

# МОДЕЛЬ ВОЛНЫ ИДЕАЛЬНОГО ТВЕРДОПЛАМЕННОГО ГОРЕНИЯ С ПЕРЕМЕННОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ ХИМИЧЕСКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Г. В. Жижин

Северо-Западный государственный заочный технический университет, 191186 Санкт-Петербург  
gv@nwpri.ru

Построена модель волны горения в конденсированных смесях с автоторможением тугоплавким продуктом реакции с учетом уменьшения поверхности частиц тугоплавкого реагента в процессе химического взаимодействия с легкоплавким реагентом. Для получения приближенного аналитического решения использован метод полубесконечной зоны реакции. Корректность метода подтверждена качественным и численным исследованием дифференциальных уравнений. Известная по литературе модель рассматриваемого процесса не учитывала изменение поверхности частиц тугоплавкого реагента, что приводило к игнорированию принципиальной характеристики всех химических реакций — непрерывному уменьшению скорости реакций при выгорании реагентов.

Ключевые слова: пламя, скорость, температура, плавление, модель.

## ВВЕДЕНИЕ

В работе [1] построена модель волны горения в конденсированных смесях, в которых один из реагентов и продукты реакции являются тугоплавкими веществами. Считалось, что тугоплавкий реагент представляет собой частицы, распределенные в легкоплавком реагенте, химическая реакция проходит на поверхности тугоплавкого реагента, при этом тугоплавкий продукт нарастает на частице тугоплавкого реагента, тормозя реакцию, так как легкоплавкий реагент для вступления в реакцию должен диффундировать через слой продукта. Эта модель получила в дальнейшем название модели идеального твердопламенного горения [2]. В [1] справедливо полагалось, что скорость тепловыделения в процессе реакции пропорциональна площади поверхности раздела реагентов, однако считалось, что частицы тугоплавкого реагента плоские, причем один из геометрических размеров частиц много меньше двух других и при этом постоянен. Изменение площади поверхности раздела реагентов, на которой происходит химическая реакция и которая, естественно, уменьшалась по мере выгорания тугоплавкого реагента, не учитывалось. В этом и заключалось противоречие модели [1]: полагалось, что тугоплавкий реагент расходуется в реакции, но не учитывалось ни изменение размера частиц, ни их число. Основное внимание в [1] уделялось влиянию изменения глубины реакции на процесс торможения реакции за счет увеличения массы тугоплавкого продукта во-

круг частиц в так называемых законах окисления. При этом из рассмотрения выпал принципиальный для всех химических реакций момент — непрерывное уменьшение скорости реакции (вплоть до нуля) за счет выгорания реагентов. Чтобы как-то сгладить указанное противоречие, в [1] полагалось, что при некоторой температуре (в окрестности адиабатической температуры горения) скорость реакции внезапно обращается в нуль. В данной работе, развивающей модель [1], учитывается изменение площади поверхности химического взаимодействия, приводящее к непрерывному уменьшению скорости реакции. Влияние тугоплавкого продукта реакции на скорость реакции учитывается с помощью законов окисления так же, как в [1, 2]. Для получения приближенного аналитического решения применяется метод полубесконечной зоны реакции, развитый в работах [3, 4]. Корректность метода подтверждается качественным и численным исследованием дифференциальных уравнений.

## 1. ИСХОДНЫЕ УРАВНЕНИЯ И ИХ ОБЩЕЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

В соответствии с [2] систему одномерных уравнений, описывающих стационарное распространение адиабатической волны твердопламенного горения в квазигомогенном приближении, запишем в виде

$$\bar{c}\bar{\rho}u \frac{dT}{dz} = \bar{\lambda} \frac{d^2T}{dz^2} + \bar{p}qsk_0\varphi(\eta)\Phi(T), \quad (1)$$

$$u \frac{d\eta}{dz} = k_0 s \varphi(\eta) \Phi(T), \quad (2)$$

где  $\bar{c}$ ,  $\bar{\rho}$ ,  $\bar{\lambda}$  — осредненные значения соответственно теплоемкости, плотности и теплопроводности среды;  $\eta$  — глубина химического превращения;  $T$  — температура;  $u$  — скорость волны горения;  $z$  — волновая координата;  $k_0$  — предэкспонент скорости химической реакции;  $\varphi(\eta)$  — член, учитывающий зависимость скорости химической реакции от глубины химического превращения, отражающий торможение реакции слоем тугоплавкого продукта [2] ( $\varphi(1) \neq 0$ );  $\Phi(T)$  — член, учитывающий зависимость скорости реакции от температуры;  $q$  — удельный тепловой эффект химической реакции (например, количество тепловой энергии, выделяющейся при сжигании единицы массы тугоплавкого реагента);  $s$  — площадь удельной поверхности тугоплавкого реагента.

Скорость химической реакции в (1), (2) записывается в виде произведения функции глубины химического превращения  $s\varphi(\eta)$  и функции температуры  $k_0\Phi(T)$ . Такой вид отражает основанные на экспериментальных данных представления о тепловой гомогенизации при твердопламенном горении [2], согласно которым в процессе реакции самопроизвольно устанавливается эффективная ширина зоны реакции, значительно превосходящая размеры частиц, так что частицы можно рассматривать как точечные источники тепла. Влияние размера и формы частиц учитывается в  $s$ . Вид функции  $\varphi(\eta)$  может меняться в зависимости от реагирующих веществ. В литературе (см., например, [5]) приведены различные экспериментальные зависимости  $\varphi(\eta)$  и способы их получения.

Если частицы тугоплавкого реагента считать сферическими радиуса  $r$ , то объем частицы будет  $V_0 \sim r^3$ , ее поверхность  $S_0 \sim r^2$ , т. е.  $S_0 \sim V_0^{2/3}$ . Определим глубину химического превращения отношением массы продукта реакции к массе смеси в единице ее объема:  $\eta = m_p / (m_h + m_p + m_f)$ , где  $m_h$  — масса тугоплавкого реагента в единице объема смеси,  $m_p$  — масса продукта реакции в единице объема смеси,  $m_f$  — масса легкоплавкого реагента в единице объема смеси. Учитывая, что тугоплавкий и легкоплавкий реагенты пропорционально исчезают в реакции и  $m_h = n\rho V_0$ , имеем

$$V_0 \approx (1 - \eta)(m_h + m_p + m_f) / n\rho,$$

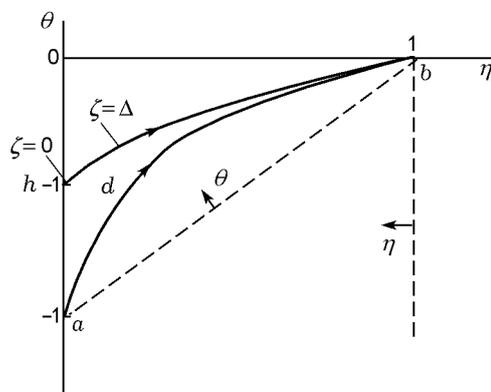


Рис. 1. Фазовая диаграмма уравнений волны твердопламенного горения с переменной поверхностью химического взаимодействия

где  $\rho$ ,  $n$  — плотность частиц и их число в единице объема. Так как  $s = nS_0$ , из предыдущего получаем

$$s \approx n((1 - \eta)(m_h + m_p + m_f) / \rho n)^{2/3}.$$

Учитывая, что отношение  $(m_h + m_p + m_f) / \rho$  и величину  $n$  можно считать постоянными, и принимая во внимание небольшое отличие  $2/3$  от 1, последнее соотношение в первом приближении можно заменить равенством  $s = C(1 - \eta)$ , где  $C$  — коэффициент пропорциональности (замена  $2/3$  на 1 существенно облегчает в дальнейшем математический анализ).

Введем коэффициент пропорциональности в константу скорости химической реакции  $k = Ck_0$ . Используем в дальнейшем следующие безразмерные переменные и параметры:  $\theta = (T - T_+) / (T_+ - T_0)$ , где  $T_+$  — температура в конце волны (адиабатическая температура горения),  $T_0$  — температура в начале волны;  $w = u(\bar{\rho}\bar{c})^{1/2} / (\bar{\lambda}k)^{1/2}$ ;  $\zeta = z\bar{\rho}u\bar{c} / \bar{\lambda}$ . Тогда уравнения (1), (2) совместно с законом сохранения энергии

$$q/\bar{c} = T_+ - T_0$$

принимают вид

$$w^2 \frac{d^2\theta}{d\zeta^2} - w^2 \frac{d\theta}{d\zeta} + (1 - \eta)\varphi(\eta)\Phi(\theta) = 0, \quad (3)$$

$$w^2 \frac{d\eta}{d\zeta} - (1 - \eta)\varphi(\eta)\Phi(\theta) = 0. \quad (4)$$

Уравнение (3) с учетом (4) и граничного условия в начале волны

$$\zeta = -\infty : \quad \frac{d\theta}{d\zeta} = \frac{d\eta}{d\zeta} = 0, \quad \theta = -1, \quad \eta = 0 \quad (5)$$

имеет интеграл

$$\frac{d\theta}{d\zeta} = \theta + 1 - \eta. \quad (6)$$

Решения системы (4), (6) можно представить траекториями в фазовой плоскости  $(\theta, \eta)$ , где  $0 \leq \eta \leq 1$ ,  $-1 \leq \theta \leq 0$  (рис. 1). На рис. 1 штриховой линией представлена нулевая изоклина уравнения (6), в точках которой  $d\theta/d\zeta = 0$ . Точка  $b$  с координатами  $(0, 1)$  особая (конечное положение равновесия), так как линия  $\eta = 1$  есть нулевая изоклина  $d\eta/d\zeta = 0$ . В этой точке выполняется граничное условие в конце волны

$$\zeta = +\infty : \quad \frac{d\theta}{d\zeta} = \frac{d\eta}{d\zeta} = 0, \quad \theta = 0, \quad \eta = 1. \quad (7)$$

Точка  $a$  с координатами  $\theta = -1, \eta = 0$  не является положением равновесия, так как, строго говоря, в ней  $d\eta/d\zeta \neq 0$ . Но при этом система (4), (6) не имеет волновых решений, которые должны представлять собой траектории, идущие из одного положения равновесия в другое. Для того чтобы точка  $a$  была особой (начальным положением равновесия), необходимо положить функцию  $\Phi(\theta)$  равной нулю в этой точке (в этом случае выполняется граничное условие (5)). Тогда искомое волновое решение представляется траекторией  $S$ , идущей из точки  $a$  в точку  $b$ . В соответствии с методом полубесконечной зоны реакции, моделируя волновое решение  $S$ , будем полагать, что  $\Phi(\theta) = 0$  не только в точке  $a$ , но и на некотором отрезке  $ad$  оси  $\theta$ , длина которого (величина обрезки источника) будет определена ниже. Отрезок  $ad$  соответствует зоне подогрева ( $-\infty \leq \zeta \leq 0$ ) в волне экзотермической реакции, а температура в точке  $d$  ( $\zeta = 0$ ) есть температура фронта реакции  $T_f$ . После точки  $d$  процесс в волне развивается по траектории  $db$  — полубесконечной зоне химической реакции ( $0 \leq \zeta \leq +\infty$ ). При таком моделировании снимается ограничение метода узкой зоны реакции [6], согласно которому считается, что химическая реакция происходит при температуре адиабатического горения (траектория  $S$  заменяется ступенькой  $a0 - 0b$ ). Обозначив длину отрезка  $ad$  через  $h = (T_f - T_0)/(T_+ - T_0)$ , из (6) при  $\eta = 0$  получим, что в зоне подогрева

$$\theta = -1 + h \exp \zeta. \quad (8)$$

Принципиальным моментом для получения аналитического решения в методе полубесконечной зоны реакции является введение между зоной подогрева и зоной химической реакции некоторой буферной зоны ( $0 \leq \zeta \leq \Delta$ ) (см. рис. 1), протяженность которой  $\Delta$  мала и в дальнейшем после разрешения алгебраической системы уравнений, полученной в результате интегрирования по зонам, устремляется к нулю. Не нарушая граничных условий (5), (7), будем интегрировать (4) в зоне химической реакции ( $\Delta \leq \zeta \leq +\infty$ ), заменяя функции  $\varphi, \Phi$  их среднеинтегральными значениями по этой зоне  $\langle \varphi \rangle, \langle \Phi \rangle$ . Тогда уравнение (4) принимает вид

$$w^2 \frac{d\eta}{d\zeta} = (1 - \eta) \langle \varphi \rangle \langle \Phi \rangle \quad (9)$$

и имеет интеграл

$$\eta = 1 - (1 - \eta_\Delta) \exp(-\alpha(\zeta - \Delta)), \quad (10)$$

где

$$\alpha = w^{-2} \langle \varphi \rangle \langle \Phi \rangle, \quad (11)$$

$\eta_\Delta$  — значение  $\eta$  при  $\zeta = \Delta$ . Подставляя (10) в (6) и интегрируя, находим

$$\theta = -(1 - \eta_\Delta)(1 + \alpha)^{-1} \exp(-\alpha(\zeta - \Delta)). \quad (12)$$

В буферной зоне ввиду ее малости зависимости  $\theta(\zeta), \eta(\zeta)$  можно положить линейными. С учетом этого, используя условие непрерывности  $\theta$  и  $\eta$ , получим

$$\theta = (\theta_\Delta + 1 - h)\zeta/\Delta + h - 1, \quad (13)$$

$$\eta = \eta_\Delta \zeta/\Delta. \quad (14)$$

Угол наклона прямых (13), (14) можно также определить на основании уравнений (4), (6), принимая в правых частях этих уравнений средние значения  $\theta, \eta$  по буферной зоне, т. е. имеем

$$(\theta_\Delta + 1 - h)/\Delta = 0,5(h - 1 + \theta_\Delta - \eta_\Delta) + 1, \quad (15)$$

$$\eta_\Delta/\Delta = w^{-2}(1 - 0,5\eta_\Delta)\varphi(0,5\eta_\Delta) \times \\ \times \Phi(0,5(h - 1 + \theta_\Delta)), \quad (16)$$

где  $\theta_\Delta$  — значение  $\theta$  при  $\zeta = \Delta$  — находится из (12):

$$\theta_{\Delta} = -(1 - \eta_{\Delta})(1 + \alpha)^{-1}. \quad (17)$$

Приравняем производные  $d\theta/d\zeta$  на границе зоны подогрева и буферной зоны. Из (8), (13) имеем

$$\theta_{\Delta} + 1 - h = h\Delta. \quad (18)$$

Сопоставляя (18), (15), получим

$$h = \theta_{\Delta} + 1 - \eta_{\Delta}. \quad (19)$$

Исключим  $\theta_{\Delta}$  из (18) с помощью (17):

$$-(1 - \eta_{\Delta})(1 + \alpha)^{-1} + 1 - h = h\Delta. \quad (20)$$

Исключим  $\eta_{\Delta}$  из левой части (16) с помощью (19), (18) и сократим (16) на величину  $\Delta$ , пока еще не равную нулю:

$$h = w^{-2}(1 - 0,5\eta_{\Delta})\varphi(0,5\eta_{\Delta}) \times \\ \times \Phi(0,5(h - 1 + \theta_{\Delta})). \quad (21)$$

Теперь в (20), (21) устремим  $\Delta$  к нулю, тогда

$$1 - h = (1 + \alpha_0)^{-1}, \quad (22)$$

$$w^2 = h^{-1}\varphi(0)\Phi(h - 1), \quad (23)$$

где  $\alpha_0$  — значение  $\alpha$  при вычислении среднеинтегральных значений по интервалу  $\zeta = 0 \div +\infty$ . Уравнения (22), (23) задают искомые значения величины  $h$  (т. е. температуры фронта волны) и скорости волны  $w$ . При найденных значениях  $h$ ,  $w$  профиль изменения глубины химического превращения находится на основании (10) (после перехода  $\Delta \rightarrow 0$ ) по уравнению

$$\eta = 1 - \exp(-\alpha_0\zeta), \quad (24)$$

а профиль температуры — на основании (12) по уравнению

$$\theta = -(1 + \alpha_0)^{-1} \exp(-\alpha_0\zeta). \quad (25)$$

## 2. ИНТЕГРИРОВАНИЕ УРАВНЕНИЙ В СЛУЧАЕ СИЛЬНОГО КИНЕТИЧЕСКОГО ТОРМОЖЕНИЯ

Перейдем от общего исследования уравнений (1), (2) с достаточно произвольными функциями  $\varphi(\eta)$ ,  $\Phi(\theta)$  к анализу этих уравнений с конкретными функциями  $\varphi(\eta)$ ,  $\Phi(\theta)$ , отвечающих идеальному твердопламенному горению в случае сильного кинетического торможения слоем тугоплавкого продукта реакции. Пусть

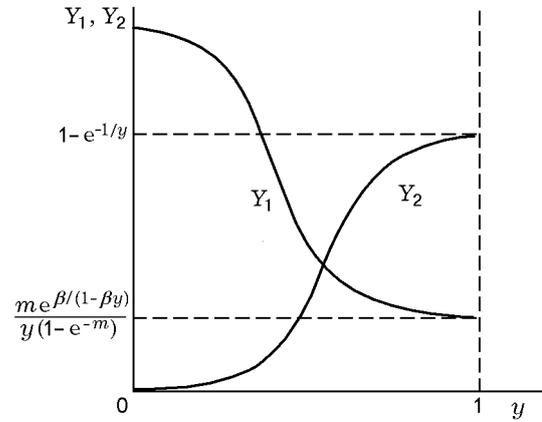


Рис. 2. Графики функций  $Y_1(y)$  и  $Y_2(y)$

$$\Phi(\theta) = \exp \left\{ - \frac{E/R}{\theta(T_+ - T_0) + T_+} \right\}, \quad (26)$$

где  $E$  — энергия активации химической реакции,  $R$  — универсальная газовая постоянная. Функция  $\varphi(\eta)$  задается экспоненциальным законом, при котором торможение реакции выражено наиболее сильно [2]:

$$\varphi(\eta) = \exp(-m\eta), \quad (27)$$

где  $m$  — кинетический параметр автоторможения реакции.

Для того чтобы воспользоваться общими выражениями (22), (24), (25), необходимо вычислить среднеинтегральные значения  $\Phi(\theta)$ ,  $\varphi(\eta)$  на интервале  $0 \leq \zeta \leq +\infty$ . Преобразуя экспоненту в (26) по Д. А. Франк-Каменецкому, получим

$$\langle \Phi(\theta) \rangle_0 = (1 - h)^{-1} \times \\ \times \int_{h-1}^{\infty} \exp \left\{ - \frac{E/R}{\theta(T_+ - T_0) + T_+} \right\} d\theta = \\ = \frac{\gamma}{1 - h} \left( 1 - \exp \frac{h-1}{\gamma} \right) \exp(-\beta), \quad (28)$$

где  $\gamma = \frac{RT_+^2}{(T_+ - T_0)E}$ ,  $\beta = \frac{E}{RT_+}$ . Используя (27), находим

$$\langle \varphi(\eta) \rangle_0 = \int_0^1 \exp(-m\eta) d\eta = m^{-1}(1 - \exp(-m)). \quad (29)$$

Таким образом, с учетом (11), (28), (29) имеем

$$\alpha_0 = \gamma(1-h)^{-1}w^{-2}m^{-1}\left(1 - \exp\frac{h-1}{\gamma}\right) \times \exp(-\beta)(1 - \exp(-m)), \quad (30)$$

$$\varphi(0) = 1. \quad (31)$$

Из (26) следует, что

$$\Phi(h-1) = \exp\left(-\frac{\gamma\beta^2}{h-1+\gamma\beta}\right). \quad (32)$$

Подставляя (30)–(32) в (22)–(25), получим формулы для расчета температуры фронта, скорости волны и ее структуры. Подставляя (30) в (22) и (31), (32) в (23), имеем

$$hw^2m = \gamma\left(1 - \exp\frac{h-1}{\gamma}\right) \times (1 - \exp(-m)) \exp(-\beta), \quad (33)$$

$$w^2 = h^{-1} \exp\frac{\gamma\beta^2}{1-h-\beta\gamma}. \quad (34)$$

Исключим из (33) с помощью (34) величину  $w$  и получим одно уравнение для расчета  $h$ :

$$(1-y)Y_1 = (1-y)Y_2, \quad (35)$$

$$y = 1-h, \quad Y_1 = m\gamma^{-1} \exp\frac{y\beta}{y-\gamma\beta} \times (1 - \exp(-m))^{-1}, \quad Y_2 = 1 - \exp\left(-\frac{y}{\gamma}\right). \quad (36)$$

Уравнение (35) имеет один корень  $y = 1$ , т. е.  $h = 0$ . Однако этот корень следует отбросить, так как он приводит к бесконечному значению скорости волны горения. Корень уравнения (35), имеющий физический смысл, определяется пересечением функций  $Y_1, Y_2$  в интервале  $0 < y < 1$ . Из построения графиков этих функций (рис. 2) видно, что такое пересечение существует и единственно, если

$$1 - \exp\left(-\frac{1}{\gamma}\right) > m\gamma^{-1} \exp\frac{\beta}{1-\beta\gamma} \times (1 - \exp(-m))^{-1}. \quad (37)$$

Уравнения (34), (35) при отсутствии автоторможения переходят (после исключения множителей, содержащих  $m$ ) в уравнения для расчета температуры фронта волны и ее скорости,

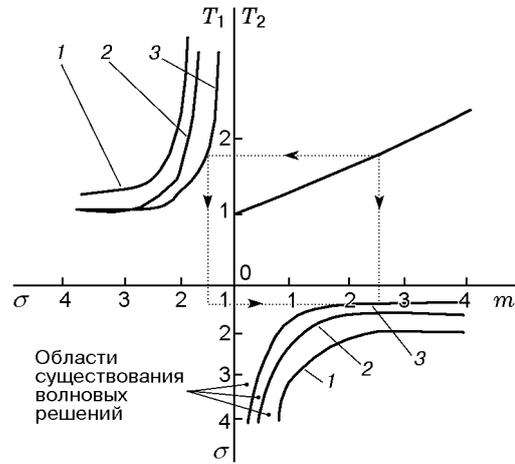


Рис. 3. Определение областей существования волновых решений:  
 $\nu = 0,5$  (1), 1 (2), 2 (3)

полученные в [3] методом полубесконечной зоны реакции для экзотермических химических реакций первого порядка. Таким же образом из (24), (25) с учетом (30) выводятся уравнения для расчета профилей температуры и глубины химического превращения в волнах химических реакций первого порядка. Количественное сравнение методов узкой и полубесконечной зоны реакции с результатами расчета нестационарных дифференциальных уравнений, проведенное в [4, 7], подтверждает преимущества метода полубесконечной зоны реакции.

### 3. ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ РЕШЕНИЙ

Для дальнейшего численного исследования удобно ввести управляющие параметры  $\sigma = 1 + T_0\bar{c}/q$ ,  $\nu = Rq/\bar{c}E$ . Тогда неравенство (37) можно записать в виде

$$\nu\sigma^2(1 - \exp(-\nu^{-1}\sigma^{-2})) \times \exp(-(\nu\sigma)^{-1}(\sigma - 1)^{-1}) > m(1 - \exp(-m))^{-1}. \quad (38)$$

Область существования волнового решения удобно исследовать с помощью диаграммы  $T_1(\sigma, \nu) - T_2(m)$ , где  $T_1, T_2$  — соответственно левая и правая части неравенства (38). На рис. 3 представлены результаты расчета функции  $T_1(\sigma)$  при  $\nu = 0,5; 1; 2$  и график функции  $T_2(m)$ . По результатам этих расчетов построены зависимости  $\sigma(m)$ , на которых при соответствующих значениях  $\nu$  неравенство (38)

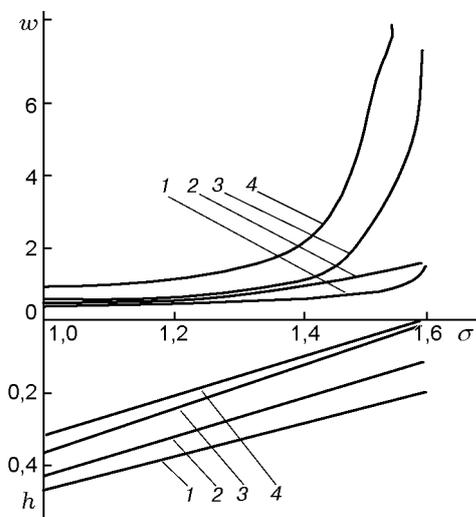


Рис. 4. Зависимости скорости волны и величины обрезки источника от управляющего параметра  $\sigma$ :

1 —  $\nu = 1, m = 0,5$ ; 2 —  $\nu = 1, m = 1$ ; 3 —  $\nu = 1, m = 2$ ; 4 —  $\nu = 2, m = 1$

превращается в равенство. Область значений, при которых  $\sigma$  меньше значений  $\sigma$  на зависимости  $\sigma(m)$  при соответствующем  $\nu$ , есть область существования волновых решений при данном  $\nu$ . Из рис. 3 следует, что чем меньше  $\nu$ , тем меньше область существования волновых решений. Увеличение  $m$  (усиление автоторможения) уменьшает диапазон значений управляющего параметра  $\sigma$ , при которых волновое решение существует.

На рис. 4 в качестве примера представлены результаты расчета скорости волны горения  $w$  и величины обрезки источника  $h$  при  $\nu = 1$  и  $m = 0,5$ ; 1; 2 в зависимости от  $\sigma$ . Видно, что при любом  $m$  рост начальной температуры (т. е.  $\sigma$ ) приводит к уменьшению  $h$ , т. е. к приближению температуры фронта волны к начальной температуре. Скорость волны при этом увеличивается. С приближением к границе области существования решений значения  $h$  стремится к нулю, а скорость волны неограниченно увеличивается. Возрастание параметра автоторможения  $m$  увеличивает скорость волны и уменьшает величину обрезки источника. Рост параметра  $\nu$ , т. е. энергии активации реакции, приводит к увеличению скорости волны и уменьшению величины обрезки источника (линия 4 на рис. 4). Уменьшение величины обрезки источника и соответствующее увеличение скорости волны сопровождаются резким

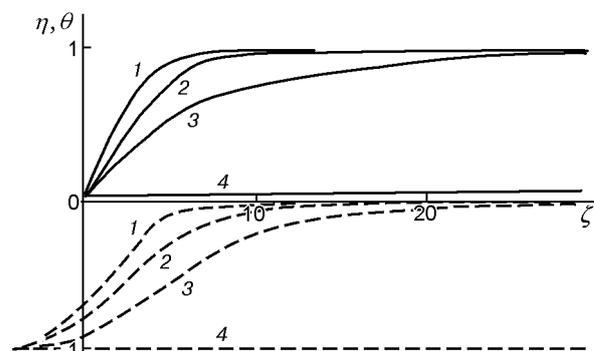


Рис. 5. Структура волны твердопламенного горения:

$m = 0$  (1), 0,5 (2), 1 (3), 2 (4), сплошные линии —  $\eta$ , штриховые —  $\theta$

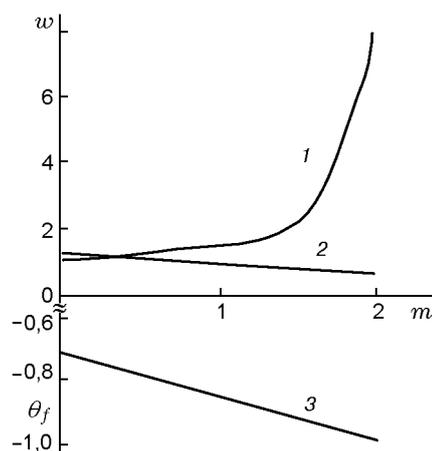


Рис. 6. Зависимость скорости и температуры фронта волны твердопламенного горения от параметра автоторможения:

1 — скорость волны, определенная методом полубесконечной зоны реакции; 2 — скорость волны, определенная методом узкой зоны реакции; 3 — температура фронта волны, определенная методом полубесконечной зоны реакции и численным интегрированием дифференциального уравнения (41)

растягиванием волны.

На рис. 5 представлены результаты расчета структуры волны при  $\sigma = 1,6$ ;  $\nu = 1$  и  $m = 0; 0,5; 1; 2$ . Из рис. 5 следует, что, несмотря на рост скорости волны при увеличении автоторможения, волна так сильно растягивается, что использовать ее можно только для образцов очень большой длины. На ограниченных образцах глубина химического превращения незначительна (линии 4 на рис. 5).

В качестве сравнения применим метод узкой зоны реакции для приближенного вычис-

ления скорости волны твердопламенного горения с экспоненциальным торможением и переменной поверхностью химического взаимодействия. Разделим уравнения (4), (16) друг на друга с учетом (26), (27):

$$\frac{d\eta}{d\theta} = \frac{1 - \eta}{\theta + 1 - \eta} w^{-2} \exp\left(-m\eta - \frac{1}{\nu(\theta + \sigma)}\right). \quad (39)$$

Положим в знаменателе правой части (39)  $\theta = 0$  (т. е.  $T = T_+$ ), тогда (39) легко интегрируется. В итоге находим

$$w^2 = \nu\sigma^2 m (\exp m - 1)^{-1} \exp(-1/(\nu\sigma)). \quad (40)$$

На рис. 6 приведены результаты расчета скорости волны твердопламенного горения в зависимости от параметра автоторможения по методу полубесконечной зоны реакции (линия 1) и методу узкой зоны реакции (линия 2) при  $\sigma = 1,6$ ,  $\nu = 1$ . Видно, что вычисленные этими методами зависимости скорости волны от параметра автоторможения имеют качественно различный характер и при увеличении  $m$  различие в значениях скорости становится очень большим.

Для проверки корректности метода полубесконечной зоны реакции уравнение (39) интегрировалось численно. Расчет начинался из особой точки по собственному направлению этой точки

$$\frac{d\eta}{d\theta} = 1 + w^{-2} \exp(-m - \nu^{-1}\sigma^{-1}) \quad (41)$$

и продолжался до тех пор пока  $\eta$  не достигало нуля. Значение  $\theta$ , отвечающее  $\eta = 0$ , соответствует температуре фронта волны. Задавая в (39), (41) значение скорости  $w$ , найденное методом полубесконечной зоны реакции при определенных значениях  $m$ ,  $\theta$ ,  $\nu$ , можно рассчитать по дифференциальному уравнению (39) температуру фронта волны и сравнить ее с температурой фронта волны, полученной из приближенного аналитического решения. На рис. 6 представлены результаты расчета температуры фронта волны (линия 3) при  $\nu = 1$ ,  $\sigma = 1,6$  в зависимости от параметра  $m$ . Линия 3 отвечает результатам расчета как по дифференциальному уравнению (39), так и по алгебраическому уравнению (35), которые в масштабе рисунка неотличимы. Отметим, что при увеличении  $m$  и соответствующем увеличении  $w$  собственное направление (41) приближается к 1, т. е. к нулевой изоклине уравнения (6)

(штриховая прямая на рис. 1). В этих условиях расчет уравнения (41) на компьютере становится затруднительным, так как любое конечное изменение фазовых координат может привести к перескоку через нулевую изоклину и изменению знака производной  $d\eta/d\theta$ . Однако в точном решении, если оно проходит через особую точку  $b$ , знак производной  $d\eta/d\theta$  не меняется. В этом случае после выхода из точки  $b$  по собственному направлению необходимо перейти от численного интегрирования (39) к расчету по уравнению  $\theta + 1 - \eta = w^{-2} \exp(-\nu^{-1}(\theta + \sigma)^{-1})$ . Оно описывает решение, расположенное в окрестности нулевой изоклины, слева от нее.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Построена математическая модель волны идеального твердопламенного горения с переменной поверхностью химического взаимодействия. Проведенные исследования свидетельствуют, что полученные решения верно описывают влияние автоторможения на основные характеристики распространения волны твердопламенного горения. Важно отметить, что стационарная волна твердопламенного горения существует при ограниченных значениях параметра  $m$ . Анализируя данные рис. 3, можно записать приближенное неравенство, необходимое для существования стационарной волны:  $m \leq (\sigma - 1)^{-1} \nu^{-1} = E/RT_0$ . Это принципиально отличает данную модель от модели [1], не учитывающей изменение поверхности химического взаимодействия в процессе реакции. В [1] именно для больших значений параметра  $m$  получено асимптотическое выражение для скорости волны.

Автор выражает благодарность А. Г. Мержанову за поддержку работы и ценные замечания.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Алдушин А. П., Мартемьянова Т. М., Мержанов А. Г. и др. Распространение фронта экзотермической реакции в конденсированных смесях при взаимодействии компонент через слой тугоплавкого продукта // Физика горения и взрыва. 1972. Т. 8, № 2. С. 202–212.
2. Мержанов А. Г. Твердопламенное горение. Черноголовка: Изд-во ИСМАН, 2000.
3. Жижин Г. В. Макрокинетика в реакторах фронтальной полимеризации. СПб.: Политехника, 1992.

4. **Жижин Г. В.** Математические модели волн радикальной полимеризации. СПб.: Изд-во СЗПИ, 1997.
5. **Браун М., Доллимор Д., Галвей А.** Реакции твердых тел. М.: Мир, 1983.
6. **Зельдович Я. Б., Франк-Каменецкий Д. А.** Теория теплового распространения пламени // Журн. физ. химии. 1938. Т. 12, № 1. С. 100–105.
7. **Жижин Г. В., Порицкая И. Я.** Саморегулируемые волны экзотермических химических реакций  $n$ -го порядка в конденсированных средах // Физика горения и взрыва. 1994. Т. 30, № 6. С. 61–68.

*Поступила в редакцию 21/І 2003 г.,  
в окончательном варианте — 14/V 2003 г.*

---