

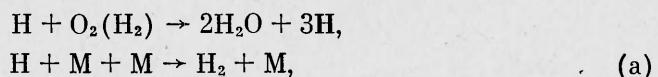
**ОБ УСТОЙЧИВОСТИ СТАЦИОНАРНЫХ СОСТОЯНИЙ
ПЛОСКОГО ЛАМИНАРНОГО ПЛАМЕНИ
В ВОДОРОДНО-КИСЛОРОДНОЙ РЕАГИРУЮЩЕЙ СМЕСИ**

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

(Алма-Ата)

В работе [1] численно реализованы экспериментально наблюдаемые колебательные режимы в пламени $H_2 - O_2 - N_2$. В [2] на основе приближенного аналитического анализа предсказаны колебания плоского пламени, стабилизированного на изотермической горелке. В [1, 2] предполагался простой одноступенчатый механизм. Для пламени $H_2 - O_2 - N_2$, богатого водородом, экспериментально и теоретически доказан [3] двухступенчатый механизм реакций. Для этой модели химического взаимодействия теоретически обнаружены неединственные стационарные состояния пламени на плоской изотермической горелке [4] и исследовано влияние колебаний температуры и скорости на устойчивые стационарные состояния [5].

В настоящей работе теоретически исследуются неединственные и колебательные режимы в богатом пламени $H_2 - O_2 - N_2$. Динамика процесса полностью описывается двухступенчатым кинетическим механизмом с двумя реагентами: атомами водорода и молекулами кислорода



где M — любое устойчивое вещество, участвующее в механизме переноса энергии в реакции образования воды и других соединений водорода.

В безразмерных переменных при общепринятых допущениях [4] задача формулируется следующей системой уравнений диффузии:

$$Fo > 0 : 0 < S < 1,$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_1}{\partial Fo} + Pe \frac{\partial C_1}{\partial S} &= Le_1 \frac{\partial^2 C_1}{\partial S^2} - A_1 \frac{C_1 C_2}{\Theta} \exp\left(-\frac{1}{\Theta}\right), \\ \frac{\partial C_2}{\partial Fo} + Pe \frac{\partial C_2}{\partial S} &= Le_2 \frac{\partial^2 C_2}{\partial S^2} + 2A_1 R_1 \frac{C_1 C_2}{\Theta} \exp\left(-\frac{1}{\Theta}\right) - A_2 \frac{C_2^2}{\Theta^2}, \end{aligned} \quad (1)$$

и энергии

$$\frac{\partial \Theta}{\partial Fo} + Pe \frac{\partial \Theta}{\partial S} = \frac{\partial^2 \Theta}{\partial S^2} + A_1 Q_1 \frac{C_1 C_2}{\Theta} \exp\left(-\frac{1}{\Theta}\right) - A_2 Q_2 \frac{C_2^2}{\Theta^2}$$

с граничными условиями на горелке

$$\begin{aligned} S = 0: Le_1 \frac{\partial C_1}{\partial S} &= Pe(C_{1c} C_{1\infty}), \\ Le_2 \frac{\partial C_2}{\partial S} &= Pe C_{2c}, \quad \Theta = \Theta_c \end{aligned} \quad (2)$$

и над пламенем

$$S = 1: \frac{\partial C_1}{\partial S} = \frac{\partial C_2}{\partial S} = \frac{\partial \Theta}{\partial S} = 0.$$

Начальные условия:

$$Fo = 0: 0 \leq S \leq 1, C_1 = C_{10}, C_2 = C_{20}, \Theta = \Theta_0.$$

Безразмерные переменные и параметры получены следующим образом:

$$\begin{aligned} C_1 &= \omega_1/\omega_{1c}, \quad C_2 = \omega_2/\omega_{1c}, \quad \Theta = RT/E, \quad S = (\Psi - \Psi_e)/(\Psi_r - \Psi_e), \\ d\Psi &= \rho dx, \quad Fo = \lambda t/c_p (\Psi_r - \Psi_e)^2, \end{aligned}$$

$$A_1 = M_1/M_2 \cdot \Lambda_1 T_c \cdot R/E, R_1 = M_2/M_1, A_2 = 2\Lambda_2 T_c^2 \frac{R^2}{E^2} C_3,$$

$$Q_1 = R_1 R/E \cdot B_1 T_c, Q_2 = R/E \cdot B_2 T_c/2,$$

$$\text{Pe} = \rho v (\Psi_r - \Psi_c)/\rho^2 a, \quad \text{Le}_1 = D_1 \rho c_p / \lambda, \quad \text{Le}_2 = D_2 \rho c_p / \lambda.$$

Здесь C_1, C_2, C_3 — концентрации кислорода и атомов водорода, азота; Θ — температура; S — пространственная координата; Fo — безразмерное время; A_1 — предэкспоненциальный множитель в константе скорости реакции окисления; A_2 — константа скорости обрыва цепей; Q_1, Q_2 — тепловые эффекты этих реакций; Pe , Le_1 — числа Пекле, Льюиса. Индексы 1, 2, г, с, ∞ , 0 относятся соответственно к кислороду, водороду, горячей границе пламени, поверхности горелки, набегающему потоку, началу процесса. Размерные переменные и параметры: ω — концентрации, T — температура, Ψ — функция тока; x, t — пространственная координата, время; $\rho, \lambda, c_p, a, D_i$ — коэффициенты плотности, теплопроводности, теплоемкости, температуропроводности, диффузии, M_i — молекулярные веса, Λ_1 — предэкспоненциальный множитель, Λ_2 — константа скорости обрыва цепей, R — универсальная газовая постоянная, E — энергия активации реакции окисления; B_1, B_2 — тепловые эффекты реакций, v — скорость подачи смеси.

Для предварительного изучения возможных состояний в пламени используется нульмерная модель [6]. Она получается из системы (1), (2) путем замены пространственных дифференциальных операторов в (1) линейными алгебраическими по трем точкам и с учетом граничных условий (2).

Нульмерная модель записывается в виде динамической системы третьего порядка

$$\begin{aligned} \frac{dC_1}{dFo} &= n_1(1 - C_1) - A_1 \frac{C_1 C_2}{\Theta} \exp(-1/\Theta) \equiv f_1(C_1, C_2, \Theta), \\ \frac{dC_2}{dFo} &= -n_2 C_2 + 2A_1 R_1 \frac{C_1 C_2}{\Theta} \exp(-1/\Theta) - \frac{A_2 C_2^2}{\Theta^2} \equiv f_2(C_1, C_2, \Theta), \quad (3) \\ \frac{d\Theta}{dFo} &= -n_3(\Theta - \Theta_c) + A_1 Q_1 \frac{C_1 C_2}{\Theta} \exp(-1/\Theta) + A_2 Q_2 \frac{C_2^2}{\Theta^2} \equiv f_3(C_1, C_2, \Theta), \\ Fo = 0: \quad C_1 &= C_{10}, \quad C_2 = C_{20}, \quad \Theta = \Theta_0. \end{aligned}$$

Здесь $n_1 = \frac{\text{Pe}(\text{Pe}+4)}{\text{Pe}+2}$; $n_2 = \frac{\text{Pe}(4\text{Le}_2 + \text{Pe})}{2\text{Le}_2 + \text{Pe}}$; $n_3 = 4 + \text{Pe}$ характеризуют скорость подвода вещества (C_1, C_2) и тепла в зону реакции.

Стационарные состояния в пламени определяются решением системы алгебраических трансцендентных уравнений

$$f_1(C_{1s}, C_{2s}, \Theta_s) = f_2(C_{1s}, C_{2s}, \Theta_s) = f_3(C_{1s}, C_{2s}, \Theta_s) = 0 \quad (4)$$

и могут быть найдены с помощью бифуркационной диаграммы

$$\Theta_c = \Theta_s - \frac{A_1 Q_1 C_{1s} C_{2s}}{n_3 \Theta_s} \exp(-1/\Theta_s) - \frac{A_2 Q_2 C_{2s}^2}{n_3 \Theta_s^2}, \quad (5)$$

$$\begin{aligned} C_{2s} &= \frac{n_2 \Theta_s^2}{2A_2} \left(\sqrt{1 + \frac{8R_1 n_1 A_2 (1 - C_{1s})}{n_2^2 \Theta_s^2}} - 1 \right), \\ C_{1s} &= \frac{1}{2} \left[\frac{n_2 \Theta_s \exp(1/\Theta_s)}{2A_1 R_1} - \frac{n_1 A_2 \exp(2/\Theta_s)}{2A_1^2 R_1} \right] + \\ &+ \sqrt{\frac{1}{4} \left[\frac{n_2 \Theta_s \exp(1/\Theta_s)}{2A_2 R_1} - \frac{n_1 A_2 \exp(2/\Theta_s)}{2A_1^2 R_1} \right]^2 + \frac{n_1 A_2 \exp(2/\Theta_s)}{2A_1^2 R_1}}. \quad (6) \end{aligned}$$

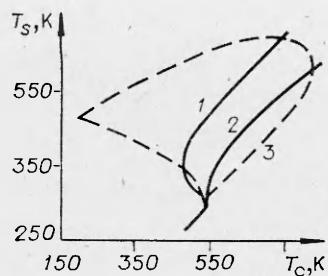


Рис. 1.

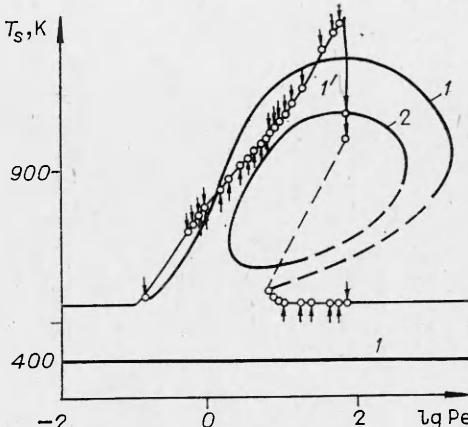


Рис. 2.

Возможные виды зависимостей стационарных температур от разогрева горелки, построенные по (5), показаны на рис. 1 ($Pe = 1(1)$ и $0,3(2)$, 3 — граница неединственности при различных значениях числа Pe). Как видно, в зависимости от скорости подачи смеси на горелке может быть от одного до трех стационарных состояний (среднее из них не реализуется). При малых скоростях вдува ($Pe < 1$) существует только нижнее (низкотемпературное) состояние, так как тепловыделение от реакции мало из-за недостаточного количества поступающей смеси (см. рис. 1, 2).

С увеличением скорости вдува (см. рис. 1, 1) система переходит в область неединственных стационарных состояний (граница области — линия 3). Образовавшаяся на выходе из пламени «горячая точка» перемещается к горелке навстречу свежей смеси, а затем выносится из пламени. Это связано с двойкой ролью скорости вдува. С одной стороны, с увеличением расхода поступает больше реакционной смеси, усиливается интенсивность тепловыделения, растет максимальная температура, что интенсифицирует отвод тепла и перемещает «горячую точку» к входу. С другой стороны, вместе с расходом усиливается конвективный снос «горячей точки», завершающийся ее выносом из пламени и потуханием.

На рис. 2 представлены зависимости стационарной температуры в пламени от числа Pe для различных значений температуры на поверхности горелки. Видно, что при больших T_c и малых Pe возможно существование только низкотемпературного стационарного состояния. Далее, с увеличением скорости вдува появляется только высокотемпературное стационарное состояние. Переход между ними бескрайзисный. При больших скоростях вдува имеют место гистерезис и область множественных стационарных состояний, обусловленная эффектом выноса «горячей точки» из пламени (рис. 2, 1, 1').

При малых T_c концы низкотемпературного режима на кривой $T_s(Re)$ сближаются и при некотором T_c смыкаются. Дальнейшее уменьшение T_c приводит к отрыву среднего режима от нижнего и образованию замкнутой цепли «изолы» для высокотемпературного и промежуточного режимов (см. рис. 2, 2). В случае существования изолы гистерезисные явления при изменении Pe отсутствуют. Возможны только два критических перехода из высокотемпературного режима в низкотемпературный. Обратного перехода нет. Чтобы осуществить высокотемпературный режим, необходимо «поджечь» смесь, т. е. создать в ней высокую начальную температуру.

¹ На рис. 2 стрелки схематически показывают температуру, с которой осуществляется выход на стационарный режим: точка с двумя стрелками означает, что стационарное состояние реализуется как воспламенением, так и зажиганием. $T_c = 550$ (1, 1') и 400 К (2). Кривые 1, 2 — решение нульмерной задачи (4), 1' — численное решение задачи (1), (2).

Условие существования неединственных стационарных состояний эквивалентно условию наличия экстремумов на кривой бифуркационной диаграммы (5) $\partial\Theta_c/\partial\Theta_s = 0$.

На плоскости $T_c - Q_1$ уравнения границы неединственных стационарных состояний имеют вид

$$Q_1 = \frac{\left[1 - \frac{2A_2 Q_2 C_{2S}}{n_3 \Theta_S^2} \left(\frac{\partial C_{2S}}{\partial \Theta_S} - \frac{C_{2S}}{\Theta_S} \right) \right] n_3 \Theta_S}{A_1 \exp(-1/\Theta_S) \left[\frac{\partial C_{1S}}{\partial \Theta_S} C_{2S} + \frac{\partial C_{2S}}{\partial \Theta_S} C_{1S} + \frac{C_{1S} C_{2S}}{\Theta_S} \left(\frac{1}{\Theta_S} - 1 \right) \right]}, \quad (7a)$$

$$\Theta_c = \Theta_S - \frac{A_1 Q_1 C_{1S} C_{2S} \exp(-1/\Theta_S)}{n_3 \Theta_S} + \frac{A_2 Q_2 C_{2S}^2}{n_3 \Theta_S^2}, \quad (7b)$$

где C_{1S} , C_{2S} определяются уравнениями (6).

В результате приближенного аналитического исследования стационарных состояний динамической системы (3) на устойчивость первым методом Ляпунова показано, что граница неединственных стационарных состояний совпадает с границей, определенной из условий Рауса — Гурвица [7]:

$$\vartheta \equiv \begin{vmatrix} f'_{1c1} & f'_{1c2} & f'_{1\Theta} \\ f'_{2c1} & f'_{2c2} & f'_{2\Theta} \\ f'_{3c1} & f'_{3c2} & f'_{3\Theta} \end{vmatrix} = 0. \quad (8)$$

Граница нейтральной устойчивости совпадает с границей

$$\Delta \equiv \begin{vmatrix} f'_{1c1} & f'_{2c1} \\ f'_{1c2} & f'_{2c2} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} f'_{1c1} & f'_{3c1} \\ f'_{1\Theta} & f'_{3\Theta} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} f'_{2c2} & f'_{3c2} \\ f'_{2\Theta} & f'_{3\Theta} \end{vmatrix} = 0. \quad (9)$$

Из-за громоздкости уравнений границы $\Delta = 0$ не будем их приводить. Взаимным расположением границ неединственности и нейтральной устойчивости на плоскостях параметров процесса обуславливается существование областей, отличающихся числом и устойчивостью стационарных состояний.

На рис. 3 для примера приведена картина деления плоскости на области возможных режимов горения при $Pe = 0,2(I)$, $0,5(II)$ и $1,0(III)$. Сплошной линией показана граница неединственных стационарных состояний, штриховой — граница нейтральной устойчивости. В областях I, II реализуются единственные (соответственно устойчивые и автоколебательные) режимы, в области III — неединственные. Значение $Q_1 = -0,0088$ всюду соответствует рассматриваемой в работе смеси. Существование автоколебательных режимов при малых Pe связано с отставанием скорости подвода вещества конвекций от скорости теплоотвода теплопроводностью при более высокой по сравнению с ними скоростью выгорания реагентов. С увеличением параметра Pe автоколебательные режимы становятся возможными только в случае, когда модель (3) отвечает эндотермической реакции окисления ($Q_1 < 0$).

На рис. 4 показаны области возможных стационарных режимов в богатом пламени $H_2 - O_2 - N_2$. Штриховой линией нанесена граница нейтральной устойчивости, сплошной — граница области неединственности. Как видно, область неединственных стационарных состояний (3) ограничена замкнутой кривой (см. рис. 4, a). Автоколебательные режимы

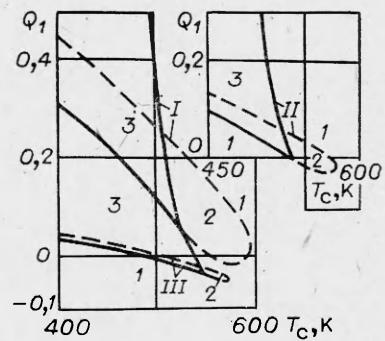


Рис. 3.

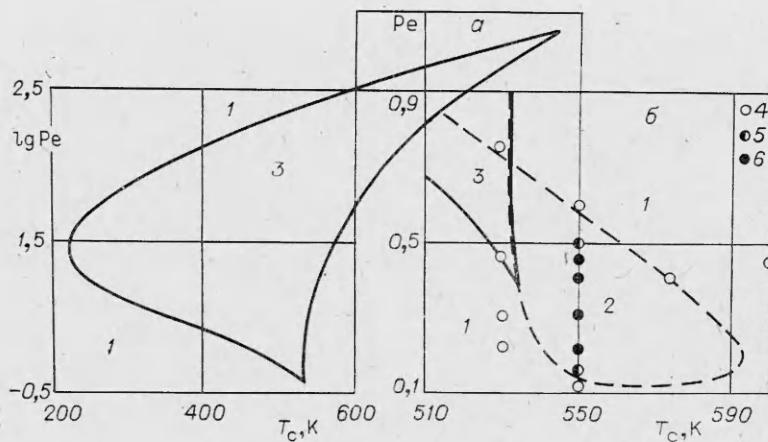


Рис. 4.

в области единственных стационарных состояний возможны при $\text{Pe} < 1$ (область 2, рис. 4, б). В области 1 реализуются единственные устойчивые стационарные состояния.

Прогнозы линейного анализа подтвердились результатами численного эксперимента на ЭВМ. Задача (1), (2) решалась по условно устойчивым явным конечно-разностным формулам с автоматическим выбором шага по времени. Сходимость процесса вычислений проверялась сопоставлением расчетов, выполненных на последовательности сгущающихся сеток.

На рис. 2, 1' для $T_c = 550$ К показана зависимость стационарной температуры пламени от скорости подачи смеси. Она подтверждает характер кривой, полученной приближенно аналитически.

На рис. 4 сравниваются предсказанные и численно реализованные режимы при малых числах Pe . Точками показаны результаты численного эксперимента: 4 — устойчивый режим без колебаний, 5 — затухающие колебания, 6 — автоколебательный режим. Как видно, численно рассчитанная область автоколебательных режимов меньше предсказанной аналитически области 2.

На рис. 5, а показано изменение максимальной температуры в пламени для автоколебательного режима ($\text{Pe} = 0,45$, $T_c = 550$ К). Колебания осуществляются около стационарного значения температуры и с периодом, предсказанным из нульмерного анализа. Как видно из рис. 5, б исчезновение автоколебаний со стороны меньших значений скорости вдува происходит с увеличением до бесконечности их периода T_A , а при больших — с уменьшением до нуля их амплитуды T_A .

Сравнение результатов численного решения, например, для высокотемпературного стационарного режима с экспериментальными данными [8]² показало хорошее их совпадение для профилей температуры и концентрации кислорода и некоторое отличие для концентрации атомов водорода.

- На основе изложенного выше можно сделать следующие выводы.

Неединственные стационарные состояния в богатом пламени $\text{H}_2 - \text{O}_2 - \text{N}_2$ реализуются для ограниченной, замкнутой области параметров процесса. Уравнения границы моностационарности совпадают с уравнениями границы (8) из условий Рауса — Гурвица. Автоколебательные режимы в пламени возможны при малых скоростях вдува.

Приближенный анализ на основе нульмерной модели хорошо предсказывает стационарные значения температуры и концентраций, период колебаний, области возможных режимов горения. Область колебательных режимов меньше предсказанной аналитически. Приближенное аналити-

² На рис. 6 $T_c = 350$ К, $\text{Pe} = 12,78$, точки — эксперимент [8].

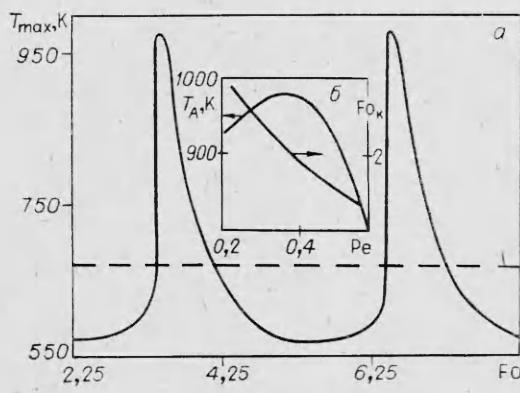


Рис. 5.

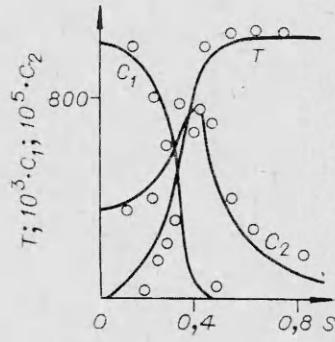


Рис. 6.

ческое изучение стационарных режимов пламени с последующей корректировкой результатов численным экспериментом позволяет воспроизвести реальную картину процесса.

ЛИТЕРАТУРА

1. S. B. Margolis. Comb. Sci. Techn., 1980, 22, 143.
2. G. Joulin. Comb. Flame, 1982, 46, 271.
3. G. Dixon — Levis. Proc. of the Royal Society, 1967, 298, 485.
4. R. F. Heinemann, A. O. Hnowles, W. R. George. AIChE J., 1980, 26, 725.
5. П. Г. Ицкова, А. Т. Лукьянов. Тез. докл. Первого Всесоюз. симпозиума по макроскопической кинетике и химической гидродинамике. Т. I, ч. 1. Черноголовка, 1984.
6. А. Т. Лукьянов, Л. Ю. Артиух, П. Г. Ицкова. Математическое моделирование задач теории горения. Алма-Ата: Наука, 1981.
7. Б. В. Вольтер, И. Е. Сальников. Устойчивость режимов работы химических реакторов. М.: Химия, 1981.
8. P. L. Stephenson, R. G. Taylor. Comb. Flame, 1973, 20, 231.

Поступила в редакцию 13/II 1985,
после доработки — 27/V 1985

О ТЕПЛОВОЙ ТЕОРИИ ЯЧЕИСТОГО ПЛАМЕНИ, ИНДУЦИРОВАННОГО ВНЕШНИМ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИМ ПОТОКОМ

Б. Е. Рогоза
(Днепропетровск)

В многочисленных экспериментах установлено [1—3], что при распространении пламени по несжимаемому реагирующему потоку газовой смеси на фронте горения формируется нелинейная структура — ячейки, состыкованные по линиям излома.

Теория спонтанных ячеистых пламен, формирующихся в результате потери теплодиффузационной или гидродинамической устойчивости плоским фронтом пламени построена в работах [4, 5].

Вместе с тем кроме спонтанных (самопроизвольно возникающих) ячеистых пламен в экспериментах замечено формирование на поверхности горения ячеек, индуцированных внешним гидродинамическим потоком. Их появление не зависит от теплодиффузационной устойчивости горения и может наблюдаться при числе Льюиса $Le = 1$, когда спонтанные ячейки не формируются. Хотя механизм формирования индуцированного ячеистого пламени вполне ясен (подстройка формы поверхности пламени под гидродинамический поток плюс нелинейный эффект нормального распространения горения), но соответствующая тепловая задача подробно не рассматривалась.