

*О. А. Борисова, Б. В. Лидский, М. Г. Нейгауз,
Б. В. Новожилов*

**ДВУМЕРНАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ
ГОРЕНИЯ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СИСТЕМ.
РЕАКЦИЯ НУЛЕВОГО ПОРЯДКА
И ШИРОКАЯ ЗОНА ТЕПЛОВЫДЕЛЕНИЯ**

В [1] численным методом исследован вопрос об устойчивости стационарного режима горения безгазовых составов по отношению к двумерным возмущениям. Оказалось, что двумерные возмущения более опасны, чем одномерные; это подтверждают результаты работ [2, 3], где та же задача исследована аналитически в приближении бесконечно тонкой зоны реакции. Поскольку в [1] рассмотрен только случай реакции первого порядка, вопрос о том, насколько общий характер имеет обнаруженное свойство безгазовых систем, остается открытым. В настоящей работе выясняется влияние порядка химической реакции и структуры зоны тепловыделения на двумерную устойчивость конденсированных систем. С этой целью методом, развитым в [1], исследуются случаи реакции нулевого порядка и волны горения с широкой зоной тепловыделения [4].

Реакция нулевого порядка. Нестационарный процесс безгазового горения конденсированного вещества описывается системой уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} &= \kappa \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) - u^0 \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{Q}{c} W(T, \eta), \\ \frac{\partial \eta}{\partial t} &= -u^0 \frac{\partial \eta}{\partial x} + W(T, \eta), \end{aligned} \quad (1)$$

где T и η — температура и степень превращения; t — время; κ и c — коэффициент температуропроводности и теплоемкость вещества; Q — тепловой эффект реакции. Скорость химического превращения для реакции нулевого порядка

$$W(T, \eta) = \begin{cases} Z \exp(-E/RT) & \text{при } T > T^*, 0 \leq \eta < 1, \\ 0 & \text{при } \eta = 1 \text{ или } T_0 \leq T \leq T^*. \end{cases}$$

Здесь Z , E — предэкспонент и энергия активации; R — универсальная газовая постоянная; T_0 — начальная температура; T^* — температура обрезания химической реакции, достаточно близкая к T_0 . Реакция нулевого порядка оканчивается за конечное время. Отсюда следует, что зона реакции пространственно ограничена, значение $\eta = 1$ достигается на некоторой поверхности $x(y)$. Для стационарного режима — это плоскость $x = x_0$.

Уравнения (1) записаны в системе координат, в которой вещество движется слева направо вдоль оси x со скоростью u^0 (ее примем равной скорости стационарного горения). К ним должны быть добавлены граничные условия:

$$\begin{aligned} x \rightarrow -\infty: T &= T_0, \eta = 0, \\ x \rightarrow \infty: \frac{\partial T}{\partial x} &= \frac{\partial \eta}{\partial x} = 0. \end{aligned} \quad (2)$$

Кроме этого, температура T есть ограниченная функция y .

Введем безразмерные переменные и параметры: $\xi = xu^0/\kappa$; $U^2 = (u^0)^2/\kappa Z \gamma \exp(-1/\beta)$; $\beta = RT_1/E$; $\gamma = RT_1^2/E(T_1 - T_0)$; $\Theta = E(T - T_1)/RT_1^2$; $\delta = E(T^* - T_0)/RT_1^2$; $\zeta = yu^0/\kappa$; $\tau = t(u^0)^2/\kappa$; $T_1 = T_0 + Q/c$ — максимальная температура в стационарном режиме.

В новых переменных исходная система уравнений (1) с учетом конечности зоны химического превращения примет вид:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \Theta}{\partial \tau} &= \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \zeta^2} - \frac{\partial \Theta}{\partial \xi} + \widehat{W}(\Theta, \eta), \\ \frac{\partial \eta}{\partial \tau} &= -\frac{\partial \eta}{\partial \xi} + \gamma \widehat{W}(\Theta, \eta); \\ \widehat{W}(\Theta, \eta) &= \begin{cases} \exp(\Theta/(1+\beta\Theta))/U^2\gamma^2 & \text{при } \delta - 1/\gamma < \Theta \leq 0 \text{ и } 0 \leq \eta < 1, \\ 0 & \text{при } \eta = 1 \text{ или } \Theta \leq \delta - 1/\gamma. \end{cases}\end{aligned}\quad (3)$$

Стационарные распределения температуры $\Theta^0(\xi)$ и степени превращения $\eta^0(\xi)$, а также собственное значение параметра U^2 , через который выражается скорость горения u^0 , находились численным интегрированием по методике, описанной в [1].

Устойчивость будем рассматривать в линейном приближении, для этого на стационарное решение наложим малые возмущения

$$\begin{aligned}\Theta(\xi, \zeta, \tau) &= \Theta^0(\xi) + \tilde{\Theta}(\xi) \exp(\Omega\tau + iS\zeta/2), \\ \eta(\xi, \zeta, \tau) &= \eta^0(\xi) + \tilde{\eta}(\xi) \exp(\Omega\tau + iS\zeta/2). \\ \xi_0(\zeta, \tau) &= \xi_0^0 + \varepsilon \tilde{\xi}_0 \exp(\Omega\tau + iS\zeta/2), \\ \xi_1(\zeta, \tau) &= \xi_1^0 + \varepsilon \tilde{\xi}_1 \exp(\Omega\tau + iS\zeta/2),\end{aligned}\quad (4)$$

где $\Omega = \omega/(w^0)^2$ и $S/2 = k\kappa/u^0$ — безразмерные частота и волновой вектор (ω и k — их размерные аналоги); ξ_0^0 и $\xi_0(\zeta, \tau)$ — поверхности окончания реакции в стационарном и нестационарном случаях соответственно (на этих поверхностях $\eta = 1$); ξ_1^0 и $\xi_1(\zeta, \tau)$ — поверхности начала реакции, на которых $\Theta = \Theta^* = \delta - 1/\gamma$, а степень превращения равна нулю. В дальнейшем положим $\xi_1^0 = 0$.

Подстановка разложений (4) в систему (3) и линеаризация по малому параметру ε приводят к системе уравнений на возмущения $\tilde{\Theta}(\xi)$ и $\tilde{\eta}(\xi)$:

$$\begin{aligned}\frac{d^2 \tilde{\Theta}}{d\xi^2} - \frac{d \tilde{\Theta}}{d\xi} - \tilde{\Theta} (\Omega + S^2/4 - \widehat{W}(\Theta^0, \eta^0)/(1+\beta\Theta^0)^2) &= 0, \\ \frac{d \tilde{\eta}}{d\xi} - \tilde{\Theta} \gamma \widehat{W}(\Theta^0, \eta^0)/(1+\beta\Theta^0)^2 + \Omega \tilde{\eta} &= 0.\end{aligned}\quad (5)$$

В зонах, где химическая реакция отсутствует, эти уравнения легко интегрируются, поэтому численный счет системы (5) проводился только на интервале $[0, \xi_0^0]$, а граничные условия на этих поверхностях находились из условий непрерывности температуры и степени превращения и производных температуры по координате.

Отметим величины в областях $\xi < \xi_1$ и $\xi > \xi_0$ индексами минус и плюс соответственно, оставив для величин в зоне химического превращения обозначения без индексов. Стационарное решение и возмущения при $\xi < 0$ имеют вид

$$\begin{aligned}\eta_-^0 &= 0, \Theta_-^0 = \Theta_0 + (\Theta^* - \Theta_0) \exp(\xi), \\ \tilde{\eta}_- &= 0, \tilde{\Theta}_- = C_1 \exp(k_1 \xi), k_1 = (1 + \sqrt{1 + 4\Omega + S^2})/2.\end{aligned}\quad (6)$$

При $\xi = \xi_1$ должны выполняться условия:

$$\eta_- = \eta = 0, \Theta_- = \Theta = \Theta^* \text{ и } d\Theta_-/d\xi = d\Theta/d\xi,$$

которые приводят к соотношениям

$$\begin{aligned}\xi &= \xi_1^0, \tilde{\eta} + \tilde{\xi}_1 d\eta^0/d\xi = 0, \tilde{\Theta} + \tilde{\xi}_1 d\Theta^0/d\xi, \\ \frac{d \tilde{\Theta}_-}{d\xi} &= C_1 k_1 \exp(k_1 \xi), \frac{d \tilde{\Theta}_-}{d\xi} + \tilde{\xi}_1 \frac{d^2 \Theta^0}{d\xi^2} = \frac{d \tilde{\Theta}}{d\xi} + \tilde{\xi}_1 \frac{d^2 \Theta^0}{d\xi^2}.\end{aligned}$$

Подставляя в эти равенства величины $\frac{d\eta^0}{d\xi} = \gamma \widehat{W}(\Theta^0, \eta^0)$, $\frac{d\Theta^0}{d\xi} = \Theta^* - \Theta_0$

и $\frac{d^2\Theta^0}{d\xi^2} - \frac{d^2\Theta^0}{d\xi^2} = -\widehat{W}(\Theta^0, \eta^0)$, которые следуют из (3), (6), получим граничные условия для $\tilde{\eta}$ и $\tilde{\Theta}$ на левой границе зоны реакции

$$\xi = 0, \tilde{\eta} = \tilde{\Theta} \gamma \widehat{W}(\Theta^0, \eta^0), k_1 \Theta = \frac{d\tilde{\Theta}}{d\xi} + \frac{\tilde{\Theta}}{\delta} \widehat{W}(\Theta^0, \eta^0), \quad (7)$$

$$\delta = \Theta^* - \Theta_0.$$

Правое граничное условие найдем из условий непрерывности на поверхности $\xi_0(\zeta, \tau)$.

Стационарное решение и возмущения при $\xi > \xi_0^0$ имеют вид

$$\eta_+^0 = 1, \Theta_+^0 = 0, d\Theta_+^0/d\xi = 0,$$

$$\tilde{\eta}_+ = 0, \tilde{\Theta} = C_2 \exp(k_2 \xi), k_2 = (1 - \sqrt{1 + 4\Omega + S^2})/2.$$

При $\xi = \xi_0$ должны выполняться условия:

$$\eta_+ = \eta = 1, \Theta_+ = \Theta = 0 \text{ и } d\Theta_+/d\xi = d\Theta/d\xi,$$

которые приводят к соотношениям

$$\xi = \xi_0^0, \eta + \tilde{\xi}_0 d\eta^0/d\xi = 0, k_2 \tilde{\Theta} = \frac{d\tilde{\Theta}}{d\xi} + \tilde{\xi}_0 \frac{d^2\Theta^0}{d\xi^2}.$$

Подставляя в эти равенства величины $d\eta^0/d\xi = \gamma \widehat{W}(\Theta^0, \eta^0)$ и $d^2\Theta^0/d\xi^2 = -\widehat{W}(\Theta^0, \eta^0)$, получим граничное условие для $\tilde{\eta}$ и $\tilde{\Theta}$ на правой границе зоны реакции при

$$\xi = \xi_0^0, k_2 \tilde{\Theta} = d\tilde{\Theta}/d\xi + \tilde{\eta}/\gamma. \quad (8)$$

Итак, имеем систему (5) с граничными условиями (7) и (8). Введем новые функции $v(\xi) = \tilde{\Theta}(\xi) \exp(-k_1 \xi)$, $r(\xi) = \tilde{\eta}(\xi) \exp(-k_1 \xi)/\gamma$. Они удовлетворяют уравнениям

$$\frac{d^2v}{d\xi^2} + (2k_1 - 1) \frac{dv}{d\xi} + v \widehat{W}(\Theta^0, \eta^0)/(1 + \beta \Theta^0)^2 = 0, \quad (9)$$

$$\frac{dr}{d\xi} + r(k_1 + \Omega) - v \widehat{W}(\Theta^0, \eta^0)/(1 + \beta \Theta^0)^2 = 0$$

с начальными условиями

$$\xi = 0, v = 1, r = \widehat{W}(\Theta^0, \eta^0)/\delta, dv/d\xi = -\widehat{W}(\Theta^0, \eta^0)/\delta. \quad (10)$$

Решение с начальными условиями (10) задачи Коши на правой границе зоны реакции должно удовлетворять условию

$$\xi = \xi_0^0, dv/d\xi + r + v(k_1 - k_2) = 0,$$

которое следует из (8). Введем обозначение $b = dv/d\xi + r + v(k_1 - k_2)$. Величина b является аналитической функцией параметров Ω_0 , S_0^2 системы (5). Теперь условие устойчивости стационарного решения можно сформулировать следующим образом. Стационарное решение задачи (1) неустойчиво тогда и только тогда, когда существует вещественное неотрицательное S_0^2 и комплексное Ω_0 с $\operatorname{Re}(\Omega_0) > 0$ такие, что $b(S_0^2, \Omega_0) = 0$.

Метод исследования устойчивости подробно описан в [1]. Так же как в [1], левое граничное условие не влияло на результаты счета, что соответствует физическому смыслу обрезания химической реакции. Печатается с разрешения автора.

рейдем к изложению результатов. Для реакции нулевого порядка на основании численных расчетов выведены интерполяционные формулы. Пусть выражение $1/\gamma = F(\beta, S^2)$ связывает параметры на границе устойчивости. Тогда функцию $F(\beta, S^2)$ в интервалах $0 \leq \beta \leq 0,18$ и $0 \leq S^2 \leq 4$ с точностью до 0,5 % можно представить в виде

$$F(\beta, S^2) = \frac{8,53}{(1 + 2,53\beta - 1,80\beta^2)} \frac{(A + BS^2 + \sqrt{(A + BS^2)^2 + 4(C + S^2)^3})}{(C + S^2)},$$

где $A = C(1 - 4C)/2$; $B = -(5,60 + 4,01C)$, $C = 5,71 + 2,07S^2 - 0,24(S^2)^2$. Эта функция при постоянном значении β имеет минимум при $S^2 \approx 1$. На счете $F(\beta, 0)$ и $F(\beta, 1)$ отличались па 2—3 %, как и для реакции первого порядка. Как и раньше, это означает меньшую устойчивость горения по отношению к двумерным возмущениям, чем к плоским.

Частота на границе устойчивости чисто мнимая $\Omega = i\Psi(\beta, S^2)$, ее численное значение можно найти из следующей интерполяционной формулы с точностью до 0,6 %:

$$\Psi(\beta, S^2) = \frac{(1 + 1,00S^2) \cdot F(\beta, S^2)}{4,06 \cdot (1 - 0,64\beta - 1,94\beta^2)}.$$

Реакция с сильным торможением тепловыделения (широкие зоны). Как и в случае реакции нулевого порядка, процесс горения моделируется системой уравнений (1) с граничными условиями (2). Для источника взято выражение $W(T, \eta) = Z \exp(-16\eta) \exp(-E/RT)$ (см. [4])

при $T > T^*$, $0 < \eta < 1$ и $W(T, \eta) = 0$ при $T < T^*$. В отличие от реакции пулевого порядка зона химического превращения пространственно неограничена и $\eta = 1$ достигается при $\xi \rightarrow \infty$, что делает данный случай реакции с широкой зоной тепловыделения полностью аналогичным случаю реакции первого порядка, разобранному в [1], поэтому перейдем сразу к изложению результатов.

Расчеты проведены при единственном значении $\beta = 0,1$. Поэтому их удобно представить в виде таблицы, из которой видно, что и для реакции с сильным торможением тепловыделения горение менее устойчиво к пространственным возмущениям. Из приведенных результатов расчетов для реакции пулевого порядка, широкой зоны тепловыделения и выводов [1], следует заключить, что свойство более слабой устойчивости безгазовых систем по отношению к двумерным возмущениям, чем к плоским, по-видимому, носит общий характер.

S^2	$1/\gamma$	Ψ
0	9,89	1,49
0,4	9,64	1,90
0,8	9,58	2,25
1,0	9,58	2,41
1,2	9,59	2,57
1,6	9,63	2,86
2,0	9,67	3,14
2,4	9,73	3,40
2,8	9,78	3,65
3,2	9,84	3,89
3,6	9,90	4,13
4,0	9,96	4,35

ЛИТЕРАТУРА

- Борисова О. А., Лидский Б. В., Нейгауз М. Г. и др. Хим. физика, 1986, 5, 6, 822.
- Махвиладзе Г. М., Новожилов Б. В. ПМТФ, 1971, 5, 51.
- Алдушин А. П., Каспарян С. Г. Докл. АН СССР, 1979, 244, 1, 67.
- Хайкин Б. И. // Горение и взрыв.— М.: Наука, 1977.

г. Москва

Поступила в редакцию 14/XII 1987,
после доработки — 3/V 1988