

УДК 536.46

ВЛИЯНИЕ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА НА ТРЕХМЕРНЫЕ НЕУСТОЙЧИВЫЕ РЕЖИМЫ БЕЗГАЗОВОГО ГОРЕНИЯ

В. Г. Прокофьев¹, В. К. Смоляков^{1,2}

¹Томский государственный университет, 634050 Томск, pvg@ftf.tsu.ru

²Отдел структурной макрокинетики Томского научного центра СО РАН, 634021 Томск

В рамках модели твердопламенного горения цилиндрического образца выполнено численное исследование теплового влияния фазового перехода на неустойчивые режимы безгазового горения. Влияние фазового перехода на характер горения проявляется тем сильнее, чем ближе температура фазового перехода к температуре горения. В этом случае поверхность фронта заметно сглаживается вследствие уменьшения градиентов температуры. Установлена связь между смежной рассматриваемых режимов горения и изменением параметров фазового перехода. Найден нестационарный периодический симметричный режим горения с кольцевой траекторией движения очагов по боковой поверхности.

Ключевые слова: безгазовое горение, спиновый режим, фазовый переход.

DOI 10.15372/FGV20160309

Анализ исследований одного из проявлений неустойчивых режимов горения — спиновых волн [1–3] — свидетельствует, что результаты трехмерного моделирования твердопламенного горения качественно соответствуют известным экспериментам. В то же время в количественном отношении такого соответствия нет. Одна из проблем — большое различие между вычисленной (малой) величиной шага «винта» и наблюдаемой. В работе [4] теоретически изученный спин классифицирован как слабый, а фиксируемый в экспериментах — как сильный. Возможная причина такого несоответствия — ограниченность чисто тепловой модели твердопламенного горения.

В экспериментальной практике спиновые волны наблюдаются только в безгазовых системах с фазовыми превращениями и наличием расплавов [5, 6]. Известно [7, 8], что фазовые переходы сильно влияют на устойчивость волны безгазового горения. Существует также предположение [9], что спиновые волны связаны с движением жидкости в поровом пространстве образца. Поэтому прежде чем приступить к построению более сложных моделей, учитывающих динамику расплавов, следует выяснить возможности модели твердопламенного горения

с тепловым влиянием фазового перехода.

Математическая модель твердопламенного горения трехмерных нестационарных волн горения с учетом плавления инертного компонента для образца цилиндрической формы (рис. 1) имеет следующий вид:

$$[1 + Ph\delta(\theta - \theta_l)] \frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} + \frac{1}{\xi^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{Td} \frac{d\eta}{d\tau}, \quad (1)$$

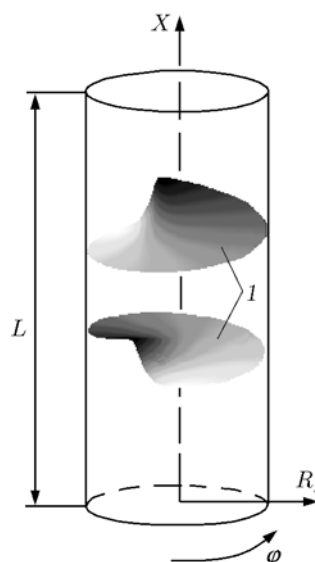


Рис. 1. Схема образца и поверхность горения (1)

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (государственное задание № 10.1329.2014/К).

$$\frac{d\eta}{d\tau} = \text{Td}(1 - \eta) \exp \frac{\theta}{1 + \text{Ar}\theta}$$

$$(0 \leq z \leq L, 0 \leq \xi \leq R_0, 0 \leq \varphi \leq 2\pi), \quad (2)$$

краевые условия:

$$z = 0: \quad \theta(0, \xi, \varphi, \tau) = 0 (\tau \leq \tau_{ign}),$$

$$\frac{\partial \theta(0, \xi, \varphi, \tau)}{\partial z} = 0 (\tau > \tau_{ign}),$$

$$z = L_0: \quad \frac{\partial \theta(L_0, \xi, \varphi, \tau)}{\partial z} +$$

$$+ \alpha_0 [\theta(L_0, \xi, \varphi, \tau) - \theta_0] = 0,$$

$$\xi = R_0: \quad \frac{\partial \theta(z, R_0, \varphi, \tau)}{\partial \xi} = 0,$$

$$\tau = 0: \quad \theta(z, \xi, \varphi, 0) = f(z, \xi, \varphi), \quad \eta(z, \xi, \varphi, 0) = 0.$$

Безразмерные параметры и переменные:

$$\text{Td} = \frac{cRT_*^2}{QE}, \quad \theta = \frac{(T - T_*)E}{RT_*^2},$$

$$\theta_l = \frac{(T_l - T_*)E}{RT_*^2}, \quad \theta_0 = \frac{(T_0 - T_*)E}{RT_*^2},$$

$$\text{Ar} = \frac{RT_*}{E}, \quad z = \frac{x}{x_*},$$

$$\xi = \frac{r}{x_*}, \quad x_* = \sqrt{\frac{\lambda t_*}{c\rho}}, \quad t_* = \frac{cRT_*^2}{QEK(T_*)},$$

$$\tau = \frac{t}{t_*}, \quad \tau_{ign} = \frac{t_{ign}}{t_*}, \quad L_0 = \frac{L}{x_*},$$

$$R_0 = \frac{R_s}{x_*}, \quad Ph = \frac{Q_l}{Q\text{Td}}, \quad \alpha_0 = \frac{\alpha x_*}{\lambda_1}.$$

Здесь T — температура; $T_* = T_0 + (Q - Q_l)/c$ — адиабатическая температура горения с учетом затрат тепла на плавление инертного компонента; T_0 — начальная температура образца; T_l — температура плавления; c — удельная теплоемкость; Q — тепловой эффект реакции; Q_l — теплота плавления в расчете на единицу массы инертного компонента; ρ — плотность; t — время; η — глубина превращения вещества; x, r, φ — осевая, радиальная и угловая координаты соответственно; α —

коэффициент теплообмена с окружающей средой; t_{ign} — время действия внешнего источника тепла; $K(T)$ — константа скорости реакции; R — универсальная газовая постоянная; E — энергия активации; R_s, L — радиус и длина образца; $\delta(\theta - \theta_l)$ — дельта-функция Дирака; Ph — относительная теплота плавления; θ_l — безразмерная температура плавления. Влияние фазового перехода на процесс теплопередачи учитывается введением функции эффективной теплоемкости $c(\theta) = 1 + Ph\delta(\theta - \theta_l)$. Аналогичный метод использовался для описания влияния плавления инертного компонента на распространение одномерной волны горения [10]. Для простоты будем полагать равенство теплофизических характеристик всех компонентов системы.

Задача (1)–(3) решалась конечно-разностным методом по неявной схеме с постоянным шагом по координатам и по времени. По радиальной координате применялась встречная прогонка по диаметру, по угловой — циклическая прогонка. Базовые значения шагов разностной сетки по осевой и радиальной координатам и по времени выбраны равными: $h = \Delta\tau = 0.5$, а по углу они составили $\Delta\varphi = 0.02\pi$ для образцов малого радиуса $R_0 \leq 40$ и $\Delta\varphi = 0.01\pi$ для образцов радиусом $R_0 = 100$. В качестве определяющих параметров выбраны радиус образца R_0 и параметры фазового перехода Ph и θ_l . Параметр R_0 показывает, во сколько раз радиус цилиндра больше характеристической толщины зоны реакции. Значения следующих параметров в расчетах приняты фиксированными: $\theta_0 = -8$, $\text{Ar} = 0.11$, $L_0 = 1000$. При численном решении уравнения (1) применялось сглаживание дельта-функции:

$$\delta(\theta) \approx \Phi(\theta) = \frac{\varphi(\theta) \text{erf}^{-1}(\sqrt{2})}{\Delta\theta \sqrt{2\pi}} \exp \frac{(\theta_l - \theta)^2}{2\Delta\theta^2},$$

$$\varphi(\theta) = \begin{cases} 0, & \theta > \theta_l + \Delta\theta, \\ 1, & \theta_l - \Delta\theta < \theta < \theta_l + \Delta\theta, \\ 0, & \theta < \theta_l - \Delta\theta. \end{cases}$$

Для функции $\Phi(\theta)$ выполняется условие нормировки $\int_{\theta - \Delta\theta}^{\theta + \Delta\theta} \Phi(\theta) d\theta = 1$, которое не зависит от $\Delta\theta$.

Длительность выхода на устойчивый режим горения зависит от условий зажигания,

удаленности от границы устойчивости одномерного фронта ($9.1Td - 2.5Ag = 1$), параметров фазового перехода и радиуса образца. Установившийся режим горения определяли, сравнивая свои результаты с результатами [1–3] при отсутствии плавления ($Ph = 0$). Фиксированной длины образца L_0 может не хватить для выхода на устойчивый режим горения. В целях уменьшения длительности выхода или расстояния от поверхности зажигания до точки фронта, в которой устанавливается режим горения, задавали соответствующее возмущение температурного поля образца в начальный момент времени $f(z, \xi, \varphi)$. Как правило, режим устанавливался при сгорании примерно половины образца, в то время как для однородного температурного поля $f(z, \xi, \varphi) = \theta_0$ это расстояние увеличивается в несколько раз.

Основной целью исследования являются так называемые спиновые режимы горения и влияние на них фазового превращения. Стабилизирующее действие теплового запаса расплава на процесс горения в случае одномерных волн рассмотрено в [10]. Для сохранения неизменной адиабатической температуры горения потери тепла на плавление, определяемые параметром Ph , компенсируются соответствующим изменением теплового эффекта реакции за счет изменения параметра Гюгенса $Td = (Ph - \theta_0)^{-1}$. Стационарные и нестационарные, периодические и непериодические режимы твердопламенного горения без учета плавления описаны в [1–4]. Наиболее простой случай — это стационарный одноочаговый спиновый режим горения, устанавливающийся на образцах малого диаметра $R_0 = 20 \div 40$ при небольшом удалении в область неустойчивости одномерного фронта. Для уменьшения времени выхода на одноочаговый стационарный режим горения задавалось начальное возмущение температурного поля

$$f(z, \xi, \varphi) = \begin{cases} \frac{(\varphi - \pi)\theta_0}{2\pi}, & 0 \leq z \leq 15, 1.2\pi \leq \varphi \leq 1.8, \\ \theta_0, & z > 15, \text{ или } 0 \leq \varphi < 1.2, \\ & \text{или } 1.8 < \varphi < 2\pi, \end{cases}$$

обеспечивающее вращение очага по часовой стрелке (рис. 2, а). При этом избыток энтальпии, определяемый интегралом

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{L_0} \int_0^{R_0} [f(z, \xi, \varphi) - \theta_0] \xi d\xi dz d\varphi,$$

много меньше запаса тепла в прогретом слое стационарной волны горения. До выхода на стационарный спиновый режим волна горения в течение $10 \div 15$ периодов совершает колебания, определяемые преимущественно осевым и радиальным переносом тепла. Реагирующая система «забывает» первоначально заданное возмущение. Задание «правостороннего» возмущения

$$f(z, \xi, \varphi) = \begin{cases} \frac{(2\pi - \varphi)\theta_0}{1.2\pi}, & 0 \leq z \leq 15, 1.2\pi \leq \varphi \leq 1.8, \\ \theta_0, & z > 15, \text{ или } 0 \leq \varphi < 1.2, \\ & \text{или } 1.8 < \varphi < 2\pi, \end{cases}$$

приводило к вращению очага против часовой стрелки. То есть, задавая начальные условия, можно получить спины, вращающиеся в левую или правую сторону. На рис. 2 показано распределение температуры в сечении, перпендикулярном оси цилиндра и проходящем через точку на оси с глубиной превращения 0.5. Условно в качестве поверхности горения принимается совокупность расчетных точек с глубиной превращения вещества $\eta = 0.5$. На рисунке более высоким температурам соответствуют более темные области. Максимальные градиенты температуры наблюдаются на границе высокотемпературной области — очага горения. Температурное поле в вышеуказанном сечении с течением времени, не меняя своей структуры, поворачивается вокруг оси цилиндра по часовой стрелке или против нее и перемещается вдоль оси в направлении свежей смеси. Таким образом, направление движения очага и ускорение выхода на установившийся режим можно задавать, выбирая соответствующее локальное возмущение температурного поля в начальный момент времени. На участке горения образца с установившимся стационарным режимом очаг совершает полный оборот вокруг цилиндра с шагом вдоль его образующей (шаг «винта»), примерно равным радиусу образца: $\Delta h \approx 22.5$. Для этого участка рассчитано отношение тангенциальной составляющей скорости горения на боковой поверхности образца (u_φ) к скорости вдоль оси образца

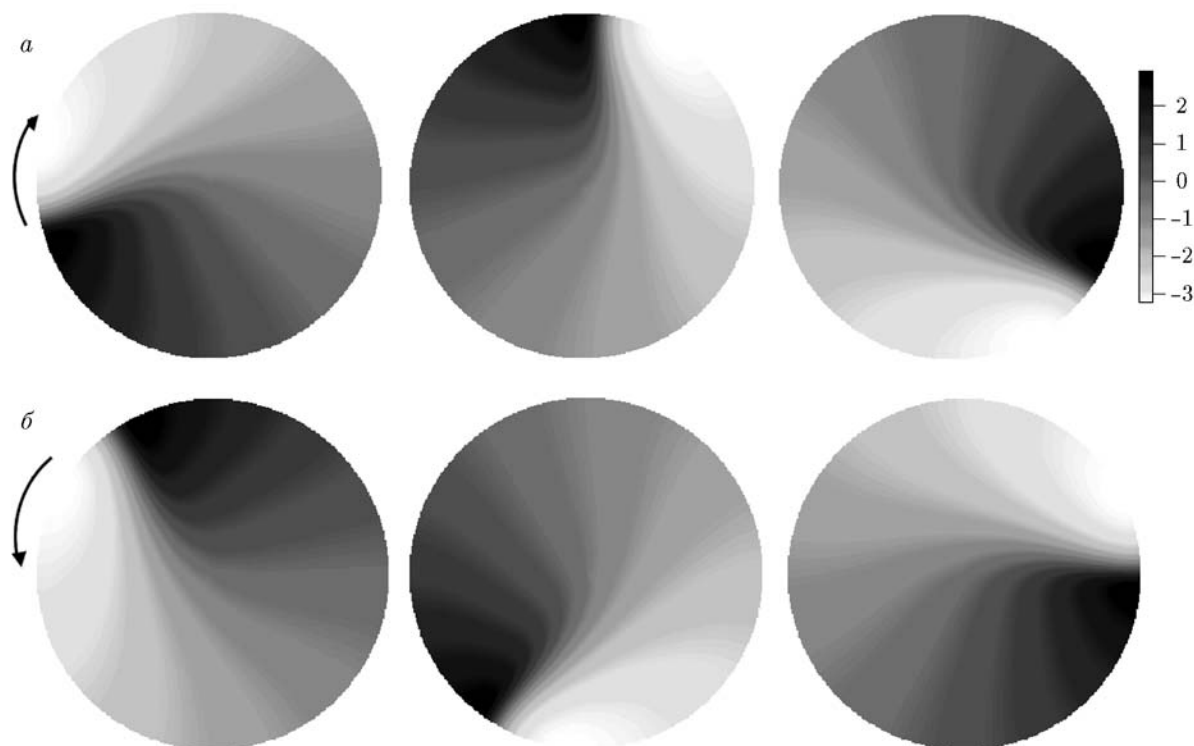


Рис. 2. Стационарный одноочаговый спиновый режим горения. Распределение температуры в сечении, перпендикулярном оси цилиндра, проходящем через точку фронта на оси цилиндра: направление движения очага на поверхности цилиндра: *a* — левый «винт», *б* — правый «винт»; $R = 24$, $Ph = 0$

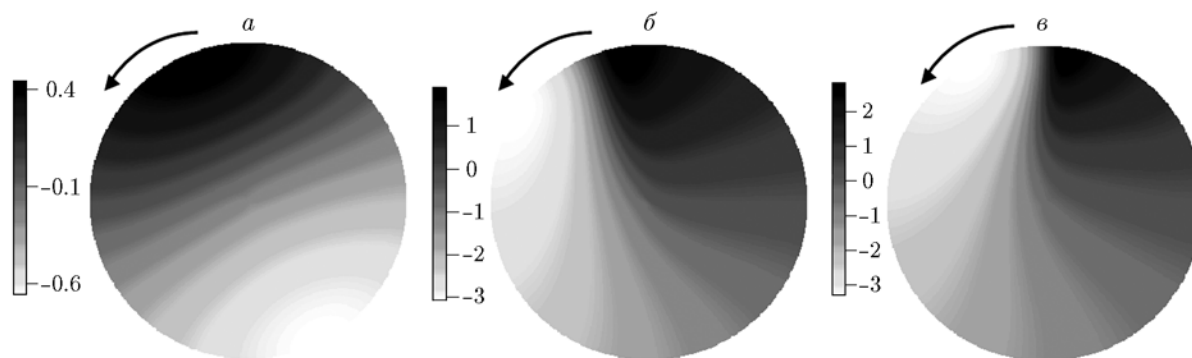


Рис. 3. Влияние температуры фазового перехода на структуру волны горения. Стационарный одноочаговый спиновый режим:

a — $\theta_l = -0.5$, $Ph = 0.3$; *б* — $\theta_l = -3.5$, $Ph = 0.3$; *в* — $Ph = 0$

(u_z): $u_\varphi/u_z = 6.8$. Осевая составляющая скорости горения $u_z = 0.128$ близка к значению параметра Годеса $Td = 0.125$. Увеличение средней скорости горения примерно на 10 % для образцов малого диаметра и аналогичное уменьшение для образцов большого диаметра по сравнению со значением параметра Годеса получено в работе [3]. Следует отметить [9], что в сме-

си Ni + 11 % Al отношение скоростей движения очага вдоль поверхности и по оси составляет 3. Такое горение по классификации [4] можно отнести к слабому спиновому режиму.

Высокотемпературный фазовый переход с температурой $\theta_l = -0.5$ приводит к изменению структуры волны горения: вблизи температуры плавления на поверхности горения по-

является изотермическое плато и уменьшаются градиенты температуры (рис. 3,а). Стабилизирующее действие плавления возрастает с уменьшением разности температур $T_* - T_l$. При равенстве температур плавления и горения поверхность горения становится плоской. Последнему случаю по классификации [11] соответствует элементарная модель второго рода — модель высокотемпературного плавления. Фазовый переход с относительно низкой температурой плавления $\theta_l = -2.5$ (рис. 3,б) оказывает слабое влияние на волну горения по сравнению с волной горения без фазового перехода, $Ph = 0$ (рис. 3,в). Следует отметить, что при уменьшении температуры плавления процесс плавления протекает в режиме Стефана в волне горения. При этом отсутствуют изотермические участки, характерные для волн горения в режиме химического превращения с высокой температурой плавления [12].

Увеличение радиуса образца ($R_0 = 50$, рис. 4,а) приводит к появлению двухочагового симметричного нестационарного режима с периодом по угловой координате φ , примерно равным 2.1π . Нестационарная двухочаговая симметричная волна горения описана в [2, 3]. Наличие фазового перехода в высокотемпературной области волны горения ($\theta_p = -0.75$) приводит к появлению нового очага горения. Двухочаговый режим переходит в нестационарный симметричный трехочаговый режим (рис. 4,б), аналогичный описанному в [3]. В качестве начала цикла можно рассматривать вспышку в центральной области. Очаг, разрастаясь, принимает форму, близкую к правильному треугольнику. Вершины очага-«треугольника» выходят на поверхность с образованием трех очагов на боковой поверхности образца,двигающихся по спирали. Движение по боковой поверхности сопровождается увеличением площади очагов в диаметральном сечении. На следующей стадии развития цикла очаги начинают радиальное движение к центру, при этом прекращается движение вдоль боковой поверхности. В центре образуется растущий очаг треугольной формы и начинается развитие нового цикла. Перепад температуры в диаметральном сечении, проходящем через точку фронта на оси образца, уменьшается примерно вдвое по сравнению с вариантом $Ph = 0$. Шаг винтовой линии на боковой поверхности равен $\Delta h \approx 23$ и слабо зависит от изменения радиуса образца. Снижение темпе-

ратуры плавления $\theta_l = -3.5$ (здесь следует рассматривать θ_l исключительно как параметр задачи) приводит к нестационарному периодическому симметричному трехочаговому режиму (рис. 4,в). В отличие от предыдущего режима, очаги после выхода на поверхность, расширяясь на боковой поверхности, движутся навстречу друг другу по кольцевой траектории. В определенный момент развития цикла в результате раздвоения на поверхности насчитывается шесть очагов. После попарного слияния их опять становится три, и дальнейшее развитие происходит преимущественно в радиальном направлении до образования общего очага горения правильной треугольной формы в центральной области. Цикличность режима горения, в отличие от предыдущего режима (см. рис. 4,б), не зависит от угловой координаты, точки выхода очагов на поверхность имеют фиксированные значения φ . Отсутствует характерный признак спиновых режимов горения — движение очагов по спиральной траектории. Для рассматриваемых трехмерных волн горения, в отличие от одномерных [7, 10], снижение температуры плавления не дестабилизирует распространение фронта горения.

Картина горения образцов большого диаметра $R_0 \geq 100$ значительно разнообразнее. Высокотемпературные зоны ($\theta > -0.5$) — очаги, выходящие на боковую поверхность, могут двигаться навстречу друг другу, образовывать линейные участки фронта во внутренней области, сопоставимые по размеру с диаметром образца (рис. 5). Взаимодействие очагов очень сложное. Они сливаются, раздваиваются, исчезают, появляются новые очаги. Этот процесс не является циклическим, по крайней мере при фиксированной длине образца, как для вышеописанных режимов. При наблюдении с внешней поверхности картина может напоминать мерцающее горение [13], создаваемое выходом на поверхность образца очагов, образованных в его глубине [14].

Подводя итог выполненной работе, можно сделать следующие выводы.

1. Предложенная и исследованная в [1–3] модель качественно верно описывает неустойчивые трехмерные режимы твердопламенного горения образцов относительно малого диаметра.

2. С увеличением диаметра образца горение существенно усложняется. Температурное поле в перпендикулярном оси цилиндра сече-

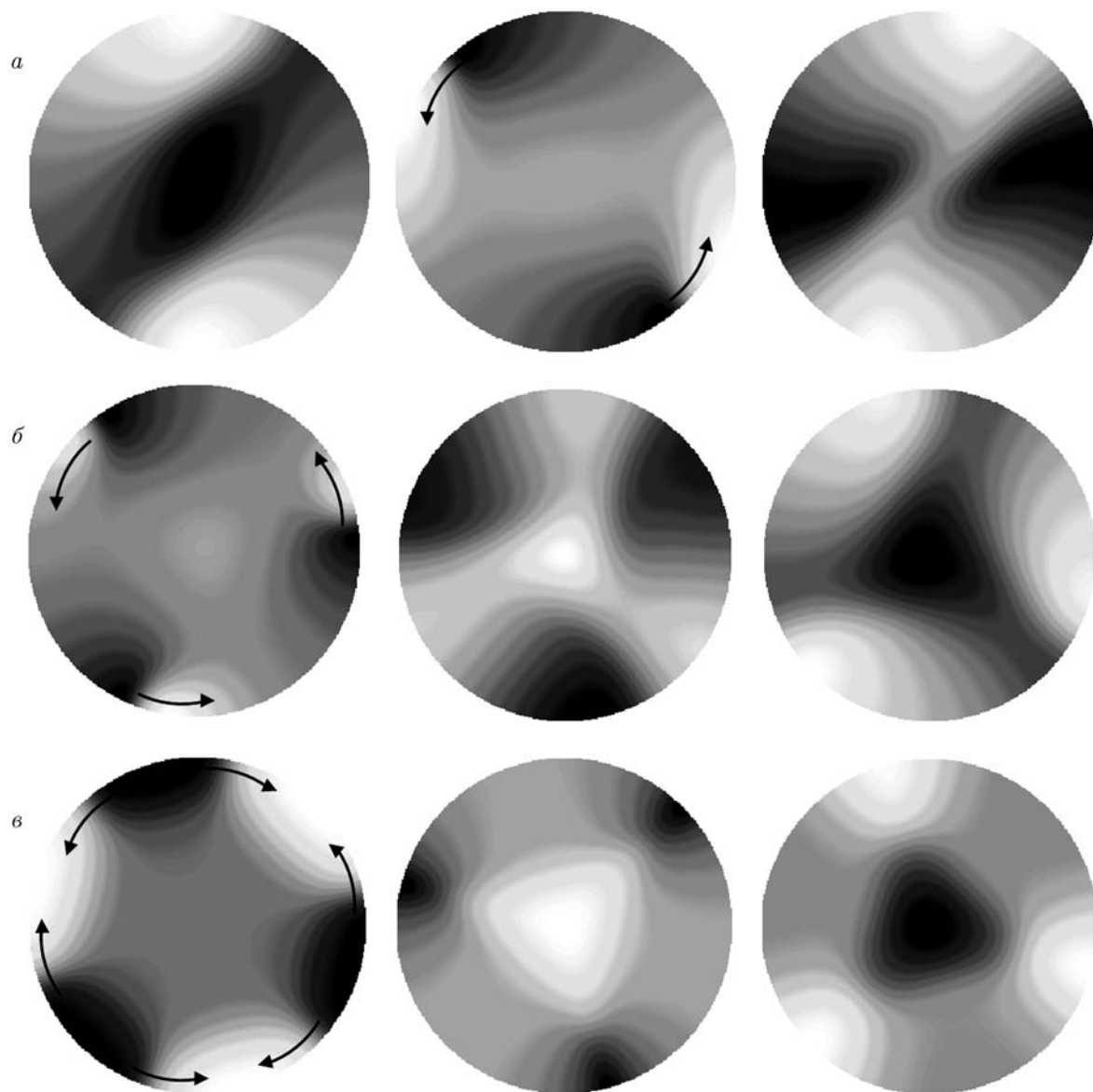


Рис. 4. Изменение режима горения в зависимости от параметров фазового перехода:

стрелками показано направление движения очагов на поверхности цилиндра: *а* — нестационарный двухочаговый симметричный режим, $R = 50$, $Ph = 0$; *б* — нестационарный трехочаговый симметричный режим, $R = 50$, $Ph = 0.3$, $\theta_l = -0.75$; *в* — кольцевой нестационарный периодический симметричный режим, $R = 50$, $Ph = 0.4$, $\theta_l = -3.5$

нии в окрестности фронта горения включает в себя высокотемпературные области — очаги или фрагменты, тепловая связь между которыми дает новую картину, не повторяющуюся во всей исследованной области параметров и времени вычислений. Наблюдается тенденция к увеличению количества очагов. Можно предположить, что с увеличением диаметра образца возможна определенная «тепловая гомо-

генизация» системы. Однако для доказательства этого предположения требуется намного больший объем вычислений.

4. Влияние фазового перехода на характер горения проявляется тем сильнее, чем ближе температура фазового перехода к температуре горения. В этом случае поверхность фронта заметно сглаживается вследствие уменьшения градиента температуры. Снижение температу-

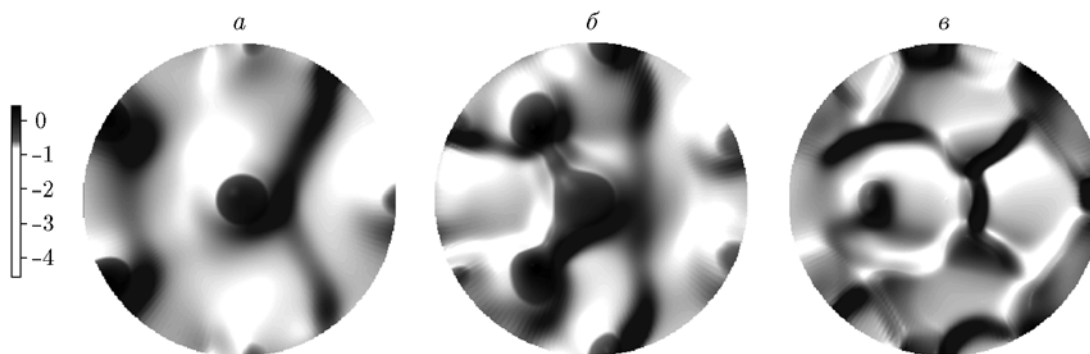


Рис. 5. Изменение поля температуры с увеличением диаметра образца:
 $Ph = 0$, $R = 100$ (а), 120 (б), 140 (в)

ры плавления в рассматриваемой области параметров приводит к смене двухочагового спинового режима горения трехочаговым.

5. Найлены нестационарные симметричные режимы горения с кольцевой траекторией движения очагов на боковой поверхности.

ЛИТЕРАТУРА

- Ивлева Т. П., Мержанов А. Г. Математическое моделирование трехмерных спиновых режимов волн безгазового горения // Докл. АН. — 1999. — Т. 369, № 2. — С. 186–191.
- Ивлева Т. П., Мержанов А. Г. Трехмерные спиновые волны безгазового горения // Докл. АН. — 2000. — Т. 371, № 6. — С. 753–758.
- Ивлева Т. П., Мержанов А. Г. Математическое моделирование трехмерных спиновых режимов безгазового горения // Физика горения и взрыва. — 2002. — Т. 38, № 1. — С. 47–54.
- Новожилов Б. В. Спиновое горение // Хим. физика. — 1996. — Т. 15, № 4. — С. 107–114.
- Максимов Ю. М., Пак А. Т., Лавренчук Г. В., Найбороденко Ю. С., Мержанов А. Г. Спиновое горение безгазовых систем // Физика горения и взрыва. — 1979. — Т. 15, № 3. — С. 156–159.
- Максимов Ю. М., Мержанов А. Г., Пак А. Т., Кучкин М. Н. Режимы неустойчивого горения безгазовых систем // Физика горения и взрыва. — 1981. — Т. 17, № 4. — С. 51–58.
- Алдушин А. П., Вольперт В. А., Филипенко В. П. Влияние плавления реагентов на устойчивость горения безгазовых систем // Физика горения и взрыва. — 1987. — Т. 23, № 4. — С. 35–41.
- Прокофьев В. Г., Смоляков В. К. Нестационарные режимы горения бинарной безгазовой смеси при зажигании накаливаемой стенки // Физика горения и взрыва. — 2005. — Т. 41, № 2. — С. 45–50.
- Кирдяшкин А. И., Китлер В. Д., Саламатов В. Г., Юсупов Р. А., Максимов Ю. М. Капиллярные гидродинамические явления в процессе безгазового горения // Физика горения и взрыва. — 2007. — Т. 43, № 6. — С. 31–39.
- Прокофьев В. Г., Смоляков В. К. Нестационарные режимы горения безгазовых систем с легкоплавким инертным компонентом // Физика горения и взрыва. — 2002. — Т. 38, № 2. — С. 21–25.
- Мержанов А. Г. Новые элементарные модели горения второго рода // Докл. АН СССР. — 1977. — Т. 233, № 6. — С. 1130–1133.
- Алдушин А. П., Мержанов А. Г. Безгазовое горение с фазовыми превращениями // Докл. АН СССР. — 1977. — Т. 236, № 5. — С. 1133–1136.
- Мержанов А. Г., Мукасьян А. С., Рогачев А. С., Сычев А. Е., Хванг С., Варма А. Микроструктура фронта горения в гетерогенных безгазовых средах (на примере горения системы $5Ti + 3Si$) // Физика горения и взрыва. — 1996. — Т. 32, № 6. — С. 68–81.
- Рогачев А. С., Барас Ф., Рогачев С. А. Режимы безгазового горения и макроструктура фронта (на примере системы $Ti-Si$) // Физика горения и взрыва. — 2009. — Т. 45, № 4. — С. 147–155.

Поступила в редакцию 15/IV 2015 г.,
 в окончательном варианте — 30/VII 2015 г.