

НЕСТАЦИОНАРНЫЕ РЕЖИМЫ ПРЕВРАЩЕНИЯ МНОГОСЛОЙНЫХ ГЕТЕРОГЕННЫХ СИСТЕМ

П. М. Кришеник, А. Г. Мержанов, К. Г. Шкадинский*

Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения РАН, 142432 Черноголовка
petr@ism.ac.ru

*Институт проблем химической физики РАН, 142432 Черноголовка

Предложена нестационарная математическая модель теплового распространения пламени в слоистой гетерогенной системе. Изучены структура и динамика фронтального экзотермического превращения в квазигомогенном, переходном и эстафетном режимах. С помощью предложенной модели проведен анализ осредненных характеристик фронта и динамики превращения отдельных элементов «дискретной» волны горения. Установлена корреляция закономерностей горения модельной среды и реальных гетерогенных составов. Показано, что максимальная скорость горения достигается на промежуточном уровне дисперсности среды в переходной параметрической области.

Ключевые слова: волны горения, гетерогенные системы, многослойные, нестационарные режимы, моделирование.

В классической теории распространения пламени исследовались режимы горения в предположении гомогенности исходной горючей смеси [1, 2]. В случае горения гетерогенных сред, исходная структура смеси которых неоднородна, можно ожидать, что и фронт пламени будет неоднородным. В этом состоит принципиальное отличие фронта экзотермического превращения гетерогенных систем от волны горения гомогенно перемешанных сред.

Для исследования закономерностей горения гетерогенных систем предложен ряд моделей, в том числе классические модели типа «сэндвич» [3], ячеистые модели [4], широкий класс моделей, описывающих горение пористых составов, и т. д. Одним из параметров, определяющих структурные характеристики среды, является макромасштаб неоднородности, который может определять специфические особенности горения гетерогенных систем. В работе [5] предложена модельная система гетерогенной среды для экспериментального исследования процессов твердопламенного горения [6]. Она представляет собой многослойную структуру, состоящую из тонких пластин толщиной d , расположенных на расстоянии δ друг от друга. Теплопередача между реакционноспособными пластинами осуществлялась че-

рез зазор толщиной δ , заполненный газообразным окислителем или инертным веществом. При экспериментальном анализе распространения волны горения в такой системе в зависимости от масштаба гетерогенности были обнаружены и описаны два предельных режима горения — эстафетный и гомогенный. В [7] предложена стационарная математическая модель, описывающая распространение поперечного твердого пламени в системе однородных слоев шихты с учетом термического сопротивления контактов в предположении их тепловой безынерционности и термической безградиентности нагрева слоев в волне. Такие предположения позволили получить приближенные выражения для скорости распространения пламени в двух предельных режимах — гомогенном и эстафетном. В [8] в рамках стационарной модели [7] исследовано влияние теплопередачи излучением на установившиеся режимы горения гетерогенной системы. Численный анализ стационарной модели представлен в [9], где основное внимание уделено анализу закономерностей перехода от одного предельного режима горения к другому. В работе [10], обобщающей исследование [5–9], рассматриваемые волны в многослойных системах названы «дискретными», что отражает особенности горения гетерогенных систем. В подтверждение этого в работе [11] представлен анализ экспериментальных результатов изучения структуры гетерогенной

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 99-03-32392а).

волны горения и сделан вывод, что все исследованные волновые режимы могут быть описаны на основе двух форм реакционных волн: квазистационарной и «дискретной» мерцающей. Проблемы прямых экспериментов стимулируют разработку новых, более адекватных процессу физических моделей «дискретных» волн горения. Горение гетерогенных систем сопровождается специфическими особенностями химического превращения в условиях нелинейного теплового взаимодействия между реакционными ячейками, зависящего от структурных характеристик.

В представленной работе предложена нестационарная математическая модель теплового распространения пламени в слоистой гетерогенной системе. Проведен анализ структуры фронта горения, исследована динамика распространения твердого пламени в многослойной среде. Определены осредненные характеристики фронта и динамика превращения отдельных элементов «дискретной» волны горения. Установлена корреляция закономерностей горения модельной среды и реальных гетерогенных составов.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Для изучения закономерностей горения гетерогенной смеси используется упрощенная (модельная) система, состоящая из чередующихся слоев горючего толщиной d и инертной или газовой прослойки толщиной δ . При этом будем исходить из следующих физических предположений.

1. Реакционные слои реагируют в безгазовом режиме, не меняя своих теплофизических характеристик и размеров. Толщина гетерогенной ячейки $d + \delta$ намного меньше диаметра общей сборки.

2. Исследуется адиабатический режим горения, при котором можно пренебречь теплопотерями в окружающую среду.

3. Теплопередача от одного реакционно-го слоя к другому осуществляется через неподвижную инертную среду, теплофизические свойства которой также постоянны.

4. Энергия активации экзотермического превращения полагается достаточно высокой для существования фронтального режима распространения. Размеры рассматриваемой гетерогенной системы допускают возможность установления фронтального режима распространения. Инициирование горения осуществля-

ется с торца сборки источником высокой температуры.

Процесс экзотермического превращения гетерогенной системы опишем следующей системой безразмерных уравнений.

Уравнение теплопроводности и макрокинетики в i -м горючем слое ($(i - 1)(d + \delta) < \xi < id + (i - 1)\delta$):

$$\partial_\tau \theta = \partial_{\xi\xi} \theta + \gamma^{-1} \partial_\tau \eta, \quad (1)$$

$$\partial_\tau \eta = (1 - \eta) \exp(\theta/(1 + \beta\theta)) = \gamma F(\theta, \eta), \quad (2)$$

$$F(\theta, \eta) =$$

$$= \begin{cases} \gamma^{-1}(1 - \eta) \exp(\theta/(1 + \beta\theta)), & 0 \leq \eta \leq 1, \\ 0, & \eta \geq 1. \end{cases}$$

Уравнение теплопроводности в i -м инертном слое ($id + (i - 1)\delta < \xi < i(d + \delta)$):

$$\sigma_{c\rho} \partial_\tau \theta = \sigma_\lambda \partial_{\xi\xi} \theta. \quad (3)$$

Условия теплового сопряжения слоев:

$$\theta|_R = \theta|_I, \quad \partial_\xi \theta|_R = \sigma_\lambda \partial_\xi \theta|_I. \quad (4)$$

Условия инициирования ($\tau > 0, \xi = 0$):

$$\theta = \theta_{in}. \quad (5)$$

Начальные условия ($\tau = 0, \xi > 0$):

$$\theta = \theta_0, \quad \eta = 0. \quad (6)$$

Масштабные величины и безразмерные переменные: $t_* = RT_*^2 k^{-1} \exp(E/RT_*) c_R / QE$ — время, $x_* = [(\lambda_R / c_R \rho_R) t_*]^{0,5}$ — длина, T_* — характерная температура процесса, $\tau = t/t_*$, $\xi = x/x_*$, $\theta = (T - T_*)E/RT_*^2$, η — глубина превращения реакционного слоя. Для перехода к безразмерным размерам гетерогенных ячеек \bar{d} и $\bar{\delta}$ использовали характерную масштабную величину длины x_* : $\bar{d} = d/x_*$, $\bar{\delta} = \delta/x_*$. Для простоты в дальнейшем черту над этими величинами будем опускать.

Подчеркнем, что в данной задаче имеются две адиабатические температуры, которые могут быть выбраны в качестве характерной температуры T_* :

$$T_{ad}^{(1)} = T_0 + Q/c_R$$

— температура адиабатического сгорания горючего (реакционноспособного) слоя,

$$T_{ad}^{(2)} = T_0 + Q\rho_R d / (c_R \rho_R d + c_I \rho_I \delta)$$

— средняя адиабатическая температура, которая устанавливается после выравнивания температур в системе горючего и инертного слоев.

Здесь R — универсальная постоянная; E — энергия активации; k — предэкспонент; c_R , c_I , ρ_R , ρ_I , λ_R , λ_I — соответственно теплоемкости, плотности и коэффициенты теплопроводности реагирующего и инертного слоев; Q — тепловой эффект реакции. Безразмерные параметры: $\gamma = RT_*^2 c_R / EQ$ — отношение ширины зоны реакции к ширине зоны прогрева в волне горения, $\beta = RT_* / E$ — температурная чувствительность скорости реакции, $\sigma_{cp} = c_I \rho_I / c_R \rho_R$ — отношение теплоемкостей единицы объема инертного и горючего слоев, $\sigma_\lambda = \lambda_I / \lambda_R$ — отношение коэффициентов теплопроводности инертного и горючего слоев.

В гетерогенной системе процесс распространения пламени описывался одной температурой $\theta(\tau)$ [7], при этом температуры соседних пластин были связаны соотношением $\theta_{i-1}(\tau - \tau_1) = \theta_i(\tau) = \theta_{i+1}(\tau + \tau_1)$, где τ_1 — сдвиг по времени. В зависимости от значения τ_1 предложенные уравнения описывали два предельных режима горения — квазигомогенный и эстафетный. Было показано, что в первом случае модель [7] сводится к классическим уравнениям теории распространения пламени [1, 2], а во втором случае — к уравнениям теплового взрыва при наличии стадии прогрева.

С помощью нестационарной модели (1)–(6) открывается возможность исследования процесса горения и инициирования нагретой стенкой до момента установления режима распространения пламени. Интуитивно понятно, что в многослойной системе, когда масштаб гетерогенности $l = d + \delta$ стремится к нулю, следует ожидать гомогенизации среды с осредненными характеристиками $\lambda^* = (1 + \delta/d)\lambda_I \lambda_R / (\lambda_R \delta/d + \lambda_I)$, $(c\rho)^* = [(c_R \rho_R + c_I \rho_I \delta/d)/(1 + \delta/d)]$, тепловым эффектом $Q^* = Q c_R \rho_R d / (c_R \rho_R d + c_I \rho_I \delta)$ и коэффициентом температуропроводности $a = \lambda^* / (c\rho)^*$. Характерная ширина фронта экзотермического превращения такой среды $L_f = a/V$, а сама скорость горения может быть оценена согласно [12]:

$$V^2 = ak \exp(-E/RT_*) RT_*^2 / E(T_* - T_0),$$

$$T_* = T_{ad}^{(2)}. \quad (7)$$

Однако из-за гетерогенности состава структура фронта отличается от структуры волны в

гомогенных системах. Периодичность гетерогенного состава не допускает фронтального режима в форме математически строгой бегущей волны. Тем не менее, как и в обычном горении, фронт «забывает» процесс инициирования и выходит на установившийся периодический режим. В установившемся фронтальном режиме пространственную зависимость температурного поля можно учесть с помощью сдвига по времени τ_1 . Из-за гетерогенности и дискретного характера скорости химического тепловыделения при решении предложенной системы целесообразно определять скорость распространения фронта по изменению температуры (например, по перемещению изотермы $(T^* + T_0)/2$).

Представленная математическая модель относится к классу «жестких» систем дифференциальных уравнений. Анализ ее решений осложняется необходимостью длительно отслеживать нелинейную динамику распространения фронта вплоть до выхода на установившийся периодический режим.

КВАЗИГОМОГЕННЫЙ РЕЖИМ ГОРЕНИЯ

Рассматриваемая задача многопараметрическая. Рис. 1 иллюстрирует квазигомогенный режим горения. Достаточные условия для реализации квазигомогенного режима горения, подобного представленному на рис. 1, — малая термическая толщина слоев горючего и инертного вещества, что равносильно условию $(d + \delta)/L_f \ll \gamma$.

Слоистая структура гетерогенной системы иллюстрирована вертикальными прямыми. Здесь характерный размер гетерогенности $d + \delta$ существенно меньше ширины фронта L_f . Общая структура фронта аналогична классической структуре превращения гомогенных систем. Фронт горения состоит из зоны прогрева исходного состава и относительно узкой по сравнению с ней зоны экзотермической реакции, превращающей разогретый исходный состав в высокотемпературные продукты. Тепловой поток из узкой высокотемпературной зоны прогревает несколько реакционных слоев, индивидуальное температурное поле в которых близко к пространственно-однородному. Температура продуктов горения близка к равновесной температуре $T_{ad}^{(2)}$ (здесь $T_* = T_{ad}^{(2)}$). Характеристики структуры фронта и значение скорости распространения могут быть при-

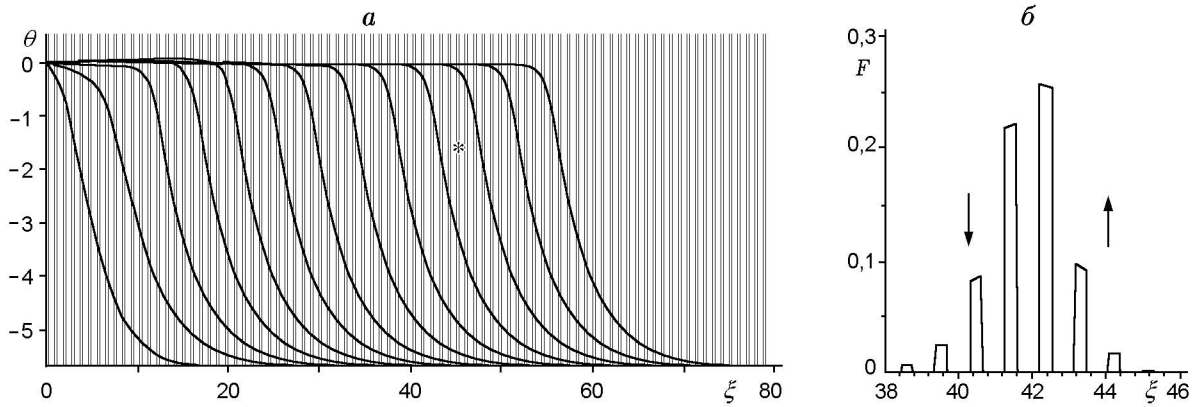


Рис. 1. Пространственно-временное распределение температуры (а) и функции тепловыделения $F(\theta, \eta)$ (б) в момент времени $\tau = \tau^*$ при квазигомогенном режиме горения многослойной системы: $d/\delta = 0,5$, $\sigma_{cp} = 0,25$, $\sigma_\lambda = 0,1$, $\gamma = 0,117$, $\beta = 0,153$, $\theta_0 = -5,67$, $\theta_\infty = \theta_{in} = 0$, $d = 0,3125$

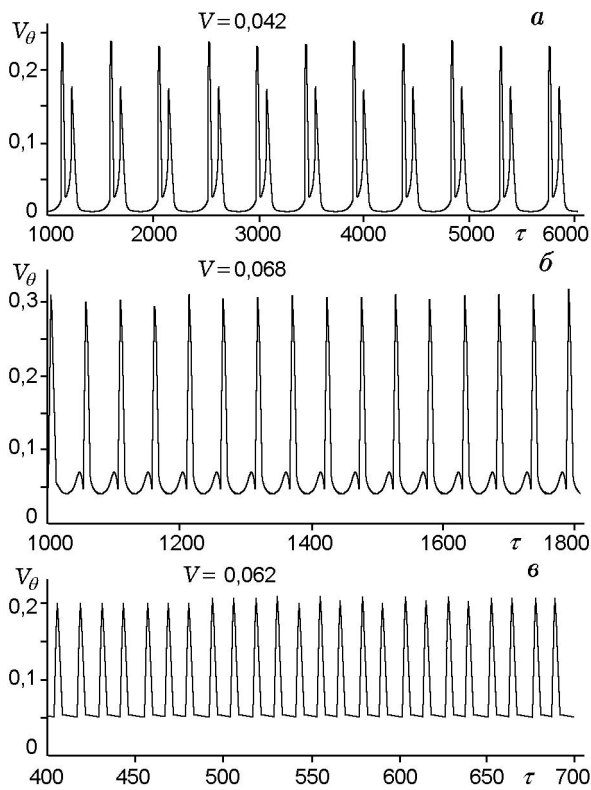


Рис. 2. Зависимость мгновенной скорости горения от времени при распространении поперечной волны горения в многослойной системе:

$d/\delta = 0,5$, $\sigma_{cp} = 0,25$, $\sigma_\lambda = 0,1$, $\gamma = 0,117$, $\beta = 0,117$, $\theta_0 = -5,67$; $d = 5$ (а), $1,25$ (б), $0,3125$ (в)

ближенно определены через эффективные теплофизические параметры и осредненную макрокинетику. На рис. 1,б представлена функция тепловыделения $F(\theta, \eta)$ в фиксированный момент времени τ^* , соответствующая установившемуся пространственно-временному распределению температуры (на рис. 1,а отмечено звездочкой). Источник тепловыделения имеет столбчатую структуру, поскольку тепловыделение сосредоточено в реагирующих пластинках. Огибающая $F(\theta, \eta)$ по структуре соответствует тепловыделению в гомогенной среде. Ее пространственное перемещение параллельно самой себе вызвано согласованным изменением $F(\theta, \eta)$ в каждом реагирующем слое (указано стрелками). Поле температур сохраняет ступенчатый характер из-за различия теплофизических характеристик в слоистой среде ($\sigma_{cp} = 0,25$, $\sigma_\lambda = 0,1$). Следовательно, мгновенная скорость V_θ фронта, определяемая перемещением изотермы $(T^* + T_0)/2$, оказывается периодической функцией. При анализе горения таких систем в качестве скорости квазигомогенного фронта V удобно использовать осредненную величину на периоде колебания. При исследовании горения гетерогенных систем важное значение имеет определение характерных размеров ячеек, при которых еще реализуется гомогенный режим превращения. Из численного анализа установлено, что достаточно примерно трех эффективно реагирующих слоев в зоне реакции, чтобы фронт имел квазигомогенную структуру. Отсюда следует, что с помощью классического анализа стационарных характеристик гомогенной волны горения можно оценить предельные размеры элементов

гетерогенной системы, при которых еще реализуется квазигомогенный режим горения.

Из вышеприведенного можно сделать вывод, что если анализ фронта горения ведется с относительно грубой «разрешающей способностью» (что обычно имеет место в эксперименте), то фронт может быть охарактеризован бегущей волной (подобной [12]). Но при детальном анализе горения гетерогенной среды (подобно [11]) движение видимой границы будет испытывать колебания, что отражает «дискректность» структуры гетерогенного фронта. На рис. 2, в представлена мгновенная скорость V_θ распространения квазигомогенного фронта ($d = 0,3125$). Вынужденные колебания скорости V_θ связаны с отличием теплофизических свойств реакционного и разреженного реакционного слоев. Ясно, что при $\sigma_{cp} = \sigma_\lambda \approx 1$ амплитуда колебаний уменьшается и $V_\theta \approx V$. Для представленного на рис. 1 случая, несмотря на квазигомогенную структуру фронта, движущегося со средней скоростью $V = 0,062$, его характеристики будут периодическими функциями, соответственно нестационарной будет и мгновенная скорость V_θ .

ПЕРЕХОДНЫЙ РЕЖИМ ГОРЕНИЯ

При согласованном увеличении размеров реакционноспособных частиц и инерта, сохраняющем постоянную среднюю массовую концентрацию смеси, наблюдается перестройка квазигомогенного режима в другой предельный режим — эстафетный. На рис. 3 представлены характеристики процесса экзотермического превращения многослойной системы на переходном этапе. Данный режим формируется в случае, когда масштаб неоднородности соизмерим с масштабом зоны реакции гомогенной волны горения, т. е. $(d + \delta)/L_f \approx \gamma$. Пространственно-временное распределение температуры показано на рис. 3, а. Здесь теряется квазигомогенный характер распространения фронта, а реакционноспособные слои по очереди объемно сгорают в режиме эстафетного механизма инициирования. Остальные слои либо сгорели, либо имеют низкую температуру, и их превращением можно пренебречь. Распространение волны горения характеризуется релаксационными колебаниями всех характеристик фронта, в том числе и скорости V_θ (рис. 2, а, б). Характер колебаний определяется двумя факторами — сверхдиабатическими температурами превращения

реакционных слоев при увеличении масштаба гетерогенности и теплопередачей в многослойной системе. При нарушении квазигомогенности превращения (см. рис. 2, б) температура в зоне реакции T_* начинает «отрываться» от равновесной температуры $T_{ad}^{(2)}$, что вызывает рост мгновенной скорости V_θ и формирование ее локального максимума. На рис. 2, б моменту зажигания реакционного слоя соответствует рост мгновенной скорости горения. В процессе кратковременного периода его превращения из-за различия теплофизических свойств слоев ($\sigma_\lambda = 0,1$) на границе реакционного и инертного слоев возникают значительные градиенты температур. Это приводит к увеличению скорости V_θ и формированию нового экстремума. Так как максимальная температура в данном случае незначительно «отрывается» от равновесной, то и значение максимума скорости V_θ меньше экстремума, связанного с другим фактором. С дальнейшим увеличением масштаба гетерогенности температура в зоне реакции значительно превышает равновесную (см. рис. 2, а). Максимальное значение скорости V_θ , вызванное интенсивным экзотермическим превращением, превышает максимальное значение скорости V_θ , обусловленное теплообменом. После короткой стадии экзотермического превращения наступает длительная стадия теплообмена между прореагировавшим и ближайшим непрореагировавшим слоями. Это соответствует достаточно малым значениям V_θ . С увеличением размера ячеек максимальная амплитуда колебаний скорости V_θ сначала растет ($\delta = 5, d = 2,5$), но при еще большем увеличении размера ячеек — уменьшается ($\delta = 10, d = 5$). Характер колебаний остается неизменным, максимальное значение V_θ достигается в момент воспламенения реакционного слоя. Период колебаний отражает периодичность многослойной системы. Средняя скорость сгорания гетерогенной среды V при переходе к эстафетному режиму горения в основном определяется временем инертного прогрева очередного реакционного слоя и периодом индукции его саморазогрева. Динамика установившегося процесса теплопереноса и тепловыделения $F(\theta, \eta)$ во фронте проиллюстрирована двумя периодами многослойной системы (см. рис. 3, б, в), соответствующими реакционным слоям, отмеченным на рис. 3, а одной и двумя звездочками. Если за точку отсчета $\tau = 2120,0$ принять время сгорания реакционного слоя, пред-

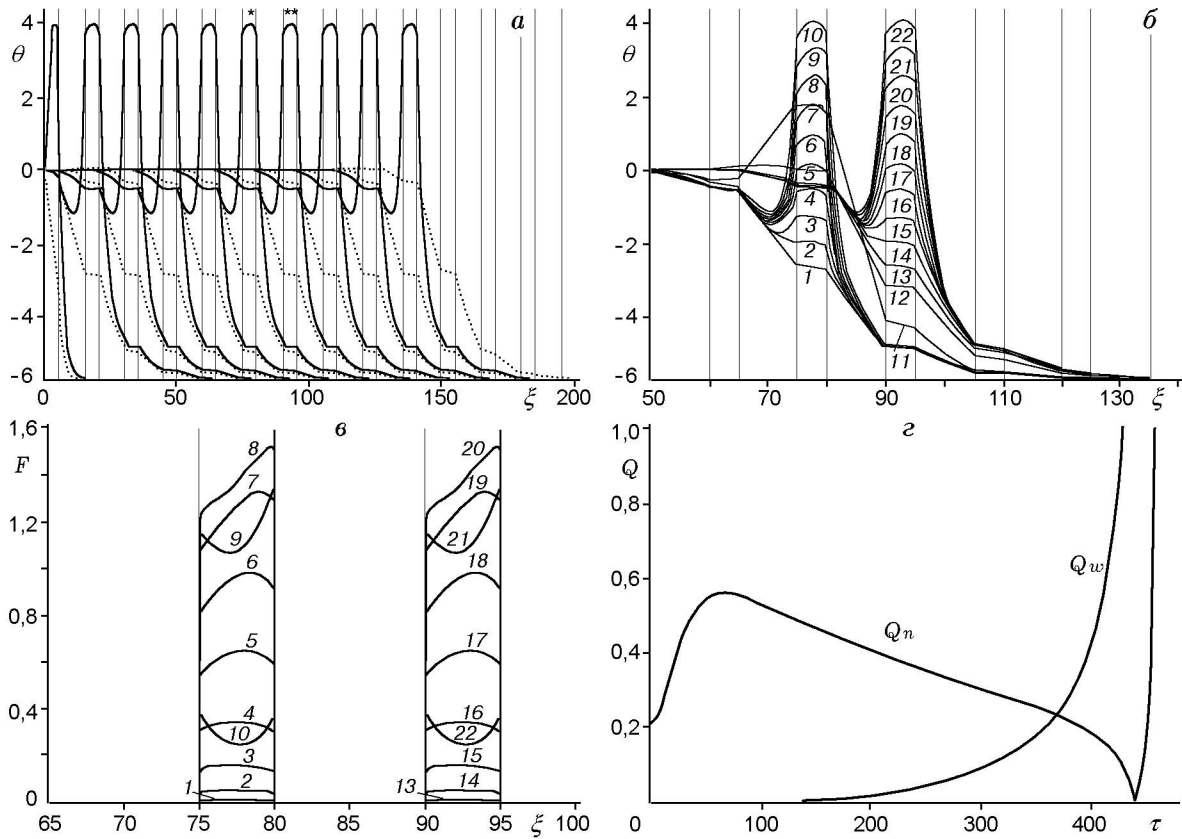


Рис. 3. Нестационарные характеристики промежуточного режима горения в многослойной системе: $d/\delta = 0,5$, $\sigma_{cp} = 0,25$, $\sigma_\lambda = 0,1$, $\gamma = 0,117$, $\beta = 0,153$, $\theta_0 = -5,67$, $\theta_\infty = \theta_{in} = 0$, $d = 5$; τ : 1 — 2565,39, 2 — 2601,39, 3 — 2612,92, 4 — 2615,59, 5 — 2617,46, 6 — 2618,53, 7 — 2619,30, 8 — 2620,93, 9 — 2621,64, 10 — 2622,95, 11 — 2705,32, 12 — 2929,74, 13 — 3029,62, 14 — 3065,62, 15 — 3074,54, 16 — 3078,82, 17 — 3080,69, 18 — 3081,15, 19 — 3082,27, 20 — 3082,77, 21 — 3083,48, 22 — 3084,97; а — пространственно-временное распределение температуры в процессе горения; б — детальная температурная динамика процессов превращения и зажигания соседних реакционноспособных слоев; в — функция тепловыделения $F(\theta, \tau)$; г — тепловые потоки в реакционном слое

шествующего слою, обозначенному одной звездочкой ($\max \eta > 0,99$), то кривые $F(\theta, \eta, \xi)$, $\theta(\eta, \xi)$ соответствуют относительным временам $\tau = 2565,39 \div 3084,97$. Видно, что установившийся период колебания характеризуется относительно длительной стадией прогрева среды. Здесь очередная реагирующая пластина ведет себя в режиме динамического теплового взрыва, характерное время самовоспламенения на порядок меньше времени тепловой релаксации. Температура продуктов горения в пластине достигает сверхадиабатических значений. С одной стороны, выделившаяся при сгорании энергия идет на нагрев исходной гетерогенной среды. С другой стороны, за фронтом происходит теплообмен между слоями с установлением равновесной температуры продуктов. Наличие

сверхадиабатических разогревов существенно влияет как на мгновенную скорость V_θ , так и на среднюю скорость горения V . Согласно представленным на рис. 3, б, в данным можно выделить три стадии горения слоя: прогрев через слой инертной прослойки, воспламенение и быстрое экзотермическое превращение. После индукционного периода (пунктирные линии на рис. 3, а или кривые 11 и 12 на рис. 3, б), когда вещество можно рассматривать как инертное тело, начинается самоускоряющийся процесс экзотермического превращения очередной реакционноспособной пластины.

Проведем анализ изменения потока тепла в реакционноспособный слой от времени $Q_n = \theta'_\xi|_{\xi=\xi_i}$, где ξ_i — координата i -й границы между

инертной прослойкой и горючим слоем. Количество тепла, выделяемого в результате химического превращения в слое, определяется как

$$Q_w(\xi, \tau) = \int_{\xi_i}^{\xi_{i+1}} (1 - \eta) \exp \frac{\theta}{1 + \beta\theta} d\xi, \text{ где } i + 1 -$$

граница между горючим и инертном. На рис. 3,2 представлена зависимость потоков Q_n и Q_w от времени (начальным моментом считается время полного сгорания предыдущего реакционного слоя). Несмотря на то, что данный режим относится к промежуточному, видно, что химическим тепловыделением на стадии прогрева можно пренебречь. В момент времени $\tau_* \approx 377$ выполняется равенство $Q_n = Q_w$ и можно считать, что стадия инертного прогрева завершена. На этой стадии за счет внешнего источника образуется прогретое реакционноспособное вещество. За время инертного прогрева глубина превращения вещества меняется незначительно. При $\tau > \tau_*$ основной вклад в нагревание вещества вносит химическое тепловыделение, которое становится ведущим в тепловом балансе. Этап зажигания заканчивается при достижении нулевого градиента температуры на границе «горючее — инертный слой» в момент времени $\tau_z = 441$. В дальнейшем тепловыделение за счет химической реакции превосходит отвод тепла в относительно холодные слои вещества. Вследствие этого начинается самоускоряющийся рост максимальной температуры. Так как уже на стадии зажигания слой прогревается неравномерно, то в данном случае отсутствует волновой характер превращения вещества в реагирующем слое. Максимальная температура в зоне реакции значительно превосходит равновесную температуру сгорания ($\theta_\infty \approx 0$).

В [7] получена оценка времени задержки зажигания слоя горючего при эстафетном режиме превращения. При этом предполагалось, что экзотермическим тепловыделением на стадии прогрева можно пренебречь. Видно, что это предположение справедливо и для характерного промежуточного режима. При оценке теплового потока температуры предыдущей и последующей пластинок полагались постоянными во времени и равными соответственно температурам сгоревшей (θ_{ad}) и исходной пластинок (θ_0). Результаты численного анализа показали, что в течение периода индукции поток тепла через инертный слой является достаточно сложной функцией времени.

На первой (кратковременной) стадии прогрева это растущая функция, что обусловлено увеличением температуры в реакционном слое. В дальнейшем это убывающая функция, качественно подобная [7]. Отсюда следует, что подходы, применяемые при анализе особенностей распространения горения эстафетного режима, можно использовать для определения характеристик промежуточного режима.

ЭСТАФЕТНЫЙ РЕЖИМ ГОРЕНИЯ

При эстафетном режиме горения теплофизические характеристики и размеры реагирующего и инертного слоев близки, а $(d + \delta)/L_f > 1$.

Результаты численного анализа подтверждают наличие (обнаруженных в экспериментах) приближенно квазигомогенного и эстафетного режимов горения.

На рис. 4 приведены нестационарные пространственно-временные профили температур в гетерогенной слоевой системе, моделирующей крупнодисперсную среду. Видно, что в установившемся режиме горения картина для каждой пары «горючее — инерт» (периоды 1–4) повторяется с некоторым сдвигом по времени τ_1 [7] (в данном примере $\tau_1 \approx 5262$). При расчете данного режима горения использовали значение характерной температуры $T_* = T_{ad}^{(1)} = T_0 + Q/c_R$.

Анализируя профили, можно заключить, что:

- каждый горючий слой сгорает во фрон-

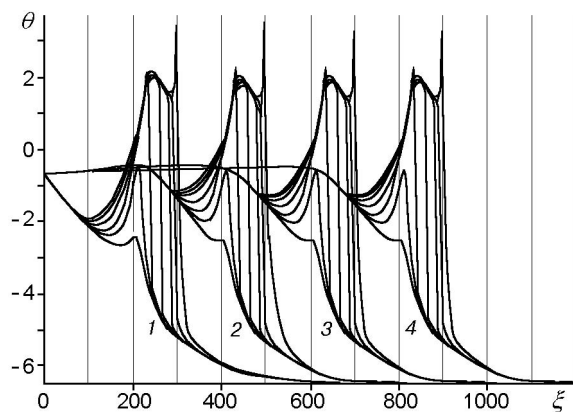


Рис. 4. Пространственно-временное распределение температуры в многослойной системе в эстафетном режиме горения:

$$d = \delta = 100, \sigma_{cp} = 0,1, \sigma_\lambda = 1,0, \gamma = 0,1534, \beta = 0,118, \theta_0 = -6,508, \theta_\infty = \theta_{in} = -0,65$$

тальном режиме, при этом температура превышает значение $T_{ad}^{(1)}$;

- тепло от сгоревшего слоя (в нестационарном режиме) идет на нагрев «свежего» инертного слоя и уже прогретого (предыдущего); последнее имеет место из-за «сверхадиабатического» разогрева;

- теплопередача через инертный слой вызывает прогрев следующего горючего слоя и приводит к его зажиганию;

- когда инициированный фронт горения подходит к противоположной поверхности горючего слоя, вблизи нее может возникать всплеск температуры как проявление «энтальпийного эффекта» [13].

Подчеркнем, что реакция в горючем слое приводит к его зажиганию лишь после сгорания предыдущего горючего слоя. В этом смысле приведенный на рис. 4 пример отражает эстафетный характер гетерогенного горения [6, 7]. Здесь время перемещения фронта сквозь один период структуры $(d + \delta)$ по сути совпадает с временем инициирования очередного реакционноспособного слоя, так как стадия горения пренебрежимо мала. Отметим в этой связи одну возникающую особенность. Наличие «вспышки» в конце сгорания пластины, обусловленное существованием избытка энтальпии в безгазовом фронте горения и слабой теплопроводностью инертной прослойки, может существенно повлиять на процессы теплообмена между слоями. Так, при оптически прозрачной инертной прослойке (например, газовая среда) лучистый теплообмен может оказаться доминирующим фактором в процессе теплообмена между слоями, что приведет к изменению характера превращения гетерогенной среды.

Анализ данного режима еще раз показывает, что процесс теплопередачи (передачи «эстафеты») становится определяющим фактором скорости распространения, зависящим от структуры гетерогенной системы и теплофизических свойств среды.

СРЕДНЯЯ СКОРОСТЬ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ФРОНТА ГОРЕНИЯ

Наличие сверхадиабатических разогревов существенно влияет как на мгновенную скорость V_θ , так и на среднюю скорость горения V . Перестройка режимов горения и параметрическая область их существования зависит не только от масштаба гетерогенности

сред, но и от физико-химических свойств слоев. Из детального численного анализа получено, что при распространении фронта в промежуточном режиме горения непрореагировавшие реакционные слои находятся под тепловым влиянием не только предыдущего слоя, но и частично «дальних» реакционных слоев. При $\gamma \ll 1$ время задержки зажигания τ_{in} в эстафетном (и близком к нему промежуточном) режиме определяется величиной осредненной интегральной потока тепла от ближайшей прореагировавшей пластины (\bar{p}). Время $\tau = 0$ выберем в качестве момента окончания превращения i -го реакционного слоя; $\xi^* = (i - 1)(d + \delta) + d$. Введем безразмерный средний

поток $\bar{p} = \left[\int_0^{\tau_{in}} \left(\int_{\xi^*}^{\xi^* + \delta} |p| d\xi \right) d\tau \right] / \delta \tau_{in}$, где $p = \theta'$. Если

в гетерогенной системе инертная прослойка газовая, можно воспользоваться приближением $|p(\xi)| \approx (\theta_{\xi^*} - \theta_{\xi^* + \delta}) / (\xi_i - \xi_{i-1})$. Так как температура прореагировавшего слоя падает, а последующего слоя растет, эта функция во время инициирования будет убывающей. Оценка $p(\xi)$ осложняется тем, что температура θ_{ξ^*} на границе между горючим и инертном в момент полного превращения слоя зависит не только от химико-физических параметров самого реакционного слоя, но и от скорости теплообмена между слоями. Поэтому для определения этого значения необходимо решать полную нестационарную задачу. Но для оценки сверху характеристик горения в эстафетном режиме можно использовать подходы [7], где предполагали, что в момент окончания превращения реакционного слоя его температура равна θ_{ad} , а поток тепла за время задержки зажигания постоянный, и равен $(\theta_{ad} - \theta_0) / \delta$.

Рассмотрим зависимость скорости распространения фронта пламени V от ширины горючего слоя d ($\delta = 0,5d$) при переходе от гомогенного режима превращения к эстафетному (рис. 5). При «узких» слоях превращение вещества происходит в гомогенном режиме. Скорость в этой параметрической области слабо зависит от масштаба гетерогенности. С увеличением размеров слоев гомогенный режим переходит в эстафетный. При нарушении гомогенности максимальная температура в реакционноспособном слое начинает превышать адиабатически равновесную. Несмотря на увеличение значения δ , из-за быстрого роста температуры в реакционном слое увеличивается осред-

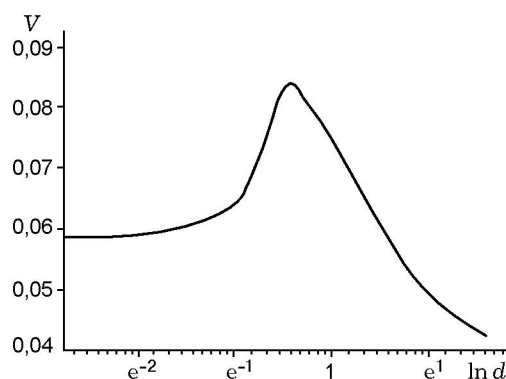


Рис. 5. Зависимость средней скорости горения от масштаба гетерогенности среды: $d/\delta = 0,5$, $\sigma_{c\rho} = 1,0$, $\sigma_\lambda = 0,1$, $\theta_0 = -5,67$, $\gamma = 0,117$, $\beta = 0,153$, $\theta_\infty = \theta_{in} = 0$

ненный тепловой поток в ближайший непрореагировавший слой за время инертного прогрева и периода индукции. Время сгорания горячего слоя начинает экспоненциально уменьшаться, а время задержки зажигания растет линейно. С увеличением размеров слоев средняя температура сгорания слоя $\tilde{\theta}$ и поток тепла \tilde{p} достигают максимума. При дальнейшем росте масштаба гетерогенности температура $\tilde{\theta}$ близка к постоянной, а поток \tilde{p} уменьшается. В результате на зависимости $T(d)$ появляется максимум.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Детальный анализ структуры фронта горения и динамики волнового распространения в гетерогенных системах показал, что его характеристики существенно сложнее, чем следовало из макроскопического «осредненного» волнового анализа. Механизм фронтового превращения в рассматриваемых системах имеет нестационарно-дискретный характер и зависит как от кинетических, так и от структурных характеристик сред.

Для одного и того же состава смеси в зависимости от масштаба гетерогенности реализуется близкий к классическому («квазистационарный») режим распространения пламени, характерный для однородных систем, а также эстафетный («нестационарный») режим. Динамика последнего зависит от характерного размера гетерогенности. При промежуточном уровне гетерогенности обнаружен максимум средней скорости горения, который связан с усложненным характером теплообмена

между реакционноспособными частицами. Ясно, что несмотря на «модельную» упорядоченность исходного состава этими свойствами обладают и реальные системы, так как переход от одного режима горения к другому связан не с упорядоченностью структуры, а с механизмами передачи тепла и воспламенения реакционных ячеек.

В дальнейших исследованиях необходимо рассмотреть влияние лучистого теплообмена в процессе передачи тепла между слоями и устойчивость фронта пламени при переходе к предельным режимам превращения. Эти вопросы представляют дополнительный интерес для анализа многослойных систем.

ЛИТЕРАТУРА

1. Зельдович Я. Б., Франк-Каменецкий Д. А. Теория теплового распространения пламени // Журн. физ. химии. 1938. Т. 12, № 1. С. 100–105.
2. Зельдович Я. Б. К теории горения порохов и взрывчатых веществ // Журн. эксперим. и теор. физики. 1942. Т. 12, № 11/12. С. 498–525.
3. Бахман Н. Н., Беляев А. Ф. Горение гетерогенных конденсированных систем. М.: Наука, 1967.
4. Алдушин А. П., Хайкин Б. И. К вопросу о распространении фронта горения при реакционной диффузии в конденсированных смесях // Теория и технология металлургических процессов. Новосибирск: Наука, 1974. С. 11–22.
5. Вадченко С. Г., Мержанов А. Г. Гетерогенная модель распространения пламени // Докл. АН. 1997. Т. 352, № 4. С. 487–489.
6. Мержанов А. Г. Научные основы, достижения и перспективы развития процессов твердопламенного горения (обзор) // Изв. РАН. Сер. хим. 1997. № 1. С. 8–32.
7. Мержанов А. Г. Распространение твердого пламени в модельной гетерогенной системе // Докл. АН. 1997. № 4. С. 505–507.
8. Филимонов И. А. Влияние передачи тепла излучением на распространение волны горения по модельной гетерогенной системе // Физика горения и взрыва. 1998. Т. 34, № 3. С. 69–76.
9. Мержанов А. Г., Перегудов А. Н., Гонтовская В. Т. Гетерогенная модель твердопламенного горения: численный эксперимент // Докл. АН. 1998. Т. 360, № 2. С. 217–219.
10. Merzhanov A. G., Rogachev A. S. Discrete heat waves in active heterogenous media: basic principles and introduction to the theory // Russian J. Phys. Chem. 2000. V. 74, suppl. 1. P. S20–S27.

11. **Рогачев А. С., Мукасян А. С., Варма А.** Микроструктура самораспространяющихся волн экзотермических реакций в гетерогенных средах // Докл. АН. 1999. Т. 366, № 6. С. 777–780.
12. **Новожилов Б. В.** Скорость распространения фронта экзотермической реакции в конденсированной среде // Докл. АН СССР. 1961. Т. 141, № 1. С. 151–154.
13. **Зельдович Я. Б., Лейпунский О. И., Либрович В. Б.** Теория нестационарного горения пороха. М.: Наука, 1975.

Поступила в редакцию 7/VI 2001 г.
