для  $x_2$  и  $x_3$  получаем следующие выражения:

$$x_{2\infty} = \frac{2y_{20} - y_{10}}{2y_{20} + 2y_{30} + y_{10}}, \quad x_{3\infty} = 1 - x_{2\infty}. \quad (9)$$

В случае реакции (6) для концентраций компонентов граничные условия:

$$x_{1\infty} = 0, \quad x_{2\infty} = x_{3\infty} = 0,5. \quad (10)$$

Значения  $\varepsilon_{\alpha\infty}$  для обеих реакций определяются на основании (4), (9), (10).

Заметим, что поскольку для реакции (5) величина  $\bar{R}_1 = \dot{M}_1 \frac{dy_1}{dt}$ , а  $R_2 = \frac{1}{2} M_2 \frac{dy_1}{dt}$ , то  $\frac{d\varepsilon_1}{d\theta} = 2 \frac{M_1}{M_2} \cdot \frac{d\varepsilon_2}{d\theta}$  и, следовательно, имеет место линейная связь между  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$ :

$$\varepsilon_1 - \varepsilon_{10} = 2 \frac{M_1}{M_2} (\varepsilon_2 - \varepsilon_{20}). \quad (11)$$

Аналогично для реакции (6) имеем

$$\varepsilon_1 - \varepsilon_{10} = -\frac{M_1}{M_2} (\varepsilon_2 - \varepsilon_{20}). \quad (12)$$

В дальнейшем использовалось одно дифференциальное уравнение (1) при  $\alpha=1$  и алгебраические соотношения (11) и (12), которые справедливы для любого числа компонентов, что позволяет использовать для определения собственного значения  $m$  метод пристрелки [4].

Для устранения «трудности холодной границы» [1, 3] так же, как и в [3], вводилась температура воспламенения  $T_1$ . Вследствие этого на «холодной» границе задавались значения  $\varepsilon_\alpha$ , а состав смеси при  $T=T_1$  нельзя задавать вследствие диффузии продуктов реакции к пламедержателю [4]. Практически при вычислениях, выбирая  $\theta_1$  достаточно близким к  $\theta_0$ , получаем значения  $x_\alpha$  при  $\theta=\theta_1$ , почти не отличающиеся от  $x_{\alpha 0}$ .

Точка  $\theta=1$  является особой для системы уравнений (1)–(3). Для определения поведения решения вблизи особой точки производные искомых функций находятся с помощью правила Лопиталя [4], в ре-

зультате чего получаем систему трех алгебраических уравнений для определения неизвестных градиентов  $\frac{d\varepsilon_2}{d\theta}$ ,  $\frac{dx_1}{d\theta}$ ,  $\frac{dx_2}{d\theta}$ . При получении системы уравнений для градиентов использовались алгебраические интегралы (3) и соотношения (11)—(12). Эта система уравнений сводится к одному кубическому уравнению относительно неизвестного градиента  $\frac{d\varepsilon_2}{d\theta}$ . Последнее уравнение имеет один нулевой и два противоположных по знаку действительных корня. Нулевой корень не имеет физического смысла, так как в этом случае все искомые градиенты равны нулю и, следовательно, во всей области интегрирования, в соответствии с методом Рунге—Кутта, имеет место равновесный состав смеси, что физически нереально. Из физических соображений ясно, что в случае окиси углерода следует взять отрицательный корень, а для окиси этилена необходимо брать положительное значение  $\frac{d\varepsilon_2}{d\theta}$ .

Действительно, из уравнения (5) следует, что компонентная доля потока массы  $O_2$  должна уменьшаться на «горячей» границе, а доля потока массы  $CH_4$  (см. (6)) должна увеличиваться.

После определения градиентов при  $\theta=1$  система уравнений (1)—(3) интегрировалась от точки  $\theta=1$  до  $\theta=\theta_1$  методом Рунге—Кутта [7]. Заметим, что для реакции горения окиси углерода правило Лопиталья можно применять тогда, когда окислитель находится в избытке. Указанное ограничение связано только с видом принятого в данной работе выражения для скорости реакции (7).

Величина  $m$  определялась методом пристрелки по величине  $\varepsilon_1$ . При этом, как показывает численный эксперимент, зависимость  $\varepsilon_\alpha$  на «холодной» границе от массовой скорости горения носит монотонный характер. Задавая начальное значение для  $m$ , интегрируем систему уравнений (1)—(3) от «горячей» границы к «холодной». При завышенном  $m$  кривая  $\varepsilon_1$  лежит ниже истинного решения, а при заниженном  $m$  кривая  $\varepsilon_1$  будет проходить выше искомого решения. Сближая «верхнее» и «нижнее» значения  $m$  до требуемой точности, т. е. до удовлетворения с заданной точностью граничного условия для  $\varepsilon_1$  на «холодной» границе, получаем решение поставленной задачи. При этом граничное условие для  $\varepsilon_2$  также удовлетворяется с необходимой точностью (см. (11), (12)). В качестве примера ниже приведем ряд последовательных значений  $\varepsilon_1$  на «холодной» границе, получаемых в ходе пристрелки для реакции (5) при  $x_{10}=x_{20}=0,33$ .

$m$	0,02964	0,03045	0,03065	0,030707	0,03074	0,03085
$\varepsilon_1$	0,2751	0,2703	0,2693	0,2689	0,2686	0,2681

Точное значение  $\varepsilon_{10}$ , отвечающее  $m=m_0=0,030701$ , равно 0,26925.

Таким образом, в ходе пристрелки величины  $\varepsilon_{10}$  и  $\varepsilon_{20}$  монотонным образом зависели от  $m$  в окрестности  $m=m_0$ , что, в свою очередь, обеспечивало достаточно точное удовлетворение граничных условий.

Расчеты проводились на ЭВМ класса БЭСМ-4. Машинное время, необходимое для вычисления одного значения  $m$ , составляло 3—8 мин в зависимости от степени близости задаваемого начального приближения для  $m$  к истинному значению массовой скорости горения. Точность вычисления массовой скорости горения, полей концентраций  $x_\alpha$  и  $\varepsilon_\alpha$  была не ниже 0,1%.

#### Вычисление нормальной скорости горения окиси углерода

На рис. 1 приведены характерные профили  $\varepsilon_\alpha$  и  $x_\alpha$  при горении окиси углерода для случаев  $x_{10}=x_{20}=0,33$  и  $k_0=1,5 \cdot 10^9$ . Сплошной линией обозначены кривые в случае учета многокомпонентной диффузии,

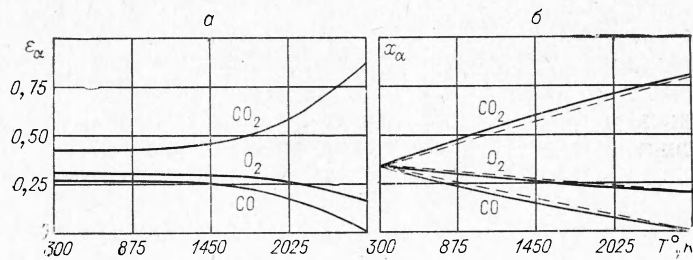


Рис. 1.

а штриховой — при числе Льюиса — Семенова, равном 1. Как видно из рис. 1, б, зависимость молярных концентраций от температуры близка к линейной, что указывает на подобие полей температур и концентраций, которое, как известно, имеет место для бинарных смесей при  $L=1$  и одинаковых теплоемкостях [1]. Отметим, что профили  $\varepsilon_\alpha$  для указанных выше двух случаев почти не различаются и на рис. 1, а они совпадают.

На рис. 2 представлены графики нормальной скорости горения СО в зависимости от начальной концентрации окиси углерода при константе скорости реакции  $k_0=1,5 \cdot 10^9$ . Сплошной линией обозначены расчетные значения, точками — опытные данные по Яну [8]. Обращает на себя внимание хорошее согласование вычисленных и экспериментальных значений нормальной скорости горения СО. Расхождение начинает увеличиваться вблизи нижнего концентрационного предела распространения пламени. Это объясняется тем, что теория ламинарного пламени, как известно [1], не дает возможности определить концентрационные пределы распространения пламени, что связано с рядом допущений, принятых при выводе основной системы уравнений. В результате расчетов по определению константы скорости реакции при изменении последней в диапазоне  $(1,1 \div 2,5) \cdot 10^9$  было получено, что наилучшее согласование с экспериментальными данными ( $u_{н\text{эксп}}=0,23$  м/с при  $x_{10}=x_{20}=0,33$ ) достигается при  $k_0=(1,5 \div 1,7) \cdot 10^9$  (рис. 3).

Сравнение скоростей горения окиси углерода, вычисленных с учетом многокомпонентности и при числе Льюиса, равном 1, показывает, что для реакции (5) расхождение этих величин не превышает 15%. Так, при  $x_{10}=x_{20}=0,33$  получаем с учетом взаимной диффузии всех компонентов  $u_n=0,225$  м/с, а при  $L=1$  скорость нормального горения равна 0,25 м/с. При  $x_{10}=0,46$  и  $x_{20}=x_{30}=0,27$   $u_n$  соответственно равно 0,43 и 0,48 м/с.

Расчеты показали, что скорости горения СО, вычисленные с учетом многокомпонентности при равных удельных теплоемкостях и при неравных друг другу теплоемкостях также различаются не более чем на 15%. Так, для  $x_{10}=x_{20}=0,33$  в первом случае имеем  $u_n=0,23$  м/с при  $c_{p\alpha}=1,176 \cdot 10^3$  Дж/кг·град (что соответствует удельной теплоемкости окиси углерода) и  $u_n=0,2$  м/с при  $c_{p\alpha}=1,26 \cdot 10^3$  Дж/кг·град. При неравных друг другу теплоемкостях получаем  $u_n=0,225$  м/с.

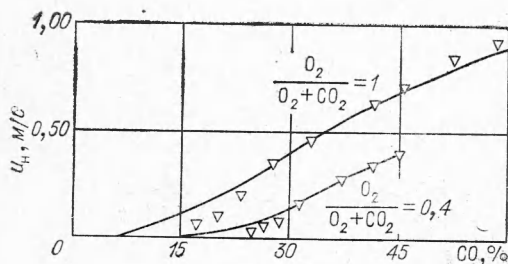


Рис. 2.

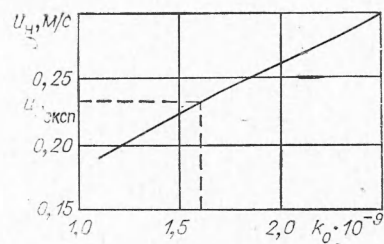


Рис. 3.

Во всех расчетах в качестве теплоемкостей  $\text{CO}$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CH}_4$  были взяты их средние по температурному интервалу значения из работы [9]. Для окиси этилена средняя теплоемкость была рассчитана с использованием данных [9] и зависимости  $c_p$  от  $T$  из работы [6].

Приведенные выше данные относились к потенциалу взаимодействия Леннарда—Джонса. В случае потенциала твердых сфер скорости горения для данной реакции отличаются от скоростей горения, вычисленных для потенциала Леннарда—Джонса, не более чем на 4%. Например, при  $x_{10}=x_{20}=0,33$  для потенциала взаимодействия твердых сфер получаем  $u_n=0,213$  м/с, а для потенциала Леннарда—Джонса  $u_n=0,225$  м/с.

Таким образом, из анализа приведенных данных можно сделать вывод, что для реакции горения окиси углерода с хорошей степенью точности можно применять бинарное приближение, т. е. считать, что компоненты диффундируют независимым образом, причем число Льюиса можно с хорошей точностью считать равным 1. Этот результат обусловлен тем фактом, что компоненты  $\text{CO}$  и  $\text{O}_2$  обладают близкими молекулярными весами и их можно объединить в одну группу, в то время как компонент  $\text{CO}_2$  следует включить в другую группу. В такой ситуации, согласно [10], для замороженных течений в пограничном слое можно использовать один бинарный коэффициент диффузии  $\text{CO}$  и  $\text{O}_2$  в  $\text{CO}_2$ . Приведенные численные данные показывают, что этот результат справедлив и при наличии неравновесной реакции окисления.

#### Вычисление нормальной скорости разложения окиси этилена

Характерные профили  $\epsilon_\alpha$  и  $x_\alpha$  для разложения окиси этилена приведены на рис. 4, сплошной линией обозначены кривые в случае учета взаимной диффузии всех компонентов, а штриховой — при числе Льюиса, равном 1. В отличие от горения окиси углерода в данном случае заметно различаются также и профили  $\epsilon_\alpha$  (рис. 4, а). Как видно из рис. 4, б, для окиси этилена нет подобия полей температуры и концентраций.

На рис. 5 дана зависимость нормальной скорости горения окиси этилена от константы скорости реакции  $k_0$ . Как следует из этой зависимости, наилучшее совпадение с экспериментом ( $u_{n\text{эксп}}=0,125$  м/с) получается при  $k_0=(2,3 \div 2,5) \cdot 10^{12}$ , что несколько отличается от константы скорости реакции, принятой в [6].

Скорости горения окиси этилена, вычисленные с учетом многокомпонентной диффузии, при  $L=1$  и неравных друг другу реальных значениях теплоемкостей отличаются на 20%. В первом случае при  $p=9,81 \cdot 10^4$  Н/м<sup>2</sup> имеем  $u_n=0,13$  м/с ( $T_\infty=1666^\circ\text{K}$ ), а при  $L=1$   $u_n=0,11$  м/с.

В результате расчетов получено, что скорость горения  $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}$  при  $L=1$  и равных друг другу теплоемкостях  $c_{p\alpha}=2,394 \cdot 10^3$  Дж/кг·град (теплоемкость окиси этилена) равна 0,072 м/с, что на 71% меньше точного значения  $u_n$ , полученного с учетом многокомпонентной диффузии. Температура пламени при этом равна  $1580^\circ\text{K}$ . При  $L=1$  и одинаковых

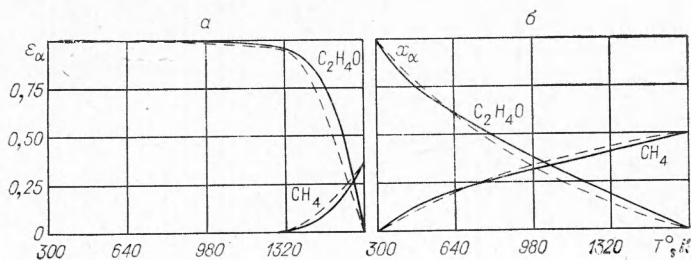


Рис. 4.

теплоемкостях  $c_{p\alpha} = 2,226 \cdot 10^3$  Дж/кг·град  $u_n, \text{м/с}$   
 $u_n = 0,16$  м/с ( $T_\infty = 1666^\circ \text{К}$ ).

Таким образом, для данной реакции наблюдается сильная зависимость нормальной скорости горения от значений теплоемкостей компонентов и температуры пламени. Этот результат сохраняет силу и при учете многокомпонентной диффузии.

Расчет для случая одинаковых теплоемкостей  $c_{p\alpha} = 2,226 \cdot 10^3$  Дж/кг·град и точном учете диффузионных свойств смеси дает  $u_n = 0,21$  м/с ( $T_\infty = 1666^\circ \text{К}$ ). Точное же значение скорости нормального горения, за которое принималось  $u_n$ , полученное с учетом взаимной диффузии всех компонентов и не равных друг другу теплоемкостей, равно 0,13 м/с, т. е. расхождение 60%.

Таким образом, для реакции (6) обычное допущение теории горения о равенстве удельных теплоемкостей [1] дает достаточно большую погрешность в определении  $u_n$ , так как, согласно приведенным результатам, существенную роль играет перенос энергии в результате диффузии компонентов. Кроме того с изменением  $c_{p\alpha}$  изменяется величина температуры горения. Отметим также, что для данной реакции нормальные скорости горения, вычисленные для потенциалов взаимодействия Леннарда — Джонса и твердых сфер, различаются на 9%. Для этих случаев скорость нормального горения равна соответственно 0,13 и 0,118 м/с.

Представляет интерес зависимость нормальной скорости горения от давления. В результате расчетов нормальной скорости горения  $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}$  при давлениях  $9,81 \cdot 10^3$ ,  $9,81 \cdot 10^4$  и  $9,81 \cdot 10^5$  Н/м<sup>2</sup> были получены значения  $u_n$ , равные 0,414; 0,13 и 0,0413 м/с соответственно. Как видно из анализа этих данных, вычисленные значения нормальной скорости горения окиси этилена с хорошей точностью следуют известной для мономолекулярных реакций зависимости  $u_n$  от давления [1], согласно которой для реакции первого порядка  $u_n \sim p^{-\frac{1}{2}}$ , что также является косвенным доказательством правильности вычислений.

Подводя итог следует сказать, что в случае сильного различия молекулярных весов необходимо корректно учитывать процессы переноса и теплофизические свойства реагентов. В данном случае нельзя игнорировать перенос энергии в ходе многокомпонентной диффузии, т. е. приближение  $c_{p\alpha} = \text{idem}$  и  $L = 1$  приводят к существенной погрешности (до 100%). Полученные в рамках приближения  $c_{p\alpha} = \text{idem}$  и  $L = 1$  в результате решения обратной задачи термокинетические постоянные  $E$  и  $qk_0$  будут вычислены с большой погрешностью, обусловленной неточностью теплофизических данных и расчета процессов переноса. Выбором эффективных значений  $E$  и  $qk_0$  в рамках даже довольно грубых допущений относительно процессов переноса можно получить согласование с экспериментом в очень узком диапазоне изменения термодинамических параметров. Фактически же  $E$  и  $qk_0$ , найденные при грубых допущениях относительно процессов переноса, не инвариантны относительно изменения условий переноса массы компонентов и энергии, и в связи с этим не обладают большой ценностью.

Таким образом, в случае, если молекулярные веса компонентов сильно различаются, необходимо корректно моделировать процессы тепло- и массообмена в реагирующих системах.

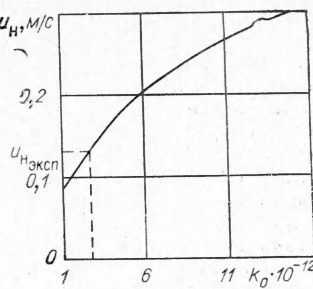


Рис. 5.

Поступила в редакцию  
29/VI 1973

## ЛИТЕРАТУРА

1. Е. С. Щетинков. Физика горения газов. М., «Наука», 1965.
2. Ф. А. Вильямс. Теория горения. М., «Наука», 1971.
3. Т. Карман, Д. Миллан. Пламена и химическая кинетика. Сб. ст. М., ИЛ, 1961.
4. Д. Гиршфельдер, К. Кертисс, Д. Кэмпбелл. В сб. «Вопросы горения и детонационных волн». М., Оборонгиз, 1958.
5. Д. Гиршфельдер, К. Кертисс, Р. Берд. Молекулярная теория газов и жидкостей. М., ИЛ, 1961.
6. М. Герштейн, Г. Макдональд, Р. Шалла. В сб. «Вопросы горения и детонационных волн». М., Оборонгиз, 1958.
7. Б. П. Демидович, И. А. Марон, Э. З. Шувалова. Численные методы анализа. М., «Наука», 1967.
8. Б. Льюис, Г. Эльбе. Горение, пламя и взрывы в газах. М., «Мир», 1968.
9. Краткий справочник физико-химических величин. Под ред. К. П. Мищенко и А. А. Равделя. М., «Химия», 1972.
10. Г. А. Тирский. ПММ, 1969, 2.

УДК 662.58

### ПРИМЕНЕНИЕ ИНТЕГРАЛЬНОГО МЕТОДА К РАСЧЕТУ ХАРАКТЕРИСТИК ГЕТЕРОГЕННОГО ЗАЖИГАНИЯ

*В. И. Розенбанд, В. В. Барзыкин*

(Москва)

Гетерогенным зажиганием называется приводящий к горению нестационарный процесс теплового самоускорения реакции, протекающей на границе раздела горючего и окислителя. В данной работе методом интегральных соотношений рассматривается протекание процесса гетерогенного воспламенения системы двух полубесконечных сред конденсированного горючего ( $x > 0$ ) и газообразного окислителя ( $x < 0$ ), на поверхности раздела которых идет экзотермическая химическая реакция:

$$v_o A_o + v_f A_f - v_p A_p = 0,$$

где  $o, f, p$  — индексы окислителя, горючего и продуктов реакции соответственно (продукты реакции считаем газообразными). Скорость теплового выделения поверхностной реакции предполагаем

$$W = QK_0 c_{os}^e e^{-E/RT_s},$$

где  $c_{os}$  — приповерхностная объемная концентрация окислителя;  $e$  — порядок реакции по окислителю;  $Q$  — тепловой эффект;  $K_0$  — предэкспонент;  $E$  — энергия активации;  $R$  — универсальная газовая постоянная;  $T_s$  — температура поверхности.

Система уравнений, описывающих процесс гетерогенного воспламенения (в предположении равенства молекулярных весов окислителя и продуктов реакции и отсутствия стефановского потока), в безразмерном виде записывается следующим образом:

$$\frac{\partial \theta_1}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \theta_1}{\partial \xi^2} \quad (\xi < 0), \quad (1)$$

$$\frac{\partial z_o}{\partial \tau} = L \frac{\partial^2 z_o}{\partial \xi^2} \quad (\xi < 0), \quad (2)$$