

**ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ
О НЕСТАЦИОНАРНОМ НАГРЕВЕ ГОРЮЧЕЙ СМЕСИ В СОСУДЕ**

*Л. Ю. Артюх,
Л. А. Вулис, А. Т. Лукьянов, С. Н. Шарая
(Алма-Ата)*

1. Задача о тепловом взрыве горючей смеси — одна из классических в тепловой теории горения [1]. В работах [2, 3] были получены качественно новые результаты, характеризующие разогрев горючей смеси, находящейся в сосуде. Показано, что в зависимости от значений определяющих параметров по-разному складывается развитие во времени теплового состояния: в одних случаях система выходит на квазистационарный режим, в других — происходит воспламенение смеси в центре сосуда (тепловой взрыв) или зажигание у стенки. В двух последних случаях горение, возникающее в центре или на периферии (зоны максимального разогрева), распространяется затем по всему объему.

В настоящем сообщении приводятся некоторые результаты численного исследования такой же задачи, преследовавшего две цели. Первая из них носила методический характер и сводилась к выяснению возможности решения нелинейных уравнений теплопроводности с аррениусовским источником на моделирующих устройствах типа статических электроинтеграторов [4]. К ней примыкало также сравнение результатов численного расчета по различным, явным и неявным, конечно-разностным схемам. Вторая, прямая цель работы состояла в изучении поведения системы при своего рода конечных «возмущениях», создаваемых вариацией граничных условий, главным образом за счет мгновенного или длящегося некоторое конечное время, повышения температуры на стенке сосуда. Такой переход позволяет получить некоторую дополнительную информацию о нестационарном тепловом режиме нелинейной системы. Хотя приводимые ниже результаты численного эксперимента могут показаться разрозненными, они позволяют сделать отдельные преимущественно качественные заключения, имеющие более общее значение.

2. Приводимые ниже результаты решения относятся к задаче о разогреве горючей смеси в предположении аррениусовской кинетики в цилиндрическом сосуде бесконечной высоты без учета выгорания.

Нестационарное уравнение теплопроводности в обычно принятых безразмерных переменных (см. ниже) имеет следующий вид:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \exp\left(\frac{\theta}{1 + \theta}\right) + \frac{1}{\xi} \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right), \quad (1)$$

где независимые переменные $\tau \in [0, \infty]$ и $\xi \in [0, 1]$ — безразмерные время и радиус.

Начальные и граничные условия зададим в виде:

$$\tau = 0: \theta(0, \xi) = \theta_n; \tau > 0: \xi = 0, \left. \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right|_{\xi=0} = 0 \text{ (условие симметрии); } \xi = 1, \theta(\tau, 1) = \theta_w(\tau).$$

Принято также, что безразмерная температура окружающей среды $\theta_0 = \text{const}$, а теплоотдача к стенкам сосуда бесконечна, т. е. $\theta_w = \theta_0$. Таким образом, основное краевое условие задачи, на которое в дальнейшем налагаются «возмущения» величины θ_w , имеет вид: при $\tau = 0: \theta(0, 1) = \theta_w = \theta_0$, тогда как для сосуда в целом для $0 \leq \xi \leq 1$ при $\tau = 0: \theta(0, \xi) = \theta_n$.

Значение температуры среды в расчете условно принимается за нуль $\theta_0 = 0$ (это не означает, конечно, исключение параметра, характеризующего температуру среды).

Запишем выражения безразмерных переменных и параметров, сохранив за каждой из них в соответствии со смыслом название основной

физической величины: $\theta = \frac{RT_0^2}{E} (T - T_0)$ — температура; $\xi = \frac{r}{r_0}$ — координата; $\tau = \frac{Q \cdot f(c_i)}{\rho C} \cdot \frac{E}{RT_0^2} k_0 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) t$ — время, $\vartheta = \frac{r_0}{E} RT_0$ — температура среды; $\delta = \frac{Q \cdot f(c_i)}{\lambda} \frac{E}{RT_0^2} r_0^2 k_0 \exp\left(-\frac{E}{RT_0}\right)$ — тепловое

сопротивление. Заметим, что параметры ϑ и δ в расчете считаются неизменными, обозначения размерных величин общепринятые¹.

Исходное уравнение (1) в случае явной конечно-разностной схемы аппроксимируется равенством

$$\frac{\theta_{k+1}^n - \theta_k^n}{\Delta \tau} = \exp\left(\frac{\theta_k^n}{1 + \vartheta \theta_k^n}\right) + \frac{1}{\delta} \left(\frac{\theta_{k+1}^n - 2\theta_k^n + \theta_{k-1}^n}{\Delta \xi^2} + \frac{1}{\xi_k} \frac{\theta_{k+1}^n - \theta_{k-1}^n}{2\Delta \xi} \right). \quad (2)$$

Это уравнение решалось на электроинтеграторе, а также на ЭВЦМ «Урал-2». Сопротивления счетно-решающей ячейки статического интегратора (см. [4]) устанавливались равными:

$$R_k = 1, R_{k-1} = R_{k+1} = M - 2.$$

Интервалы $\Delta \tau$ и $\Delta \xi$ сеточной области выбирались из условий:

$$\frac{1}{\delta} \frac{\Delta \tau}{(\Delta \xi)^2} = \frac{1}{6}, \quad \frac{1}{(1 + \vartheta \theta)^2} \exp\left(\frac{\theta}{1 + \vartheta \theta}\right) < \frac{4}{\delta (\Delta \xi)^2},$$

причем расчет проводился при различных соотношениях $\Delta \tau / \Delta \xi$.

3. Содержание численного расчета сводится к следующему. Во всех случаях значение начальной температуры смеси в сосуда принималось одним и тем же: $\theta_n(0, \xi) = -11,7$ а величина ϑ полагалась равной 0,03. Значения параметров δ и θ_w менялись в ходе решения в соответствии с тремя выбранными режимами:

1) $\theta_w(\tau, 1) = \text{const}$ ($\theta_w > \theta_n$) — температура стенки постоянная.

¹ Здесь T — температура, t — время, r — переменный радиус, r_0 — радиус сосуда, $V \cdot f(c_i) \cdot k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$ — скорость реакции в сосуде, причем $f(c_i) = \text{const}$, Q — тепловой эффект, λ — коэффициент теплопроводности, C — теплоемкость, ρ — плотность, E — энергия активации, R — газовая постоянная, c_i — концентрация реагентов, V — объем сосуда, индексы 0, n, w относятся к среде, начальному моменту и к стенке.

2) $\theta_w(0, 1) = \theta_w^*$ — температура стенки в момент времени $n\Delta\tau$ возрастает. Фактически повышенное значение $\theta_w = \theta_w^*$ принималось постоянным в течение одного расчетного шага по времени (при $\Delta\tau = \Delta\tau^* = 0,05$); условно будем считать время температурного «всплеска» в этом режиме $\Delta\tau^* \approx 0$, а значение температуры стенки при $\tau \neq \tau^*$ $\theta_w = 0$

3) $\theta_w(\tau^* \div \tau^* + \Delta\tau^*, 1) = \theta_w^*$ — температура стенки в момент $\tau = \tau^*$ повышается «мгновенно» и поддерживается в течение интервала $\Delta\tau^*$, после этого восстанавливалось граничное условие $\theta_w = \theta_0 = 0$, сохранявшееся затем неизменным до конца расчета.

Для удобства подробные характеристики численных экспериментов

Номер рисунка	Номер кривых на рисунке	Параметры				
		δ	θ_w^*	τ^*	$\Delta\tau^*$	ξ^*
1, а	—	2,5	0	0	4,85	0
1, б	—	2,0			10,40	0,6
1, в	—	500			90,00	0,8
2	1	2,07	0	0	4,491	0
	2		1		1,701	0
	3		2		1,179	0
	4		2,2		1,114	0,3
	5		2,4		1,052	0,4
	6		2,6		0,992	0,5
	7		2,8		0,934	0,6
	8		3,0		0,879	0,65
	9		4		0,632	0,85
	10		5		0,432	0,95
	11		11		0,054	—
3	1	1,8	0	0	0	—
	2		50	1		—
	3		51	1		—
	4		20	3		0,95
	5		40	3		—
	6		48	3		—
	7		50	3		0,95
4, а	1	1,8	1	0	1,614	0
4, б	2		1		1,2	—
	1		5		0,408	0,85
	2		5		0,39	—
5	1	1,8	0	0	—	—
	2		5		—	—
	3		50		—	—
	4		1		—	—
	5		1		1,2	—
	6		1		1,64	0

сведены в таблицу, в которой указаны значения всех параметров и выбранный спектр граничных условий, там же приведены соответствующие им номера рисунков и отдельных кривых.

4. Опишем кратко результаты расчетов, представленных частично на рис. 1—5. Заметим предварительно, что расчеты с помощью разных конечно-разностных схем на статическом электроинтеграторе и ЭВЦМ практически совпадают как между собой, так и с данными работы [2].

Поэтому в дальнейшем на вопросах, связанных с техникой вычисления, останавливаться не будем.

Представленные на рис. 1 температурные кривые характеризуют различные режимы разогрева горючей смеси при изменении параметра δ . Повторяют работу [2] и играют роль контрольного расчета. При малом значении δ (рис. 1, а) тепловой взрыв происходит в центре сосуда, при больших (рис. 1, б и в) — зажигание смещается к стенке.

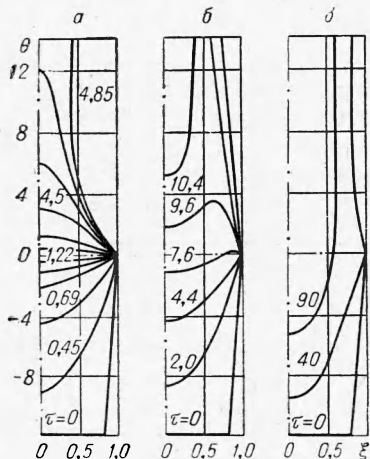


Рис. 1. Профили температуры при нестационарном нагреве горючей смеси в цилиндрическом сосуде.

а — $\delta=2,5$; б — $\delta=20$; в — $\delta=500$.

Новые в качественном отношении результаты представлены на рис. 2, где показано влияние вариации амплитуды мгновенного повышения температуры стенки (режим 1). По мере роста значения θ_w^* наблюдается смещение координаты зажигания $\xi = \xi_v$ от оси сосуда (кривые 2, 3) по направлению к стенке (кривые 4—7). Это изменение местоположения теплового взрыва $\xi_v = \xi(\theta_w^*)$ отдельно показано на рис. 2, б. Наряду со смещением координаты взрыва ξ_v претерпевает резкое изменение (уменьшение, с ростом θ_w^*) также и значение «периода индукции» — интервала времени до взрыва. Значения этих величин ξ_v и τ_v для расчетных условий рис. 2 приведены в таблице. Таким образом, данные, представленные на рис. 2, характеризуют непрерывное смещение местоположения теплового взрыва в сосуде от оси к стенке, вызванное ростом амплитуды мгновенного температурного возмущения на границе.

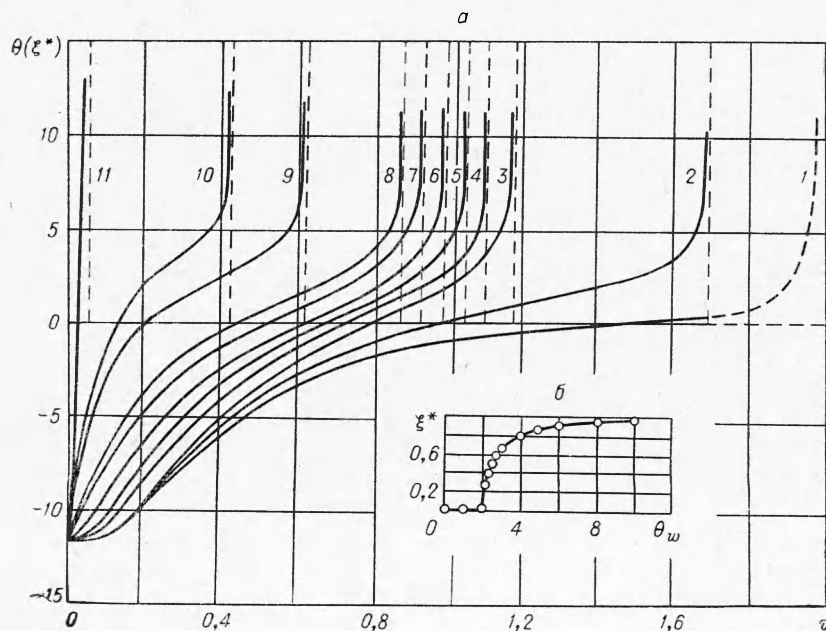


Рис. 2. Изменение со временем температуры смеси при различных значениях разогрева стенки сосуда θ_w (а) и зависимость координаты взрыва ξ^* от величины θ_w (б).

Последующие рис. 3, 4 и 5 содержат результаты численного эксперимента над докритической системой (значение параметра $\delta=1,8$, т. е. $\delta < \delta_{кр}=2,07$ [1]). Здесь интересно сопоставление расчетов для второго и третьего режимов возмущения, когда температура стенки повышается мгновенно или в течение конечного промежутка времени, следовательно,

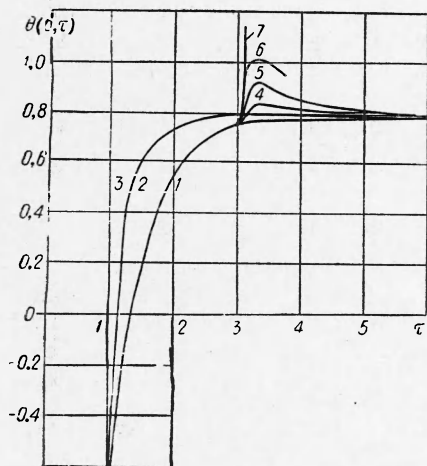


Рис. 3. Разогрев смеси в центре сосуда при различных возмущениях температуры на поверхности θ_w (пояснения к кривым см. в таблице).

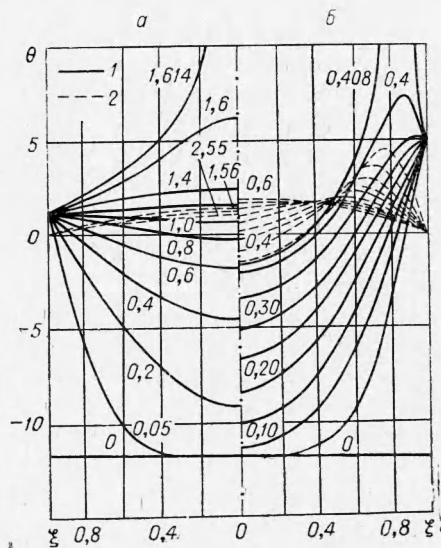
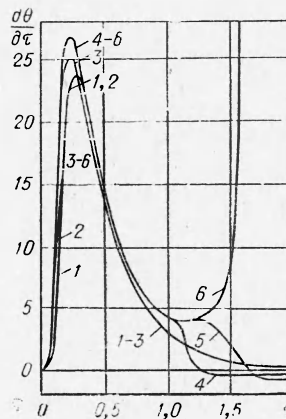


Рис. 4. Нестационарные профили температуры в сосудах с горючей смесью.
а — $\theta_w = 1$ при $0 < \tau < 1,614$ (1) и $\theta_w = 0$ при $\tau \geq 1,2$ (2); б — $\theta_w = 5$ при $0 < \tau < 0,39$ (1) и $\theta_w = 0$ при $\tau \geq 0,39$ (2).

воздействия этих параметров (θ_w^* и $\Delta \tau^*$) в какой-то мере дополняют друг друга. Иначе говоря, к одинаковому в качественном отношении результату приводит повышение амплитуды θ_w^* при $\Delta \tau^* = 0$ и увеличение длительности возмущения $\Delta \tau^*$ при заданном значении θ_w^* . Наряду с этим для дальнейшего поведения системы имеет значение также момент начала времени τ^* повышения температуры стенки. На рис. 3 показан разогрев смеси в центре сосуда, когда температура стенки претерпевала возмущения. Как можно видеть из рисунка (характеристики кривых см. в таблице), возмущения разной амплитуды, произведенные в различные моменты времени, могут приводить к зажиганию (вблизи стенки при $\xi_w = 0,95$ — кривые 3 и 7) или к выходу на квазистационарный режим с «рассасыванием» возмущения (кривые 4—6). При этом одно и то же значение θ_w^* (например, $\theta_w^* = 50$) приводит (кривая 7)

Рис. 5. Изменение со временем темпа нагрева на оси цилиндра докритических размеров ($\delta=1,8$) в зависимости от вариации граничных условий (пояснения к кривым см. в таблице).



или не приводит к взрыву (кривая 3) в зависимости от момента воздействия возмущения (соответственно $\tau^*=3$ или $\tau^*=1$).

Кривые, представленные на рис. 4, иллюстрируют влияние длительности возмущения $\Delta\tau^*$. Сплошные линии (рис. 4, а и 4, б) отвечают соответственно режимам $\theta_w = 1$ и $\theta_w = 5$ при $\Delta\tau^* = \infty$; пунктирные — тем же по амплитуде возмущениям, длившимся конечное время $\Delta\tau^*=1,2$ и $\Delta\tau^*=0,39$ соответственно. При этом пунктирные кривые, нанесенные на рис. 4, относятся ко времени, когда возмущение снято, а температура стенки приняла постоянное значение $\theta_w = 0$ (интервал времени τ от 1,2 до 3,5 на рис. 4, а, когда $\Delta\tau^*=1,2$ и $\tau=0,39$ —0,6 при $\Delta\tau^*=0,39$ на рис. 4, б). Эти кривые характеризуют затухание возмущения, не приводящего, как при $\Delta\tau^* = \infty$, к взрыву.

Для большей наглядности на рис. 5 изображена временная зависимость темпа нагрева, т. е. изменение производной $\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = f(\tau)$ в характерных точках на оси сосуда. Представленные на этом рисунке кривые, характеристики которых даны в таблице, иллюстрируют различные тепловые режимы докритической системы в зависимости от вариации граничных условий. Здесь вновь видно, что к одинаковому эффекту приводит как мгновенный рост температуры стенки, так и менее интенсивное повышение ее на конечном отрезке времени. Если возмущение на стенке прекращается раньше, чем скорость разогрева начинает вновь возрастать, то взрыв не наступает. Производная $\frac{\partial \theta}{\partial \tau}$ становится при этом отрицательной, подведенное во время возмущения тепло перераспределяется в объеме сосуда.

6. Наряду с описанным выше был выполнен также численный эксперимент при мгновенном или конечном во времени температурном возмущении системы на оси сосуда или при других значениях координаты ξ . Результаты его тождественно схожи с полученными при описанной выше вариации граничных условий на стенке. Выяснено, что зажигание смеси происходит при определенном для данных условий возмущении, которое будет тем больше, чем дальше система от равновесного состояния.

Существенно, что сравнительно ничтожные по тепловой мощности возмущения могут при благоприятных условиях оказаться достаточными для наступления взрыва. Такой переход возможен в любой точке сосуда в зависимости от мгновенного баланса тепла в этом месте.

Остановимся в заключение на качественной связи результатов расчета с реальным развитием процесса горения смеси. Известно, что при возникновении (и распространении) пламени ведущая роль принадлежит некоторым избранным «горячим точкам», для которых наиболее благоприятно складывается местный баланс тепла и вещества. В других точках пламя загасает из-за сильного теплоотвода, в недостаточной мере компенсируемого выделением тепла за счет реакции. Как правило, такого рода локальные условия являются весьма важными, если не решающими, при зажигании и обеспечении устойчивого развития процесса горения в технических устройствах для стабилизации пламени и т. п.

Поступила в редакцию 15/V 1968

ЛИТЕРАТУРА

1. Д. А. Франк-Каменецкий. Диффузия и теплообмен в химической кинетике. М., Изд-во АН СССР, 1947.
2. А. Г. Мержанов, В. Г. Абрамов, В. Т. Гонтковская. Докл. АН СССР, 1963, 148, 1.
3. Я. Б. Зельдович. Докл. АН СССР, 1963, 150, 2.
4. А. Т. Лукьянов. Авт. св. № 175260, 1965.