

9. Brewer L., Searsy A. W. The gaseous species of the Al—Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> system // J. Am. Chem. Soc.—1957.—73.—P. 5308.  
 10. Справочник по типовым программам моделирования/Под ред. А. Г. Ивахненко.—Киев: Техника, 1980.

г. Санкт-Петербург

УДК 541.124

B. A. Соболев, E. A. Щепакина

## САМОВОСПЛАМЕНЕНИЕ ЗАПЫЛЕННЫХ СРЕД

Рассматривается задача о тепловом взрыве газовой смеси, содержащей инертные пылевые частицы. Для определения критических условий теплового взрыва используется метод интегральных многообразий. Получена асимптотическая формула для вычисления критических условий теплового взрыва для автокатализической реакции горения.

При исследовании структуры предела самовоспламенения газовой смеси, содержащей равномерно распределенные инертные частицы, учитывая только межфазный теплообмен, будем рассматривать случай однородного распределения температуры. Сохраняя предположения работы [1], запишем двухтемпературную модель в безразмерном виде

$$\begin{aligned} \gamma \frac{d\Theta}{dt} &= \eta(1-\eta) \exp\left(\frac{\Theta}{1+\beta\Theta}\right) - \alpha(\Theta - \Theta_c), \\ \gamma_c \frac{d\Theta_c}{dt} &= \alpha(\Theta - \Theta_c), \\ \frac{d\eta}{dt} &= \eta(1-\eta) \exp\left(\frac{\Theta}{1+\beta\Theta}\right), \\ \Theta(0) &= \Theta_c(0) = \eta(0) = 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь  $\Theta$  — безразмерная температура реакционной фазы;  $\Theta_c$  — безразмерная температура инертных пылевых частиц;  $\eta$  — глубина превращения.

В отличие от [1] рассматривается случай, когда в реакционной фазе идет простейшая автокатализическая реакция. Как и в [1], считаем параметры  $\gamma$  и  $\beta$  малыми и понизим порядок системы (1), используя закон сохранения энергии:

$$\eta = \gamma\Theta + \gamma_c\Theta_c.$$

Для переменных  $\Theta$  и  $\eta$  получим систему уравнений второго порядка

$$\begin{aligned} \gamma \frac{d\Theta}{dt} &= \eta(1-\eta) \exp\left(\frac{\Theta}{1+\beta\Theta}\right) - \alpha\left(1 + \frac{\gamma}{\gamma_c}\right)\Theta + \frac{\alpha}{\gamma_c}\eta, \\ \frac{d\eta}{dt} &= \eta(1-\eta) \exp\left(\frac{\Theta}{1+\beta\Theta}\right). \end{aligned} \quad (2)$$

Цель работы — определение критического значения коэффициента теплопередачи  $\alpha$ .

Рассмотрим нулевое приближение. Система дифференциальных уравнений (2) сингулярно возмущенная, поскольку содержит малый параметр  $\gamma$  при одной из производных [2, 3].

Полагая  $\gamma = 0$ , получим порождающую задачу

$$\begin{aligned} \eta(1-\eta) \exp\left(\frac{\Theta}{1+\beta\Theta}\right) - \alpha\Theta + \frac{\alpha}{\gamma_c}\eta &= 0, \\ \frac{d\eta}{dt} &= \eta(1-\eta) \exp\left(\frac{\Theta}{1+\beta\Theta}\right). \end{aligned} \quad (3)$$

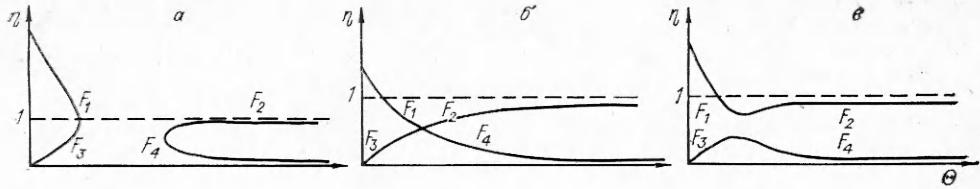


Рис. 1.

Уравнение (3) определяет медленную кривую, вид которой существенно зависит от  $\alpha$ . На рис. 1 эта кривая изображена при  $\alpha > \alpha_0^*$  (а),  $\alpha = \alpha_0^*$  (б),  $\alpha < \alpha_0^*$  (с).

Значение  $\alpha = \alpha_0^*$  критическое и определяется из условия существования точки самопересечения медленной кривой (3), т. е. точки, в которой функция, стоящая в правой части (3), обращается в нуль вместе с частными производными первого порядка по переменным  $\eta$  и  $\Theta$ . Простой счет дает следующий результат. Критическая точка (точка самопересечения медленной кривой) имеет координаты  $\eta = \eta_0$ ,  $\Theta = \Theta_0$  и соответствует значению  $\alpha = \alpha_0^*$ , где  $\Theta_0$  — корень уравнения

$$(1 + \beta\Theta)^4 - \Theta^2 + \gamma_c^{-1}\Theta = 0,$$

$$\text{равный } \frac{1}{2}(\gamma_c^{-1} + \sqrt{4 + \gamma_c^{-2}}) = \Theta_{00} \text{ при } \beta = 0,$$

$$\eta_0 = \gamma_c [\Theta_0 - (1 + \beta\Theta_0)^2],$$

$$\alpha_0^* = \gamma_c (2\eta_0 - 1) \exp\left(\frac{\Theta_0}{1 + \beta\Theta_0}\right).$$

Следует отметить, что участки  $F_1$  и  $F_3$  медленной кривой устойчивы, а участки  $F_2$  и  $F_4$  неустойчивы (в смысле определения из [2]). Значение  $\alpha = \alpha_0^*$  является критическим и в том смысле, как это принято считать в теории теплового взрыва. При  $\alpha > \alpha_0^*$  реакция носит невзрывной характер, а при  $\alpha < \alpha_0^*$  взрывной. Это справедливо, разумеется, только в рамках нулевого приближения, т. е. при  $\gamma = 0$ .

Для более точного анализа рассматриваемой задачи применим аппарат теории интегральных многообразий [3], использовавшийся при вычислении критических условий теплового взрыва в [3—5]. Суть предлагавшегося метода определения критических условий теплового взрыва состоит в следующем. В окрестности каждого из участков медленной кривой  $F_1$ ,  $F_2$ ,  $F_3$ ,  $F_4$  существуют одномерные медленные интегральные многообразия. Имеется такое значение  $\alpha^*(\gamma)$ , которое представляется в виде асимптотического разложения

$$\alpha^* = \alpha_0^* + \gamma\alpha_1^* + \gamma^2 + \dots$$

Теперь при  $\alpha = \alpha^*$  интегральные многообразия  $M_2$  и  $M_3$ , определенные в  $\gamma$ -окрестностях дуг  $F_2$  и  $F_3$  медленной кривой, «склеиваются», и возникает одномерное медленное интегральное многообразие, состоящее из устойчивого участка  $M_3$  и неустойчивого  $M_2$  (рис. 2). Такие одномерные многообразия в современной математической литературе получили название «траекторий-уток» [6]. Кривая, состоящая из  $M_2$  и  $M_3$ , разделяет на фазовой плоскости траектории, соответствующие взрывным и невзрывным режимам и является естественным объектом, при помощи которого можно моделировать критический режим.

Для вычисления  $\alpha^*$  применима модификация формализма, предложенного в [3]. Интегральное многообразие системы (2) будем искать в виде

$$\eta = h(\Theta, \gamma) = h_0(\Theta) + \gamma h_1(\Theta) + \gamma^2 h_2(\Theta) + \gamma^3 + \dots$$

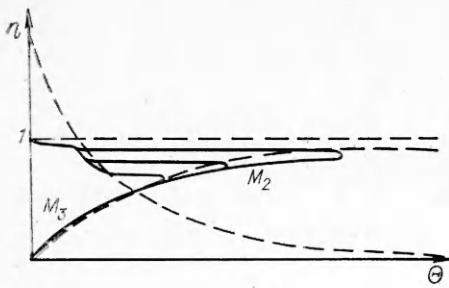


Рис. 2.

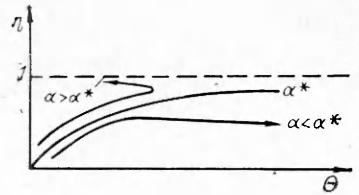


Рис. 3.

Подставив последнее выражение вместо  $\eta$  в уравнения (2), получим для функции  $h$  уравнение

$$\frac{\partial h}{\partial \Theta} \left[ h(1-h) \exp \left( \frac{\Theta}{1+\beta\Theta} \right) - \alpha \left( 1 + \frac{\gamma}{\gamma_c} \right) \Theta + \frac{\alpha}{\alpha_c} h \right] = \gamma h(1-h) \exp \left( \frac{\Theta}{1+\beta\Theta} \right).$$

Используя асимптотические разложения для функции  $h$  и параметра  $\alpha = \alpha^*$ , будем приравнивать коэффициенты при одинаковых степенях малого параметра  $\gamma$ . Значения  $\alpha_1^*, \alpha_2^*, \dots$  подбираем из условия непрерывности функций  $h_1, h_2, \dots$  соответственно.

Ограничивааясь первым приближением, получим для  $\alpha^*$  следующее выражение:

$$\begin{aligned} \alpha^* = \alpha_c^* + \gamma \alpha_1^* + O(\gamma^2) &= \gamma_c [2\gamma_c \Theta_0 - 2\gamma_c (1 + \beta\Theta_0)^2 - 1] \exp \left( \frac{\Theta_0}{1 + \beta\Theta_0} \right) - \\ &- \gamma \alpha_0^* \left[ \frac{1}{h_0'(\Theta_0)} + \frac{\Theta_0}{\gamma_c (1 + \beta\Theta_0)^2} \right] + O(\gamma^2), \\ h_0'(\Theta_0) &= \frac{dh_0}{d\Theta} \Big|_{\Theta=\Theta_0} = \frac{1}{2(1 + \beta\Theta_0)^2} [1 - 2\eta_0 + \\ &+ \sqrt{(1 - 2\eta_0)^2 + 2\eta_0(1 - \eta_0)(1 - 2\beta(1 + \beta\Theta_0))}]. \end{aligned}$$

Если воспользоваться малостью параметра  $\beta$  и при вычислении  $\alpha_0^*$  допустить погрешность порядка  $O(\beta^2)$ , а при вычислении  $\alpha_1^*$  — погрешность порядка  $O(\beta)$ , то для критического значения  $\alpha^*$  получается более компактное выражение

$$\begin{aligned} \alpha^* = \frac{1 - \beta\Theta_{00}^2}{2 + \sqrt{4 + \gamma_c^{-2}}} e^{\Theta_{00}} \left[ 1 - \gamma \left( \frac{1}{2} \gamma_c^{-2} + \frac{1}{2} \gamma_c^{-1} (2 + \sqrt{4 + \gamma_c^{-2}}) \right) + \right. \\ \left. + \sqrt[4]{4 + \gamma_c^{-2}} \sqrt{2 + \sqrt{4 + \gamma_c^{-2}}} \right]. \quad (4) \end{aligned}$$

Отметим, что полученное выражение хорошо согласуется с результатами, полученными в [8] для автокаталитической реакции горения без пылевых частиц.

Существует еще одна кривая, представляющая интерес для качественного исследования рассматриваемой системы. Она получается в результате «склеивания» медленных интегральных многообразий, расположенных в  $\gamma$ -окрестностях дуг  $F_1$  и  $F_4$  медленной кривой. Соответствующее значение  $\alpha = \alpha^{**}(\gamma)$  имеет вид

$$\begin{aligned} \alpha^{**} = \frac{1 - \beta\Theta_{00}^2}{2 + \sqrt{4 + \gamma_c^{-2}}} e^{\Theta_{00}} \left[ 1 - \gamma \left( \frac{1}{2} \gamma_c^{-2} + \frac{1}{2} \gamma_c^{-1} (2 + \sqrt{4 + \gamma_c^{-2}}) \right) - \right. \\ \left. - \sqrt[4]{4 + \gamma_c^{-2}} \sqrt{2 + \sqrt{4 + \gamma_c^{-2}}} \right], \end{aligned}$$

аналогичный (4). Это значение дает критическую траекторию, которая отделяет переходную область от области медленных режимов, т. е. режимов, для которых характерно замедление реакции при незначительных степенях превращения реагирующего вещества.

Промежутку ( $\alpha^*$ ,  $\alpha^{**}$ ) соответствует область медленных переходных режимов. Для них характерно сравнительно быстрое (но не взрывное) течение реакции до значительных степеней превращения реагирующего вещества, а затем резкое падение степени разогрева и переход к медленному течению реакции (см. рис. 2).

Важно отметить, что поскольку точка (0, 0) соответствует положению равновесия системы (2), то реакция может начинаться только в том случае, когда начальная точка лежит в окрестности положения равновесия [7]. Критическая траектория, соответствующая значению  $\alpha = \alpha^*$ , делит область начальных условий  $\eta = \eta(0)$ ,  $\Theta = \Theta(0)$  на две части, соответствующие взрывным и невзрывным режимам (рис. 3).

В заключение авторы выражают признательность В. С. Бабкину и В. И. Бабушоку за помощь в постановке задачи и обсуждение полученных результатов.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Бабушок В. И., Гольдштейн В. М., Романов А. С. и др. Тепловое воспламенение в инертной пористой среде // ФГВ.—1992.—28, № 4.—С. 3—10.
2. Мищенко Е. Ф., Розов И. Х. Дифференциальные уравнения с малым параметром и релаксационные колебания.—М.: Наука, 1975.
3. Гольдштейн В. М., Соболев В. А. Качественный анализ сингулярно возмущенных систем.—Новосибирск: Ин-т математики АН СССР. Слб. отд-ние, 1988.
4. Бабушок В. И., Гольдштейн В. М. Предел самовоспламенения: переходные режимы реакции.—Новосибирск, 1985.—51 с.—(Препринт АН СССР. Сиб. отд-ние. Ин-т математики, № 10).
5. Babushok V. I., Gol'dshtejn V. M., Sobolev V. A. Critical conditions for thermal explosion with reactant consumption // Combust. Sci. and Technol.—1990.—70.—P. 81—89.
6. Звонкин А. К., Шубин М. А. Нестандартный анализ и сингулярные возмущения обыкновенных дифференциальных уравнений // Успехи матем. наук.—1984.—39, вып. 2.—С. 77—127.
7. Gray B. F. Critical behaviour in chemical reacting systems: II. An exactly soluble model // Combust. Flame.—1973.—21.—P. 317—325.
8. Gorelov G. N., Sobolev V. A. Duck-trajectories in a thermal explosion problem // Appl. Math. Lett., 1992.

г. Самара

УДК 536.46

Е. М. Тонкопий, Г. Б. Манелис, С. В. Куликов

#### ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛЬ ГОРЕНИЯ УГЛЕРОДА В ПОРИСТОЙ СРЕДЕ С УЧЕТОМ КИНЕТИКИ ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ

Предложена математическая модель фильтрационного горения, позволяющая более подробно учсть кинетику химических превращений. Расчеты, проведенные для многокомпонентной системы с усложненной кинетикой, продемонстрировали существенное влияние кинетики на основные параметры процесса. Варьирование водовоздушного соотношения для случая «влажного» горения показало, что с увеличением начальной концентрации воды возрастают полнота превращения горючего, скорость продвижения фронта и температура горения.

Интерес к явлению распространения фронта горения в пористой среде обусловлен разнообразием технологических процессов, для которых существует механизм фильтрационного горения (ФГ). Это, например, подземная газификация угля, питенсификация добычи нефти с помощью

© Е. М. Тонкопий, Г. Б. Манелис, С. В. Куликов, 1993.