

РАСЧЕТ ОТКЛИКА ГАЗИФИЦИРУЮЩЕГОСЯ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО МАТЕРИАЛА НА ДЕЙСТВИЕ МОНОХРОМАТИЧЕСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Л. К. Гусаченко¹, В. Е. Зарко¹, С. П. Ивания², А. Д. Рычков³

¹Институт химической кинетики и горения СО РАН, 630090 Новосибирск, gusachen@kinetics.nsc.ru

²Новосибирский государственный технический университет, 630092 Новосибирск

³Институт вычислительных технологий СО РАН, 630090 Новосибирск

Для однородного энергетического материала с экзотермическими подповерхностными реакциями показано существование границы устойчивости стационарной газификации при малых и больших значениях лучистого потока. Приведены примеры соответствующих расчетов по нестационарной модели. Рассмотрен (с примерами численного счета) возможный способ учета влияния подповерхностных реакций на прозрачность энергетического материала. Аналитически найдена функция отклика скорости газификации инертного материала на малые колебания светового потока. Знание этой функции позволяет с помощью относительно простых экспериментов получать информацию о некоторых тепловых и оптических характеристиках энергетического материала.

Ключевые слова: газификация излучением, прозрачность, неустойчивость, энергетический материал.

ВВЕДЕНИЕ

Режимы газификации гомогенного энергетического материала (ЭМ) под воздействием теплового излучения могут быть применены для практических целей. Кроме того, из экспериментов по газификации в некоторых случаях можно сравнительно легко извлечь информацию о тепловых и оптических характеристиках ЭМ. В данной работе режимы газификации исследуются с использованием излагаемой ниже одномерной нестационарной модели зажигания и горения ЭМ. Модель ранее была опубликована в относительно труднодоступных изданиях [1, 2] и поэтому воспроизводится в данной статье (система уравнений вынесена в приложение). Можно ожидать, что в ряде случаев она адекватно действительности описывает горение некоторых ЭМ. В частности, ранее с ее помощью был теоретически обнаружен эффект неустойчивости горения за счет интенсивных экзотермических реакций в конденсированной фазе [3, 4], позволяющий дать объяснение результатам многих экспериментов. Отметим, что универсальных моделей горения ЭМ не существует в связи с громадным многообразием типов веществ и режимов горения.

В модели предполагается, что в волне горения происходит нагрев исходного твердого вещества и его плавление при температуре T_m ;

в жидкой фазе протекают две параллельные химические реакции. Принято, что газообразные продукты этих реакций практически мгновенно покидают конденсированную фазу, например, по струйному механизму или диффузией. При температуре поверхности T_s происходит равновесный фазовый переход жидкость — газ, так что величина T_s зависит от давления p и состава газа у поверхности. В газовой фазе идут две последовательные экзотермические химические реакции, происходят дальнейший нагрев вещества и диффузионное перераспределение состава газовой смеси. Схема физико-химических превращений показана на рис. 1.

Учтена возможность поступления к поверхности лучистого теплового потока со спектром, состоящим из одной или нескольких линий. На практике это может быть лазерное из-

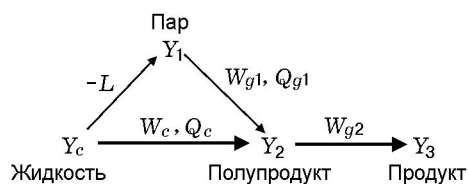


Рис. 1. Схема превращений вещества:

тепловые эффекты Q_c , Q_{g1} и теплота испарения L связаны законом Гесса $Q_{g1} = Q_c + L$

лучение или вырезанная фильтрами узкая полоса сплошного спектра от другого источника излучения. Поток излучения поглощается далее в веществе по закону Бугера (см. приложение). Предусмотрена также возможность поглощения части этого потока продуктами разложения и парами исходного ЭМ. Внешний лучистый поток q и давление p до начала расчета задаются как функции времени.

В такой постановке при действии достаточно интенсивного облучения под поверхностью ЭМ на глубине, примерно равной $1/\alpha$ (α — параметр закона Бугера), реализуется температурный максимум. Тонкий слой жидкости находится в перегретом метастабильном состоянии. Предполагается, что в условиях интенсивной газификации ввиду малости времени пребывания жидкости в перегретой зоне там не успевают сколько-нибудь заметно вырасти газовые пузыри.

УСТОЙЧИВОСТЬ СТАЦИОНАРНОЙ ГАЗИФИКАЦИИ ПРОЗРАЧНОГО ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО МАТЕРИАЛА С РЕАКЦИЯМИ В КОНДЕНСИРОВАННОЙ ФАЗЕ

Рассмотрим «чистую» газификацию под действием излучения, когда можно пренебречь теплоподводом по механизму Фурье из газовой фазы (например, если зона тепловыделения в газовой фазе достаточно удалена от поверхности или устранена продольным обдувом инертным газом). В этих условиях температурный профиль стационарной волны газификации имеет подповерхностный максимум (см. [5], а также последний параграф настоящей статьи). Если распределение интенсивности поглощения поступающего через поверхность потока энергии q принять по закону Бугера в форме $q \exp(-\alpha x)$, то высота температурного максимума (перегрев) пропорциональна q , а его расстояние от поверхности имеет порядок толщины зоны поглощения $1/\alpha$. В случае реагирующего в конденсированной фазе ЭМ форму профиля дополнительно усложняет подповерхностное тепловыделение от реакций¹. Простыми качественными рассуждениями можно показать, что в такой ситуации относительно

¹Далее учитываем одну глобальную реакцию первого порядка с газообразными продуктами, которые мгновенно выводятся в газовую фазу (диффузией или в струйном режиме).

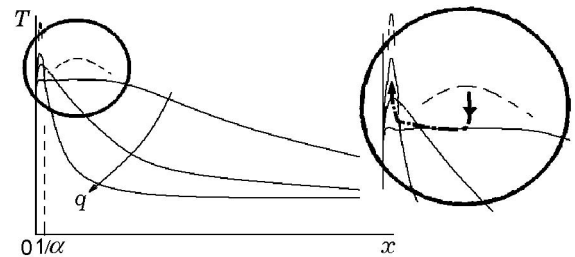


Рис. 2. Зависимость температурного профиля от теплового потока:

в выделенном круге штрихпунктирная стрелка показывает эволюцию положения температурного максимума с ростом q ; сплошные линии соответствуют стационарным режимам, штриховые линии — режиму вспышки при нарушении устойчивости

интенсивное суммарное тепловыделение подповерхностных реакций может вызвать неустойчивость типа теплового взрыва. Неустойчивость реализуется как при слабых, так и при высоких уровнях потока излучения [1, 2].

При малых потоках излучения соответственно мала скорость газификации u ; при этом велика толщина x/u прогретого слоя, а с ней и толщина зоны экзотермических реакций (здесь x — температуропроводность). Уместно рассмотреть предельный случай, когда толщина зоны подповерхностных реакций значительно больше толщины зоны поглощения лучистого потока, что соответствует приближению снизу к верхней линии на рис. 2. В этом случае (см. профиль, изображенный почти горизонтальной сплошной линией в выделенном круге на рис. 2) тепловыделение в зоне реакций за счет поглощения лучистого потока составляет малую часть общего. Физическая картина близка к таковой для непрозрачного ЭМ с поглощением потока излучения на его поверхности. «Температурную» часть упомянутой картины для непрозрачного ЭМ можно выделить из рис. 2, если в качестве поверхности ЭМ принять поверхность, левее которой поглощена основная часть излучения. На рис. 1 этой поверхности соответствует штриховая вертикальная линия². Если при этом скорость суммарного тепловыделения от реакций равна теплоотводу в глубь ЭМ, то согласно Я. Б. Зельдовичу [6] реализуется ситуация

²В математической модели предельный переход к бесконечно большому коэффициенту поглощения создает особенность на поверхности и при формальном подходе может вызвать затруднения в численном счете.

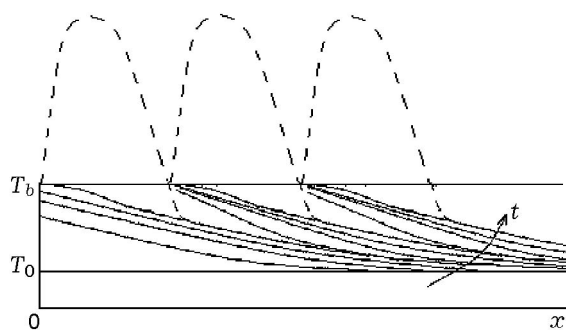


Рис. 3. Схема эволюции температурного профиля при малых световых потоках

на границе устойчивости режима нагрева. Геометрический признак такой ситуации в [6] — обращение в нуль температурного градиента на «горячей» границе рассматриваемой зоны реакций (на поверхности ЭМ); в данном случае эта граница соответствует штриховой вертикальной линии.

Нестационарная картина нагрева ЭМ представлена на рис. 3. Поскольку рост температуры поверхности жестко ограничен фазовым переходом, после достижения температуры кипения T_b избыточное тепловыделение от реакций создает подповерхностный максимум температуры (см. штриховые линии на рис. 3).

Часть тепла отводится в сторону поверхности и, добавляясь к поглощаемому излучению в узкой зоне толщиной $1/\alpha \ll \varepsilon/u$, вызывает ускоренное испарение, которое вместе с реакциями очень быстро перерабатывает перегретую выше температуры T_b часть вещества. В результате реализуется локально крутой температурный профиль (часть штриховой линии ниже T_b на рис. 3), и из приповерхностного слоя теперь отводится тепла больше, чем поступает. Температура поверхности опускается ниже температуры кипения, при этом резко понижается скорость испарения, а с ней и скорость движения поверхности. Но поскольку нагрев поверхности продолжается, через некоторое время температура поверхности снова достигает значения T_b , профиль опять становится пологим и вспышка повторяется. В этом режиме поверхность ЭМ и прилегающая к ней часть температурного профиля перемещаются по веществу неравномерно, с глубокими понижениями уровня скорости движения между вспышками.

С увеличением теплового потока прогретый слой становится тоньше, соответствен-

но становится уже зона реакций и меньше суммарное тепловыделение. Вызванный подповерхностными реакциями температурный максимум исчезает, и реализуется стационарный режим газификации. При достаточно большом потоке становятся существенными особенности профиля, вносимые прозрачностью ЭМ. При $\varepsilon/u \ll 1/\alpha$ «теплопроводностной» составляющей толщины прогретого слоя можно пренебречь, а толщина поглощения от потока не зависит. Поэтому с ростом потока излучения общая толщина прогретого слоя уменьшается лишь до некоторого предела. В то же время высота подповерхностного температурного максимума, вызванного поглощением в прозрачном ЭМ, с ростом q увеличивается. Для инертного материала согласно [2] максимум перегрева равен $T_{\max} - T_0 \approx (q/\alpha\lambda)[(L_1 - \ln(1 + L_1))/(1 + L_1)]$, $L_1 = L/[c(T_s - T_0)]$ (λ — коэффициент теплопроводности, c — удельная теплоемкость) и находится на расстоянии от поверхности $x_{\max} \approx (1/\alpha) \ln(1 + L_1)$. Таким образом, при $\varepsilon/u \ll 1/\alpha$ суммарное тепловыделение реакций с ростом q возрастает, при этом картина изменения температурного профиля качественно соответствует рис. 2 (нижняя линия) и при достаточно большом значении q суммарное подповерхностное тепловыделение реакций $Q \int W(T) dx$ с ростом q снова увеличивается и опять приводит к тепловому взрыву³.

Расчеты газификации при действии потока излучения проводились по нестационарной модели, описанной в [1, 2] и в приложении данной статьи. Приняты следующие значения параметров конденсированной фазы: предэкспонент, энергия активации и тепловой эффект подповерхностной реакции равны соответственно $k_0 = 5 \cdot 10^{17} \text{ с}^{-1}$, $E = 200\,000 \text{ Дж/моль}$, $Q = 3\,000 \text{ кДж/кг}$; коэффициент теплопроводности, теплоемкость и плотность — $\lambda = 0.00023 \text{ кВт/(м}\cdot\text{К)}$, $c = 1.256 \text{ кДж/(кг}\cdot\text{К)}$, $\rho = 1720 \text{ кг/м}^3$; тепловой эффект испарения, температура кипения при атмосферном давлении, теплота и температура плавления — $L = 469 \text{ кДж/кг}$, $T_b = 613 \text{ К}$, $Q_m = 159 \text{ кДж/кг}$, $T_m = 480 \text{ К}$. В газовой фазе заданы нулевая скорость реакций, молярные массы пара и продуктов подповерхностного разложения 296 и 35 кг/кмоль, на-

³В [2] приведено приближенное аналитическое доказательство неустойчивости в этом случае. Но пока нет информации об обнаружении в эксперименте этой ветви границы устойчивости стационарной газификации.

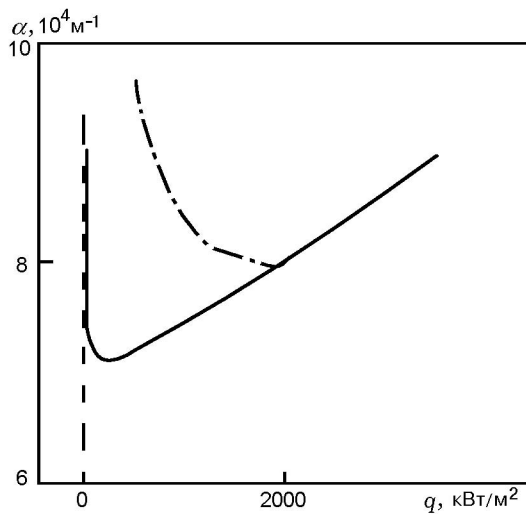


Рис. 4. Граница устойчивости процесса стационарной газификации:

область устойчивости — внутри «угла», образованного сплошной линией; штриховая асимптота соответствует участку границы при $\alpha \rightarrow \infty$

чальная температура $T_0 = 300$ К; давление $p = 0.3$ МПа. В результате получена «карта устойчивости», показанная на рис. 4. Область устойчивой газификации ЭМ при облучении находится внутри «угла», образованного сплошной линией. Штрихпунктирной линией показана граница выхода на стационарный режим, полученная в расчетах с постоянным во времени значением плотности потока излучения. При малых плотностях потока сказывается эффект возможной неустойчивости переходного процесса «от зажигания к горению» при действии постоянного потока.

Термины в кавычках показывают условность их использования: правильнее говорить об аналоге горения — газификации ЭМ под действием излучения и об аналоге зажигания — начале этой газификации. По названной причине левее точки пересечения сплошной и штрихпунктирной линии расходятся. Левая ветвь сплошной линии построена по результатам расчетов с переменной во времени плотностью q потока излучения. Пример такого расчета показан на рис. 5.

Видно, что вначале было реализовано зажигание и выход на режим с кипением на поверхности при действии потока излучения с уменьшающейся во времени плотностью, затем происходит практически стационарная газификация под действием потока излучения плот-

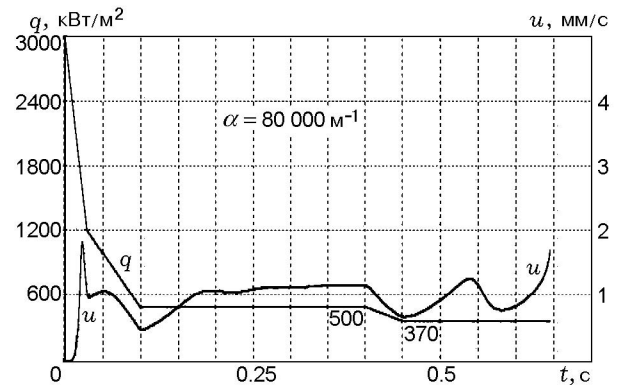


Рис. 5. Переход через левую ветвь границы устойчивости, показанной на рис. 4

ностью $q = 500$ кВт/м². Это значение потока несколько выше критического, при котором стационарный режим невозможен. Последующий плавный переход плотности потока на более низкий (ниже критического) стационарный уровень $q = 370$ кВт/м² привел к возникновению и раскачке колебаний. В результате программа останавливается, что следует трактовать как своеобразный эффект «погасания» ЭМ, за которым в реальной ситуации должна происходить череда вспышек, схематично показанная на рис. 3. Расчет выполнен для коэффициента поглощения $\alpha = 80\,000$ м⁻¹. Заметим, что представленный на рис. 5 стационарный режим при $q = 500$ кВт/м² невозможно получить, если задать такой постоянный поток с самого начала расчета⁴.

Аналогичным образом проведены расчеты для нахождения правой границы устойчивости газификации на рис. 3. Пример расчета с переходом через эту ветвь границы показан на рис. 6.

Основываясь на результатах численных расчетов, можно предложить следующую экспериментальную процедуру определения пределов устойчивости стационарной газификации в широком диапазоне значений тепловых потоков. Начиная с высоких значений, вначале следует определить правую ветвь границы устойчивости (опытами при $q = \text{const}$) и найти ее «минимум», соответствующий пересечению со штрихпунктирной линией рис. 4, а затем, начиная от «минимума», искать левую ветвь, про-

⁴Точка $q = 500$ кВт/м², $\alpha = 80\,000$ м⁻¹ на рис. 4 находится в области левее штрихпунктирной линии, где «зажигание» постоянным потоком, соответствующим выбранной точке области, невозможно.

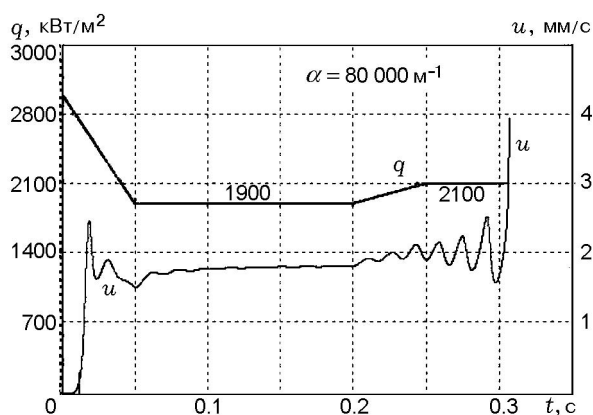


Рис. 6. Переход через правую ветвь границы устойчивости, показанной на рис. 4

вода далее опыты с «кусочно-линейным» заданием функции $q(t)$ по образцу рис. 5.

При численном моделировании не относящиеся непосредственно к постановке задачи параметры численного счета («кусочно-линейное» задание потока излучения на «участке зажигания», крутизна и длительность переходов между стационарными режимами типа показанных на рис. 5 и 6, шаги по времени и пространству, размер области расчета) подбираются таким образом, чтобы зависимостью от них можно было пренебречь при еще приемлемой трудоемкости расчетов.

ВЛИЯНИЕ ПОДПОВЕРХНОСТНЫХ РЕАКЦИЙ НА ПРОЗРАЧНОСТЬ ВЕЩЕСТВА

При нагреве ЭМ естественно ожидать уменьшения прозрачности вещества за счет создаваемых подповерхностной реакцией оптических неоднородностей. За неимением другой информации предложим линейную зависимость локального коэффициента поглощения от массовой доли $(1 - Y_c)$ разложения вещества. Тогда соответствующее «закону Бугера» выражение для плотности объемного тепловыделения вместо $q(t)\alpha \exp(-\alpha x)$ примет вид

$$q(t)\alpha(1 + A(1 - Y_c(x, t))) \times \exp\left(-\alpha\left(x + A \int_0^x (1 - Y_c(x, t)) dx\right)\right). \quad (1)$$

Здесь α — коэффициент поглощения исходного ($A = 0$) вещества, константа A подлежит экспериментальному определению. Выражение (1)

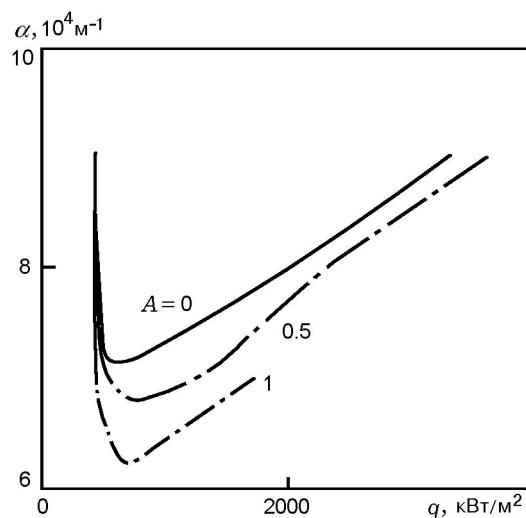


Рис. 7. Граница устойчивости стационарного режима газификации тепловым излучением с учетом «замутняющего» влияния реакций

было вставлено в систему уравнений использованной выше модели, и проведены расчеты с вариацией параметров. Рис. 7 демонстрирует характер влияния величины A на форму границы устойчивой газификации.

В соответствии с выражением (1) учет влияния химических реакций приближенно сводится к использованию эффективной поглощательной способности $\alpha(1 + A(1 - Y_c))$ вместо величины α в выражении для плотности поглощения излучения $q(t)\alpha \exp(-\alpha x)$. В частности, потеря устойчивости, которая для заданного теплового потока q при $A = 0$ происходит при некоторой величине $\alpha = \alpha^*$, теперь наблюдается (см. рис. 7) при меньшем значении $\alpha = \alpha^*/(1 + A(1 - Y_c))$. Слабое место этих приближенных рассуждений связано с переменностью во времени и пространстве степени подповерхностного разложения Y_c , так что граница устойчивости $\alpha(q)$ с увеличением A не просто сдвигается вниз, но и определенным образом деформируется, что можно заметить на рис. 7.

ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ СКОРОСТИ ГАЗИФИКАЦИИ К МАЛЫМ КОЛЕБАНИЯМ ЛУЧИСТОГО ПОТОКА

Внутри области устойчивости (см. рис. 4, 7) можно выделить часть, достаточно удаленную от обеих ветвей границы устойчивости, чтобы в ней можно было без заметных ошибок пренебречь подповерхностным теп-

ловыделением. Иначе говоря, в этой области ЭМ ведет себя как инертный материал. Воспользуемся этим упрощением для получения относительно несложной аналитической оценки отклика скорости газификации на малые колебания потока. Такая оценка при сравнении с экспериментом дает информацию о некоторых оптических и термодинамических характеристиках ЭМ.

Постановка задачи выглядит следующим образом. На плоскую поверхность «полубесконечного» прозрачного вещества с начальной температурой T_0 падает поток q лазерного излучения, который поглощается в глубине по закону Бугера с коэффициентом поглощения α , обеспечивающим плотность тепловыделения $q\alpha \exp(-\alpha x)$. После достижения поверхностью температуры кипения T_s на ней начинается интенсивное испарение с тепловым эффектом L . Фронт испарения распространяется по веществу со скоростью $u(t)$, подлежащей определению. Продукты газификации предполагаются абсолютно прозрачными. Поскольку тепло на испарение поступает только теплопроводностью из конденсированной фазы, под поверхностью испарения должен находиться температурный максимум. Стационарная задача в такой постановке решена в [5].

Процесс описывается одномерным уравнением теплопроводности с движущейся границей. Поместим начало координат на этой границе, тогда вещество надвигается на нее справа со скоростью $u(t)$. Уравнение имеет вид

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(-\lambda \frac{\partial T}{\partial x} - c\rho u(t)(T - T_0) \right) + q\alpha \exp(-\alpha x), \quad (2)$$

$$T(0, t) = T_s, \quad T(\infty, t) = T_0.$$

Дополнительное условие на поверхности — баланс тепла в соответствии с законом сохранения энергии. Отводом теплопроводностью в газ пренебрегаем: из-за большой скорости оттока температурный профиль в газе сильно растянут. Граничное условие имеет вид

$$x = 0, \quad \lambda \frac{\partial T}{\partial x} = \rho u(t)L. \quad (3)$$

Введем безразмерные переменные $\alpha x = \xi$, $(T - T_0)/(T_s - T_0) = \vartheta$, $\alpha^2 t = \tau$, $L/[c(T_s - T_0)] = L_1$, $q/[\alpha\lambda(T_s - T_0)] = q_1$. Здесь $\alpha = \lambda/c\rho$. Тогда (2) принимает вид

$$\frac{\partial \vartheta}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \vartheta}{\partial \xi^2} + \frac{1}{L_1} \frac{\partial \vartheta}{\partial \xi} \frac{\partial \vartheta}{\partial \xi}(0, \tau) + q_1 \exp(-\xi), \quad (4)$$

$$\vartheta(0, \tau) = 1, \quad \vartheta(\infty, \tau) = 0.$$

Используем обычный способ решения задачи о чувствительности. Вначале находим стационарное решение. Затем, чтобы выявить его чувствительность к малым колебательным возмущениям светового потока $\Delta q_1 = |\Delta q_1| \exp(i\omega\tau)$, в нестационарном уравнении (4) полагаем $\vartheta(\xi, \tau) = \vartheta_{st}(\xi) + \Delta\vartheta(\xi, \tau)$, $\Delta\vartheta(\xi, \tau) = f(\xi) \exp(i\omega\tau)$ и по малой добавке $\Delta\vartheta$ проводим линеаризацию. Далее из получившегося линейного уравнения находим $f(\xi)$ и при этом требуем выполнения граничных условий. Чувствительностью будем называть комплексное отношение безразмерных возмущений

$$S = \frac{\Delta u/u}{\Delta q/q} = \frac{f'(0)/\vartheta'_{st}(0)}{|\Delta q_1|/q_1}. \quad (5)$$

Модуль и аргумент этой величины представляют собой отношение амплитуд u и q и сдвиг возмущения скорости по фазе колебаний.

Ищем стационарное решение (4) в виде

$$\vartheta_{st}(\xi) = A_1 \exp(-A_2\xi) + A_3 \exp(-\xi), \quad (6)$$

так что $\vartheta'_{st} = -A_1 A_2 \exp(-A_2\xi) - A_3 \exp(-\xi)$, $\vartheta'_{st}(0) = -A_1 A_2 - A_3$, $\vartheta''_{st} = A_1 A_2^2 \exp(-A_2\xi) + A_3 \exp(-\xi)$.

Подставляя полученные выражения в (4) (с нулевой левой частью) и приравнявая нулю суммы коэффициентов при обеих экспонентах, получаем два соотношения для A_1 , A_2 , A_3 . Еще одно соотношение дает условие при $x = 0$: $A_1 + A_3 = 1$. Из этих трех уравнений следует

$$A_1 = \frac{1 + L_1 + q_1 L_1}{1 + L_1 - q_1}, \quad A_2 = \frac{q_1}{1 + L_1}, \quad (7)$$

$$A_3 = -q_1 \frac{1 + L_1}{1 + L_1 - q_1}.$$

При этом $\vartheta'_{st}(0) = A_2 L_1$.

Теперь для линеаризации в окрестности стационарного решения ищем решение нестационарной задачи (4) в виде $\vartheta(\xi, \tau) = \vartheta_{st}(\xi) + \Delta\vartheta(\xi, \tau)$. Подставляем его и $q_1 = q_{1st} + |\Delta q_1| \exp(i\omega\tau)$ в (4), тогда с учетом (6) выполняется (с точностью до величин первого порядка малости)

$$\frac{\partial \Delta\vartheta}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \Delta\vartheta}{\partial \xi^2} + \frac{1}{L_1} \left(\vartheta'_{st}(\xi) \frac{\partial \Delta\vartheta}{\partial \xi}(0, \tau) + \right.$$

$$+ \vartheta'_{st}(0) \frac{\partial \Delta \vartheta}{\partial \xi} \Big) + \Delta q_1 \exp(-\xi), \quad (8)$$

$$\Delta \vartheta(0, \tau) = 0, \quad \Delta \vartheta(\infty, \tau) = 0.$$

Поскольку $\Delta \vartheta(\xi, \tau) = f(\xi) \exp(i\omega\tau)$, $\Delta q_1 = |\Delta q_1| \exp(i\omega\tau)$, для f получаем обыкновенное линейное дифференциальное уравнение:

$$i\omega f = f'' + A_2 f' - \frac{1}{L} f'(0) (A_1 A_2 \exp(-A_2 \xi) + A_3 \exp(-\xi)) + |\Delta q_1| \exp(-\xi), \quad (9)$$

$$f(0) = f(\infty) = 0.$$

Ищем решение (9) в виде

$$f(\xi)/|\Delta q_1| = B_1 \exp(-\xi) + B_2 \exp(-A_2 \xi) + B_3 \exp(-k\xi), \quad (10)$$

так что $f'(\xi)/|\Delta q_1| = -B_1 \exp(-\xi) - B_2 A_2 \exp(-A_2 \xi) - B_3 k \exp(-k\xi)$, $f'(0)/|\Delta q_1| = -(B_1 + B_2 A_2 + B_3 k)$, $f''(\xi)/|\Delta q_1| = B_1 \exp(-\xi) + B_2 A_2^2 \exp(-A_2 \xi) + B_3 k^2 \exp(-k\xi)$.

Подставляем найденное выражение в (9), где для удобства член $i\omega f$ переносим в правую часть, и требуем тождественного выполнения, для чего по отдельности приравняем к нулю суммы коэффициентов при каждой из трех представленных в решении экспонент ($\exp(-\xi)$, $\exp(-A_2 \xi)$, $\exp(-k\xi)$):

$$B_1(1 - i\omega) - A_2 B_1 + (A_3/L_1)(B_1 + B_2 A_2 + B_3 k) = -1, \quad (11)$$

$$B_2(A_2^2 - i\omega) - A_2^2 B_2 + (A_1 A_2/L_1)(B_1 + B_2 A_2 + B_3 k) = 0, \quad (12)$$

$$B_3(k^2 - i\omega) - k A_2 B_3 = 0. \quad (13)$$

Кроме того, из условия $f(0) = 0$ следует

$$B_1 + B_2 + B_3 = 0. \quad (14)$$

Из (13) имеем

$$k^2 - A_2 k - i\omega = 0, \quad (15)$$

$$k = \frac{A_2}{2} + \sqrt{\left(\frac{A_2}{2}\right)^2 + i\omega}.$$

Знак + перед корнем выбран для выполнения при любом ω условия $f(\infty) = 0$. Для представления k воспользуемся соотношением для произвольных a, b :

$$\sqrt{a + ib} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\sqrt{R + a} + i\sqrt{R - a}),$$

$$R = \sqrt{a^2 + b^2},$$

так что

$$k = \frac{A_2}{2} + \sqrt{\left(\frac{A_2}{2}\right)^2 + i\omega} = \frac{A_2}{2} + \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{R + \left(\frac{A_2}{2}\right)^2} + i\sqrt{R - \left(\frac{A_2}{2}\right)^2} \right),$$

$$R = \sqrt{\left(\frac{A_2}{2}\right)^4 + \omega^2}.$$

Из (11), (12), (14) следует получить (для подстановки в (5)) величину $f'(0)/|\Delta q_1| = -(B_1 + B_2 A_2 + B_3 k)$. Поэтому в систему (11), (12), (14) выгодно ввести $f'(0)/|\Delta q_1|$ и избавиться от B_3 :

$$B_1(1 - i\omega - A_2) - (A_3/L_1) f'(0)/|\Delta q_1| = -1,$$

$$-B_2 i\omega - (A_1 A_2/L_1) f'(0)/|\Delta q_1| = 0,$$

$$B_1 + B_2 - (f'(0)/|\Delta q_1| + B_1 + A_2 B_2)/k = 0.$$

Исключая B_1 и B_2 , получим

$$S = \frac{f'(0)/\vartheta'_{st}(0)}{|\Delta q_1|/q_1} = \frac{q_1/A_2}{A_3 - (1 - A_2 - i\omega) \frac{L_1 - iA_1 A_2 (k(\omega) - A_2)/\omega}{k(\omega) - 1}}. \quad (16)$$

При всех значениях параметров q_1, L_1 зависимость амплитуды отклика от частоты воздействия проходит через максимум (рис. 8).

Для практики могут представлять интерес величина этого максимума $|S|_{\max}$ и соответствующие значения частоты ω_{\max} и сдвига возмущения скорости по фазе колебаний $\varphi_{\max} = \arg(S_{\max})$. Допустим, проведен эксперимент с использованием датчика реактивной силы оттекающих продуктов газификации, который позволяет получить амплитуду и сдвиг φ по фазе величины $S = (\Delta u/u)/(\Delta q/q)$ при

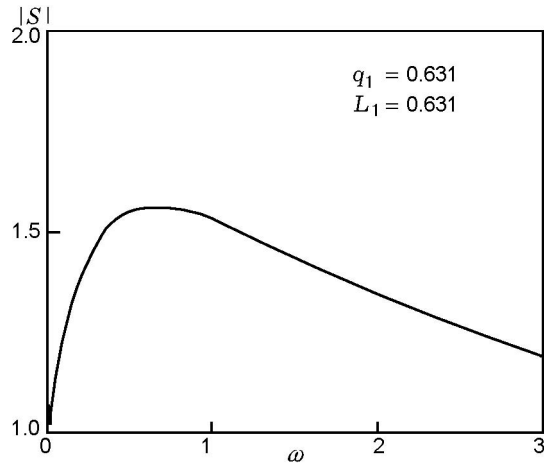


Рис. 8. Зависимость амплитуды отклика S от частоты воздействия ω

различных частотах Ω колебаний потока q . В частности, при некоторой (размерной) частоте Ω^* будет найден максимум амплитуды отклика $|S|_{\max}^*$ и при этом зафиксирован сдвиг φ_{\max}^* . Если известны величины $q, c, \rho, (T_s - T_0)$, то полученных данных достаточно для определения коэффициента поглощения излучения α , коэффициента теплопроводности λ , а также теплоты испарения L . В самом деле, из (16) легко получить (например, с помощью Mathcad) теоретические зависимости от параметров q_1, L_1 для максимальной амплитуды отклика $|S|_{\max}^*$, безразмерной частоты ω_{\max} (при которой этот максимум достигается) и соответствующего фазового сдвига φ_{\max} (рис. 9).

Тогда для пяти неизвестных $\alpha, \lambda, L, L_1,$

q_1 с использованием сделанных выше обозначений получим пять соотношений с известными левыми частями:

$$\begin{aligned} |S|_{\max}^* &= |S|_{\max}(L_1, q_1) \\ c\rho\Omega_{\max}^* &= \alpha^2\lambda\Omega_{\max}(L_1, q_1), \\ \varphi_{\max}^* &= \varphi_{\max}(L_1, q_1), \\ \frac{q}{T_s - T_0} &= \alpha\lambda q_1, \quad c(T_s - T_0) = L/L_1. \end{aligned} \quad (17)$$

Следует отметить возможность уточнения использованной в этом параграфе модели. Для учета влияния плавления можно воспользоваться фрагментами аналитического решения из [7]. Кроме того, желательна оценка влияния зависимости теплоемкости и коэффициента теплопроводности от температуры.

ВЫВОДЫ

Рассмотренные в статье примеры расчета отклика скорости газификации ЭМ показывают, что прозрачность может существенно влиять на характеристики нагрева ЭМ излучением. Для стационарной газификации ЭМ теория предсказывает существование дополнительной границы устойчивости, вызванной именно прозрачностью. Предложен способ приближенного учета влияния подповерхностных реакций на прозрачность.

Получены аналитические выражения для максимума амплитуды отклика скорости га-

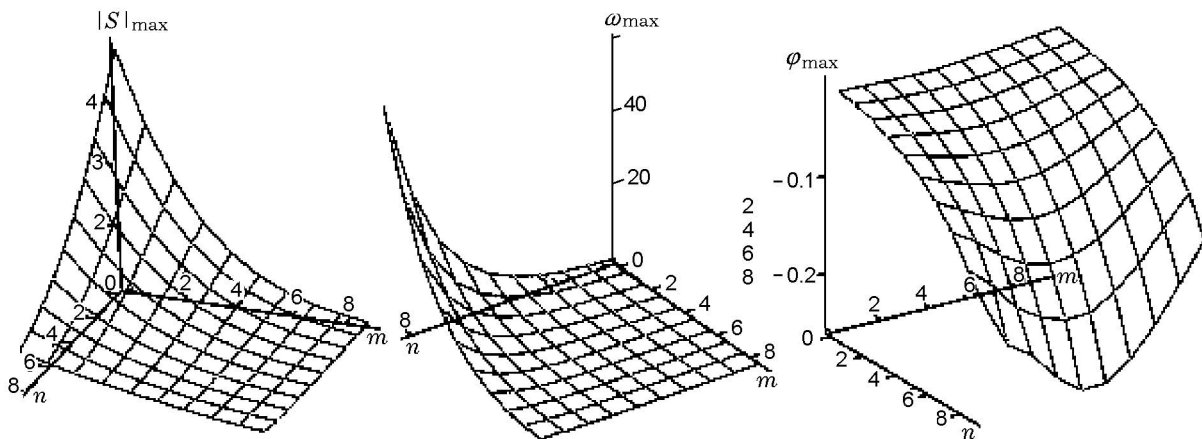


Рис. 9. Характеристики максимального отклика (расчет по (16)) в зависимости от величин n, m , связанных с параметрами задачи q_1, L_1 соотношениями $q_1 = 10^{-1+0.2n}, L_1 = 10^{-1+0.2m}$

зификации ЭМ на колебания лучистого потока, для соответствующих значений частоты и сдвига по фазе. При сравнении с экспериментом (например, с использованием датчика реактивной силы) эта информация позволяет извлечь значения трех параметров процесса, например коэффициента поглощения, теплопроводности, теплоты испарения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Zarko V. E., Gusachenko L. K., Rychkov A. D. Simulation of combustion of melting energetic materials // Defence Sci. J. — 1996. — V. 46, N 5. — P. 425–433.
2. Zarko V. E., Gusachenko L. K., Rychkov A. D. The effect of phase transitions on combustion stability of melted energetic materials // Combustion and Detonation: Proc. of 28th Intern. Annu. Conf. of ICT, 1997, Karlsruhe, FRG. — P. 16.
3. Гусаченко Л. К., Зарко В. Е. Анализ моделей горения энергетических веществ с полностью газообразными продуктами реакции // Физика горения и взрыва. — 2005. — Т. 41, № 1. — С. 24–40.
4. Гусаченко Л. К., Зарко В. Е. Об устойчивости самоподдерживающегося горения энергетических материалов с интенсивным подповерхностным тепловыделением // Хим. физика. — 2008. — Т. 27, № 1. — С. 91–99.
5. Боурингер, Спиндлер. Лучистый нагрев полупрозрачных материалов // Ракет. техника и космонавтика. — 1963. — Т. 1, № 1. — С. 105–110.
6. Зельдович Я. Б. Теория зажигания накаленной поверхностью // ЖЭиТФ. — 1939. — Т. 9, № 12. — С. 1530–1534.
7. Гусаченко Л. К. Влияние плавления на устойчивость горения квазигомогенных составов. Метод Зельдовича — Новожилова // Физика горения и взрыва. — 1998. — Т. 34, № 4. — С. 26–29.

ПРИЛОЖЕНИЕ

НЕСТАЦИОНАРНАЯ ОДНОМЕРНАЯ МОДЕЛЬ ГОРЕНИЯ ГОМОГЕННОГО ЭМ

t — время, с,
 x — пространственная координата, мм,
 V_c — скорость горения твердого топлива, мм/с,
 V — скорость движения газа, м/с,
 T — температура, К,
 ρ — плотность, г/м³,
 p — давление, МПа,

y_i — относительная массовая концентрация химического компонента,
 x_i — относительная молярная концентрация химического компонента,
 c_c — удельная теплоемкость конденсированной фазы, кДж/(кг·К),
 c_{pi} — удельная теплоемкость i -го компонента, кДж/(кг·К),
 λ — коэффициент теплопроводности, кДж/(м·с·К),
 Q — удельный тепловой эффект химической реакции, кДж/кг,
 M_i — молярная масса i -го компонента, кг/кмоль,
 N — число линий в спектре поглощения излучения,
 R — универсальная газовая постоянная, кДж/(кмоль·К),
 L — удельная теплота испарения жидкой фазы, кДж/кг,
 A — предэкспоненциальный множитель в законе Аррениуса, для реакций первого порядка — 1/с, второго — м³/(кмоль·с),
 E — энергия активации, кДж/кмоль,
 D — коэффициент диффузии, м²/с,
 q_r — удельный лучистый поток от источника излучения, кВт/м²,
 α_{gi}, α_{cj} — коэффициенты поглощения излучения в газовой (кг/м²) и конденсированной (1/м) фазах в законе Бугера.

Индексы

c — параметры твердой фазы,
 l — параметры жидкой фазы,
 1, 2, 3 — компоненты газовой фазы (пар, полупродукт, конечный продукт),
 s — параметры на поверхности горения,
 m — параметры точки плавления,
 индекс 0 соответствует начальным условиям, переменные без индекса относятся к газовой фазе в целом.

ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Область, в которой рассматривается процесс горения, приведена на рис. 10.

Переходя к подвижной системе координат (\bar{x}, \bar{t}) , связанной с движущейся поверхностью

горения $\bar{x} = \int_0^t V_c dt$, $\bar{t} = t$, как это принято при решении данного класса задач, запишем систему уравнений (здесь и далее черту над x и t опускаем).

Твердая фаза ($x_m(t) \leq x \leq R$):

$$c_c \rho_c \left(\frac{\partial T_c}{\partial t} - v_m \frac{\partial T_c}{\partial x} \right) = \lambda_c \frac{\partial^2 T_c}{\partial x^2} + q(0, t) \sum_{j=1}^N \delta_{cj} \alpha_{cj} \exp(-\alpha_{cj} x). \quad (A1)$$

На границе:

$$T_c(x, 0) = T_0, \quad T_c(x_m, t) = T_m, \\ \left(\frac{\partial T_c}{\partial x} \right)_{x=R} = 0, \quad V_m = \frac{dx_m}{dt}.$$

Жидкая фаза ($0 \leq x \leq x_m$):

$$c_l \rho_c \left[\frac{\partial T_c}{\partial t} - \left(V_c + \frac{x}{x_m} (V_m - V_c) \right) \frac{\partial T_c}{\partial x} \right] = \\ = \lambda_l \frac{\partial^2 T_c}{\partial x^2} + \Phi_{c1} + \Phi_{c2} + q(0, t) \sum_{j=1}^N \delta_{cj} \alpha_{cj} \exp(-\alpha_{cj} x), \quad (A2)$$

$$\rho_c \left[\frac{\partial y_c}{\partial t} - \left(V_c + \frac{x}{x_m} (V_m - V_c) \right) \frac{\partial y_c}{\partial x} \right] = -\omega_{c1} - \omega_{c2}, \quad (A3)$$

$q(0, t) = q_r \sum_{j=1}^N \delta_{gj} \exp(-\alpha_{gj} \int_{x_L}^0 \rho y_1 dx)$ — лучистый поток, падающий на горящую поверхность (после частичного поглощения в газовой фазе),

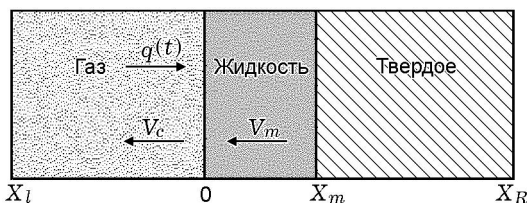


Рис. 10. Схема расчетной области

$$\Phi_{ci} = Q_{ci} \omega_{ci}, \quad \omega_{ci} = A_{ci} \rho_c y_c \exp\left(-\frac{E_{ci}}{RT_c}\right), \\ i = 1, 2.$$

На границе:

$$y_c(x_m, t) = 1, \quad T_c(x, 0) = T_0, \quad T_c(x_m, t) = T_m, \\ -\lambda \left(\frac{\partial T_c}{\partial x} \right)_{x=x_m+0} + L_m V_m \rho_c.$$

Коэффициент поглощения предполагается одинаковым в жидкой и твердой фазах. Линейчатый характер спектра задают несколько пар значений $\{\alpha_{cj}, \delta_{cj}\}$, где δ_{cj} — относительная доля коэффициента α_{cj} в полном спектре поглощения $\left(\sum_{j=1}^N \delta_{cj} = 1 \right)$.

Предполагается, что в газовой фазе лучистая энергия поглощается в основном паром, поскольку он обычно содержит вещества с большими молекулярными массами. Полагаем, что газовая фаза состоит из двух реагирующих компонентов (пар, полупродукт) и одного нейтрального (конечные продукты сгорания). Реакция в паре протекает по порядку N_{g1} , в полупродуктах — по порядку N_{g2} . Температура обоих компонентов одинакова.

Учитывается также возможность действия генерируемого внешним источником и равномерно распределенного в заданной пространственно-временной области тепловыделения мощности W , моделирующего действие искрового разряда. Система уравнений для газовой фазы принимает вид ($x_l \leq x \leq 0$):

$$c_p \rho \left[\frac{\partial T}{\partial t} - \left(V - V_c - \sum_{i=1}^3 \frac{c_{pi}}{c_p} D_i \frac{\partial y_i}{\partial x} \right) \frac{\partial T}{\partial x} \right] = \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \Phi_1 + \Phi_2 + \\ + q_r \sum_{j=1}^N \delta_{gj} \alpha_{gj} \exp\left(-\alpha_{gj} \int_{x_l}^x \rho y_1 dx\right) + W, \quad (A4)$$

$$\rho \left(\frac{\partial y_1}{\partial t} + (V - V_c) \frac{\partial y_1}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D_1 \frac{\partial y_1}{\partial x} \right) - \omega_1, \quad (A5)$$

$$\rho \left(\frac{\partial y_2}{\partial t} + (V - V_c) \frac{\partial y_2}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D_2 \frac{\partial y_2}{\partial x} \right) - \omega_2 + \omega_1, \quad (\text{A6})$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} - V_c \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{\partial(\rho V)}{\partial x} = 0, \quad (\text{A7})$$

$$p = R\rho T/M, \quad (\text{A8})$$

$$\frac{1}{M} = \left(\frac{y_1}{M_1} + \frac{y_2}{M_2} + \frac{y_3}{M_3} \right),$$

$$\Phi_1 = Q_1 \omega_1, \quad \Phi_2 = Q_2 \omega_2,$$

$$\omega_1 = A_1(\rho y_1)^{N_1} \exp \left(- \frac{E_1}{RT} \right),$$

$$\omega_2 = A_2(\rho y_2)^{N_2} \exp \left(- \frac{E_2}{RT} \right),$$

$W = \text{const} = qz$ в интервале времени $tz_1 \leq t \leq tz_2$ и интервале координат $x_l \leq x \leq 0$; и $W = 0$ во всех других случаях.

На границе:

$$T(x, 0) = T_0, \quad y_1(x, 0) = y_2(x, 0) = 0,$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\partial y_1}{\partial x} = \frac{\partial y_2}{\partial x} = 0 \quad \text{при} \quad x = x_l,$$

$$y_1 + y_2 + y_3 = 1,$$

$$D_1 \frac{\partial y_1}{\partial x} + D_2 \frac{\partial y_2}{\partial x} + D_3 \frac{\partial y_3}{\partial x} = 0.$$

Модель и программа учитывают возможность задаваемого пользователем изменения во времени давления и светового потока в виде функций, составленных из линейных и синусоидальных или экспоненциальных участков.

Предполагается, что на поверхности горения существует связь между температурой поверхности и концентрацией пара в газовой фазе, которая определяется условиями равновесия между испарением и конденсацией при фазовом переходе. Это дополнительное условие, наряду с граничными условиями, позволяет определить скорость горения твердого топлива:

$$\lambda \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_{x=-0} =$$

$$\begin{aligned} &= \lambda_c \left(\frac{\partial T_c}{\partial x} \right)_{x=+0} + q(0, t) - y_c \rho_c V_c L, \\ &\quad - \rho(V - V_c) y_1 + D_1 \rho \frac{\partial y_1}{\partial x} = \rho_c V_c y_c, \\ &\quad - \rho(V - V_c) y_2 + D_2 \rho \frac{\partial y_2}{\partial x} = \rho_c V_c (1 - y_c), \\ &\quad - \rho(V - V_c) = - \rho_c V_c, \\ &\quad y_1 \frac{M_1}{M} = \exp \left[- \frac{LM_1}{R} \left(\frac{1}{T_s} - \frac{1}{T_b} \right) \right]. \end{aligned}$$

КОЭФФИЦИЕНТЫ ПЕРЕНОСА

Для определения таких теплофизических характеристик реагирующей газовой смеси, как коэффициенты теплопроводности λ , теплоемкости c_p и коэффициенты эффективной диффузии ее компонентов D_i , использовали известные подходы молекулярной теории газовых смесей.

Теплопроводность определяли по формуле Мейсона и Саксены, обладающей хорошей точностью в широком диапазоне температур:

$$\lambda = \sum_{i=1}^3 \frac{1}{1 + 1.065 \sum_{k=1}^3 G_{ik} x_k / x_i},$$

$$G_{ik} = \frac{[1 + (\lambda_i / \lambda_k)^{1/2} (M_i / M_k)^{1/4}]^2}{2\sqrt{2}(1 + M_i / M_k)},$$

$$\lambda_i = A_{\lambda_i} + B_{\lambda_i} T, \quad x_i = y_i M / M_i,$$

где коэффициенты A_{λ_i} и B_{λ_i} взяты из таблиц, составленных на основе данных экспериментов.

Теплоемкость смеси реагирующих газов находили обычным образом:

$$c_p = \sum_{i=1}^3 c_{pi}, \quad c_{pi} = A_{cpi} + B_{cpi} T,$$

где коэффициенты A_{cpi} и B_{cpi} определяются также из таблиц.

Коэффициенты эффективной диффузии определяли, как уже отмечалось выше, только для пара и газа по формуле Уилке:

$$D_i = (1 - x_i) \left/ \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^3 \frac{x_k}{D_{ik}} \right.,$$

$$D_{ik} = 2.628 \cdot 10^{-3} \frac{T \sqrt{T(M_i + M_k)/(2M_i M_k)}}{\rho \Omega_{ik}^{(1,1)*}(T_{ik}^*) \sigma_{ik}^2}.$$

$$\Omega_{ik}^{(1,1)*}(T_{ik}^*) = 1.074 \left(\frac{kT}{\varepsilon_{ik}} \right)^{-0.1604},$$

Интеграл столкновений $\Omega_{ik}^{(1,1)*}$ вычисляли по аппроксимационной зависимости, предложенной Н. А. Анфимовым:

$$\sigma_{ik} = (\sigma_i + \sigma_k)/2, \quad \varepsilon_{ik}/k = \sqrt{(\varepsilon_i/k)(\varepsilon_k/k)},$$

где ε_{ik}/k и σ_{ik} — параметры потенциальной энергии молекул, характеризующие взаимодействие молекул i -х и k -х сортов.

*Поступила в редакцию 15/II 2010 г.,
в окончательном варианте — 26/VII 2010 г.*
