

ЛИТЕРАТУРА

1. Ю. А. Гостинцев, Л. А. Суханов, П. Ф. Похил. Докл. АН СССР, 1970, 195, 1.
2. Ю. А. Гостинцев, Л. А. Суханов, П. Ф. Похил. ПМТФ, 1971, 6.
3. Ю. А. Гостинцев, Л. А. Суханов, П. Ф. Похил. Горения и взрыв. М., «Наука», 1972.
4. Б. В. Новожилов. ФГВ, 1968, 4, 4.
5. Я. Б. Зельдович. ПМТФ, 1964, 3.
6. Б. В. Новожилов. ФГВ, 1967, 3, 1.
7. В. Н. Вильюнов, А. П. Руднев. ПМТФ, 1972, 6.

УДК 536.46

ВЫХОД НА РЕЖИМ НОРМАЛЬНОГО ГОРЕНИЯ В МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ ГОРЮЧЕЙ СМЕСИ

А. М. Гришин, А. Н. Субботин
(Томск)

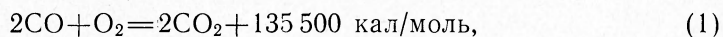
В работах [1, 2] при исследовании вопроса о выходе на режим нормального горения считалось, что смесь бинарна, и использовалась эффективная скорость реакции для гипотетического реагирующего газа. В работе [3] рассматривалось влияние многокомпонентной диффузии (смесь считалась трехкомпонентной) на нормальную скорость горения окиси углерода и окиси этилена.

В данной работе при помощи ЭВЦМ исследуется выход на режим нормального горения для трехкомпонентной (CO , O_2 , CO_2) и пятикомпонентной горючей смеси (CO , O_2 , CO_2 , H_2O , N_2). В согласии с результатами [3, 4] установлено, что если молекулы можно разбить на две группы с сильно различающимися молекулярными весами, то диффузные свойства смеси можно описать одним коэффициентом диффузии. Показано, что большое влияние на скорость и время выхода на режим стационарного горения оказывают величины теплоемкостей компонентов, эффективные числа Льюиса инертного компонента могут быть как больше единицы, так и меньше нуля, а концентрация инертного компонента имеет максимум, который всегда находится перед фронтом горения.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Пусть в момент времени $t=0$ нагретая пластина, температура которой остается постоянной и примерно равной температуре горения, приводится в соприкосновение с полупространством, заполненным реагирующим газом. Считаем газ сжимаемым, трех- (первый компонент — CO , второй — O_2 , третий — CO_2) или пятикомпонентным (добавляется H_2O — четвертый и N_2 — пятый). Предполагаем, что пластина инертная, а свободная и вынужденная конвекции реагирующего газа не имеют места.

В реагирующем газе происходит реакция



скорость которой, согласно [5], равна

$$\frac{dy_{\text{CO}}}{dt} = -P_0 x_1 x_2^{0.25} T^{-2.25} \exp\left(-\frac{23\,000}{RT}\right) [\text{моль/см}^3 \cdot \text{с}]. \quad (2)$$

Здесь Pk_0 — предэкспоненциальный множитель порядка $(1,14-2,5) \cdot 10^9$, y_{CO} — объемная концентрация окиси углерода, x_1 и x_2 — мольные доли окиси углерода и кислорода соответственно, T — температура газа, R — универсальная газовая постоянная.

Ставится задача: оценить влияние многокомпонентной диффузии на нестационарную скорость горения и время выхода на режим горения. Математически данная задача сводится к решению системы уравнений сохранения массы компонентов и энергии:

$$L_n \frac{\partial I_1}{\partial y} = - \frac{\partial c_1}{\partial \tau} - \gamma_1 (1 + \beta \theta)^{-2,25} \cdot \rho^{-1} \cdot x_1 x_2^{0,25} \exp \frac{\theta}{1 + \beta \theta}, \quad (3)$$

$$L_n \frac{\partial I_2}{\partial y} = - \frac{\partial c_2}{\partial \tau} - \gamma_2 (1 + \beta \theta)^{-22,5} \cdot \rho^{-1} \cdot x_1 x_2^{0,25} \exp \frac{\theta}{1 + \beta \theta}, \quad (4)$$

$$L_n \frac{\partial I_4}{\partial y} = - \frac{\partial c_4}{\partial \tau}, \quad (5)$$

$$L_n \frac{\partial I_5}{\partial \tau} = - \frac{\partial c_5}{\partial \tau}, \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho \lambda \frac{\partial \theta}{\partial y} \right) = c_p \frac{\partial \theta}{\partial \tau} + L_n \frac{\partial \theta}{\partial y} \sum_{\alpha=1}^5 c_{p\alpha} I_\alpha - \\ - (1 + \beta \theta)^{-2,25} \cdot \rho^{-1} \cdot x_1 x_2^{0,25} \exp \frac{\theta}{1 + \beta \theta}. \end{aligned} \quad (7)$$

При следующих начальных и граничных условиях

$$\theta|_{\tau=0} = -\theta_n, \quad \theta|_{y=0} = 0, \quad \theta|_{y=\infty} = -\theta_n, \quad (8)$$

$$I_\alpha|_{y=0} = 0, \quad c_\alpha|_{y=\infty} = c_\alpha|_{\tau=0} = c_{\alpha n}, \quad \alpha = \overline{1,5}. \quad (9)$$

Здесь $\theta = \frac{(T - T_*)E}{RT_*^2}$ — безразмерная температура газа, E — энергия активации, T_* — характерная температура, равная температуре пластины,

$\tau = \frac{t}{t_*}$ — безразмерное время, $t_* = \frac{c_{pH} \rho_H RT_*^{4,25} \exp \frac{E}{RT_*}}{qPk_0 EM_1}$ — масштаб времени,

$c_p = \sum_{\alpha=1}^5 c_{p\alpha} c_\alpha$ — удельная теплоемкость газовой смеси, c_α — мас-

совая концентрация, $c_{p\alpha}$ — удельная теплоемкость, $I_\alpha = - \frac{\rho^2 D_\alpha}{D_{12}} \frac{\partial c_\alpha}{\partial y}$ — диффузионный поток, D_α — эффективный коэффициент диффузии α -компонента, $\rho_j^* = \frac{\rho_j}{\rho_n}$ — безразмерная плотность газовой смеси, $j = \frac{\Psi}{\Psi_n}$ — без-

размерная пространственная координата, $\Psi_n = V \sqrt{\frac{\lambda_n \rho_n^2 RT_*^{4,25} \exp \frac{E}{RT_*}}{qPk_0 EM_1}}$ —

масштаб лагранжевой координаты, $\beta = \frac{RT_*}{E}$, $\gamma = \frac{c_{pH} RT_*^2}{qE}$, $\gamma_1 = \gamma$, $\gamma_2 = \frac{M_2 \gamma}{2M_1}$ —

безразмерные параметры, M_α — молекулярный вес α -компонента, $L_n = \frac{c_{pH} \rho_n D_{12}}{\lambda_n}$ — число Льюиса — Семенова, D_{12} — коэффициент бинарной

диффузии между CO и O₂, $\theta_n = \frac{(T_* - T_n)E}{RT_*^2}$, $M = 1 / \sum_{\alpha=1}^5 \frac{c_\alpha}{M_\alpha}$ — молекуляр-

ный вес смеси газов, q — тепловой эффект реакции, $\lambda = \frac{\lambda'}{\lambda_n}$ — коэффициент теплопроводности газа, индекс n приписывается начальным значениям.

Систему уравнений (3)—(7) необходимо решать совместно с соотношениями Стефана — Максвелла [6, 7]

$$\frac{\partial x_\alpha}{\partial y} - \sum_{j=1}^5 \frac{x_\alpha x_j}{\rho^2 D_{\alpha j}} \left(\frac{I_j}{c_j} - \frac{I_\alpha}{c_\alpha} \right), \quad \alpha = \overline{1,4}, \quad \sum_{\alpha=1}^5 I_\alpha = 0, \quad (10)$$

где $D_{\alpha j}$ — коэффициент бинарной диффузии для молекул сорта α и j и вычисляется по формуле [6]

$$D_{\alpha j} = \frac{2,628 \cdot 10^{-3} \sqrt{\frac{T^3 (M_\alpha + M_j)}{2 M_\alpha M_j}}}{\rho \sigma_{\alpha j}^2 \Omega_{\alpha j}^{(1,1)*} (T_{\alpha j}^*)} [\text{см}^2/\text{с}].$$

Здесь p — давление в атмосферах; $\sigma_{\alpha j} = \frac{\sigma_\alpha + \sigma_j}{2}$; $T_{\alpha j}^* = \frac{kT}{\varepsilon_{\alpha j}}$ — приведенная температура; $\varepsilon_{\alpha j} = \sqrt{\varepsilon_\alpha \varepsilon_j}$; $\Omega_{\alpha j}^{(1,1)*}$ — интеграл столкновения для молекул сорта α и j ; σ_α и ε_α — силовые постоянные для потенциала взаимодействия Леннарда — Джонса; k — постоянная Больцмана.

Плотность газа вычисляем, используя уравнение состояния, которое в безразмерном виде можно записать

$$\rho = \frac{\bar{k} \cdot M}{M_n (1 + \beta \theta)},$$

где $\bar{k} = \frac{T_n}{T^*}$, а $M_n = M|_{\tau=0}$.

Для расчета коэффициента теплопроводности смеси газов используем формулу, полученную Мейсоном и Саксеной (она дана, например, в [7]), которая имеет вид

$$\lambda' = \sum_{\alpha=1}^5 \frac{\lambda'_\alpha}{1 + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq \alpha}}^5 G_{\alpha k} x_k / x_\alpha},$$

где

$$G_{\alpha k} = \frac{1,065}{2 \sqrt{2}} \left(1 + \frac{M_\alpha}{M_k} \right)^{-\frac{1}{2}} \left[1 + \left(\frac{\lambda'_{\alpha_0}}{\lambda'_{k_0}} \right)^{1/2} \left(\frac{M_\alpha}{M_k} \right)^{1/4} \right]^2.$$

Здесь λ_{α_0} — теплопроводность «чистого» газа с замороженными (невозбужденными) внутренними степенями свободы, а

$$\lambda'_\alpha = \lambda_{\alpha_0} \left(0,115 + 0,354 \frac{c_{p\alpha}}{R} \right).$$

Величина λ'_α — коэффициент теплопроводности α -компонента с учетом по Эйкену внутренних степеней свободы.

$$\lambda_{\alpha_0} = 1,989 \cdot 10^{-4} \frac{\sqrt{M_\alpha T}}{M_\alpha \sigma_\alpha^2 \Omega_{\alpha}^{(2,2)} (T_\alpha^*)} [\text{кал}/(\text{см} \cdot \text{с} \cdot \text{град})],$$

где $\Omega_{\alpha}^{(2,2)}$ — интеграл столкновения для молекулы сорта α . Значения σ_α и ε_α/k для CO , O_2 , CO_2 , H_2O , N_2 были взяты из работ [5, 6]. Удельные теплоемкости α -компонентов $c_{p\alpha}$ вычисляем по интерполяционным формулам, которые даны в [8],

$$c_{p\alpha} = f_\alpha + g_\alpha (1 + \beta \theta) + h_\alpha (1 + \beta \theta)^{-2} [\text{кал}/(\text{г} \cdot \text{град})]. \quad (11)$$

Здесь $f_1=0,2424$; $g_1=3,4988 \cdot 10^{-5} T_*$; $h_1=-329,7 \cdot T_*^{-2}$; $f_2=0,235$; $g_2=2,5312 \cdot 10^{-5} T_*$; $h_2=2812,5 T_*^{-2}$; $f_3=0,2397$; $g_3=4,908 \cdot 10^{-5} T_*$; $h_3=-4635,3 T_*^{-2}$; $f_4=0,3424$; $g_4=1,421 \cdot 10^{-4} T_*$; $h_4=44,4 \cdot T_*^{-2}$; $f_5=0,2377$; $g_5=3,6412 \cdot 10^{-5} T_*$; $h_5=0$.

МЕТОД ЧИСЛЕННОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ ОСНОВНОЙ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ

При решении уравнений сохранения массы α -компонентов приходится преодолевать большие математические трудности, так как они не разрешены относительно старших производных по пространственной переменной. Эти трудности удается преодолеть, применяя итерационно-интерполяционный метод [3].

С этой целью задаем, согласно [3], искомое решение в нулевом приближении на i -м интервале в виде интерполяционных полиномов первой степени

$$c_{\alpha,i}^{(0)} = A_{\alpha,i} y + B_{\alpha,i}, \quad \theta_i^{(0)} = \bar{A}_i y + \bar{B}_i, \quad (12)$$

где

$$A_{\alpha,i} = \frac{c_{\alpha,i} - c_{\alpha,i-1}}{y_i - y_{i-1}}, \quad B_{\alpha,i} = \frac{y_i c_{\alpha,i-1} - y_{i-1} c_{\alpha,i}}{y_i - y_{i-1}},$$

$$\bar{A}_i = \frac{\theta_i - \theta_{i-1}}{y_i - y_{i-1}}, \quad \bar{B}_i = \frac{y_i \theta_{i-1} - y_{i-1} \theta_i}{y_i - y_{i-1}}.$$

Нелинейный член аппроксимируем независимым образом

$$\Phi_i^{(0)} = C_i y + D_i. \quad (13)$$

Здесь $C_i = \frac{\Phi_i - \Phi_{i-1}}{y_i - y_{i-1}}, D_i = \frac{y_i \Phi_{i-1} - y_{i-1} \Phi_i}{y_i - y_{i-1}}, \Phi_i = (1 + \beta \theta_i)^{-2,25} \cdot \rho_i^{-1} x_{1,i} \times$
 $\times x_{2i}^{0,25} \exp \frac{\theta_i}{1 + \beta \theta_i}.$ Подставляя (12) и (13) в правые части уравнений (3) — (6) и интегрируя по y , получаем

$$L_{\alpha} I_{\alpha,i}^{(0)} = - \left[\dot{A}_{\alpha,i} \frac{y^2}{2} + \dot{B}_{\alpha,i} y + \gamma_{\alpha} \times \right. \\ \left. \times \left(C_i \frac{y^2}{2} + D_i y \right) + G_{\alpha,i}(\tau) \right], \quad (14)$$

где $\alpha = \overline{1,4}, \gamma_3 = \gamma_4 = 0.$

Если задать диффузионные потоки I_{α} в нулевом приближении на i -м интервале тоже в виде интерполяционных полиномов первой степени

$$I_{\alpha,i}^{(0)} = E_{\alpha,i} y + F_{\alpha,i},$$

где $E_{\alpha,i} = \frac{I_{\alpha,i} - I_{\alpha,i-1}}{y_i - y_{i-1}}, F_{\alpha,i} = \frac{y_i I_{\alpha,i-1} - y_{i-1} I_{\alpha,i}}{y_i - y_{i-1}},$ то, интегрируя уравнение (14) по y , получаем

$$L_{\alpha} \left(E_{\alpha,i} \frac{y^3}{6} + F_{\alpha,i} y \right) = - \left[\dot{A}_{\alpha,i} \frac{y^3}{6} + \dot{B}_{\alpha,i} \frac{y^2}{2} + \right. \\ \left. + \gamma_{\alpha} \left(C_i \frac{y^2}{2} + D_i y \right) + G_{\alpha,i} y + H_{\alpha,i}(\tau) \right]. \quad (15)$$

Здесь $G_{\alpha,i}$ и $H_{\alpha,i}$ — произвольные функции времени.

Подставляя в уравнение (15) $y = y_i$ и затем $y = y_{i-1}$ и вычитая из первого уравнения второе, находим функции времени $G_{\alpha,i}$ в виде

$$G_{\alpha,i} = L_{\alpha} \left(E_{\alpha,i} \frac{y_i + y_{i-1}}{2} + F_{\alpha,i} \right) + \left(\dot{A}_{\alpha,i} + \gamma_{\alpha} C_i \right) \times \\ \times \frac{\frac{2}{3} + y_i y_{i-1} + y_{i-1}^2}{6} + \left(\dot{B}_{\alpha,i} + \gamma_{\alpha} D_i \right) \frac{y_i + y_{i-1}}{2}.$$

Наконец, из условия равенства диффузионных потоков

$$I_{\alpha,i}^{(0)}|_{y=y_i} = I_{\alpha,i+1}^{(0)}|_{y=y_i} \quad (16)$$

получаем систему обыкновенных дифференциальных уравнений, аппроксимирующую уравнения диффузии¹

$$\begin{aligned} & (y_i - y_{i-1}) \dot{c}_{\alpha,i-1} + 2(y_{i+1} - y_{i-1}) \dot{c}_{\alpha,i-1} + (y_{i+1} - y_i) \dot{c}_{\alpha,i+1} = \\ & = -\gamma_{\alpha} [(y_i - y_{i-1}) \Phi_{i-1} + 2(y_{i+1} - y_{i-1}) \Phi_i + (y_{i+1} - y_i) \Phi_{i+1}] - \\ & - 3L_{\alpha} (I_{\alpha,i+1} - I_{\alpha,i-1}), \quad i = \overline{1, N-1}. \end{aligned} \quad (17)$$

Решение уравнения энергии (7) сводим к решению системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} & a_{i-1} \dot{\theta}_{i-1} + a_i \dot{\theta}_i + a_{i+1} \dot{\theta}_{i+1} = b_{i-1} \Phi_{i-1} + b_i \Phi_i + b_{i+1} \Phi_{i+1} + \\ & + d_{i-1} \theta_{i-1} + d_i \theta_i + d_{i+1} \theta_{i+1}, \end{aligned} \quad (18)$$

где

$$\begin{aligned} a_{i-1} &= \frac{(y_i - y_{i-1}) [c_{p,i} (7\rho_i \lambda_i + 3\rho_{i-1} \lambda_{i-1}) + c_{p,i-1} (8\rho_i \lambda_i + 2\rho_{i-1} \lambda_{i-1})]}{5(\rho_i \lambda_i + \rho_{i-1} \lambda_{i-1})}, \\ a_i &= \frac{(y_i - y_{i-1}) [c_{p,i} (18\rho_i \lambda_i + 12\rho_{i-1} \lambda_{i-1}) + c_{p,i-1} (7\rho_i \lambda_i + 3\rho_{i-1} \lambda_{i-1})]}{5(\rho_i \lambda_i + \rho_{i-1} \lambda_{i-1})} + \\ & + \frac{(y_{i+1} - y_i) [c_{p,i+1} (3\rho_{i+1} \lambda_{i+1} + 7\rho_i \lambda_i) + c_{p,i} (12\rho_{i+1} \lambda_{i+1} + 18\rho_i \lambda_i)]}{5(\rho_{i+1} \lambda_{i+1} + \rho_i \lambda_i)}, \\ a_{i+1} &= \frac{(y_{i+1} - y_i) [c_{p,i+1} (2\rho_{i+1} \lambda_{i+1} + 8\rho_i \lambda_i) + c_{p,i} (3\rho_{i+1} \lambda_{i+1} + 7\rho_i \lambda_i)]}{5(\rho_{i+1} \lambda_{i+1} + \rho_i \lambda_i)}, \\ b_{i-1} &= \frac{(y_i - y_{i-1}) (3\rho_i \lambda_i + \rho_{i-1} \lambda_{i-1})}{\rho_i \lambda_i + \rho_{i-1} \lambda_{i-1}}, \quad b_i = b_{i-1} + b_{i+1} + 2(y_{i+1} - y_{i-1}), \\ b_{i+1} &= \frac{(y_{i+1} - y_i) (\rho_{i+1} \lambda_{i+1} + 3\rho_i \lambda_i)}{\rho_{i+1} \lambda_{i+1} + \rho_i \lambda_i}, \quad d_i = -(d_{i-1} + d_{i+1}), \\ d_{i-1} &= \frac{L_{\alpha} \left[5\rho_i \lambda_i + 3\rho_{i-1} \lambda_{i-1} \right] \sum_{\alpha=1}^5 c_{p\alpha,i} I_{\alpha,i} + (3\rho_i \lambda_i + \rho_{i-1} \lambda_{i-1}) \sum_{\alpha=1}^5 c_{p\alpha,i-1} I_{\alpha,i-1}}{\rho_i \lambda_i + \rho_{i-1} \lambda_{i-1}} + \\ & + \frac{24 \cdot \rho_i \lambda_i \rho_{i-1} \lambda_{i-1}}{(y_i - y_{i-1}) (\rho_i \lambda_i + \rho_{i-1} \lambda_{i-1})}, \\ d_{i+1} &= \frac{24 \cdot \rho_{i+1} \lambda_{i+1} \rho_i \lambda_i}{(y_{i+1} - y_i) (\rho_{i+1} \lambda_{i+1} + \rho_i \lambda_i)} + \\ & + \frac{L_{\alpha} \left[(\rho_{i+1} \lambda_{i+1} + 3\rho_i \lambda_i) \sum_{\alpha=1}^5 c_{p\alpha,i+1} I_{\alpha,i+1} + (3\rho_{i+1} \lambda_{i+1} + 5\rho_i \lambda_i) \times \sum_{\alpha=1}^5 c_{p\alpha,i} I_{\alpha,i} \right]}{\rho_{i+1} \lambda_{i+1} + \rho_i \lambda_i}. \end{aligned}$$

В точке $y=0$ обыкновенные дифференциальные уравнения для концентрации компонентов получаем из условий $I_{\alpha,1}^{(0)}|_{y=0} = 0$, которые, согласно уравнениям (14), принимают вид $G_{\alpha,1} = 0$. Преобразуя эти равенства, имеем

$$2y_1 \dot{c}_{\alpha,0} + y_1 \dot{c}_{\alpha,1} = -\gamma_{\alpha} (2y_1 \Phi_0 + y_1 \Phi_1) - 3L_{\alpha} I_{\alpha,1}. \quad (19)$$

¹ Как следует из изложенного, уравнения (17) получены, в сущности, из условия обращения в нуль средней невязки уравнения (14).

Соотношения Стефана — Максвелла (10) решаем методом Зейделя [9]. Для этого запишем соотношения (10) в виде

$$I_{\alpha,i}^{k+1} = \sum_{j=1}^{\alpha-1} \frac{\bar{l}_{\alpha j,i}}{l_{\alpha\alpha,i}} I_{j,i}^{(k+1)} + \sum_{j=\alpha+1}^4 \frac{\bar{l}_{\alpha j,i}}{l_{\alpha\alpha,i}} I_{j,i}^{(k)} + \frac{\bar{l}_{\alpha,i}}{l_{\alpha\alpha,i}}, \quad (20)$$

где

$$l_{\alpha\alpha,i} = \left(\sum_{\substack{\beta=1 \\ \beta \neq \alpha}}^5 \frac{x_{\beta}}{M_{\alpha} D_{\alpha\beta}} + \frac{x_{\alpha}}{M_5 D_{\alpha 5}} \right) \Big|_{y=y_i},$$

$$l_{\alpha,i} = - \left(\frac{\rho^2}{M} \frac{\partial x_{\alpha}}{\partial y} \right) \Big|_{y=y_i},$$

$$l_{\alpha,j} = \left(\frac{x_{\alpha}}{M_j D_{\alpha j}} - \frac{x_{\alpha}}{M_5 D_{\alpha 5}} \right) \Big|_{y=y_i}, \quad I_{\alpha,i}^{(k)} = I_{\alpha}^{(k)} \Big|_{y=y_i}.$$

Таким образом имеем систему $5N-1$ уравнений (17) — (19) для определения $c_{\alpha,i}$ ($\alpha=1, 2, 3, 4; i=0, N-1$), θ_i ($i=1, N-1$) — $5N-1$ неизвестных функций.

Выписанные выше дифференциальные уравнения решались с учетом следующих начальных и граничных условий:

$$\theta_j|_{\tau=0} = -\theta_n, \quad \theta_0=0, \quad \theta_N = -\theta_n, \quad (21)$$

$$I_{\alpha,0}=0, \quad c_{\alpha,i}|_{\tau=0} = c_{\alpha,N} = c_{\alpha,n}, \quad \alpha=1,4, \quad (22)$$

где индекс 0 приписывается величинам при $y=0$, а индекс N — величинам при $y=y_N$, (y_N — число, моделирующее бесконечность).

Было установлено, что полученная система обыкновенных дифференциальных уравнений (17) — (19) с начальными и граничными условиями (21), (22) аппроксимирует исходную нелинейную краевую задачу (3) — (10) с погрешностью $O(h^2)$. Система (17) — (19) методом прогонки разрешалась относительно производных по времени. Устойчивость прогонки для данной системы уравнений следует из [10]. Затем система уравнений, приведенная к нормальному виду, решалась модифицированным методом Эйлера [11] (прогноз с коррекцией). Расчеты проводились на ЭВМ БЭСМ-4. Машинное время, необходимое для расчета одного варианта, составляло 2—3 часа в зависимости от соотношения начальных концентраций. Поля концентраций, температура и нормальная скорость горения вычислялись с точностью не ниже 0,5%.

АНАЛИЗ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

При численном интегрировании системы уравнений (17) — (19) с начальными и граничными условиями (21) — (23) фиксировались поля величин θ , c_{α} , L_{α} и координата «фронта» пламени $y_*(\tau)$, которая определялась из уравнения

$$c_*(y_*, \tau) = 0,025.$$

Здесь c_* — концентрация α -компонента, который находится в недостатке (для бедной смеси $c_*=c_{1*}$, а для богатой — $c_*=c_{2*}$).

Все численные результаты, приведенные в этой работе, получены при $T_* = 2010^\circ \text{K}$, $Pk_0 = 1,5 \cdot 10^9$, $T_n = 300^\circ \text{K}$ и значениях начальных концентраций, которые даются отдельно в каждом конкретном случае.

На рис. 1 приведены зависимости безразмерной скорости го-

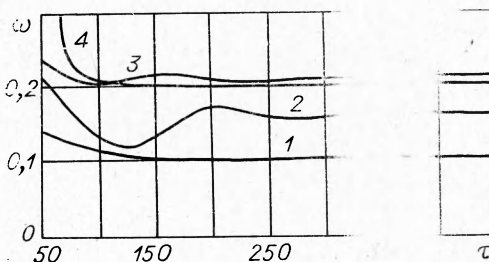


Рис. 1.

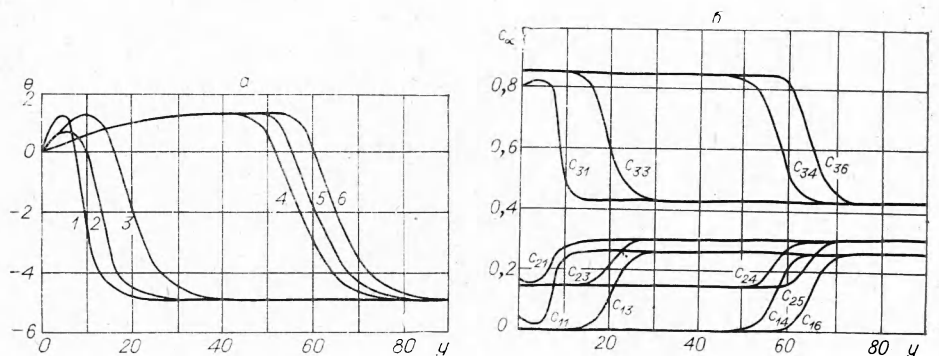


Рис. 2.

рения окиси углерода ω в случае трехкомпонентной смеси CO , O_2 , CO_2 от времени при различных начальных концентрациях (1 — $c_{1н}=0,2$, $c_{2н}=0,79$; 2 — $c_{1н}=0,2658$, $c_{2н}=0,3038$; 3 — $c_{1н}=0,318$, $c_{2н}=0,182$; 4 — $c_{1н}=0,2658$, $c_{2н}=0,3038$, $L_\alpha=1$). Как видно из рисунка, выход на режим нормального горения сопровождается колебаниями скорости горения; время выхода на стационарный режим зависит от начальных концентраций компонентов. Для достаточно бедных и богатых смесей ω приближается к нормальной скорости горения CO быстрее, чем для смесей с концентрациями $c_{1н}=0,2658$, $c_{2н}=0,3038$.

Кривая 4 на рис. 1 получена для эффективных чисел Льюиса — Семенова $L_\alpha = \frac{c_p \rho \cdot D_\alpha}{\lambda} = 1$ ($\alpha=1, 2, 3$), т. е. для случая, когда многокомпонентная диффузия α -компонентов не учитывается (α -компоненты диффундируют независимым образом). Нормальная скорость горения при $L_\alpha=1$ на 20% больше нормальной скорости, вычисленной с учетом многокомпонентной диффузии.

Колебания скорости горения окиси углерода вызываются колебаниями температуры, которые показаны на рис. 2, а. Этот график построен при $c_{1н}=0,2658$, $c_{2н}=0,3038$ в момент времени τ : 1 — 35,3, 2 — 48,9, 3 — 103,5, 4 — 321,1, 5 — 343,6, 6 — 367,8. Вначале при воспламенении образуется максимум температуры, после чего вследствие выгорания реагента в прогретом слое и теплоотдачи в холодные слои максимум температуры уменьшается. Затем после прогрева нового слоя горючей смеси происходит ее воспламенение и образуется максимум температуры в следующей точке пространства. С течением времени амплитуда колебаний температуры уменьшается, и затем колебания вообще прекращаются. Этот вывод подтверждается также графиками кривых $c_{\alpha 4}$ и $c_{\alpha 6}$ ($\alpha=1, 2, 3$, а второй индекс обозначает соответствующий момент времени), изображенными на рис. 2, б. Видно, что при $\tau \geq 321,1$ кривые $c_\alpha(y)$ становятся эквидистантными друг другу для различных моментов времени.

Нормальная скорость горения $u_n=0,2277$ м/с, найденная в данной работе методом установления при $c_{1н}=0,2658$ и $c_{2н}=0,3038$, совпадает со стационарной скоростью горения, полученной в [3] методом «пристрелки» для трехкомпонентной смеси при тех же значениях $c_{1н}$ и $c_{2н}$.

Представляют интерес зависимости от y эффективных чисел Льюиса — Семенова [4] для трехкомпонентной смеси. На рис. 3 даны кривые 1, 2, 3, которые являются графиками эффективных

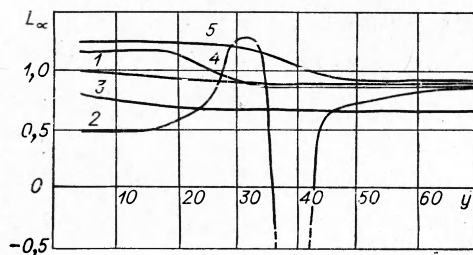


Рис. 3.

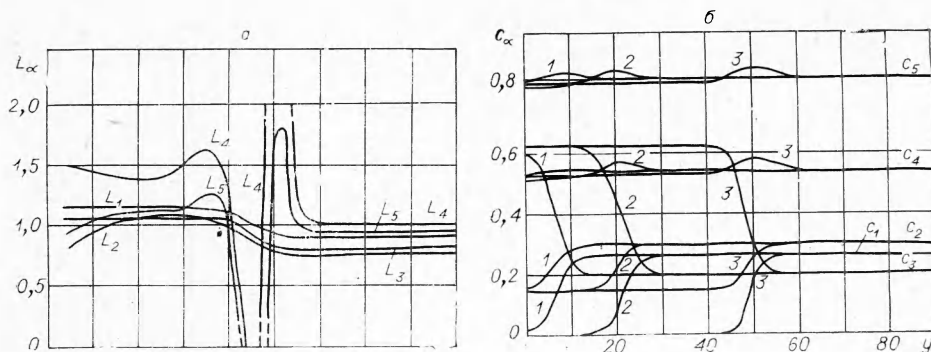


Рис. 4.

чисел Льюиса L_α ($\alpha=1, 2, 3$), для первого, второго и третьего компонентов при $\tau=39,3$, $c_{1н}=0,2$, $c_{2н}=0,79$. На рис. 3, 4 построен график эффективного числа Льюиса — Семенова в том случае, если все эффективные коэффициенты диффузии $D_\alpha=D_{13}$ ($\alpha=1, 2, 3$), а на рис. 4, 5 — график $L_\alpha(y)$ ($\alpha=1, 2, 3$), для стехиометрической смеси ($c_{1н}=0,318$, $c_{2н}=0,182$ при $\tau=190,8$).

Из анализа рис. 3, 2 следует, что число Льюиса инертного компонента (в данном случае роль инертного компонента выполняет кислород, находящийся в избытке) может принимать не только значения, превышающие единицу, но и отрицательные значения. В том случае, когда смесь находится в стехиометрическом соотношении, скорость исчезновения (возникновения) компонентов одинакова и эффективные числа Льюиса совпадают: $L_1=L_2=L_3$ (см. рис. 3, 5). В этом случае не наблюдается резких изменений числа Льюиса.

Для смеси CO , O_2 , CO_2 молекулярные веса окиси углерода и кислорода различаются не очень сильно, поэтому их можно объединить в одну группу, а в другую группу включить CO_2 . Тогда на основании результатов работы [4] можно предположить, что диффузные свойства смеси будут достаточно точно описаны одним коэффициентом бинарной диффузии D_{13} . Для проверки этой гипотезы был проведен расчет на ЭВМ при $c_{1н}=0,2658$, $c_{2н}=0,3038$. Нормальная скорость горения для этого случая оказалась равной $0,2286$ м/с, а для CO с учетом многокомпонентной диффузии для того же состава $u_n=0,2277$ м/с. Различие в стационарных профилях температур и концентраций также не превышает 1%.

Таким образом, как следует из приведенных выше результатов, в данном случае можно при вычислении нормальной скорости горения диффузные свойства смеси описать одним коэффициентом диффузии, точно так же как предложено в [4] для замороженных течений в пограничном слое.

Следует отметить, что, несмотря на хорошее совпадение стационарных значений скорости горения, в данном случае времена выхода на режим стационарного горения различаются более чем в два раза (при учете многокомпонентной диффузии $t_{\text{вых}}=3,31 \cdot 10^{-3}$ с, а при $D_\alpha=D_{13}$ $t_{\text{вых}}=1,55 \cdot 10^{-3}$ с). Кроме того, при учете многокомпонентной диффузии, в приведенном выше примере, выход на режим нормального горения сопровождается затухающими колебаниями скорости горения, а при $D_\alpha=D_{13}$ скорости горения асимптотически приближаются к нормальной скорости горения сверху (без колебаний).

Интересно, что нормальная скорость горения окиси углерода очень сильно зависит от удельной теплоемкости смеси. Например, если рассчитывать удельные теплоемкости как функции температуры по формулам (11), то $u_n=0,2277$ м/с, если же считать $c_p=\text{const } c_{pн}$, то для смеси

того же состава нормальная скорость горения CO равна 0,367 м/с, т.е. увеличилась на 60%. Время выхода на режим нормального горения в первом случае равно $3,31 \cdot 10^{-3}$ с, а во втором $1,38 \cdot 10^{-3}$ с.

При расчетах нестационарной скорости горения в пятикомпонентной смеси (CO, O₂, CO₂, H₂O, N₂) также было установлено, что эффективные числа Льюиса для инертных компонентов H₂O и N₂ могут быть меньше нуля. В частности, на рис. 4, а приведены кривые $L_\alpha(y)$ ($\alpha=1, 2, 3, 4, 5$), которые получены для $\tau=265,9$, при $c_{1н}=0,2658$, $c_{2н}=0,3038$, $c_{3н}=0,2$, $c_{4н}=0,015$, $c_{5н}=0,2154$. Кривая $L_4(y)$ имеет минимум, равный $-0,63$ и максимум, равный $2,44$ (на рис. 4, а их не удалось показать). Кривая $L_5(y)$ также немонотонная и имеет минимум, равный $-1,45$ и максимум, равный $1,82$.

Таким образом, для инертных компонентов эффективные числа Льюиса — Семенова могут принимать любые, в том числе и отрицательные, значения. Этот результат обусловлен тем, что L_α по определению зависит не только от концентраций всех компонентов и температуры, но и от плотностей диффузионных потоков. Надо сказать, что отрицательные числа Льюиса — Семенова известны в литературе, посвященной анализу процесса тепломассообмена в замороженном пограничном слое при наличии сильных вдувов (см. [12]), однако для задач теории горения, по-видимому, обнаружены впервые в данной работе.

Представляют интерес профили концентраций компонентов. На рис. 4, б для $\tau=36,6$ (кривая 1), $\tau=110,7$ (кривая 2) и $\tau=265,9$ (кривая 3) даны при тех же значениях $c_{\alpha н}$ графики $c_\alpha(y)$ ($\alpha=1, 2, 3, 4, 5$). При выполнении графиков масштаб для $c_5(y)$ был взят в 4 раза, а для $c_4(y)$ в 35 раз меньшим, чем для $c_1(y)$, $c_2(y)$, $c_3(y)$. Из анализа кривых $c_4(y)$ и $c_5(y)$ следует, что концентрации инертных компонентов немонотонны и имеют максимум, который движется вместе с фронтом горения и всегда расположен впереди него. Немонотонность этих кривых объясняется тем, что концентрации инертных компонентов не имеют «собственного» градиента и их профили формируются под влиянием градиентов концентраций активных компонентов, участвующих в химической реакции, т.е. обусловлена наличием неравновесной химической реакции. Надо сказать, что ранее максимум концентрации инертного компонента обнаружен в работе [13] при анализе стационарных «замороженных» течений в пограничном слое, однако для задач горения этот эффект обнаружен, по-видимому, впервые в данной работе и обусловлен, как уже отмечалось, наличием неравновесной химической реакции.

Как показали расчеты, инертные компоненты могут довольно сильно влиять на величину нормальной скорости горения и время выхода на режим горения, так как при изменении начальных концентраций инертных компонентов существенно изменяются теплофизические свойства реакционноспособной смеси. Например, при $c_{1н}=0,2658$, $c_{2н}=0,3038$, $c_{3н}=0,4304$, $u_n=0,2277$ м/с и $t_{вых}=3,31 \cdot 10^{-3}$ с, а при $c_{1н}=0,2658$, $c_{2н}=0,3038$, $c_{3н}=0,2$, $c_{4н}=0,015$, $c_{5н}=0,2154$ имеем $u_n=0,284$ м/с и $t_{вых}=2,03 \cdot 10^{-3}$ с. Так как в данном примере начальная концентрация активных компонентов оставалась постоянной, то u_n изменялась начальной концентрацией инертных компонентов, что приводит к изменению теплофизических свойств горючей смеси (отношение теплоемкости и теплопроводности первой горючей смеси к соответствующим параметрам второй смеси равно 1,07 и 1,104 соответственно).

Скорость горения, найденная из эксперимента, часто используется для определения эффективных значений энергии активации и предэкспонентов гомогенных химических реакций в результате решения соответствующей обратной задачи. Поэтому целесообразно корректно учитывать диффузные и теплофизические свойства всех, в том числе и инертных, компонентов горючей смеси. В противном случае ошибка значений скорости горения, полученных расчетным способом, может достигать,

как показывают приведенные выше примеры, 60%, что в свою очередь может привести к существенной погрешности в определении энергии активации и предэкспонентов.

Поступила в редакцию
12/V 1974

ЛИТЕРАТУРА

1. К. Г. Шкадинский. 2-й Всесоюзный симпозиум по горению и взрыву. Автореф. докл. Черноголовка, 1969.
2. А. Г. Мержанов, Б. И. Хайкин, К. Г. Шкадинский. ПМТФ, 1969, 5.
3. А. М. Гришин. Математическое моделирование некоторых нестационарных аэротермических явлений. Томск, Изд. ТГУ, 1973.
4. Г. А. Тирский. ПММ, 1969, 33, 1.
5. Е. С. Шетинков. Физика горения газов. М., «Наука», 1965.
6. Д. Гиршфельдер, К. Кертис, Р. Берд. Молекулярная теория жидкостей и газов. М., ИЛ, 1961.
7. Б. В. Алексеев, А. М. Гришин. Курс лекций по аэротермохимии, ч. 2. Томск, изд. ТГУ, 1971.
8. Краткий справочник физико-химических величин. Под ред. К. П. Мищенко и А. А. Равделя. Л., «Химия», 1967.
9. И. С. Березин, Н. П. Жидков. Методы вычислений, т. 1. М., «Наука», 1966.
10. С. К. Годунов. Уравнения математической физики. М., «Наука», 1971.
11. Р. В. Хемминг. Численные методы. М., «Наука», 1968.
12. Э. А. Гершбейн. Изв. АН СССР, МЖГ, 1970, 1.
13. Н. А. Анфимов. Изв. АН СССР, механика и машиностроение, 1962, 1.

УДК 536.46

О ХАРАКТЕРЕ ВЛИЯНИЯ ПОДЪЕМНЫХ СИЛ НА ДЛИНУ ДИФФУЗИОННЫХ ПЛАМЕН

В. К. Баев, В. А. Ясаков

(Новосибирск)

В [1] из анализа уравнений сохранения для квазиодномерной струи с учетом подъемных сил, действующих на объем, занимаемый пламенем, было показано, что длина пламени, определяемая из выражения

$$\bar{L} = \frac{1}{C} \sqrt{\frac{(1 + \alpha L_0) \left(1 + \alpha L_0 \frac{i_1^*}{i_0^*} + \frac{H_u \psi}{i_0^*} \sigma \frac{\mu_0 C_{p_0}}{\mu C_p} \frac{1 + \frac{\kappa - 1}{2} M_0^2}{1 + \frac{\kappa - 1}{2} M^2} \right)}{1 + \frac{1}{\kappa M_0^2} \frac{\sigma - 1}{\sigma} + m \alpha L_0 + \frac{\rho_1}{\rho_0} \left(1 - \frac{\tilde{\rho}}{\rho_0} \right) \frac{C^2 \bar{L}^{-3}}{3 \cdot Fr}}}, \quad (1)$$

достаточно хорошо согласуется с многочисленными экспериментальными данными для разных газов (метан, пропан, водород, коксовый и генераторный газы) в широком диапазоне скоростей истечения ($u_0 = 0 \div 2600$ м/с), коэффициентов нерасчетности ($\sigma = 0,7 \div 1,8$) и чисел Маха ($M = 0,25 \div 3,08$).

Формула (1) получена из уравнения

$$1 + \frac{\sigma - 1}{\kappa} \frac{1}{\kappa M_0^2} + m \alpha L_0 + \frac{\rho_1}{\rho_0} \left(1 - \frac{\tilde{\rho}}{\rho_0} \right) \frac{C^2 \bar{x}^3}{Fr} =$$