

ЛИТЕРАТУРА

1. Коловертных Н. Е., Худяев С. И., Штейнберг А. С. ФГВ, 1980, 16, 4, 67.
2. Барзыкин В. В., Гонтковская В. Т., Мержанов А. С. и др. ФГВ, 1964, 3, 118.
3. Барзыкин В. В., Худяев С. И. Докл. АН СССР, 1966, 169, 6, 13.
4. Вольперт А. И., Худяев С. И. Анализ в классах разрывных функций и уравнения математической физики.— М.: Наука, 1975.
5. Vaganov D. A., Samoilenco N. G., Abramov V. G. Chem. Engng. Sci., 1978, 33, 8, 1133.
6. Коловертных Н. Е., Улыбин В. Б., Худяев С. И. и др. ФГВ, 1982, 18, 1, 72.
7. Худяев С. И., Маклаков С. В. Воспламенение и остыивание в переохлажденном сосуде // Кинетика и горение: Матер. VIII Всесоюз. симп. по горению и взрыву.— Черноголовка, 1986.
8. Селезенек А. А., Крекин Д. А., Максименко М. Р. Хим. физика, 1987, 6, 4, 538.
9. Жукова Л. А., Худяев С. И. Численный анализ протекания экзотермической реакции в системе пористое тело — газ/АН СССР, ОИХФ.— Препр.— Черноголовка, 1987.
10. Алдушин А. П., Мержанов А. Г. Теория фильтрационного горения: Общие представления и состоявшиеся исследования/АН СССР, ОИХФ.— Препр.— Черноголовка, 1987.
11. Бабкин В. С., Даевский Ю. М. ФГВ, 1987, 23, 5, 27.
12. Киселев О. В., Матрос Ю. Ш. ФГВ, 1987, 23, 5, 167.
13. Лукьянов А. Т., Артиох Л. Ю., Ицкова П. Г. Математическое моделирование задач теории горения.— Алма-Ата: Наука КазССР, 1981.
14. Франк-Каменецкий Д. А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике.— М.: Наука, 1967.
15. Макаренко А. Г., Хайкин Б. И., Худяев С. И. ФГВ, 1983, 19, 3, 9.
16. Марсден Дж., Мак-Кранен М. Бифуркация рождения цикла и ее приложения.— М.: Мир, 1980.
17. Ивлева Т. П., Шкадинский К. Г. Информационный бюл. Госфонда алгоритмов и программ СССР, 1979, 1(27), 18.

Поступила в редакцию 20/VI 1987,
после доработки — 25/XII 1987

УДК 536.46 : 662.612.31

СТАТИСТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДВУХФАЗНОГО РЕАГИРУЮЩЕГО ТУРБУЛЕНТНОГО ПОТОКА

A. B. Воронецкий, Д. Г. Павлов, А. В. Сухов, Д. А. Ягодников
(Москва)

Уровень технического совершенства в большинстве промышленных установок, применяемых в химической технологии, порошковой металлургии, энергетике, определяется степенью интенсификации различных физико-химических процессов, которые протекают в турбулентных многофазных реагирующих потоках. Однако теоретический анализ таких систем (без которого невозможно решение названной проблемы) существенным образом затруднен необходимостью учета турбулентного перемешивания, полифракционности состава частиц конденсированных компонентов, термодинамической неравновесности фаз и т. д.

В [1—3] используется распространенный в теории турбулентности подход, основанный на полуэмпирическом замыкании осредненных уравнений тепло- и массопереноса. Однако в рамках такого подхода пока что не получено удовлетворительных результатов даже применительно к гомогенным реагирующим потокам, что в первую очередь обусловлено сложностью описания осредненных источниковых членов, учитывающих кинетику химических реакций. Для многофазных систем задача еще более усложняется, и использование в этом случае полуэмпирических моделей турбулентности представляется еще более проблематичным.

Значительно более многообещающими можно считать получившие в последнее время достаточно широкое распространение статистические методы, использующие понятие функции плотности распределения вероятности (ПРВ) одной или нескольких термодинамических величин [4—6]. Основное достоинство этих методов состоит в возможности учета влияния турбулентных пульсаций различных параметров потока на

осредненные значения скоростей химических реакций. Следует, однако, отметить, что пока вероятностные модели успешно используются главным образом для расчета гомогенных систем, применительно же к многофазным турбулентным потокам исследованы лишь весьма упрощенные частные случаи [7, 8].

В самом общем виде аргументами ПРВ, описывающей состояние турбулентной многофазной реагирующей смеси, помимо пространственных координат и времени, являются термодинамические параметры газообразных компонентов и различные параметры частиц конденсированных компонентов. Однако поскольку возможности современной вычислительной техники не позволяют достичь удовлетворительной точности расчетов для ПРВ высоких размерностей, в выполненных исследованиях используются ПРВ лишь одного [7] или двух параметров [8].

В настоящей работе также предлагается использовать двумерную ПРВ, однако в отличие от [8] оба независимых параметра — характеристики частиц конденсированного компонента. В качестве этих параметров выбраны температура T_p и масса m_p частиц, что обусловлено, с одной стороны, наиболее существенным их влиянием именно на скорость гетерогенных химических реакций, а с другой — сильной нелинейностью этой зависимости. Для описания же состояния газообразного компонента, под которым будем понимать произвольную газовую смесь, используются обычные осредненные по турбулентным реализациям уравнения тепло- и массопереноса.

Рассмотрим сферически-симметричную систему с центральным источником исходной газовзвеси. Предположим, что частицы конденсированного компонента (далее — просто частицы) имеют сферическую форму и способны вступать в химические реакции с газообразным компонентом, а сами реакции могут протекать как с относительно низкими (кинетический режим), так и с высокими (диффузионный режим) скоростями. Положим также, что переход к более эффективному, с практической точки зрения, диффузионному режиму происходит при достижении частицей некоторой определенной температуры T_b . Исследование рассматриваемой системы подразумевает прежде всего анализ условий реализации стационарных режимов взаимодействия компонентов и расчет скоростей взаимодействия на этих режимах, а также изучение особенностей изменения параметров компонентов в процессе их реагирования (например, дисперсного состава частиц, концентрации окислителя в газе и т. д.).

Перейдем к определению совместной ПРВ температуры и массы частиц $P(T_p, m_p, R, t)$. Считаем, что произведение $P(T_p, m_p, R, t) \times \times dT_p dm_p$ — вероятность того, что у частицы, находящейся в момент времени t в точке пространства с координатой R , значения T_p и m_p заключены в интервалах $T_p \div (T_p + dT_p)$ и $m_p \div (m_p + dm_p)$. Для вывода уравнения баланса этой ПРВ примем следующие допущения: 1) влияние столкновений, коагуляции и дробления частиц на параметры системы пренебрежимо мало; 2) пульсации скорости частиц не оказывают существенного влияния на скорости изменения их массы и температуры; 3) турбулентная диффузия частиц подчиняется закону Фика; 4) счетная концентрация частиц статистически независима от их массы и температуры.

В такой постановке уравнение баланса $P(T_p, m_p, R, t)$ в сферической системе координат можно записать в виде

$$\frac{\partial \langle N \rangle P}{\partial t} + \frac{\partial v_p \langle N \rangle P}{\partial R} + \frac{\partial f_p \langle N \rangle P}{\partial m_p} + \frac{\partial \omega_p \langle N \rangle P}{\partial T_p} = \frac{1}{R^2} \frac{\partial}{\partial R} \left(R^2 D_p \frac{\partial \langle N \rangle P}{\partial R} \right), \quad (1)$$

где v_p — скорость конвективного переноса в радиальном направлении; f_p и ω_p — соответственно скорости изменения массы и температуры; D_p — коэффициент турбулентной диффузии; здесь и далее индекс p указывает на то, что параметр относится к конденсированным компонентам.

ментам; $\langle \rangle$ — осреднение по турбулентным реализациям состояний частиц.

Уравнение для осредненной счетной концентрации частиц $\langle N \rangle$ получаем интегрированием выражения (1) по T_p и m_p :

$$\frac{\partial \langle N \rangle}{\partial t} + \frac{1}{R^2} \frac{\partial}{\partial R} (R^2 \langle v_p \rangle \langle N \rangle) = 0, \quad (2)$$

где $\langle v_p \rangle = \int \int \left(\rho_p P - \frac{D_p}{R^2} \frac{\partial R^2 P}{\partial R} \right) \partial T_p dm_p$ — средняя скорость частиц.

Изменение осредненных значений параметров газообразных компонентов определяется системой соответствующих уравнений тепло- и масопереноса

$$\frac{\partial \rho c T}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial R} (\rho v c T) = \frac{1}{R^2} \frac{\partial}{\partial R} \left[R^2 (\lambda + \lambda_t) \frac{\partial T}{\partial R} \right] + \langle Q \rangle, \quad (3)$$

$$\frac{\partial \rho g}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial R} (\rho v g) = \frac{1}{R^2} \frac{\partial}{\partial R} \left[R^2 (D + D_t) \frac{\partial g}{\partial R} \right] + \langle G \rangle, \quad (4)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{R^2} \frac{\partial}{\partial R} (R^2 \rho v) = \langle G \rangle. \quad (5)$$

Здесь ρ — плотность; c — теплоемкость; g — относительная массовая концентрация окислителя; λ , λ_t и D , D_t — коэффициенты молекулярной и турбулентной теплопроводности и диффузии; $\langle Q \rangle$ и $\langle G \rangle$ — осредненные по состояниям частиц скорости тепловыделения и реагирования газообразных компонентов. Здесь и далее символ осреднения по турбулентным реализациям газообразных компонентов опускается.

Примем также, что для газа справедливо уравнение состояния идеальных газов, а давление в системе остается постоянным. Полагая далее справедливым допущение о полной скоростной равновесности фаз, запишем выражения

$$v_p = v, \quad D_p = D_t.$$

На основе анализа имеющихся данных по кинетике взаимодействия двухфазных реагирующих систем будем считать, что скорость изменения массы частиц может быть выражена следующим образом:

$$f_p = \begin{cases} \frac{4\pi r_p^2 \rho_p k_0 g \exp\left(-\frac{E}{R_\mu T_p}\right)}{A + Br_p} & \text{при } T_p < T_b, \\ \frac{4\pi r_p^2 \rho_p}{A + Br_p} & \text{при } T_p = T_b, \end{cases} \quad (6)$$

а для скорости нагрева частиц

$$\omega_p = \begin{cases} \frac{3}{c_p \rho_p r_p} \left[\rho_p k_0 \Delta H_p g \exp\left(-\frac{E}{R_\mu T_p}\right) + \alpha^* (T - T_p) + \right. \\ \left. + \epsilon \sigma (\langle T_k \rangle^4 - T_p^4) \right] & \text{при } T_p < T_b, \\ 0 & \text{при } T_p = T_b. \end{cases} \quad (7)$$

Здесь r_p — радиус; ΔH_p — теплота образования продуктов реакции в расчете на единицу массы к-фазы; k_0 — предэкспонентный множитель; E — энергия активации; R_μ — универсальная газовая постоянная; α^* — коэффициент теплоотдачи; ϵ — степень черноты; σ — постоянная Стефана — Больцмана.

Для определения лучистых тепловых потоков введем понятие эффективной температуры излучающей поверхности $\langle T_k \rangle$. Считаем, что в зависимости от режима взаимодействия компонентов (кинетического или диффузионного) излучает соответственно поверхность частицы или расположенная на некотором расстоянии от нее зона интенсивных химических реакций (а точнее, находящиеся в ней нагретые конденсированные

ные продукты). Проводя статистическое осреднение температуры окружающих отдельную частицу зон излучения, можно перейти к определению падающего на эту частицу радиационного потока. Тогда

$$\langle T_k \rangle = \frac{\int \int r_k^2 T_k P dT_p dm_p}{\int \int r_k^2 P dT_p dm_p}, \quad (8)$$

$$\begin{cases} r_k = r_p, & T_k = T_p \text{ при } T_p < T_b, \\ r_k = r_f, & T_k = T_f \text{ при } T_p = T_b \end{cases}$$

(r_f и T_f — радиус и температура отошедшей от поверхности частицы зоны интенсивных химических реакций).

Полагая, что в результате протекающих в системе химических реакций образуются только конденсированные продукты, запишем выражения для входящих в (3) — (5) источниковых членов:

$$\langle G \rangle = K_m \langle G_p \rangle = K_m \langle N \rangle \int \int f_p P dT_p dm_p, \quad (9)$$

$$\langle Q \rangle = \Delta H_p \langle G_p \rangle - \langle Q_p \rangle = \Delta H_p \langle N \rangle \int \int f_p P dT_p dm_p - \langle N \rangle \int \int m_p c_p \omega_p P dT_p dm_p$$

(K_m — стехиометрический коэффициент). Границы условия, необходимые для решения системы (1) — (5):

$$\begin{aligned} R = R_0: \quad & T = T_0, \quad g = g_0, \quad v = v_0, \quad \langle N \rangle = N_0, \\ & P = P_0(m_0) \delta(T_p - T_0), \\ R = R_0, \quad R = R_\infty: \quad & \frac{\partial T}{\partial R} = \frac{\partial g}{\partial R} = \frac{\partial \langle N \rangle}{\partial R} = \frac{\partial P}{\partial R} = 0, \end{aligned} \quad (10)$$

где $P_0(m_p)$ — функция распределения исходного конденсированного компонента по массе частиц; R_0 — радиус источника газовзвеси; R_∞ — условный радиус внешней границы системы (достаточно удаленной от начала координат); δ — дельта-функция Дирака. Принимаем, что в начальный момент времени во всем объеме $R_0 < R < R_\infty$

$$T = T_0, \quad g = g_0, \quad \langle N \rangle = N_0, \quad P = P_0(m_p) \delta(T_p - T_b). \quad (11)$$

Нестационарная постановка задачи дает возможность проследить развитие во времени процессов тепло- и массопереноса и химического реагирования в двухфазном турбулентном потоке вплоть до момента формирования стационарного режима. По (11) первоначально во всем объеме $R_0 < R < R_\infty$ находятся частицы, реагирующие с газом исключительно в диффузионном режиме. Это приводит к постепенному уменьшению их массы, повышению температуры и уменьшению концентрации газообразных компонентов. С течением времени поступающая через границу R_0 свежая газовзвесь оттесняет эту зону интенсивных реакций в сторону внешней границы R_∞ , а в области, примыкающей к источнику газовзвеси, появляются относительно холодные частицы, которые при движении постепенно прогреваются и вступают сначала в гетерогенные, а затем и в парофазные химические реакции. При этом переход от кинетического к диффузионному режиму реагирования происходит в пределах некоторой распространяющейся по газовзвеси зоны. Поскольку в этой зоне существует градиент температуры, назовем ее турбулентной тепловой волной, а для большей определенности (например, при анализе ее пространственного положения) будем отождествлять ее с поверхностью радиуса R_f , соответствующей максимуму тепловыделения. Скорость распространения волны относительно исходной смеси u_t вычисляем по массовой скорости расходования одного из компонентов [8] или — в случае стационарного режима — по формуле

$$u_t = \frac{\frac{1}{4} R_0^2}{R_f^2} v_0.$$

Система (1) — (5), описывающая распространение сферической двухфазной турбулентной тепловой волны при принятых граничных (10) и начальных (11) условиях, решалась численно для монофракционных и полидисперсных систем. В качестве к-фазы взят алюминий, газ — воздух. Представленные ниже результаты получены для стехиометрического соотношения компонентов при $T_0 = 300$ К, $T_b = 2300$ К, $R_0 = 0,1$ м, $R_\infty = 0,4$ м, $v_0 = 1,7$ м/с, $\rho_0 = 1,15$ кг/м³, $D_t = 0,01$ м²/с, $\lambda_t = 10$ Дж/(м · К · с), $g_0 = 0,23$, $\langle r_{p0} \rangle = 10^{-5}$. Величины физических констант, входящих в уравнения (6) — (8), задавались исходя из анализа имеющихся экспериментальных данных.

Для численного интегрирования применен явный конечно-разностный метод, в основу которого заложен принцип сохранения потока ПРВ через грани ячеек фазового пространства, что позволило с высокой степенью точности соблюдать условие нормировки функции $P(T_p, m_p, R, t)$:

$$\int \int P dT_p dm_p = 1.$$

Введем безразмерные температуру и массу частиц: $\Theta = (T_p - T_0)/(T_b - T_0)$, $\varphi = m_p/m_{p\max}$, $m_{p\max}$ — масса частиц максимального радиуса.

Рассмотрим вначале монофракционные системы. Совместную плотность распределения вероятности Θ и φ в турбулентном реагирующем потоке запишем так:

$$P(\Theta, \varphi) = \alpha \delta_\alpha(\Theta, \varphi - 1) + \gamma P_\gamma(\Theta, \varphi) + \beta \delta_\beta(\Theta - 1, \varphi),$$

где δ_α и δ_β — двумерные дельта-функции, характеризующие предельные состояния частиц (δ_α соответствует исходному состоянию, т. е. частицам с начальной температурой и максимальной массой; δ_β соответствует конечному состоянию частиц, т. е. их полному окислению и максимальной температуре); P_γ — плотность распределения промежуточных состояний; α , β , γ — весовые коэффициенты, причем $\alpha + \beta + \gamma = 1$.

На рис. 1, а — в представлены результаты расчета безразмерной ПРВ для трех характерных сечений установившейся турбулентной тепловой волны: а) передний фронт, б) зона наиболее интенсивных химических реакций, в) зона, где реакции практически завершены.

Из рис. 1, а видно, что для переднего фронта стационарной двухфазной тепловой волны характерно наличие частиц, находящихся преимущественно в предельных состояниях, представленных на графиках δ -функциями в виде двойных стрелок (цифры рядом указывают расчетные величины их весовых коэффициентов α и β). Наличие в зоне переднего фронта волны полностью прореагировавших частиц обусловлено их забросом сюда из высокотемпературных зон турбулентными пульсациями скорости.

По мере продвижения в глубь стационарной волны доля частиц, находящихся в исходном состоянии, резко уменьшается, что вызвано их взаимодействием с газом, доля же частиц, находящихся в промежуточных состояниях, напротив, растет. Эти изменения отчетливо видны из рис. 1, б, соответствующего состоянию газовзвеси в сечении с максимальной интенсивностью тепловыделения R_f . В сечениях, где химические реакции практически завершены, совместная ПРВ безразмерных массы и температуры частиц отлична от пуля только в области $\Theta = 1$, что соответствует диффузионному режиму протекающих реакций, причем основная доля частиц прореагировала уже полностью ($\beta \approx 0,8$).

По известному распределению $P(\Theta, \varphi)$ легко вычисляются другие статистические характеристики двухфазного потока. Так, на рис. 1 представлены рассчитанные по приведенным двумерным ПРВ одномерные распределения частиц по массе $P(\varphi)$, которые дают наглядную информацию о фракционном составе к-фазы в каждом из рассмотренных сечений.

На рис. 2 приведены профили изменения массы $\langle \varphi \rangle$, температуры $\langle \Theta \rangle$ и скорости реакции $\langle v \rangle$ частиц по безразмерной координате тепловой волны ξ , определяемой соотношением $\xi = (R - R_0)/(R_\infty - R_0)$; штри-

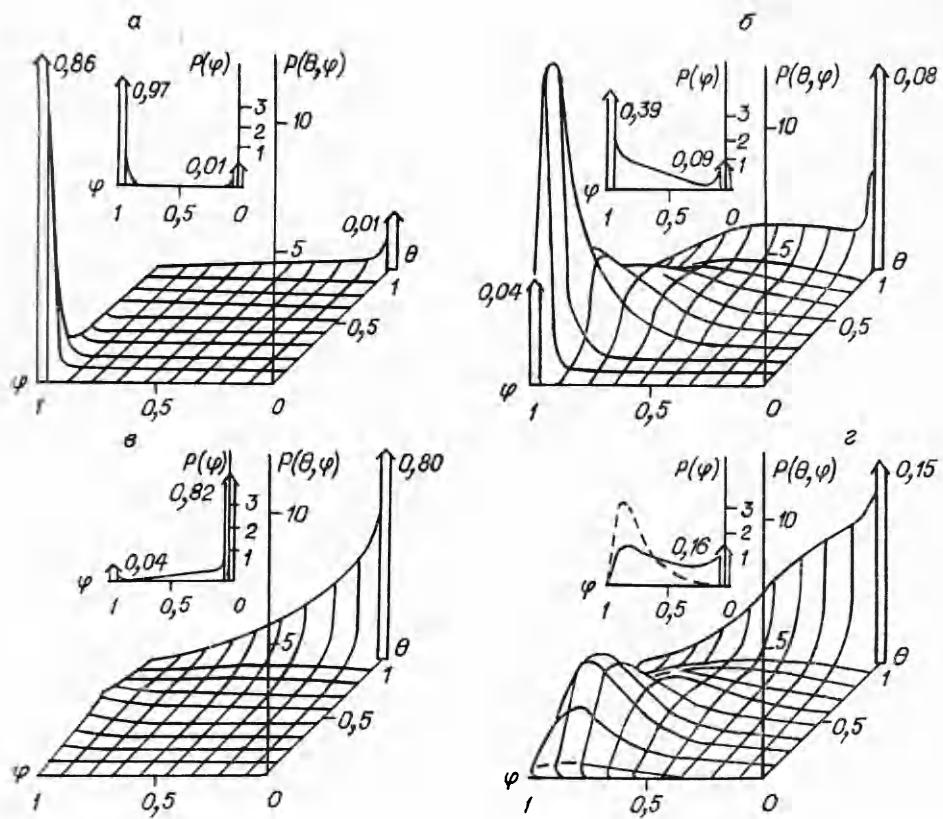


Рис. 1.

ховыми линиями показано положение сечений, соответствующих рис. 1, а — в.

При переходе от монофракционного состава исходной газовзвеси к полифракционному принципиальных различий в виде совместной ПРВ $P(\Theta, \varphi)$ не наблюдается. На рис. 1, г представлены результаты расчета такой ПРВ в сечении тепловой волны с максимальной интенсивностью химических реакций. Условия расчета полностью аналогичны рассмотренному выше примеру, за исключением исходного фракционного состава частиц, вид которого приведен штриховой линией на графике $P(\varphi)$. Следует, однако, отметить, что, несмотря на качественное соответствие, количественные характеристики процессов в этих двух случаях существенно различаются. Так, скорость распространения волны для полифракционного состава исходной газовзвеси примерно в 1,5 раза выше таковой для монофракционной смеси (при одинаковом среднемассовом размере частиц), изменяются также и соотношения других параметров системы. Все это говорит о необходимости учета в прикладных расчетах конкретных особенностей фракционного состава используемых на практике газовзвесей.

Таким образом, предложенная модель позволяет учитывать существенное для двухфазных турбулентных реагирующих потоков распределение частиц по температуре и массе, выявлять и объяснять физические особенности процессов переноса в турбулентной тепловой волне, а введение в модель дополнительных предположений относительно скорости конвективного переноса к-фазы и коэффициентов турбулентной диффузии частиц позволяет проследить влияние на различные параметры потока возможной скоростной неравновесности фаз как в осредненном, так и в пульсационном движении.

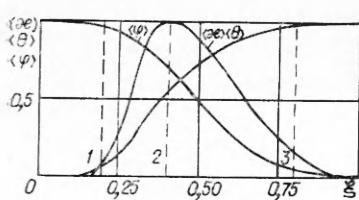


Рис. 2.

ЛИТЕРАТУРА

1. Новомлинский В. В., Стронгин М. П. // Тез. докл. 17-й Всесоюз. конф. по физике аэродисперсных систем.— Одесса, 1982.
2. Гавин Л. Б., Медведев В. А., Наумов В. А. // Химическая физика процессов горения и взрыва. Горение гетерогенных и газовых систем.— Черноголовка, 1986.
3. Сухов Г. С., Ярин Л. П. ФГВ, 1986, 22, 1.
4. Тurbulentные течения реагирующих газов/Под ред. П. А. Либби, Ф. А. Вильямса.— М.: Мир, 1983.
5. Методы расчета турбулентных течений/Под ред. В. Кольмана.— М.: Мир, 1984.
6. Кузнецов В. Р., Сабельников В. А. Турбулентность и горение.— М.: Наука, 1986.
7. Андреев М. А., Степанов А. М. // Химическая физика процессов горения и взрыва. Горение гетерогенных и газовых систем.— Черноголовка, 1986.
8. Андреев М. А., Степанов А. М. ФГВ, 1986, 22, 6.

Поступила в редакцию 20/VII 1987

УДК 534.226

НЕСТАЦИОНАРНЫЙ ЛИНЕЙНЫЙ ПИРОЛИЗ ПРИ ТЕРМОНЕЙТРАЛЬНОЙ РЕАКЦИИ

Ю. И. Бабенко, А. С. Штейнберг
(Черноголовка)

Исследование линейного пиролиза представляет значительный интерес для задач гетерогенного горения, в частности, горения полимеров. Однако до настоящего времени достаточно хорошо изучены закономерности процесса только для стационарного случая, когда разложение образца происходит с постоянной скоростью [4, 2]. Между тем нестационарный линейный пиролиз представляет не только теоретический интерес. Так, например, значительная часть или даже весь процесс пиролиза полимерных связующих при горении и форсированном разложении соответствующих композитных материалов (теплозащита и др.) протекает в нестационарном режиме. В настоящей работе анализируется процесс выхода линейного пиролиза на стационарный режим.

Рассматривается задача

$$\frac{\partial T}{\partial t} - a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - u(t) \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\alpha \delta}{c_p} T = 0, \\ u(t) = \int_0^\infty k e^{-E/PT} dx, \quad 0 < x < \infty, \quad 0 < t < \infty, \quad (1)$$

$$T(0, t) = T_s(t), \quad T(\infty, t) = T(x, 0) = 0,$$

описывающая переходной процесс при термодеструкции полубесконечного образца (пластины, цилиндра), когда температура поверхности $x = 0$ изменяется по заданному закону.

Математическая модель идентична стационарному случаю [1]. Используются следующие дополнительные предположения:

1) температура отсчитывается от начального значения, равного T_∞ , так что $T = T_{abs} - T_\infty$. При этом функция Аррениуса для малых температур определяется с некоторой погрешностью. Необходимость такого допущения обусловлена используемым ниже методом решения нестационарной задачи, который в принципе является точным, поэтому требует корректной математической постановки;

2) нестационарность учитывается только в уравнении теплопроводности, так как для конденсированных сред время релаксации зоны химической реакции много меньше, нежели для зоны прогрева.

Все обозначения общепринятые. Пояснения требует величина δ — характерный размер образца в поперечном направлении; в частности, для цилиндра радиуса r имеем $\delta = r/2$.