

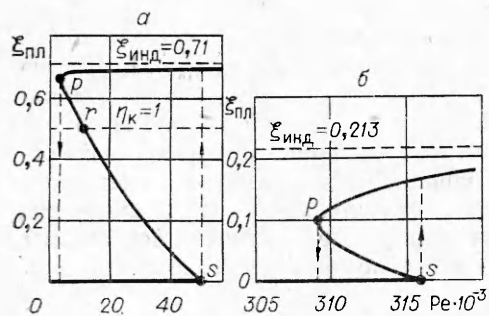


Рис. 3. Местоположение стационарной волны горения в канале в зависимости от числа Пекле при $Da=0,03$ (а) и $0,1$ (б).

а влияние малых возмущений исследовать методом, развитым для оценки локальной устойчивости фронта пламени в однородной безграничной среде².

Действительно, рассматривая ход кривой $u_r/u_* \cdot (\xi_{пл})$ в окрестности точек A , B и C , отвечающих стационарным состояниям (см. рис. 2), легко убедиться, что любые малые отклонения фронта от положения равновесия в точке C , где $\frac{d}{d\xi_{пл}} \left(\frac{u_r}{u_*} \right) < 0$, приводят к дальнейшему уходу волны горения от стационарного состояния. Точки A и B , где $\frac{d}{d\xi_{пл}} \left(\frac{u_r}{u_*} \right) > 0$, напротив, являются устойчивыми. Что касается роли нестационарных возмущений в окрестности фронта, то, как показано в [3], они при определенных значениях физико-химических характеристик среды также могут привести к развитию неустойчивости фронта горения.

При этом реализуются, очевидно, лишь те стационарные состояния, которые устойчивы в обоих упомянутых выше случаях.

Поступила в редакцию
6/XI 1980

ЛИТЕРАТУРА

1. Г. С. Сухов, Л. П. Ярин. ФГВ, 1979, 15, 1.
2. А. А. Бутаков, Э. И. Максимов, К. Г. Шкадинский. К теории химических реакторов вытеснения. Препринт, Черноголовка, 1976.
3. Г. С. Сухов, Л. П. Ярин. ФГВ, 1980, 16, 3.

НЕСТАЦИОНАРНОЕ РАСПРОСТРАНЕНИЕ ДВУХСТАДИЙНОЙ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОЙ РЕАКЦИИ В К-ФАЗЕ

В. С. Берман, Ю. С. Рязанцев, В. М. Шевцова
(Москва)

Основные закономерности стационарного распространения плоского фронта горения в газе при протекании двухстадийной экзотермической последовательной реакции теоретически с использованием ЭВМ исследо-

² Вообще говоря, такой подход может быть применен к анализу устойчивости высокотемпературных режимов любого реактора вытеснения.

ваны в [4]. Приближенное аналитическое решение этой задачи как для газа, так и для конденсированной фазы получено в [2, 3], где показано, что в зависимости от значений определяющих параметров структура зоны горения существенно изменяется и выделены качественно различные режимы горения — слияние, управление и отрыв.

В работе [4] впервые численным счетом установлено, что в конденсированной фазе (безгазовое горение) даже в случае простейшей одностадийной реакции первого порядка с аррениусовой зависимостью константы скорости реакции от температуры в некотором интервале изменения определяющих параметров стационарное распространение плоского фронта горения оказывается неустойчивым и становится пульсирующим (автоколебательным). В последующих работах (например, [5, 6]) детально исследовались критические условия перехода к нестационарному режиму горения и основные особенности автоколебательного теплового распространения фронта одностадийной безгазовой экзотермической химической реакции в конденсированной среде.

В данной работе при помощи ЭВМ исследовано нестационарное распространение плоской зоны безгазового горения с двухстадийной последовательной экзотермической реакцией. Для каждого из характерных стационарных режимов — слияния, управления и отрыва — установлены границы устойчивости, изучена роль каждой стадии реакции при автоколебательном распространении волны горения. При обычных упрощающих предположениях нестационарное распространение плоского фронта двухстадийной последовательной безгазовой реакции первого порядка $A_1 \rightarrow A_2 \rightarrow A_3$ в конденсированной среде может быть описано следующей системой уравнений и граничных условий:

$$\rho c \cdot \partial T / \partial t' = \lambda \cdot \partial^2 T / \partial x^2 + Q_1 F_1 + Q_2 F_2, \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \rho \cdot \partial a_1 / \partial t' &= -F_1, & \rho \cdot \partial a_2 / \partial t' &= F_1 - F_2, \\ F_1 &= a_1 k_1 \rho \exp(-E_1/RT), & F_2 &= a_2 k_2 \rho \exp(-E_2/RT), \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} x &= 0, \quad T = T_+, \quad x = \infty, \quad T = T_-, \\ t' &= 0, \quad x > 0, \quad T = T_-, \quad a_1 = 1, \quad a_2 = 0, \\ T_+ &= T_- + (Q_1 + Q_2)/c. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь x — координата; t' — время; ρ — плотность; c — теплоемкость; λ — теплопроводность; a_i — массовая доля вещества; Q_i — тепловой эффект реакции; k_i — предэкспоненциальный множитель; E_i — энергия активации; F_i — скорость химической реакции ($i = 1, 2$); T_+ — адиабатическая температура полного превращения; T_- — начальная температура конденсированной горючей смеси. Предполагается, что в ходе химических реакций плотность и все теплофизические характеристики среды сохраняют постоянные значения.

При решении задачи (1)–(3) на ЭВМ будем использовать вместо точных выражений для зависимостей скоростей химических реакций от температуры (функции Аррениуса) их разложения по Франк-Каменецкому [7]. Для оценки погрешностей, связанных с этой заменой, проведены контрольные расчеты с точными функциями Аррениуса. Установлено, что качественная картина процесса в обоих случаях одинакова, а затраты машинного времени в первом случае существенно меньше.

В безразмерных переменных уравнения после разложения функции Аррениуса по Франк-Каменецкому запишутся в виде

$$\begin{aligned} \partial \Theta / \partial t &= \partial^2 \Theta / \partial \xi^2 + \delta_1 (1-r) \exp[\beta \sigma_E (\Theta - 1)] + \\ &+ \delta_2 (r-q) \exp[\beta (1 - \sigma_E)(\Theta - 1)], \\ \partial r / \partial t &= \delta_1 (1-r) / \sigma_q \exp[\beta \sigma_E (\Theta - 1)], \end{aligned} \quad (4)$$

$$\partial q/\partial t = \delta_2(r - q)/(1 - \sigma_Q) \exp[\beta(1 - \sigma_E)(\Theta - 1)].$$

Здесь $r = 1 - a_1$; $q = 1 - a_1 - a_2$; $\Theta = (T - T_-)/(T_+ - T_-)$; $t = t'/\Delta t$; $\xi = x/\Delta x$; $(\Delta x)^2 = \lambda \Delta t / \rho c$; $\sigma_Q = Q_1/(Q_1 + Q_2)$; $\sigma_k = k_1/(k_1 + k_2)$; $\sigma_E = E_1/(E_1 + E_2)$; $\sigma = T_-/(T_+ - T_-)$; $\beta = \frac{(E_1 + E_2)}{RT_+^2} (T_+ - T_-)$; $\delta_1 = k_1 \Delta t \sigma_Q \exp[-\sigma_E \beta \times (1 + \sigma)]$; $\delta_2 = k_2 \Delta t (1 - \sigma_Q) \exp[-(1 - \sigma_E) \beta (1 + \sigma)]$.

В безразмерные комбинации δ_1 и δ_2 входит неопределенный временной масштаб Δt , который при расчетах выбирается так, чтобы безразмерная скорость стационарного горения была порядка единицы. Значения стационарной скорости горения вычислялись по формулам работы [3] с учетом того, что в данном случае использовалось разложение по Франк-Каменецкому. В отличие от одностадийной реакции [4], где граница устойчивости определяется параметрами β , σ , здесь эта граница зависит от параметров β , σ , σ_E , σ_k , σ_Q .

На рис. 1 представлены результаты расчета границы устойчивости в виде зависимости $\beta(\sigma_E)$ при $\sigma_k = \sigma_Q = 0,5$, $\sigma = 0,1$. Вертикальные штриховые линии разделяют характерные режимы *I*, *II*, *III* — слияние, управление и отрыв соответственно. Для значений β и σ_E , лежащих ниже кривой, наблюдается стационарное распространение фронта двухстадийной последовательной реакции в соответствующем режиме. Для значений β и σ_E , лежащих выше кривой, наблюдается автоколебательное распространение реакции.

В режиме слияния, когда скорость стационарного распространения фронта горения определяется кинетическими характеристиками первой реакции и адиабатической температурой полного превращения, а величина σ_E изменяется в пределах $0,5 < \sigma_E \leq 1$ [3],

$$\delta_1 = \sigma_Q \sigma_E \beta,$$

$$\delta_2 = (1 - \sigma_k)/\sigma_k \cdot (1 - \sigma_Q) \sigma_E \beta \exp[-(1 - 2\sigma_E) \beta (1 + \sigma)].$$

В этом режиме двухстадийная реакция фактически вырождается в одностадийную, нестационарное распространение которой рассматривалось ранее [4, 5]. Распределение температуры и концентраций в режиме слияния в момент вспышки при $t = 6,4$, $\sigma_k = 0,5$, $\sigma_E = 0,65$, $\sigma_Q = 0,9$, $\beta = 15$ показано на рис. 2, где 1 — температура, 2 — концентрация промежуточного продукта в увеличенном масштабе $a = 25 a_2$, 3 — убывание исходного продукта, $r = 1 - a_1$. При счете стационарного режима распространения фронта реакции результаты счета согласуются с основными выводами работы [3].

Анализ границ устойчивости в зависимости от σ_Q ($\sigma_E = 0,5$, $\sigma_k = 0,5$, $\sigma = 0,1$) показал, что с уменьшением σ_Q значение β , при котором возможно автоколебательное распространение фронта реакции, уменьшается, зависимость границ устойчивости от параметра σ_k слабее; значение β , при котором начинается пульсирующее распространение волны горения, уменьшается, но незначительно.

Режим управления, для которого $(1 + \sigma)/(3 - \sigma_Q + \sigma) \leq \sigma_E < 1/2$, представляет наибольший интерес. В этом случае скорость горения определяется кинетикой второй реакции и адиабатической температурой полного превращения,

$$\delta_1 = \sigma_k \sigma_Q (1 - \sigma_Q) \beta (1 - \sigma_E) e^{(1 - 2\sigma_E) \beta (1 + \sigma)} / (1 + \sigma) (1 - \sigma_k),$$

$$\delta_2 = (1 - \sigma_E) \beta (1 - \sigma_Q)^2 / (1 + \sigma).$$

Для конечных значений β (порядка 10—20) при изменении σ_E от 0,5 до $(1 + \sigma)/(3 - \sigma_Q + \sigma)$ наблюдается плавный переход от режима

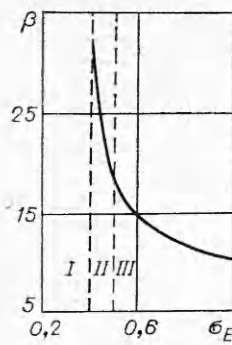


Рис. 1.

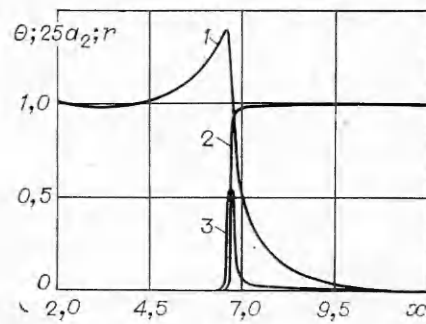


Рис. 2.

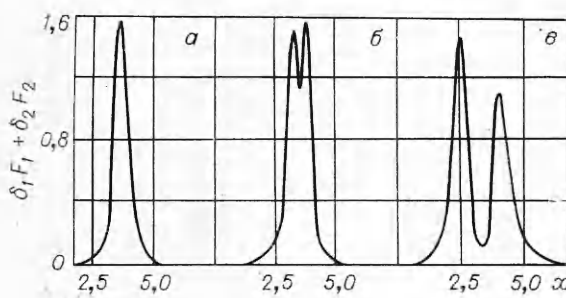


Рис. 3.

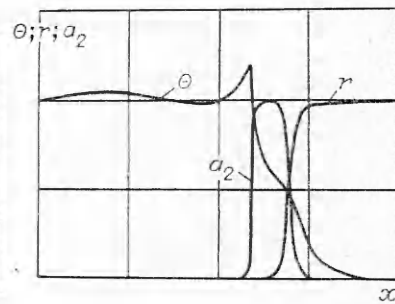


Рис. 4.

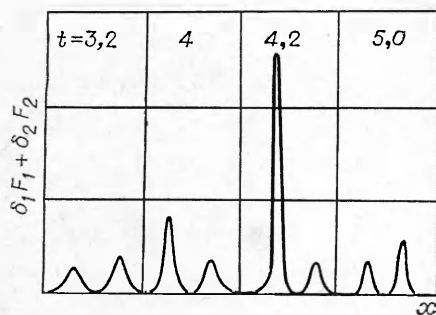


Рис. 5.

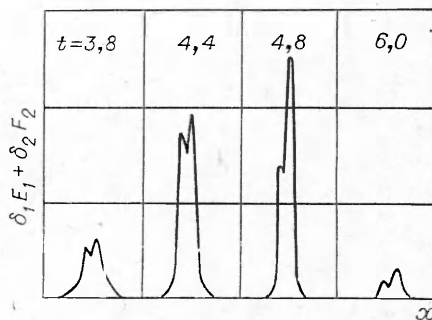


Рис. 6.

слияния к режиму отрыва, что можно видеть из рис. 3, на котором показаны пространственные распределения интенсивности тепловыделения $\delta_1 F_1 + \delta_2 F_2$, где

$$F_1 = (1 - r) \exp [\beta \sigma_E (\Theta - 1) / (\Theta + \sigma)],$$

$$F_2 = (r - q) \exp [\beta (1 - \sigma_E) (\Theta - 1) / (\Theta + \sigma)],$$

для различных значений σ_E .

Видно, что при $\sigma_E = 0,47$ пространственное расположение F_1 и F_2 совпадает (см. рис. 3, а) и вид распределения аналогичен наблюдаемому в режиме слияния, при $\sigma_E = 0,45$ проявляются два пика (см. рис. 3, б), при $\sigma_E = 0,42$ функции тепловыделения полностью разделяются (см. рис. 3, в).

Граница устойчивости стационарного распространения для режима управления (см. рис. 1, II) более резкая, чем в режиме слияния. В результате численного анализа установлено, что в режиме управления с

изменением σ_E изменяется роль отдельных стадий реакции в автоколебательном процессе. На рис. 4 показано изменение температуры Θ , концентрации $r = 1 - a_1$ и концентрации a_2 для $\sigma_E = 0,42$, $\beta = 35$, $\sigma_k = 0,5$, $\sigma_q = 0,5$ в момент времени $t = 4,0$. Из вида температурного профиля следует, что пик температуры обусловлен второй реакцией. Путем численного решения найдено также, что для значений $\sigma_E \sim 0,42$ и меньших автоколебательный процесс в основном обусловлен второй реакцией. Для наглядности на рис. 5 показано изменение функций тепловыделения на протяжении вспышки для $\sigma_E = 0,42$, $\sigma_q = 0,5$, $\sigma_k = 0,5$, $\beta = 35$. Видно, что функция тепловыделения второй реакции F_2 за время вспышки резко изменяется, в то время, как F_1 сохраняет почти постоянное значение. Для $\sigma_E > 0,42$ наблюдается обратная ситуация: определенную роль в автоколебательном процессе играет первая реакция.

На рис. 6 показано изменение функций тепловыделения для $\sigma_E = 0,45$, $\sigma_q = 0,5$, $\sigma_k = 0,5$, $\beta = 23$. В начале вспышки область с тепловыделением сужается, максимум функции тепловыделения растет, затем следует резкое увеличение максимума первой функции тепловыделения, а тепловыделение во второй реакции слегка уменьшается. Через некоторое время все распределение повторяется. Кроме того, из расчетов следует, что при постоянном σ_E расстояние между максимумами F_1 и F_2 изменяется в соответствии с колебаниями скорости горения; во время вспышек (ускорение фронта) максимумы сближаются, во время депрессии (замедление фронта) — расходятся.

В режиме отрыва, который реализуется при $0 < \sigma_E < (1 + \sigma)/(3 - \sigma_q + \sigma)$, скорость горения определяется характеристиками и адиабатической температурой первой стадии реакции, вторая стадия протекает в индукционном режиме. Поскольку распространение фронта первой реакции в этом случае практически не зависит от второй реакции, этот режим менее интересен и не исследовался детально.

Поступила в редакцию
19/III 1981

ЛИТЕРАТУРА

1. Б. И. Хайкин, А. К. Филоненко, С. И. Худяев. ФГВ, 1968, 4, 4, 591.
2. В. С. Берман, Ю. С. Рязанцев. ПММ, 1973, 37, 6, 1049.
3. В. С. Берман, Ю. С. Рязанцев. ПМТФ, 1973, 1, 75.
4. К. Г. Шкадинский, Б. И. Хайкин, А. Г. Мержанов. ФГВ, 1971, 7, 1, 19.
5. А. Г. Мержанов, А. К. Филоненко, И. П. Боровинская. Докл. АН СССР, 1973, 208, 4, 892.
6. B. J. Matkovsky, G. I. Sivashinsky. Siam. J. Appl. Math., 35, 3, 465.
7. Д. А. Франк-Каменецкий. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М.: Наука, 1967.