

## НЕСТАЦИОНАРНЫЕ РЕЖИМЫ ФИЛЬТРАЦИОННОГО ГОРЕНИЯ

А. Н. Фирсов<sup>1</sup>, Н. И. Озерковская<sup>2</sup>, К. Г. Шкадинский<sup>1</sup><sup>1</sup>Институт проблем химической физики РАН, 142432 Черноголовка, shkad@icp.ac.ru<sup>2</sup>Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения РАН, 142432 Черноголовка

С использованием трехмерной математической модели проведено исследование нестационарных режимов фильтрационного горения. Модель описывает экзотермическое химическое взаимодействие конденсированных систем с активными газами и образованием твердых продуктов. Нестационарность режимов фильтрационного горения обусловлена неустойчивостью плоского фронта горения. Исследовано формирование периодической структуры фронта горения пористых цилиндрических образцов с различной геометрией поперечного сечения. Показано, что в условиях неустойчивости плоского фронта горения, дефицита массы активного газа во внутривыводном пространстве в зависимости от геометрии поперечного сечения цилиндрических образцов и различных способов тепло- и массообмена образца с внешней газовой средой могут устанавливаться различные периодические режимы распространения фронта горения. Получены периодические режимы колебательного (объемного и поверхностного) горения на образцах с круговым сечением, спиновый на кольцевом сечении и сложные периодические режимы на образцах прямоугольного сечения.

Ключевые слова: фильтрационное горение, неустойчивость фронта, математическое моделирование.

## ВВЕДЕНИЕ

Теория фильтрационного горения создавалась в последние годы на базе новых данных экзотермического химического взаимодействия пористых конденсированных систем с активными газами и образованием твердых продуктов (см. обзоры в [1, 2]). Математическое описание этого процесса сводилось к достаточно сложным нелинейным системам дифференциальных уравнений, характеризующим макрокинетику химического взаимодействия и процессы тепло- и массопереноса в пористых средах. На начальном этапе математическое моделирование ограничивалось исследованием одномерных процессов. Переход к двумерным математическим моделям [3, 4] позволил выделить области существования плоского и поверхностного режимов фильтрационного горения. Были обнаружены эффекты стимулирования химического превращения в отдельных зонах объема реагирующей среды за счет особенностей неоднородной организации процессов тепло- и массообмена. Однако многие реальные нестационарные процессы для адекватного описания требуют анализа на основе трехмерных моделей фильтрационного горения, построение которых сдерживается уровнем как вычислительной техники, так и эффективных

приближенных методов математического моделирования. В работе [5] впервые рассмотрена трехмерная математическая модель безгазового горения, где вблизи границы устойчивости обнаружены нестационарные режимы горения. Полный анализ этой модели выполнен в работе [6].

В настоящей работе проведено исследование трехмерных нестационарных фронтальных режимов, возникающих в области неустойчивости плоского квазистационарного фронта фильтрационного горения [7]. Рассматривается горение цилиндрических образцов с различной геометрией поперечного сечения.

## МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

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



(где  $\mu_g$ ,  $\mu_k$ ,  $\mu_p$  — стехиометрические коэффициенты,  $R_g$ ,  $R_k$  — газовый и конденсированный реагенты,  $R_p$  — продукт) и описывается математической моделью в безразмерных переменных, которая включает: закон сохранения массы газа

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

уравнение Дарси, определяющее скорость движения газа,

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

уравнение состояния газа

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

закон сохранения энергии (энтальпии)

$$\frac{\partial H}{\partial \tau} = \operatorname{div} \left( \lambda(m) \nabla \theta - c_g \rho m \mathbf{V} \frac{1 + \beta\theta}{\beta} \right),$$

$$H = (c_g \rho m + c_\eta \rho_\eta (1 + \mu_\eta \eta)) \frac{1 + \beta\theta}{\beta} + \rho_\eta \frac{1 - \eta}{\gamma}, \quad (4)$$

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

уравнение макрокинетики химического взаимодействия

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

Граничные условия определяют условия тепло- и массообмена образца с внешней газовой средой. На разных частях боковой поверхности  $\partial S_{bn}$  или на всей поверхности  $S_{bn}$  образца могут задаваться граничные условия вида:

$\tau > 0, A \in S_{bn}$ :

$$\begin{aligned} \theta(A, \tau) &= \theta_w, & P(A, \tau) &= P_{bn}, \\ \frac{\partial \theta(A, \tau)}{\partial \mathbf{n}} &= 0, & \frac{\partial P(A, \tau)}{\partial \mathbf{n}} &= 0, \end{aligned}$$

$\tau > 0, A \in \partial S_{bn}$ :

$$\begin{aligned} \lambda(m) \frac{\partial \theta(A, \tau)}{\partial \mathbf{n}} &= \\ &= \begin{cases} c_g \rho \mathbf{V} (\theta(A, \tau) - \theta_{bn}) & \text{для } P_{\partial S} < P_{bn}, \\ 0 & \text{иначе,} \end{cases} \end{aligned}$$

$\tau > 0, A \in \partial S_{bn}$ :

$$\lambda(m) \frac{\partial \theta(A, \tau)}{\partial \mathbf{n}} = \alpha_{\partial S} (\theta(A, \tau) - \theta_{bn}).$$

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

$$\theta = \theta_0, \quad P = P_0, \quad \eta = \eta_0, \quad \rho_0 = P_0 / (1 + \beta\theta_0).$$

Переход к безразмерным параметрам осуществляется по формулам:

$$c_g = c_{g0}/c_*, \quad c_\eta = c_{c0}/c_*, \quad \rho = \rho_g/\rho_*,$$

$$\rho_\eta = \rho_{c0}\nu(1 - m)/\rho_*, \quad \lambda_\eta = \lambda_{c0}/\lambda_*,$$

$$\lambda_g = \lambda_{g0}/\lambda_*, \quad \lambda(m) = m\lambda_g + (1 - m)\nu\lambda_\eta,$$

$$\mu_\eta = \frac{\mu_g M_g}{\mu_c M_c}, \quad a = \frac{\lambda_*}{c_* \rho_*}, \quad \alpha_{\partial S} = \frac{\alpha x_*}{\lambda_{c0}},$$

$$K_f(m) = \frac{k_f P_*}{a}, \quad \gamma = \frac{RT_*^2}{E(T_* - T_0)}, \quad \beta = \frac{RT_*}{E},$$

$$x_*^2 = at_*, \quad t_* = \frac{\gamma}{k_0 \exp(-E/RT_*)}, \quad P_* = \frac{RT_* \rho_*}{M_g},$$

$$T_* \approx T_0 + \frac{Q}{c_{k0}}, \quad c_* = c_{c0}, \quad \lambda_* = \lambda_{c0}, \quad \rho_* = \rho_{c0},$$

$$\theta = \frac{T - T_*}{RT_*^2/E}, \quad \eta = \frac{C_0 - C}{C_0}, \quad P = p/P_*,$$

$$\mathbf{V} = \mathbf{U} t_* / x_*, \quad \tau = t/t_*, \quad \delta = 10^{-6}.$$

Здесь размерные величины:  $T$  — температура среды,  $p$  — давление газа,  $\rho$  — плотность,  $C$  — концентрация конденсированного реагента;  $E, k_0, Q$  — соответственно энергия активации, предэкспоненциальный множитель, тепловой эффект реакции;  $\mathbf{U}$  — вектор скорости движения газа;  $k_f$  — коэффициент фильтрации,  $c$  — теплоемкость,  $\lambda$  — теплопроводность,  $a$  — температуропроводность,  $\alpha$  — коэффициент теплопотерь,  $R$  — газовая постоянная,  $M$  — молекулярная масса. Безразмерные величины:  $\mu_\eta$  — стехиометрический коэффициент,  $\nu$  — доля конденсированной фазы в единице объема среды,  $m$  — пористость среды (доля газовой фазы в единице объема среды),  $\delta$  — малый параметр, характеризующий слабую зависимость скорости реакции от давления газа за исключением области низких давлений,  $\theta_w$  — высокотемпературный импульс. Индексы: 0 обозначает величины в начальный

момент времени, \* — величины, используемые при обезразмеривании,  $g$  — газ,  $c$  — конденсированную непористую среду,  $\eta$  — безразмерную плотность конденсированной пористой среды,  $bn$  — величину, относящуюся к внешней среде. Эталоны:  $t_*$  определяет характерное время горения,  $x_*$  — характерный размер зоны химической реакции. Согласно теории горения  $t_* \sim a\gamma^2/u^2$ ,  $x_* \sim a\gamma/u$  (где  $u$  — скорость горения). Для рассматриваемого класса систем (пористый реагент + активный газ  $\rightarrow$  твердый продукт [8])  $t_* \approx 4 \cdot 10^{-4} \div 3 \cdot 10^{-2}$  с,  $x_* \approx 2 \cdot 10^{-3} \div 3 \cdot 10^{-2}$  см. Ввиду недостаточной изученности макрокинетики химического взаимодействия в условиях горения отметим приближенный характер этих данных.

Трехмерная математическая модель (1)–(5) при соответствующих граничных и начальных условиях исследовалась методом переменных направлений [9] с применением неравномерных сеток, адаптирующихся к особенностям решения [10]. При этом по мере распространения фронта горения по исследуемому образцу при определенных условиях происходило наращивание расчетной области задачи со стороны реагентов и удаление части расчетной области со стороны продуктов горения. Этот прием позволял проследить динамику выхода на установившиеся режимы горения. Используя такой подход, мы фактически имитируем работу реактора вытеснения непрерывного действия.

## АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ

Основные закономерности наблюдаемых режимов горения пористых конденсированных систем в среде активного газа определяются химическим взаимодействием, теплопередачей и движением газа. Интенсивная химическая реакция протекает только при наличии всех необходимых для реакции компонентов и высокой температуры. Важно отметить, что для достижения полного превращения конденсированной среды требуется такое количество газового реагента, масса которого сравнима с массой исходного конденсированного вещества. Масса газа в образце зависит от давления газа и объема пор. При образовании продукта горения в результате химической реакции выделяется тепло, повышается температура в зоне реакции, газ расходуется, давление газа понижается, возникает градиент давления, при-

водящий к фильтрации газа в зону химической реакции из соседних областей пористого вещества и внешней газовой среды (если поверхность пористой среды газопроницаема). В горящем образце происходит взаимосвязанная пространственно-временная перестройка полей температуры, давления, скорости движения газа и глубины превращения. Наиболее наглядное представление о сложной, многомерной динамике геометрии зоны химической реакции (которая управляет фильтрационными процессами) лучше всего дает поле глубины превращения, фиксирующее результат химического взаимодействия.

Неустойчивость квазистационарного фронтального режима фильтрационного горения [7] усложняет процесс горения. При потере устойчивости плоского квазистационарного фронта горения для параметров вблизи границы устойчивости возникают новые, неоднородные периодические устойчивые режимы горения, эволюция которых определяется основными параметрами математической модели. Трехмерная математическая модель (1)–(5) содержит три важных фактора фронтального режима экзотермического химического превращения: экспоненциально зависящую от температуры макрокинетику химического взаимодействия (соответственно скорости энерговыделения); фильтрационный транспорт газового реагента в активную зону химической реакции (нелинейный, но подобный диффузионному транспорту в моделях диффузионного пламени); механизм теплообмена. Здесь можно рассматривать аналог критерия Льюиса, характеризующий соотношение процессов транспорта активного газового реагента и процесса теплопроводности. Следовательно, в вопросах устойчивости фронтального режима экзотермического превращения ожидается ситуация, подобная фронту теплодиффузионного пламени, хотя и существенно более нелинейная. В предельных случаях, например при отсутствии проницаемости (аналог «безгазового» горения), мы должны ожидать существование спиновых режимов горения, а при больших коэффициентах фильтрации (аналог теплодиффузионного пламени с большим значением числа Льюиса) — ячеистой структуры фронта. Конечно, возможны и другие «многообразные» нелинейные режимы горения, так как кроме указанных трех факторов важны геометрии

ческая форма образцов горящих составов и условия взаимодействия с внешней средой.

Сначала рассмотрим результаты исследования процесса горения пористых цилиндрических образцов в среде активного газа, когда тепло- и массообмен с внешней средой происходит через поверхность образца. Процесс горения инициируем с нижнего торца высокотемпературным импульсом ( $\theta_w$ ). При проведении расчетов теплофизические характеристики среды ( $c_g = 0.5$ ,  $\lambda_g = 5.0 \cdot 10^{-3}$ ,  $\mu_\eta = 0.3$ ,  $m = 0.5$ ,  $c_\eta = 1.0$ ,  $\lambda = 0.5$ ) были постоянными, изменяли параметры  $\gamma$ ,  $\beta$ ,  $P_0 = P_{bn}$ ,  $K_f$ ,  $\theta_0$ , форму образцов и условия их взаимодействия с внешней средой.

Для визуализации физических полей (температуры, давления, глубины превращения) выделяли плоское сечение образца, на котором отражалась динамика изолиний соответствующих полей. Это позволило получать информацию об их градиентах, определяющих потоки движения тепла и массы газа. Отметим, что в случае реального физического эксперимента, когда исходные и конечные продукты конденсированные, информация о внутренних процессах в образце визуальна недоступна.

Рассмотрим периодический процесс горения цилиндрического образца (высота  $h = 1200$ , радиус  $r = 100$ ) с газопроницаемой боковой поверхностью, на которой осуществляется теплообмен по закону Ньютона с коэффициентом  $\alpha_{\partial S} = 2.5 \cdot 10^{-2}$ . Здесь внешнее давление выбрано равным  $P_{bn} = 5 \cdot 10^{-3} = P_0$ , оно меньше стехиометрического  $P_{st} = 3.6 \cdot 10^{-2}$  (при котором внутрипорового активного газа достаточно для стехиометрического превращения пористой среды); коэффициент фильтрации  $K_f = 9.2 \cdot 10^3$ ; параметры  $\gamma = 0.06$ ,  $\beta = 0.11$ ;  $\theta_0 = \theta_{bn} = -8.0$ ,  $\theta_w = 1.0$ . На рис. 1 изображены изолинии глубины превращения, температуры и давления в плоском осевом сечении цилиндра, полученные в последовательные моменты времени. Они определяют динамику структуры фронта на одном периоде процесса горения. Изолинии 1, 2 ( $\eta = 0.1$  и  $0.9$ ) характеризуют динамику зоны активного химического превращения. Изотермы 3–5 ( $\theta = -5.0, -1.0, 1.0$ ) отражают динамику тепловой структуры фронта горения. Изобары 6, 7 ( $P = 4.9 \cdot 10^{-3}, 5 \cdot 10^{-4}$ ) характеризуют динамику фильтрационных потоков и зоны интенсивного поглощения активного газового реагента. На представленных рисунках отражена дина-

мика первого периода распространения фронта горения после инициирования горения высокотемпературным источником на поверхности  $X = 0$ . После этапа зажигания (см. рис. 1, а) формируется сложная осесимметричная динамическая структура фронта, перемещающаяся в направлении  $X$ , у которой периодически меняются по радиусу характеристики лидирующей зоны. В плоскости сечения видны две (в силу осевой симметрии) приповерхностные высокотемпературные области с глубиной превращения, близкой к единице (см. изолинию 2,  $\eta = 0.9$ , на рис. 1, а). Они разделены областью продукта с глубиной превращения меньше единицы. В этой области активный газ практически полностью израсходован (см. изобару 7), а его встречный фильтрационный подвод потребляется химической реакцией в лидирующей зоне фронта (изотерма 4,  $\theta = -1.0$ ). Из-за теплопотерь на боковой поверхности образца в приповерхностной области температура остается пониженной (изотерма 3,  $\theta = -5.0$ ), продукты горения здесь первоначально практически не образуются и газ не расходуется. Поле давления перестраивается так, что через приповерхностные слои фильтрационный поток газа устремляется внутрь цилиндра в высокотемпературную зону (изотерма 4,  $\theta = -1.0$ ), в дополнение к осредненной встречной фильтрации (изобара 6,  $P = 4.9 \cdot 10^{-3}$ ), повышая в ней скорость химической реакции и, следовательно, тепловыделение. Размеры высокотемпературных очагов увеличиваются, они смещаются частично к осевой части среды, завершая там экзотермическое химическое превращение.

Лидирующая часть очагов стремится выйти на боковую поверхность образца, так как вблизи нее созданы более благоприятные тепловые и фильтрационные условия для протекания химического превращения. Однако очаги не успевают еще достигнуть поверхности образца, как на ней, хорошо обеспеченной газовым реагентом, уже создаются условия для возникновения и интенсивного протекания химической реакции (изотерма 5 на рис. 1, б) с полной глубиной превращения. Перестройка полей глубины превращения, температуры и давления отражена изолиниями на рис. 1, б.

Со временем химическая реакция охватывает всё большую область боковой поверхности образца, что приводит к объединению основного и поверхностного очагов, при этом фронт горения распространяется от поверхно-

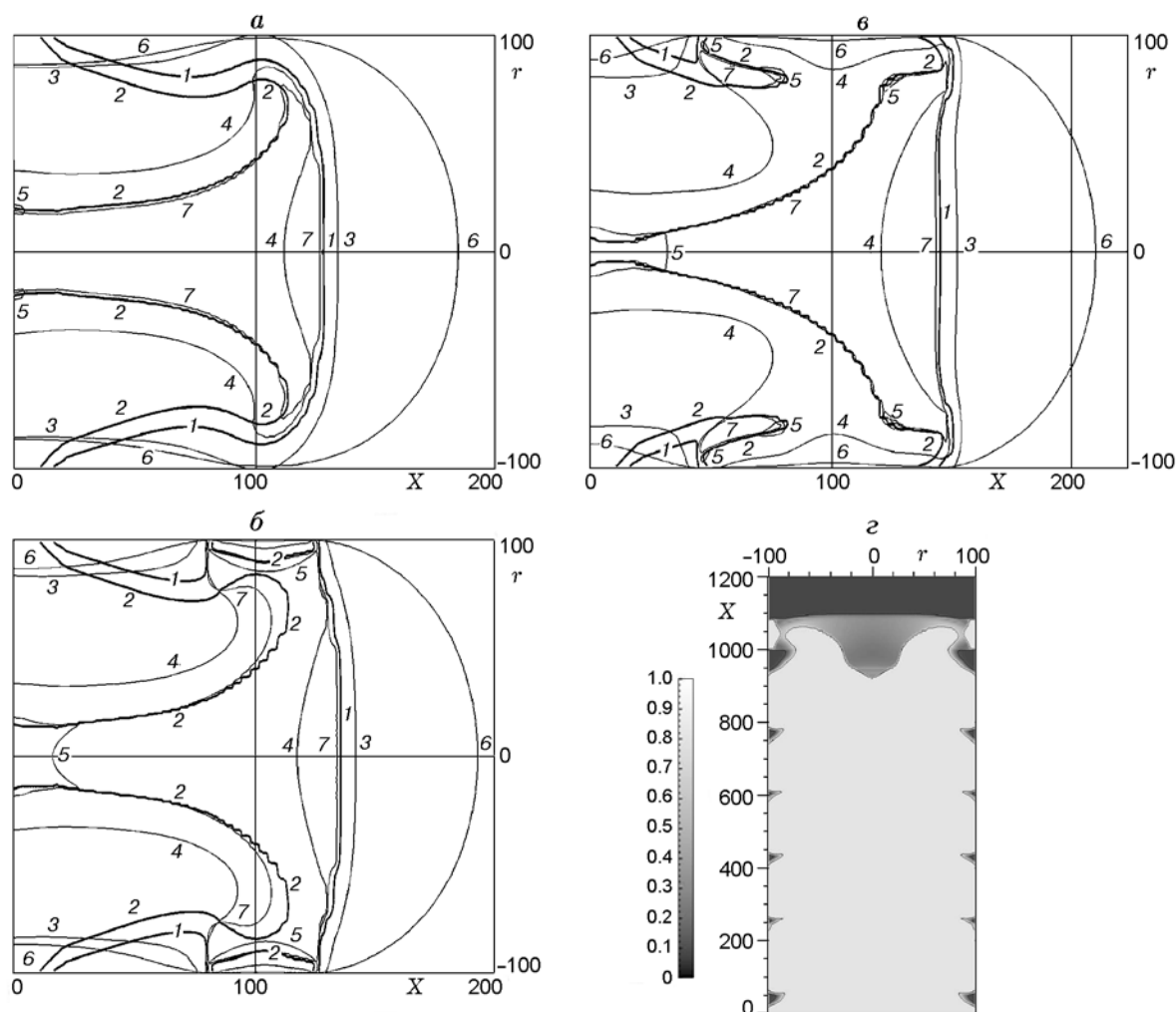


Рис. 1. Нелинейная динамика формирования неоднородной структуры фронта фильтрационного горения пористого цилиндрического образца и его распространение по образцу с приповерхностным недогоранием:

изолинии:  $\eta$ : 1 — 0.1, 2 — 0.9;  $\theta$ : 3 — 5.0, 4 — -1.0, 5 — 1.0;  $P$ : 6 —  $4.9 \cdot 10^{-3}$ , 7 —  $5.0 \cdot 10^{-4}$

сти образца в режиме спутной фильтрации (см. рис. 1, в). Здесь мы наблюдаем как фронт экзотермического превращения, распространяющийся вверх по свежей пористой среде, так и движущийся вниз «угасающий» фронт догорания приповерхностной непрореагировавшей среды. Поле температур перестраивается в соответствии с кондуктивной теплопередачей и конвективным переносом тепла за счет изменившегося поля скорости газа, в условиях внешних теплопотерь. На переднем фронте в приповерхностной зоне вновь формируются очаги (здесь достаточно активного газа, а теплопотери влияют только на поверхностную зону пористой среды).

В результате этих процессов создается

сложный неоднородный режим горения, периодически повторяющийся с течением времени. При этом в продуктах горения наблюдается периодическое недогорание в приповерхностных слоях (см. рис. 1, г, на котором представлено поле глубины превращения). Следует отметить, что часть участков фронта горения обеспечивается встречной фильтрацией, а другая часть — спутной.

Динамика образования и распространения неоднородной структуры фронта горения изменяется, если увеличить коэффициент фильтрации до  $K_f = 9.8 \cdot 10^3$  при тех же значениях остальных параметров математической модели. В этом случае в результате увеличения скорости фильтрации отсутствует фронт горения,

идущий с боковой поверхности навстречу верхним частям внутренних очагов образца. Здесь приповерхностные колебания глубины превращения более сильные (продукт образуется с большим недогоранием, чем при  $K_f = 9.2 \cdot 10^3$ ).

Аналогичный режим горения наблюдается и в случае пористых цилиндрических образцов трубчатой «геометрии» с тепло- и массоизолированной внутренней поверхностью трубы и проницаемой для газа внешней поверхностью.

Если боковая поверхность цилиндрического образца (высота  $h = 400$ , радиус  $r = 100$ ) непроницаема для газа, то в условиях внешних теплопотерь ( $\alpha \partial S = 1.0 \cdot 10^2$ ) и встречной фильтрации газа через открытый верхний торец образца ( $P_{bn} = 1.0 \cdot 10^{-2} = P_0$ ,  $K_f = 1.0 \cdot 10^4$ ,  $\gamma = 0.06$ ,  $\beta = 0.11$ ,  $\theta_0 = \theta_{bn} = -8$ ,  $\theta_w = 1$ ) реализуется приповерхностный режим горения (рис. 2). Здесь структура фронта характеризуется изолиниями глу-

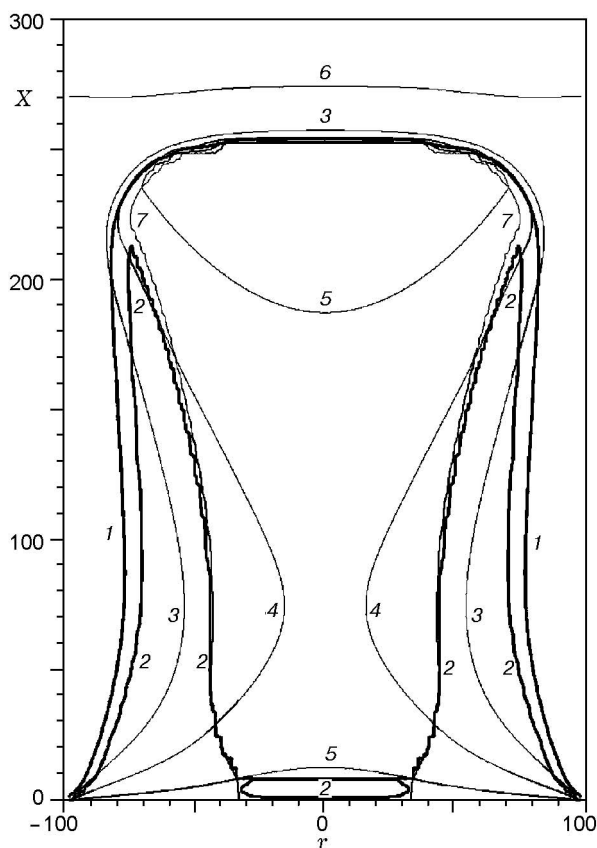


Рис. 2. Приповерхностный режим фильтрационного горения пористого цилиндрического образца:

изолинии:  $\eta$ : 1 — 0.25, 2 — 0.99;  $\theta$ : 3 — -3.0, 4 — -1.0, 5 — 0.5;  $P$ : 6 —  $6.5 \cdot 10^{-3}$ , 7 —  $3.0 \cdot 10^{-4}$

бины превращения  $\eta = 0.25, 0.99$ , изотермами  $\theta = -3.0, -1.0, 0.5$ , изобарами  $P = 6.5 \cdot 10^{-3}, 3.0 \cdot 10^{-4}$ . Необходимо отметить, что теплопотери с боковой поверхности образца понижают температуру в приповерхностных слоях так, что продукты горения в них не образуются, и в приповерхностных слоях создается дополнительный канал движения газа к удаленным от боковой поверхности зонам активного химического превращения. Для внутренней, окружающей ось цилиндра части области характерна существенная неполнота превращения. Это обусловлено практически полным потреблением поступающего с верхнего торца активного газа в лидирующей зоне фронта горения. Однако при приближении фронта к открытому торцу глубина превращения достигает единицы. На этом этапе возникает фронт догорания, который распространяется в обратном направлении и поддерживается спутным потоком газа через образовавшиеся конечные продукты реакции. Такой процесс раздвоения фронта ранее наблюдался в рамках одномерного описания.

В области параметров, где плоский квазистационарный фронт фильтрационного горения становится неустойчивым, может возникнуть новый устойчивый периодический режим, когда зона химической реакции сосредоточена в малом (по сравнению с диаметром образца) очаге. Этот очаг движется по спирали вдоль поверхности горячей системы, проникая на небольшую глубину внутрь образца. Такой режим наблюдался экспериментально при горении металлов (титана, тантала, гафния и др.) в среде азота и назван спиновым [8]. Его особенностью является движение очага по предварительно прогретому слою, образованному процессом горения на предыдущем витке. Отметим, что образовавшийся устойчивый периодический фронт не является осесимметричным, хотя сам образец и характеризующие его исходные состояние параметры обладали такой симметрией.

Для параметров математической модели  $\gamma = 0.085$ ,  $\beta = 0.09$ ;  $\theta_0 = \theta_{bn} = -10$ ,  $\theta_w = 1$ ,  $\mu_\eta = 0.3$ ,  $m = 0.5$ ,  $P_{bn} = 5 \cdot 10^{-3} = P_0$ ,  $K_f = 5.0 \cdot 10^3$  спиновый режим фильтрационного горения получен на образце в виде тонкой трубы (высота  $h = 500$ , радиус  $r = 40$ , толщина стенки трубы  $\Delta r = 0.2$ ) с тепло- и массоизолированной внутренней поверхностью и проницаемой для газа внешней поверхностью. На развертке (рис. 3) изображены изолинии физи-

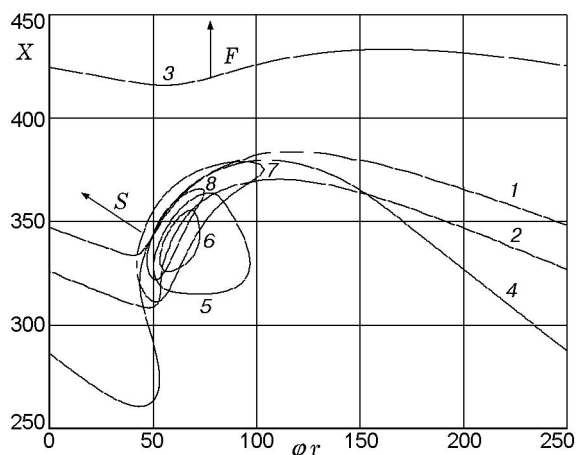


Рис. 3. Структура спиновго фронта фильтрационного горения пористой цилиндрической трубы с тепло- и массоизолированной внутренней поверхностью трубы и газопроницаемой внешней поверхностью:

изолинии:  $\eta$ : 1 — 0.1, 2 — 0.9;  $\theta$ : 3 — -0.8, 4 — -1.75, 5 — 0, 6 — 0.5;  $P$ : 7 —  $4.9 \cdot 10^{-3}$ , 8 —  $4.95 \cdot 10^{-3}$

ческих полей (изолинии глубины превращения  $\eta = 0.1, 0.9$ , изотермы  $\theta = -8.0, -1.75, 0, 0.5$  и изобары  $P = 4.9 \cdot 10^{-3}, 4.95 \cdot 10^{-3}$ ), характеризующие структуру фронта горения (спина). Стрелками указано направление распространения высокотемпературного очага вдоль прогретого слоя ( $S$ ) и направление движения осредненного фронта ( $F$ ). Здесь уместно отметить сложную динамику установления спиновго режима. Прежде чем выйти на устойчивый спиновго режим, фронт горения после инициирования распространяется в пульсирующем режиме (характерном для тонких одномерных образцов), затем — в многоочаговом режиме (с хаотической динамикой движения очагов).

Хорошо известно, что в области неустойчивости плоского фронта динамика фронтального экзотермического химического превращения зависит от геометрии (топологии поперечного сечения) цилиндрических образцов. Сложные многомерные режимы наблюдаются при фильтрационном горении пористых конденсированных образцов прямоугольного сечения. Рассмотрим результаты трехмерного численного анализа фильтрационного горения пластины. Ее размер по оси  $Y$  много меньше размеров по осям  $X$  и  $Z$  ( $L_X = 400, L_Y = 2$  и  $L_Z = 335$ );  $\gamma = 0.06, \beta = 0.11$ ;  $\theta_0 = \theta_{bn} = -8, \theta_w = 1$ . Внешнее давление  $P_{bn} = 2.5 \cdot 10^{-3}$  мень-

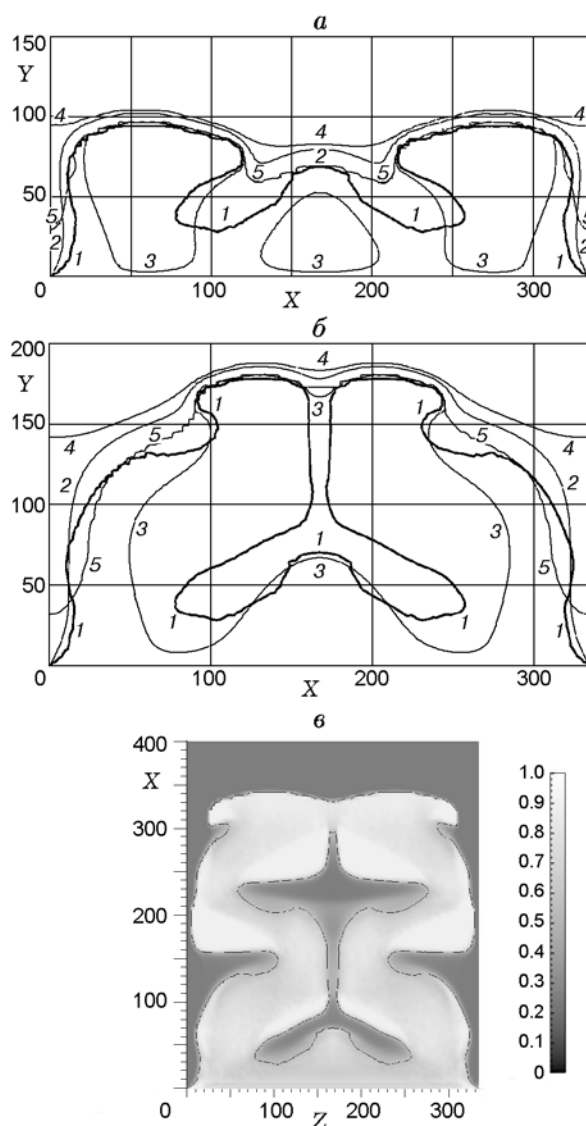


Рис. 4. Динамика развития нестационарного фильтрационного горения пористой пластины с газонепроницаемой боковой поверхностью и проницаемым верхним торцом:

грани  $XZ$  теплоизолированы, через грани  $XU$  происходит теплообмен по закону Ньютона с коэффициентом  $\alpha_{\partial S} = 100.0$ ; изолинии:  $\eta$ : 1 — 0.5;  $\theta$ : 2 — -5.0, 3 — -0.1;  $P$ : 4 —  $2.0 \cdot 10^{-3}$ , 5 —  $2.0 \cdot 10^{-4}$

ше стехиометрического  $P_{st} = 3.6 \cdot 10^{-2}$ , коэффициент фильтрации  $K_f = 5.0 \cdot 10^4$ , нижний торец пластины поджигается высокотемпературным источником ( $\theta_w = 0$ ), а верхний проницаем для газа. Остальные (боковые) грани пластины газонепроницаемы. Грани  $XZ$  теплоизолированы, а через грани  $XU$  происходит теплообмен по закону Ньютона с коэффициентом  $\alpha_{\partial S} = 100$ .

На рис. 4, *a, б* представлен фрагмент динамики развития нестационарного горения такой пластины. Отметим, что такая квазидвумерная пористая среда допускает более качественную аппроксимацию математической модели процесса, а следовательно, и более детальный его анализ. Положение относительно узкого фронта превращения характеризуется изолинией  $\eta = 0.5$ , теплового фронта — изотермами  $\theta = -5.0, -0.1$  и изобарами  $P = 2.0 \cdot 10^{-3}, 2.0 \cdot 10^{-4}$ . После процесса зажигания формируются три очага. Средний очаг гибнет, так как тепловые и фильтрационные условия для его развития ухудшаются за счет усиления химического превращения приповерхностных очагов, сложное взаимодействие которых отражается в изменении полей температуры, давления и глубины превращения, представленных на рис. 4, *б*. Очаги движутся навстречу друг другу до центра пластины (см. рис. 4, *a, б*), затем распространяются вдоль оси  $Y$  в центральной части, далее перемещаются к краям пластины и продолжают движение вдоль ее ребер. Затем этот процесс движения очагов повторяется. С приближением фронта горения к открытой поверхности (см. рис. 4, *в*, на котором представлено поле глубины превращения) очаги объединяются, формируется и далее распространяется плоский фронт.

Если верхний торец образца непроницаем для окружающего газа, то химическая реакция потребляет газ, находящийся только в порах. Газа недостаточно для повторения описанной выше картины, и в процессе приближения фронта горения к закрытой поверхности сначала наблюдается динамика, подобная представленной на рис. 4, *a, б*, а затем она изменяется и горение прекращается из-за отсутствия газового реагента.

Заметим, что, несмотря на существование исходной симметрии (как самого образца, так и характеризующих его исходное состояние параметров), для пластин также наблюдалась несимметричная динамика распространения фронта горения.

При больших толщинах образцов ( $L_X = 600, L_Y = 250$  и  $L_Z = 250$ ) реализуется более сложный, неоднородный режим фильтрационного горения пористых конденсированных составов ( $\gamma = 0.06, \beta = 0.11; \theta_0 = \theta_{bn} = -8.0, \theta_w = 1.0; K_f = 9.2 \cdot 10^3, P_{bn} = P_0 = 5 \cdot 10^{-3}$ ) в условиях тепло- и массообмена с внешней средой (коэффициент теплообмена один и тот же

для всех граней —  $\alpha_{\partial S} = 2.5 \cdot 10^{-2}$ ; боковые грани и верхний торец проницаемы для газа).

Этот режим характеризуется периодическим появлением очагов на гранях образца (рис. 5, *a*), их раздвоением с последующим движением к ребрам (рис. 5, *б*), слиянием на ребрах, поступательным движением вдоль них, затем раздвоением и движением к центрам граней (рис. 5, *в*). Рис. 5 отражает динамику температурных полей в образце. Подобные неоднородные режимы нестационарного горения образцов прямоугольного сечения из железциркониевых термитов экспериментально исследовались в работе [11]. В реальном опыте экспериментатор довольствуется именно такой внешней картиной сложного фронтального процесса, протекающего внутри объема образца. Математическая модель позволяет экспериментатору «заглянуть» внутрь объема и увидеть нелинейную динамику фронта, подобную изображенной на рис. 4.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Устойчивые фронтальные режимы экзотермического химического превращения позволяют осуществить самоподдерживающийся процесс выделения энергии и получения конечного продукта путем локального иницирования процесса. Взаимодействие с окружающей средой может нарушить плоскую геометрию фронта, реализовать фронтальные режимы с неполным превращением и последующим режимом догорания. Сильное взаимодействие с внешней средой может вызвать критические явления типа срыва фронтального режима распространения — погасание. Попытка осуществления плоского фронтального режима в условиях его неустойчивости приводит к появлению дополнительного «спектра возможностей» его распространения: спиновых режимов, ячеистых структур сложной геометрии и состава продуктов и др. Известно, что структура продукта и его свойства зависят от условий и закономерностей динамики его получения. В режиме высокотемпературного синтеза получают материалы и изделия с широким спектром свойств. Представленные выше результаты показывают существование новых технологических возможностей при использовании фронтальных режимов для синтеза материалов и изделий из них, а также расширяют понимание причин нежелательных факторов, нарушающих однородность их структуры.



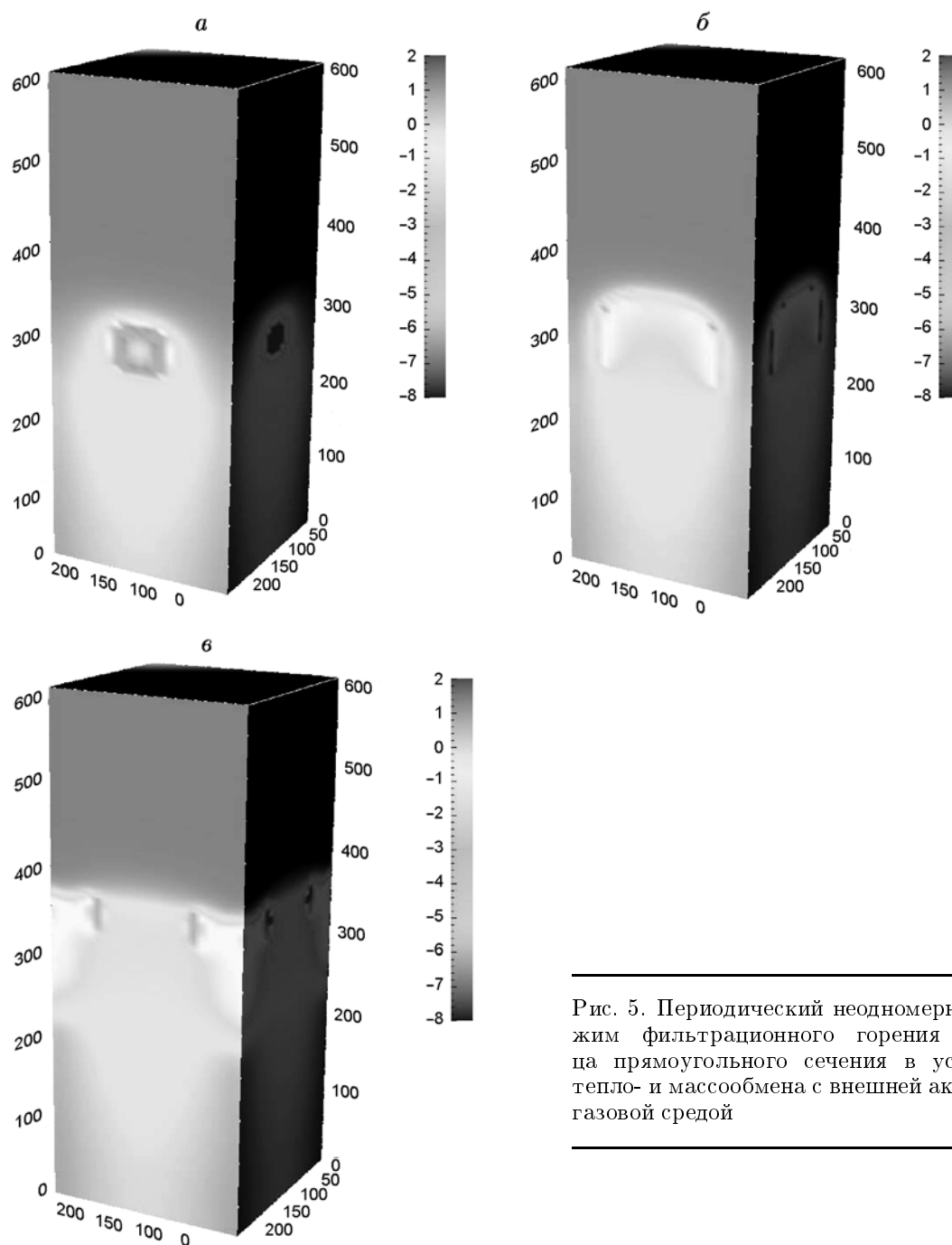


Рис. 5. Периодический неоднородный режим фильтрационного горения образца прямоугольного сечения в условиях тепло- и массообмена с внешней активной газовой средой

### ЛИТЕРАТУРА

1. Алдушин А. П., Мержанов А. Г. Теория фильтрационного горения: общие представления и состояние исследований // Распространение тепловых волн в гетерогенных средах / под ред. Ю. Ш. Матроса. — Новосибирск: Наука, 1988. — С. 9–52.
2. Алдушин А. П. Фильтрационное горение металлов // Там же. — С. 52–71.
3. Ивлева Т. П., Мержанов А. Г., Шкадинский К. Г. Поверхностное горение пористых конденсированных веществ с конденсированными продуктами // Химическая физика процессов горения. Горение конденсированных и гетерогенных систем: материалы VI Всесоюз. симпоз. по горению и взрыву. — Черногоровка, 1980. — С. 99–103.
4. Грачев В. В., Ивлева Т. П. Двумерные режимы фильтрационного горения // Физика го-

- рения и взрыва. — 1999. — Т. 35, № 2. — С. 16–22.
5. **Щербак С. Б.** Режимы неустойчивого горения образцов безгазовых составов в форме стержней квадратного и кругового сечения // Физика горения и взрыва. — 1983. — Т. 19, № 5. — С. 9–12.
  6. **Ивлева Т. П., Мержанов А. Г.** Математическое моделирование трехмерных спиновых режимов безгазового горения // Физика горения и взрыва. — 2002. — Т. 38, № 1. — С. 47–54.
  7. **Алдушин А. П., Каспарян С. Г.** Устойчивость стационарных волн фильтрационного горения // Физика горения и взрыва. — 1981. — Т. 17, № 6. — С. 37–49.
  8. **Филоненко А. К.** Нестационарные явления при горении гетерогенных систем, образующих тугоплавкие продукты // Процессы горения в химической технологии и металлургии. — Черноголовка: ОИХФ АН СССР, 1976. — С. 258–273.
  9. **Самарский А. А.** Теория разностных схем. — М.: Наука, 1977.
  10. **Ивлева Т. П., Шкадинский К. Г.** Алгоритм построения подвижной, неравномерной, адаптирующейся к решению расчетной сетки // Информ. бюл. Госфонда алгоритмов и программ СССР. — 1979. — № 1(27). — С. 18–19.
  11. **Вольперт В. А., Дворянкин А. В., Струнина А. Г.** Неодномерное горение образцов прямоугольного сечения // Физика горения и взрыва. — 1983. — Т. 19, № 4. — С. 10–13.

*Поступила в редакцию 6/II 2009 г.*

---