

ВОЗНИКНОВЕНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ СТРУКТУР В ПРОЦЕССЕ ФИЛЬТРАЦИОННОГО ГОРЕНИЯ

Н. И. Озерковская¹, А. Н. Фирсов², К. Г. Шкадинский²

¹Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения РАН, 142432 Черногловка

²Институт проблем химической физики РАН, 142432 Черногловка, shkad@icp.ac.ru

Исследован фронт фильтрационного горения и возможность его структурирования. Показано, что в условиях неустойчивости плоского фронта горения, больших коэффициентов фильтрации, недостатка массы активного газового реагента во внутривещном пространстве происходит формирование ячеистых структур фронта, которые подобны ячеистым пламенам при горении газовых смесей. В таких системах концентрационные поля конденсированных продуктов фильтрационного горения образуют фронтальные структуры, получившие название «фингеры» — *fingering instabilities*.

Ключевые слова: фильтрационное горение, неустойчивость фронта, ячеистые структуры.

ВВЕДЕНИЕ

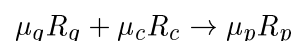
До работы [1] господствовало представление, что в эволюционных системах «включение» диффузионной связи между точечными элементами сглаживает пространственное распределение характеристик среды. В действительности же, часто независимо от начальных данных, самопроизвольно формируются сложные регулярные структуры, симметрия которых может качественно отличаться от симметрии начального возмущения (самоорганизация, «диссипативные структуры» [2]).

В процессах горения также приходится сталкиваться с подобными явлениями. Возникновение структурирования во фронте теплодиффузионного пламени отмечал Я. Б. Зельдович [3]. Затем в [4] это было подтверждено количественно при анализе вопросов устойчивости данного фронта. В работе [5] методами математического моделирования было исследовано формирование установившихся структур теплодиффузионного фронта в процессе зажигания. С экспериментальными исследованиями процессов структурирования фронта пламени можно ознакомиться в сборнике [6], где они характеризуются как ячеистые пламена.

В данной работе изучается фронт фильтрационного горения и возможности его структурирования. Появление сложных ячеек при исследовании неустойчивого режима отмечалось и ранее [7], но их детальное исследование не было проведено, так как требовало серьезных усилий и качественного многомерного математического моделирования.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Процесс химического взаимодействия пористого конденсированного образца с газом с образованием твердого продукта проходит по схеме



(где μ_g, μ_c, μ_p — стехиометрические коэффициенты, R_g, R_c — газовый и конденсированный реагенты, R_p — продукт) и в безразмерных переменных описываются следующей математической моделью:

закон сохранения массы газа:

$$\frac{\partial(\rho m)}{\partial \tau} + \operatorname{div}(\rho m \mathbf{V}) = -\mu_\eta \rho_\eta \frac{\partial \eta}{\partial \tau}, \quad (1)$$

уравнение движения газа:

$$\mathbf{V} = -K_f(m) \operatorname{grad}(P), \quad (2)$$

уравнение состояния газа:

$$P = \rho(1 + \beta\theta), \quad (3)$$

закон сохранения энергии (энтальпии):

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial \tau} = \operatorname{div} \left(\lambda(m) \nabla \theta - c_g \rho m \mathbf{V} \frac{1 + \beta\theta}{\beta} \right), \\ H = [c_g \rho m + c_\eta \rho_\eta (1 + \mu_\eta \eta)] \frac{1 + \beta\theta}{\beta} + \\ + \rho_\eta \frac{1 - \eta}{\gamma}, \quad (4) \end{aligned}$$

$$\rho_\eta = (1 - m)\nu,$$

уравнение макрокинетики химического взаимодействия:

$$\frac{\partial \eta}{\partial \tau} = \gamma(1 - \eta) \exp\left(\frac{\theta}{1 + \beta\theta}\right) \frac{P}{P + \delta}, \quad (5)$$

где δ — малый параметр, характеризующий слабую зависимость скорости реакции от давления газа, за исключением области низких давлений.

Состояние физических полей внутри образца (температуры, давления, глубины превращения) в начальный момент времени определяют начальные условия:

$$\theta = \theta_0, \quad P = P_0, \quad \eta = \eta_0.$$

Граничные условия определяются тепло- и массообменом образца с внешней газовой средой, которые конкретизированы ниже.

Переход к безразмерным параметрам осуществляется по формулам:

$$\begin{aligned} c_g &= \frac{c_{g0}}{c_*}, \quad c_\eta = \frac{c_{c0}}{c_*}, \quad \rho = \frac{\rho_g}{\rho_*}, \\ \rho_\eta &= \frac{\rho_{c0}\nu(1 - m)}{\rho_*}, \quad \lambda_\eta = \frac{\lambda_{c0}}{\lambda_*}, \quad \lambda_g = \frac{\lambda_{g0}}{\lambda_*}, \\ \lambda(m) &= m\lambda_g + (1 - m)\nu\lambda_\eta, \\ \mu_\eta &= \frac{\mu_g M_g}{\mu_c M_c}, \quad a = \frac{\lambda_*}{c_* \rho_*}, \quad \alpha \partial S = \frac{\alpha x_*}{\lambda_*}, \\ \gamma &= \frac{c_* R T_*^2}{E Q}, \quad \beta = \frac{R T_*}{E}, \quad K_f(m) = \frac{k_f p_*}{a}, \\ \theta &= \frac{T - T_*}{R T_*^2 / E}, \quad \eta = \frac{C_0 - C}{C_0}, \quad P = \frac{p}{p_*}, \\ \mathbf{V} &= \frac{\mathbf{u} t_*}{x_*}, \quad \tau = \frac{t}{t_*}, \end{aligned}$$

где

$$x_*^2 = a t_*, \quad t_* = \frac{\gamma}{k_0 \exp(-E/R T_*)}, \quad p_* = \frac{R T_* \rho_*}{M_g},$$

$$c_* = c_{c0}, \quad \lambda_* = \lambda_{c0}, \quad \rho_* = \rho_{c0}.$$

Размерные величины: T — температура среды, p — давление газа, ρ — плотность, C — концентрация конденсированного реагента, E , k_0 ,

Q — соответственно энергия активации, предэкспоненциальный множитель, тепловой эффект реакции, \mathbf{u} — вектор скорости движения газа, k_f — коэффициент фильтрации, c — теплоемкость, λ — теплопроводность, α — коэффициент теплопотерь, R — газовая постоянная, a — температуропроводность, M — молекулярная масса. Безразмерные величины: θ — температура, P — давление, η — глубина превращения, X, Y, Z — пространственные координаты, нормированные на x_* , μ_η — стехиометрический коэффициент, ν — доля активной конденсированной фазы в единице объема среды, m — пористость среды (доля газовой фазы в единице объема среды). Индексы: 0 — значение в начальный момент времени, * — значение, используемое при обезразмеривании, g — величины, относящиеся к газу, c — к конденсированной среде, c_0 — к конденсированной непористой среде, bn — к внешней среде, η соответствует безразмерным плотности и теплопроводности конденсированной пористой среды. Эталоны: t_* определяет характерное время горения, x_* — характерный размер зоны химической реакции. Согласно теории горения $t_* \sim a\gamma^2/u^2$, $x_* \sim a\gamma/u$ (где a — коэффициент температуропроводности среды, u — скорость горения). Для рассматриваемого класса систем (пористый реагент + активный газ \rightarrow твердый продукт) $t_* \approx (0.04 \div 3) \cdot 10^{-2}$ с, $x_* \approx (0.2 \div 3) \cdot 10^{-2}$ см. Ввиду недостаточной изученности макрокинетики химического взаимодействия в условиях горения отметим приближенный характер этих данных.

При выборе безразмерной температуры Д. А. Франк-Каменецкий в качестве нулевого значения температуры предложил выбирать характерную температуру исследуемого процесса, в качестве масштаба температуры — использовать характерный температурный интервал $R T_*^2 / E$. При изменении температуры на величину характерного интервала скорость ведущего химического взаимодействия обычно меняется в e раз. В качестве характерной температуры T_* в задачах горения обычно выбирают температуру, при которой достигается максимальная скорость реакции $T_* \approx T_0 + Q/c_*$. В данном случае из-за неполноты превращения исходного реагента следует выбирать более низкую температуру. Отметим, что выбор характерной температуры регулируется удобством вычислений.

С целью аккуратного и детального анали-

за выхода на установившиеся режимы горения трехмерная математическая модель (1)–(5) исследовалась численными методами с применением меняющихся во времени неравномерных сеток, адаптирующихся к особенностям решения. При исследовании распространения фронта горения по образцу происходило наращивание расчетной области задачи со стороны реагентов и удаление части расчетной области со стороны продуктов горения. Используя такой подход, мы фактически имитировали работу достаточно протяженного реактора вытеснения непрерывного действия, внутри которого находится фронт фильтрационного горения.

АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ

Горение пористых цилиндрических образцов инициировалось с нижнего торца высокотемпературным импульсом или импульсом переменной температуры с возмущениями в форме пространственной синусоиды определенной амплитуды и частоты. Для визуализации физических полей (температуры, давления, глубины превращения) выделяли типичное плоское сечение, на котором отражалась динамика изолиний соответствующих полей. Это позволяло получать информацию об их градиентах, определяющих потоки тепла и массы газа.

Структура математической модели фильтрационного горения аналогична модели теплодиффузионного пламени. В обеих моделях осуществляется транспорт активного газового реагента в зону интенсивного химического взаимодействия. В условиях неустойчивости плоского фронта горения, больших коэффициентов фильтрации, недостатка массы активного газового реагента во внутрипоровом пространстве следует ожидать формирование ячеистых структур фронта, которые аналогичны ячеистым пламенам при горении газовых смесей. Для такого процесса характерно частичное сгорание исходных реагентов. Конденсированные продукты горения образуют нелинейные фронтальные структуры в исходной реакционно-способной конденсированной среде, получившие название «фингеры» (fingering instabilities).

Ниже представим результаты (в безразмерных переменных) вычислительного эксперимента по мере усложнения получаемых структур. Сначала рассмотрим структуры, которые образуются при горении пористой пластины, размеры которой по оси Y много мень-

ше размеров по осям X и Z ($L_X = 600$, $L_Y = 2$ и $L_Z = 335$). Нижний непроницаемый для газа торец пластины поджигается высокотемпературным источником ($\theta_w = 0$), а верхний открыт для газа. Остальные грани пластины газонепроницаемы. Грани XZ теплоизолированы, а через грани XY происходит теплообмен с окружающей средой по закону Ньютона с коэффициентом $\alpha_z = 2.0$. Внешнее давление ($P_{bn} = 2.5 \cdot 10^{-3}$) меньше стехиометрического ($P_{st} = 3.6 \cdot 10^{-2}$), остальные параметры: $K_f = 5.0 \cdot 10^4$, $c_g = 0.5$, $\lambda_g = 5.0 \cdot 10^{-3}$, $\mu_\eta = 0.3$, $m = 0.5$, $\gamma = 0.06$, $\beta = 0.11$, $c_\eta = 1.0$, $\lambda = 0.5$, $\theta_0 = -8.0$, $P_0 = P_{bn}$.

При зажигании высокотемпературным импульсом ($\theta_w = 0$) исходная пористая конденсированная среда вступает в экзотермическое химическое взаимодействие с внутрипоровым активным газом с образованием конденсированных продуктов. В зонах интенсивного химического превращения температура среды растет и становится выше температуры инициирования. Потребление активного газового реагента приводит к понижению внутрипорового давления в зоне интенсивного превращения, к появлению фильтрации газа и возможному прекращению реакции из-за отсутствия активного газа.

Теплопотери, срывая процесс химического взаимодействия и уменьшая потребление газового реагента в охлажденной приповерхностной зоне, обеспечивают более высокий фильтрационный поток газового реагента к соседним нагретым зонам. В этих зонах плотность газового реагента становится выше по сравнению со средним значением плотности газа по оси Z при однородном температурном поле. Здесь растет температура, следовательно, скорость реакции увеличивается, усиливается потребление газового реагента из окружающего внутрипорового пространства, что понижает общий уровень обеспеченности активным газовым реагентом. Таким образом, возникают два высокотемпературных приповерхностных очага с большой глубиной превращения, разделенные областью, где глубина превращения много меньше единицы. В дальнейшем эти очаги увеличиваются (см. изотерму 3 ($\theta = 2$) на рис. 1, *a*) как по высоте, устремляясь к открытому краю пластины, так и в ширину, стремясь объединиться, но из-за недостатка активного газа (изобара 4, $P = 3 \cdot 10^{-4}$) этого не происходит.

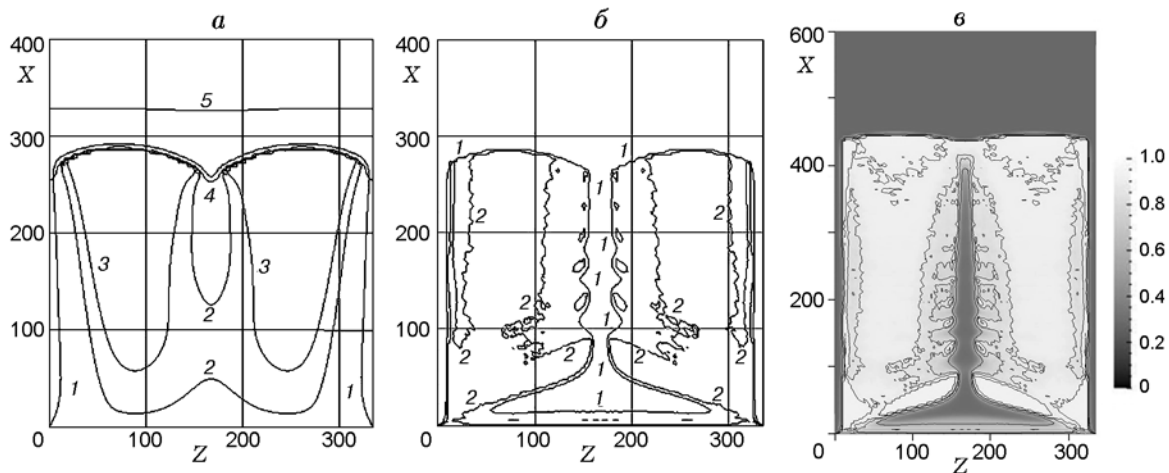


Рис. 1. Структурирование в процессе зажигания ($P_0 = 0.0025$ ($P_{st} = 0.036$), $K_f = 5.0 \cdot 10^4$):

a — поле температуры (изотермы: 1 — $\theta = -5.0$, 2 — 0.5, 3 — 2.0) и поле давления (изобары: 4 — $P = 3.0 \cdot 10^{-4}$, 5 — $1.4 \cdot 10^{-3}$); *б* — поле глубины превращения (изолинии: 1 — $\eta = 0.5$, 2 — 0.9); *в* — поле глубины превращения в черно-белом изображении (изолинии: $\eta = 0.5, 0.8, 0.9, 0.99$); образец — параллелепипед XYZ: $L_X = 600$, $L_Y = 2$, $L_Z = 335$; $\gamma = 0.06$, $\beta = 0.11$, $\mu_\eta = 0.3$, $\theta = -8.0$, $\theta_w = 0$, $\alpha_z = 2.0$

Неоднородный фронт горения представлен на рис. 1, *a* изотермами 1–3, отражающими тепловую структуру фронта, и изобарами 4, 5 характеризующими направление фильтрационного потока газа через открытую верхнюю грань в зону интенсивного химического взаимодействия. Поле глубины превращения изображено на рис. 1, *б* с помощью изолиний 1, 2, которые отражают динамику нелинейного химического превращения. Изолиния $\eta = 0.5$ характеризует остов полученного продукта горения. Внутри него глубина превращения неоднородна, меняется вплоть до $\eta = 1.0$ (мы приводим здесь лишь одну изолинию $\eta = 0.9$). Заметим, что на рис. 1, *a, б* представлены физические поля в один и тот же текущий момент времени. При приближении неоднородного фронта горения к открытому краю пористого образца (в условиях внешнего постоянного давления) фильтрационный поток газа из внешней среды увеличивается, скорость химического превращения растет, соответственно повышается температура в очагах, которые объединяются и формируют плоский фронт горения. Сложную динамику распространения фронта горения «запоминает» поле глубин химического превращения η , которое представлено на рис. 1, *в* и соответствует более позднему моменту времени. Изображение его дано в черно-белой гамме в виде двух частей, разделенных областью

непрореагировавшей среды (белый цвет — глубина превращения близка к 1, черный — практически равна 0).

Динамика образования и распространения неоднородной структуры фронта горения усложняется, если увеличить давление ($P_0 = P_{bn} = 3.3 \cdot 10^{-3}$, $P_0 < P_{st}$) и уменьшить коэффициент фильтрации ($K_f = 10^4$), оставив без изменения остальные параметры. Такое изменение параметров приводит к затруднению фильтрации активного газа к фронту горения. Поле глубины превращения «запоминает» (рис. 2, *б*) развитие процесса химического превращения во времени, в отличие от полей температуры и давления, которые отражают состояние процесса в данный момент времени (рис. 2, *a*). На начальных стадиях процесса наблюдается практически симметричная картина из двух приповерхностных очагов, появившихся после зажигания в условиях боковых теплопотерь и относительно слабой скорости фильтрации газа (см. изолинии 1, 2 на рис. 2, *б*). Эти очаги движутся как к открытой поверхности, так и по направлению друг к другу с образованием неоднородного продукта горения (два «фингера»). Здесь, в отличие от процесса, представленного на рис. 1, *б*, возникают «боковые отростки» с глубиной превращения $\eta = 0.5$ и 0.9 (соответственно изолиния 1 и замкнутая изолиния 2). Они прекращают свое развитие из-за

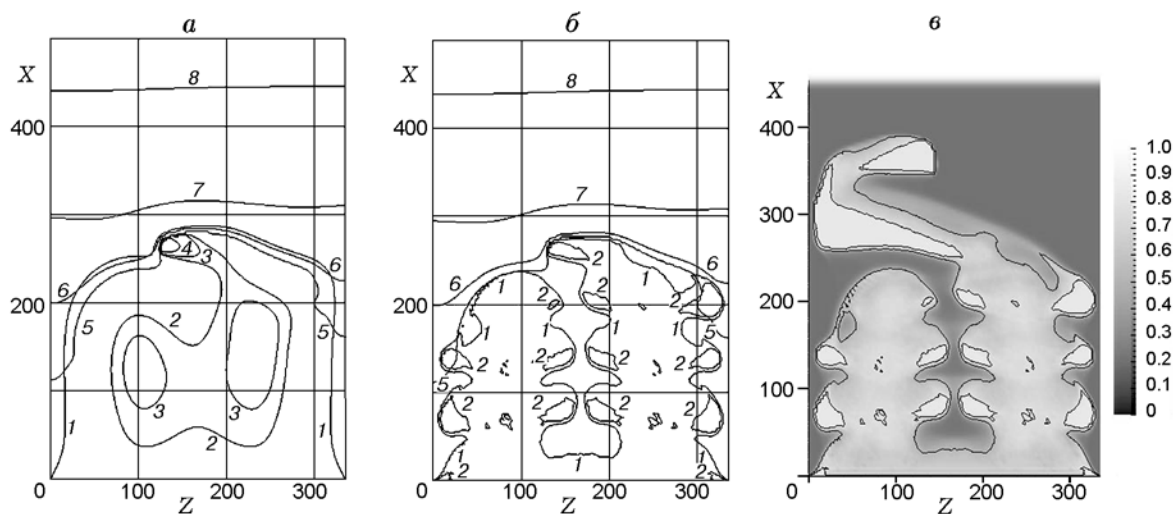


Рис. 2. Структурирование в процессе зажигания ($P_0 = 0.0033$ ($P_{st} = 0.036$), $K_f = 10^4$):

a — поле температуры (изотермы: 1 — $\theta = -5.0$, 2 — 0.5, 3 — 1.0, 4 — 2.0) и поле давления (изобары: 5 — $P = 3.0 \cdot 10^{-4}$, 6 — $1.4 \cdot 10^{-3}$, 7 — $2.5 \cdot 10^{-3}$, 8 — $3.0 \cdot 10^{-3}$); *б* — поле глубины превращения (изолинии: 1 — $\eta = 0.5$, 2 — 0.9); *в* — поле глубины превращения в черно-белом изображении (изолинии: $\eta = 0.5$, 0.9); $L_X = 600$, $L_Y = 2$, $L_Z = 335$; $\gamma = 0.06$, $\beta = 0.11$, $\mu_\eta = 0.3$, $\theta = -8.0$, $\theta_w = 0$, $\alpha_z = 2.0$

отсутствия активного газа, уже потребленного лидирующими зонами фильтрационного фронта горения. С течением времени симметричность распространения очагов нарушается: левый очаг становится менее активным и гибнет, в то время как правый усиливается и начинает движение от одной боковой границы пластины к другой (рис. 2, б). Следует отметить, что такое направление движения высокотемпературного очага обусловлено воздействием теплового потока от частично прореагировавшей среды в направлении исходной среды. На рис. 2, а изображены тепловая структура фронта на этот момент времени (изотермы 1–4 и изолинии давления 5–8). Динамика образования продуктов горения в более поздний момент времени представлена на рис. 2, в в черно-белой гамме. Подобную картину экспериментатор наблюдает при исследовании продуктов горения в образцах.

Динамика нелинейной структуры фронта горения зависит от условий фильтрации газа, условий теплообмена с внешней средой, а также от параметров пластины. При изменении размера пластины в процессе зажигания формировалось три и более очага. Наблюдалась гибель среднего очага, так как тепловые и фильтрационные условия для его развития ухудшались за счет усиления химического превраще-

ния приповерхностных очагов, сложное взаимодействие которых отражалось в изменении физических полей температуры, давления и глубины превращения.

Таким образом, в условиях неустойчивости плоского фронта уже на стадии зажигания возникают «необычные» формы движения фронта, разрушающие начальную симметрию возмущений реагирующей системы. Эти формы распространения фронта зависят от давления (важен дефицит активного газа), проницаемости пористой среды, ее геометрии и размеров и контакта с окружающей средой.

Чтобы исключить влияние процессов тепло- и массообмена с окружающей средой на боковых гранях пластины (оказывающих воздействие на формирование фронтальных структур), была рассмотрена «периодическая» реагирующая система. Для этого в качестве объекта исследования выбрана длинная труба фиксированной толщины, изготовленная из пористого вещества. Внутренняя и внешняя поверхности трубы теплоизолированы и газонепроницаемы, а ее верхний торец открыт для поступающего извне газа. Процесс горения инициировали снизу с помощью специально заданного температурного импульса, имеющего возмущение синусоидального характера с амплитудой A и частотой K : $T_w + A \sin(\varphi K)$

($\varphi = 0 \div 2\pi$ — угол вращения). По истечении времени импульса зажигания нижний торец образца был теплоизолирован. Поперечные колебания температуры зажигания были относительно малые. В случае устойчивого режима горения они не влияли на структуру установившегося плоского фронта горения (фронт «забывал» стадию зажигания). В неустойчивом случае с помощью возмущений мы сокращали характерное время процесса структурирования. При этом возникает вопрос о влиянии амплитуды и частоты возмущений на структуру фронта.

Для ответа на поставленный вопрос была проведена серия расчетов. При фиксированной толщине пористой трубы варьировались внутренний радиус R_0 (длина волны возмущения) и частота возмущений K колебаний температуры зажигания. В силу малой толщины трубы и слабой зависимости полей температуры, давления и глубины превращения от радиуса, для иллюстрации полей мы выбирали их значения для радиуса $R = 0.5(R_{bn} + R_0)$. Далее на рисунках приведена динамика процесса структурирования продуктов горения (меняющиеся во времени поля температуры, давления и глубины превращения). Отметим, что на них отражена только та часть фронта, которая характеризует динамику его лидирующей части, полностью потребляющей активный газовый реагент. Зона фильтрации газа в верхней непрогретой части пористой среды и зона фиксированных продуктов (в силу отсутствия активного газа) не представлены на последовательных кадрах динамики процесса.

На рис. 3 показана нелинейная динамика структурирования продуктов горения трубы (длиной $L_X = 4000$, внутреннего радиуса $R_0 = 250$ и внешнего $R_{bn} = 254$). Здесь коэффициент фильтрации $K_f = 2 \cdot 10^4$, внешнее и начальное давление $P_{bn} = 0.018$, $P_0 = P_{bn}$ ($P_{st} = 0.036$), амплитуда и частота возмущений $A = 1$, $K = 1$, остальные параметры те же, что и для варианта, приведенного на рис. 1. Сначала после импульсного теплового воздействия на фоне практически плоского фронта возникают малые флуктуации физических полей. Они едва заметны на поле глубины превращения и на поле температуры, а поле давления является однородным в поперечном направлении, с низкими значениями в зоне фронта горения и в области продуктов. С течением времени наблюдается появление отдельных

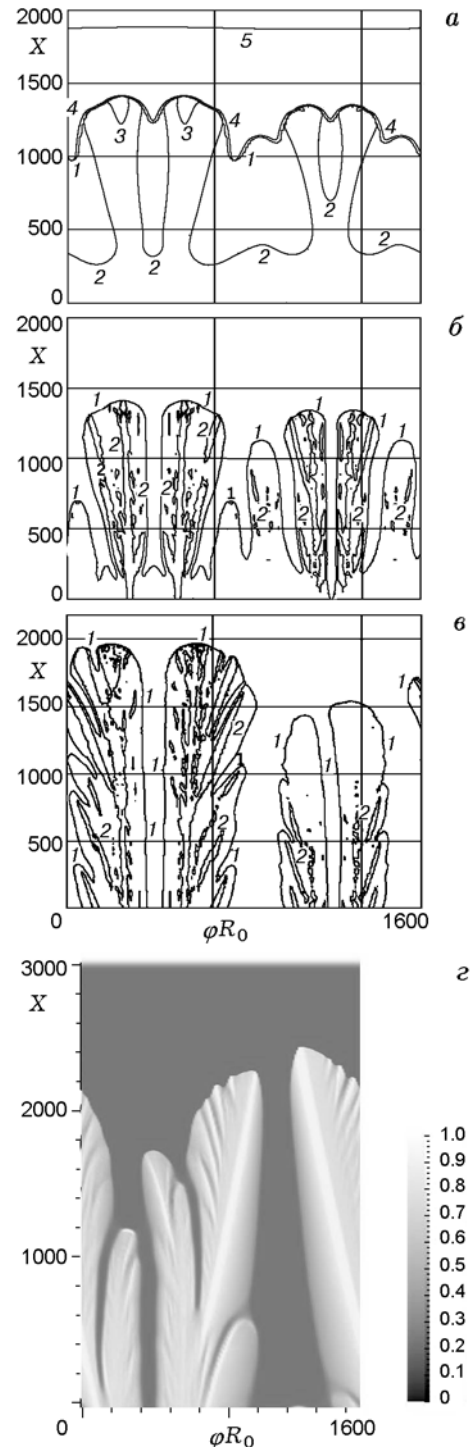


Рис. 3. Нелинейная динамика структурирования ($R_0 = 250$, $R_{bn} = 254$, $K = 1$):

a — поле температуры (изотермы: 1 — $\theta = -5.0$, 2 — 0.5, 3 — 2.0) и поле давления (изобары: 4 — $P = 5.0 \cdot 10^{-4}$, 5 — $P = 1.2 \cdot 10^{-2}$); *б*, *в*, *г* — глубины превращения (изолинии: 1 — $\eta = 0.5$, 2 — 0.8)

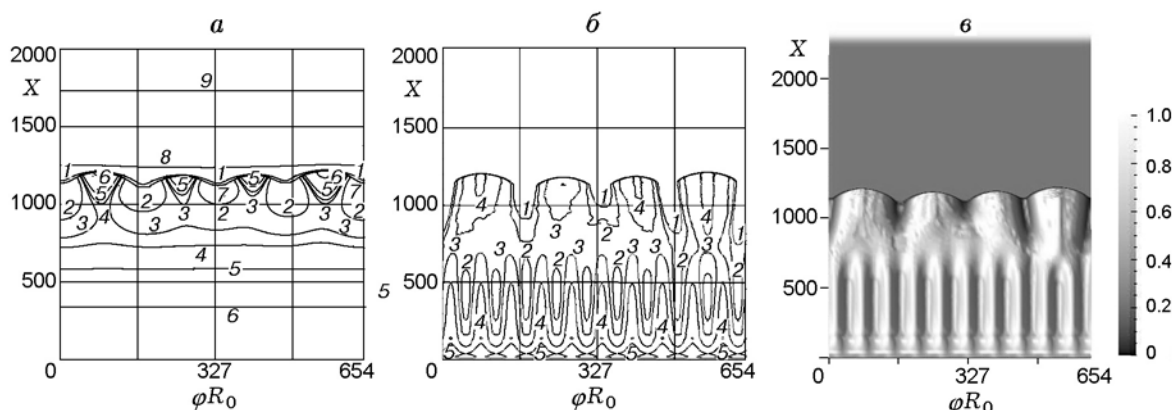


Рис. 4. Нелинейный процесс объединения высокочастотных колебаний и формирование отдельных ячеек («фингеров») фронта горения ($R_0 = 100$, $R_{bn} = 104$, $K = 10$):

a — поле температуры (изотермы: 1 — $\theta = -5.0$, 2 — 0.5, 3 — 0.9, 4 — 1.0, 5 — 1.2, 6 — 1.8) и поле давления (изобары: 7 — $P = 5.0 \cdot 10^{-4}$, 8 — $6.0 \cdot 10^{-3}$, 9 — $1.2 \cdot 10^{-2}$); b , v — поле глубины превращения (изолинии: 1 — $\eta = 0.5$, 2 — 0.6, 3 — 0.7, 4 — 0.8, 5 — 0.9)

новых структурных ячеек (см. рис. 3, b , изолинии 1, 2), которые конкурируют между собой — объединяются или затухают. Их тепловое состояние характеризуют изотермы 1–3, а фильтрационные потоки — изобары 4, 5. Видно, что образовавшаяся структура практически «забыла» процесс зажигания. В дальнейшем на фоне оставшихся «фингеров» выделяются две пары (рис. 3, b), из которых левая пара за счет большего разветвления потребляет больше газа из окружающего ее пространства и выделяет больше тепла. В результате возникает пространственная неоднородность во всех физических полях (θ , P , η). Эта пара и продолжает свое существование дальше (см. рис. 3, z , поле глубины превращения в черно-белом изображении). Два «фингера» разделены между собой «оврагом», где глубина превращения конденсированной среды близка к нулю, так как здесь практически отсутствует активный газ, хотя и достигнута достаточно высокая температура. Поэтому разветвление их идет в верхней части ячеек, где выполнены их условия существования (повышенная температура и газ).

Напомним, что движение «структурированного фронта» определяется лидирующей частью структуры фронта. Это объясняется распределением давления активного газового реагента (см. изобару 4 на рис. 3, a), массы активного газа хватает только для разогревотой конденсированной среды в лидирующей части фронта. В более глубоких слоях частично

прореагировавшей среды активный газ отсутствует и, хотя температура высокая, химическое превращение не идет. Температура здесь осредняется, глубина превращения фиксируется. Это позволяет упростить исследование процесса распространения фронта, сосредоточив внимание на динамике его лидирующей части. На рис. 3, a – z нижняя часть образовавшейся ранее структуры «срезана» и не демонстрируется, зато «добавлена» дополнительная масса исходной среды, по которой возможно дальнейшее распространение фронта. Полное отражение структуры продукта можно получить, соответственно объединив все рисунки для глубины превращения.

На рис. 4 показаны нелинейный процесс химического взаимодействия в трубе (внутреннего радиуса $R_0 = 100$ и внешнего $R_{bn} = 104$), инициируемый импульсом в виде высокочастотных возмущений температуры ($K = 10$), и дальнейшее формирование отдельных ячеек («фингеров») во фронте горения. Остальные параметры те же, что и для расчета, приведенного на рис. 3. В данном случае довольно быстро формируется периодическая структура фронта, приводящая к ячеистой структуре конденсированных продуктов горения. Ячейки имеют периодическую структуру в поперечном направлении; более того, создается впечатление, что эта структура установилась. Однако реально идет медленная перестройка структуры, обусловленная изменением условий филь-

трации газа. Процесс перестройки фиксируется полем глубины превращения. Происходит объединение отдельных ячеек, при этом новый характерный размер больше двух прежних ячеек, но меньше трех. Это отчетливо видно на рис. 4, б, в, где поле глубины превращения представлено в виде изолиний, а также в черно-белом изображении. Соответственно перестраиваются поля температуры и давления. Температура — почти периодическая функция вдоль окружности трубы (см. рис. 4, а, изотермы 1–6). Поле давления отражает зоны интенсивного химического взаимодействия: изобара 7 выделяет нижнюю кромку «зоны присутствия» активного реагента, изобары 8, 9 характеризуют фильтрационные потоки активного газа в зону реакции. На рис. 4, б, в заметно различие ячеек. Видна тенденция «поглощения» крайними ячейками двух внутренних. Дальнейшее развитие процесса действительно привело к образованию двух основных «фингеров».

Таким образом, можно сделать вывод, что характерный размер установившейся структуры (количество и поперечный размер «фингеров») не определяется однозначно условиями инициирования. С другой стороны, процесс релаксации структуры зависит от условий инициирования. Реально вычислительный эксперимент, так же как и физический, фиксирует промежуточное состояние активной системы, которое зависит от определяющих параметров и «забывает» детали процесса инициирования. Меняя характеристики среды, размеры окружности трубы, можно управлять процессом формирования «квазипериодических» структур и их количеством по длине окружности. На рис. 5 ($R_0 = 250$, $R_{bn} = 254$, $K = 4$, остальные параметры те же, как для варианта рис. 3) приведен фрагмент динамики такой структуры — поле глубины превращения в черно-белой гамме.

На рис. 6 представлено экспериментально наблюдаемое поле глубины превращения, черный цвет — прореагировавшая часть «плоского» образца из целлюлозы [8]. Сравнение с физическим экспериментом показывает, что наши данные находятся в качественном согласии. Отметим, что процессы нелинейной динамики распространения фронта реакции имеют фундаментальное значение в теории горения и им уделяется постоянное внимание в научной литературе. Так, в работе [9] предложена двумерная теплодиффузионная модель горения свободной поверхности конденсированной

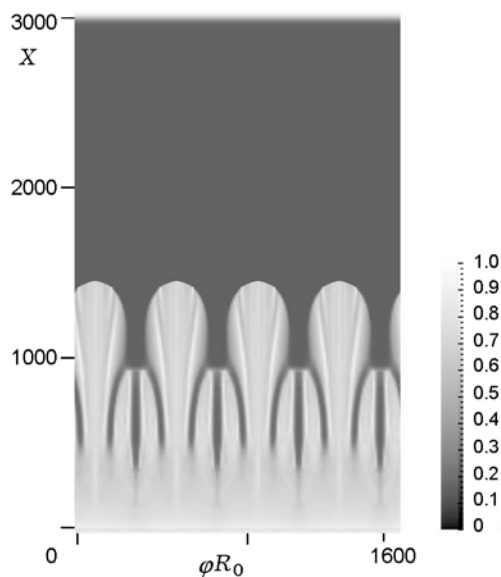


Рис. 5. Формирование «квазипериодических» структур ($R_0 = 250$, $R_{bn} = 254$, $K = 4$)

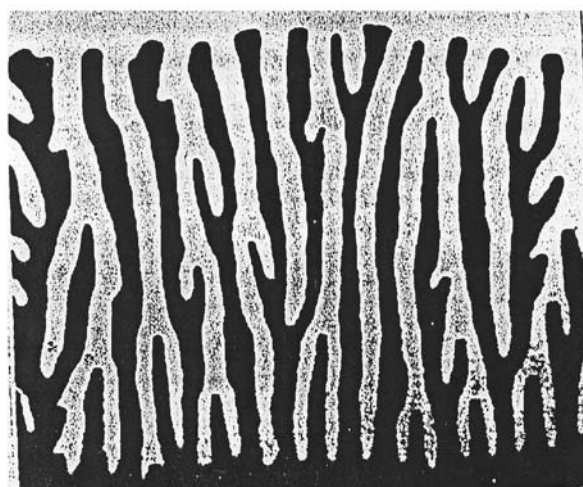


Рис. 6. Поле глубины превращения (эксперимент)

фазы, контактирующей со встречно перемещающимся газом, и рассмотрена динамика структурирования фронта, подобная ячеистым пламенам для газовых смесей. Структурообразованию при спутном фильтрационном горении посвящены работы [10, 11], где проведен анализ структуры одной ячейки для математической модели, близкой к рассматриваемой нами. В этих работах теоретически и экспериментально доказывается факт образования струк-

туры, когда плоский фронт фильтрационного горения неустойчив. Отметим, что в отличие от [10] формируемая ячейка, определенная в наших расчетах, имеет сложную поперечную структуру с переменной глубиной превращения в поперечном направлении, отражающую историю ее роста.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В рамках трехмерного математического моделирования фильтрационного горения показано, что при неустойчивости плоского фильтрационного фронта горения процесс экзотермического химического превращения может протекать в новой «динамической форме». Проведенный вычислительный эксперимент свидетельствует о возможности существования многоячейковых структур, число и форма которых определяются теплофизическими и макрокинетическими параметрами среды, а также геометрией и размерами пористого состава. Линейный анализ задачи об устойчивости плоского фронта указывает на существование резкого роста возмущений с определенной длиной волны. Характерный размер нелинейных ячейковых структур в неустойчивом фронте теплодиффузионного пламени, согласно гипотезе Я. Б. Зельдовича, может также соответствовать длине волны возмущения с максимальным ростом. Эта гипотеза не противоречит данным проведенного вычислительного эксперимента для фильтрационного горения. При изменении поперечного размера пористого образца формируется соответствующее количество ячеек. Однако при удалении параметров от границы устойчивости стационарного фронта это соответствие разрушается из-за сильной нелинейности системы. Здесь ячейки принимают сложную нелинейную структуру, соответственно усложняется и динамика их формирования. Следует отметить, что полученные результаты имеют характер промежуточной асимптотики. С одной стороны, процесс быстро «забывает» симметрию процесса зажигания. С другой стороны, мы не можем получать установившиеся структуры, отвечающие бесконечному времени для бесконечных образцов; нами представлена динамика на конечном промежутке времени. Аналогичная си-

туация возникает и в реальном эксперименте, где образцы имеют конечную длину и время их горения ограничено. Полученные результаты носят фундаментальный характер и могут представлять интерес при анализе процессов фильтрационного горения в химических реакторах, где процессы экзотермического химического превращения аналогичны вышеописанным.

ЛИТЕРАТУРА

1. Turing A. The chemical basis of morphogenesis // Phil. Trans. Reg. Soc. — 1952. — V. 237. — P. 37–72.
2. Николис Г., Пригожин И. Самоорганизация в неравновесных системах: пер. с англ. — М.: Мир, 1979.
3. Зельдович Я. Б. Теория горения и детонации газов. — М.; Л.: Изд-во АН СССР, 1944.
4. Баренблатт Г. И., Зельдович Я. Б., Истратов А. Г. О диффузионно-тепловой устойчивости ламинарного пламени // ПМТФ. — 1962. — № 4. — С. 21.
5. Алдушин А. П., Каспарян С. Г., Шкадинский К. Г. Образование двумерной ячейковой структуры в теплодиффузионном пламени // Докл. АН СССР. — 1979. — Т. 247, № 5. — С. 1112–1115.
6. Нестационарное распространение пламени / под ред. Дж. Г. Маркштейна. — М.: Мир, 1968.
7. Шкадинский К. Г. Математическое моделирование нестационарных фронтальных режимов экзотермического химического превращения: дис. . . д-ра физ.-мат. наук / Ин-т проблем химической физики. — Черноголовка, 1983.
8. Zik O., Olami Z., Moses E. Fingering instability in combustion // Phys. Rev. Lett. — 1998. — 81.3868.
9. Kagan L., Sivashinsky G. Pattern formation in flame spread over thin solid fuels // Combust. Theory and Modelling. — 2008. — V. 12, N 2. — P. 269–281.
10. Aldushin A. P., Matkovsky B. J. Instabilities, Fingering and the Saffman — Taylor problem in filtration combustion // Combust. Sci. and Technol. — 1998. — V. 133. — P. 293.
11. Алдушин А. П., Браверман Б. Ш. «Фингер» — эффект при фильтрационном горении // XIV Всерос. симпоз. по горению и взрыву, 13–17 октября 2008 г., Черноголовка: тез. докл. — С. 11.

*Поступила в редакцию 19/I 2009 г.,
в окончательном варианте — 16/III 2010 г.*