

УДК 536.2(075)

ИССЛЕДОВАНИЕ СИЛЬНОНЕРАВНОВЕСНОЙ МОДЕЛИ ТЕПЛООВОГО ВОСПЛАМЕНЕНИЯ С УЧЕТОМ ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННОЙ НЕЛОКАЛЬНОСТИ

В. А. Кудинов, А. В. Ерёмин, И. В. Кудинов, В. В. Жуков

Самарский государственный технический университет, 443100 Самара, totig@yandex.ru

На основе модифицированного закона Фурье с учетом релаксации теплового потока и скалярной величины градиента температуры, разработана математическая модель локально-неравновесного процесса теплового воспламенения систем с экспоненциально изменяющимся от температуры внутренним источником тепла. Выполненные исследования при граничных условиях первого рода показали, что учет пространственно-временной нелокальности приводит к возрастанию времени задержки теплового воспламенения. Кроме того, показано, что при учете релаксационных свойств материала граничные условия не могут быть приняты мгновенно, а лишь по истечении определенного времени. Следовательно, количество теплоты, подводимой к системе, имеет предел, зависящий от физических (в том числе и релаксационных) свойств среды.

Ключевые слова: локально-неравновесный теплообмен, время релаксации, нелинейный источник тепла, тепловое воспламенение, время задержки теплового воспламенения, численное решение.

DOI 10.15372/FGV20180603

Основным содержанием теории теплового воспламенения (теплового взрыва) является математическое исследование температурного состояния системы при протекании химических реакций, которое позволяет определить критические условия и время задержки теплового воспламенения [1–3]. Известные модели теплового воспламенения основаны на параболических уравнениях теплопроводности, полученных без учета пространственно-временной нелокальности. Известно, что классические модели теплопроводности основаны на принципе локального термодинамического равновесия и гипотезе сплошной среды. Согласно этому принципу в любом малом элементе среды предполагается локальное равновесие, тогда как в системе в целом наблюдаются градиенты потенциалов исследуемых полей. Такое состояние возможно лишь в случае, когда скорость нарушения равновесия, вызванного граничными условиями, значительно меньше скорости релаксации системы к локальному равновесию.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках базовой части государственного задания ФГБОУ ВО «СамГТУ» (проект № 1.5551.2017/8.9).

©Кудинов В. А., Ерёмин А. В., Кудинов И. В., Жуков В. В., 2018.

В связи с этим в математические модели, использующие принцип локального равновесия и гипотезу сплошной среды, заложена бесконечная скорость распространения тепла. Это связано с использованием в этих моделях закона Фурье для теплового потока

$$q = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x}, \quad (1)$$

в котором градиент температуры $\frac{\partial T}{\partial x}$ и тепловой поток q не разделены во времени (x — координата, λ — коэффициент теплопроводности). Согласно (1) любое изменение градиента температуры вызывает мгновенное изменение теплового потока. Из этой формулы следует также, что при граничных условиях первого рода тепловой поток на стенке в начальный момент времени устремляется к бесконечности. Так как в реальных процессах не могут возникать бесконечные значения каких-либо параметров, то дифференциальные уравнения, выведенные на основе формулы (1), будут адекватны этим процессам лишь в определенном пространственно-временном диапазоне. Известно, что параболические уравнения неадекватно описывают как быстропротекающие процессы, длительность которых сопоста-

вима с временем релаксации, так и температурное состояние тел, наблюдаемое при сверхмалых значениях временной и пространственной переменных, в любых тепловых процессах [2–13]. Следовательно, такие уравнения являются локальными.

Поскольку предметом исследования теории воспламенения являются критические условия и время задержки теплового воспламенения, отсчитываемое непосредственно от начала прогрева, а данные процессы относятся к быстропротекающим, то неучитывание пространственно-временной нелокальности в математических моделях может привести к отличию получаемых параметров от их действительных значений.

Для вывода дифференциального уравнения теплового воспламенения с учетом локальной неравновесности представим формулу (1) таким образом, чтобы в ней было учтено ускорение во времени как теплового потока, так и скалярной величины градиента температуры [4, 11–13]:

$$q = -\lambda \left(\frac{\partial T}{\partial x} + \tau_1 \frac{\partial^2 T}{\partial x \partial t} \right) - \tau_1 \frac{\partial q}{\partial t}, \quad (2)$$

где t — время, τ_1 — время релаксации теплового потока и скалярной величины градиента температуры. Подставляя (2) в уравнение теплового баланса

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} + \omega(T) = 0, \quad (3)$$

находим

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \lambda \tau_1 \frac{\partial^3 T}{\partial x^2 \partial t} + \tau_1 \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial q}{\partial x} \right) + \omega(T), \quad (4)$$

где $\omega(T) = Q\rho k_0 \exp(-E/(RT))$ — мощность внутреннего источника тепла, Q — тепловой эффект реакции, ρ — плотность, c — теплоемкость, k_0 — предэкспоненциальный множитель, E — энергия активации, R — универсальная газовая постоянная. Выражая $\frac{\partial q}{\partial x}$ из (3) и подставляя в (4), получаем

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \lambda \tau_1 \frac{\partial^3 T}{\partial x^2 \partial t} - \tau_1 \frac{\partial}{\partial t} \left[c\rho \frac{\partial T}{\partial t} + Q\rho k_0 \exp \left(-\frac{E}{RT} \right) \right] +$$

$$+ Q\rho k_0 \exp \left(-\frac{E}{RT} \right). \quad (5)$$

Определив производные в третьем слагаемом правой части уравнения (5), будем иметь

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} + \tau_1 \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} &= \\ &= a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \tau_1 a \frac{\partial^3 T}{\partial x^2 \partial t} + \frac{Qk_0}{c} \exp \left(-\frac{E}{RT} \right) - \\ &\quad - \frac{\tau_1 Qk_0 E}{cRT^2} \exp \left(-\frac{E}{RT} \right) \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (6) \end{aligned}$$

где $a = \lambda/(c\rho)$ — коэффициент температуропроводности.

Очевидно, что при $\tau_1 = 0$ уравнение (6) приводится к классическому параболическому уравнению теплопроводности с нелинейным источником тепла:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{Qk_0}{c} \exp \left(-\frac{E}{RT} \right). \quad (7)$$

Краевые условия к уравнению (6) при зажигании тонкой пластины при несимметричных граничных условиях имеют вид [3]:

$$T(x, 0) = T_0, \quad (8)$$

$$\frac{\partial T(x, 0)}{\partial t} = 0, \quad (9)$$

$$T(0, t) = T_w, \quad (10)$$

$$T(L, t) = T_0, \quad (11)$$

где T_0 — начальная температура, T_w — температура стенки ($T_w > T_0$), L — толщина пластины.

Математическая модель (6), (8)–(11) соответствует физическому процессу зажигания конденсированного вещества горячим телом с температурой T_w (рис. 1) [3].

Введем, в соответствии с [1, 3], следующие безразмерные переменные и параметры:

$$\begin{aligned} \tau &= \frac{t}{t_a}, \quad t_a = \frac{cRT_w^2}{EQk_0} \exp \frac{E}{RT_w^2}, \\ \xi &= \frac{x}{x_a}, \quad x_a = \sqrt{at_a}, \quad (12) \end{aligned}$$

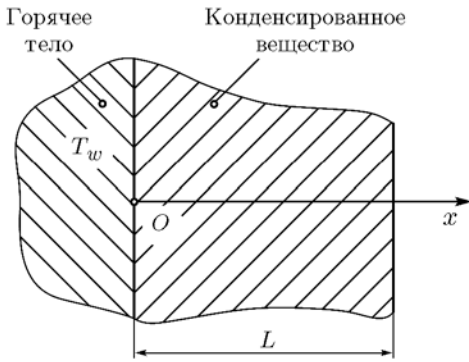


Рис. 1. Схема теплообмена

$$\Theta = \frac{E}{RT_w^2}(T - T_w), \quad \beta = \frac{RT_w}{E}, \quad \text{Fo}_1 = \frac{\tau_1}{t_a},$$

где Θ , τ , ξ — соответственно безразмерные температура, время, координата; t_a , x_a — временной и пространственный масштабы; Fo_1 — безразмерное время релаксации; $\beta = RT_w/E$ — степень зависимости скорости химической реакции от температуры [3].

С учетом обозначений (12) задача (6), (8)–(11) принимает вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Theta}{\partial \tau} + \text{Fo}_1 \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \tau^2} &= \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \xi^2} + \text{Fo}_1 \frac{\partial^3 \Theta}{\partial \xi^2 \partial \tau} + \\ &+ \exp\left(\frac{\Theta}{\beta\Theta + 1}\right) - \text{Fo}_1 \exp\left(\frac{\Theta}{\beta\Theta + 1}\right) \frac{\partial \Theta}{\partial \tau} \end{aligned} \quad (0 \leq \xi \leq \xi_0, \tau > 0), \quad (13)$$

$$\Theta(\xi, 0) = \Theta_0, \quad (14)$$

$$\frac{\partial \Theta(\xi, 0)}{\partial \tau} = 0, \quad (15)$$

$$\Theta(0, \tau) = 0, \quad (16)$$

$$\Theta(\xi_0, \tau) = \Theta_0, \quad (17)$$

где $\xi_0 = \sqrt{\delta}$; $\delta = L^2/x_a^2$ — параметр Франк-Каменецкого; $\Theta_0 = \frac{E}{RT_w^2}(T_0 - T_w)$.

В уравнении (13) содержится слагаемое (последнее в правой части), представляющее источник тепла с отрицательным знаком. Следовательно, в данной модели действие источника тепла, связанного с протеканием химической реакции, ослабляется действием источника, связанного с учетом релаксационных свойств материала.

Для решения задачи (13)–(17) методом конечных разностей в рассматриваемой области вводилась пространственно-временная сетка с шагами $\Delta\xi$, $\Delta\tau$ соответственно по переменным ξ и τ :

$$\xi_k = k\Delta\xi, \quad k = \overline{0, K}; \quad \tau_i = i\Delta\tau, \quad i = \overline{0, I}, \quad (18)$$

где K , I — число шагов по координатам ξ , τ . На сетке (18) вводились сеточные функции $\Theta_k^i = \Theta(\xi_k, \tau_i)$. Используя явную схему аппроксимации дифференциальных операторов, задачу (13)–(17) можно записать в виде:

$$\begin{aligned} \frac{\Theta_k^i - \Theta_k^{i-1}}{\Delta\tau} + \text{Fo}_1 \frac{\Theta_k^{i+1} - 2\Theta_k^i + \Theta_k^{i-1}}{\Delta\tau^2} &= \\ &= \frac{\Theta_{k-1}^i - 2\Theta_k^i + \Theta_{k+1}^i}{\Delta\xi^2} + \text{Fo}_1 \times \\ &\times \frac{\Theta_{k-1}^i - 2\Theta_k^i + \Theta_{k+1}^i - \Theta_{k-1}^{i-1} + 2\Theta_k^{i-1} - \Theta_{k+1}^{i-1}}{\Delta\tau\Delta\xi^2} + \\ &+ \exp\left(\frac{\Theta_k^i}{\beta\Theta_k^i + 1}\right) - \text{Fo}_1 \exp\left(\frac{\Theta_k^i}{\beta\Theta_k^i + 1}\right) \frac{\Theta_k^i - \Theta_k^{i-1}}{\Delta\tau} \end{aligned} \quad (\tau > 0; 0 < \xi < \xi_0), \quad (19)$$

$$\Theta_k^0 = \Theta_0, \quad (20)$$

$$\frac{\Theta_k^1 - \Theta_k^0}{\Delta\tau} = 0, \quad (21)$$

$$\Theta_0^i = 0, \quad (22)$$

$$\Theta_K^i = \Theta_0. \quad (23)$$

При решении задачи (19)–(23) использовались следующие исходные данные [3]: $E = 35$ ккал/моль; $Qk_0 = 2.45 \cdot 10^{16}$ кал/(г·моль); $\lambda = 5.6 \cdot 10^{-4}$ кал/(см·с·К); $c = 0.35$ кал/(моль·К); $Q = 270$ кал/г; $T_0 = 300$ К; $T_w = 553$ К; $\rho = 1.6$ г/см³; $L = 7.38 \cdot 10^{-4}$ м.

На рис. 2, 3 приведены распределения температуры по толщине пластины при различных значениях безразмерного времени в случае, когда релаксационные свойства материала не учитываются ($\text{Fo}_1 = 0$). Из анализа рис. 2

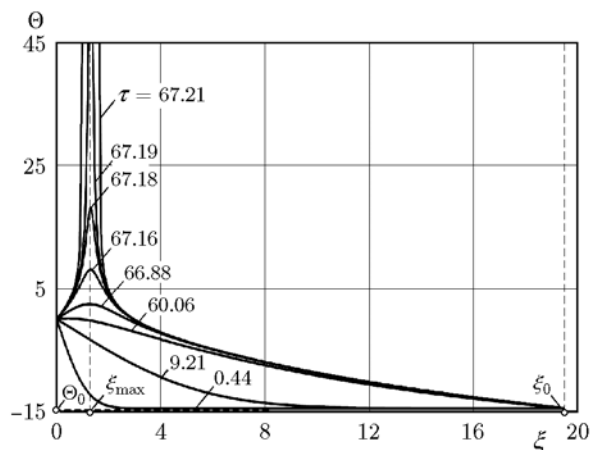


Рис. 2. Распределение температуры в пластине ($Fo_1 = 0$) в диапазоне $\xi = 0 \div 20$

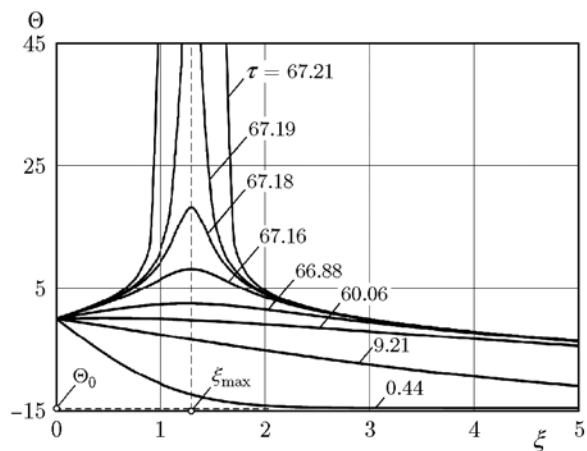


Рис. 3. Распределение температуры в пластине ($Fo_1 = 0$) в диапазоне $\xi = 0 \div 5$

следует, что после установления теплового равновесия $\frac{\partial \Theta(0, \tau_0)}{\partial \xi} = 0$ поверхностные слои пластины за небольшой период времени прогреваются выше температуры стенки нагревателя T_w . После этого нагреватель оказывается не источником тепла, а его стоком и координата максимума температур смещается от $\xi = 0$ до $\xi = \xi_{\max} = 1.37$.

Рис. 4 иллюстрирует изменение температуры во времени в отдельных точках пространственной переменной. В момент времени $\tau_{ign\infty} = 67.2$ происходит загорание вещества и далее температура неограниченно возрастает. Полученные результаты полностью согласуются с решениями [3], расхождение не превышает 0.1 %.

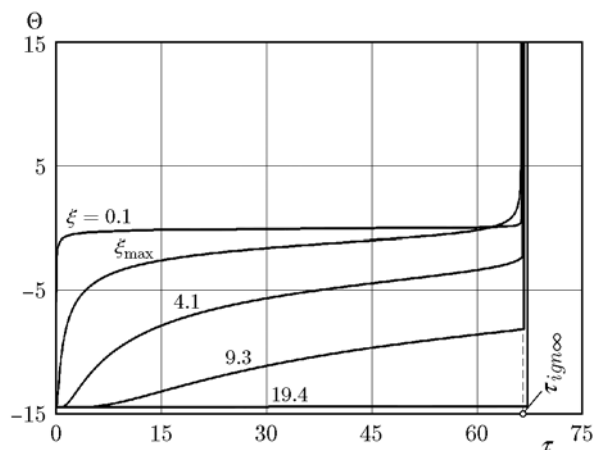


Рис. 4. Изменение температуры пластины во времени ($Fo_1 = 0$)

Результаты расчетов температуры с учетом релаксационных свойств вещества ($Fo_1 \neq 0$) приведены на рис. 5. Величина коэффициента релаксации оказывает существенное влияние на время задержки зажигания. Так, при $Fo_1 = 0.35$ ($\tau_1 = 0.005$ с) время задержки теплового воспламенения увеличивается на $\Delta\tau_{ign\infty} = 40.5$ ($\Delta t_{ign\infty} = 1.54$ с) по сравнению со случаем, когда релаксационные свойства материала не учитываются. Результаты исследований показали, что учет релаксационных свойств материалов приводит к невозможности мгновенного принятия граничных условий на стенке ($\xi = 0$), этот процесс занимает некоторый период времени $0 \leq \tau \leq \tau^*$. В частности, при $Fo_1 = 0.35$ время принятия граничного условия составляет $Fo^* \approx 0.8$.

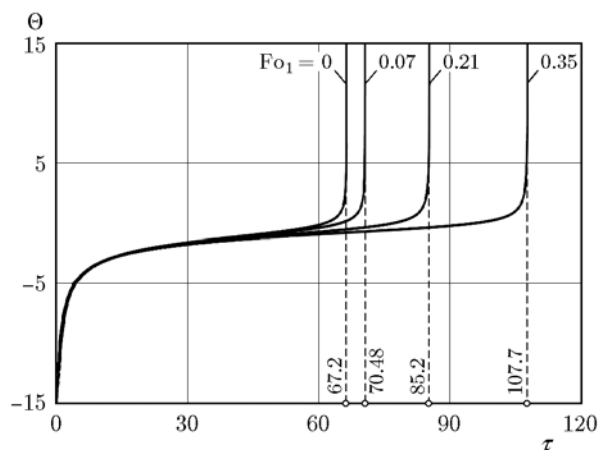


Рис. 5. Изменение температуры во времени в точке ξ_{\max} при различных значениях Fo_1

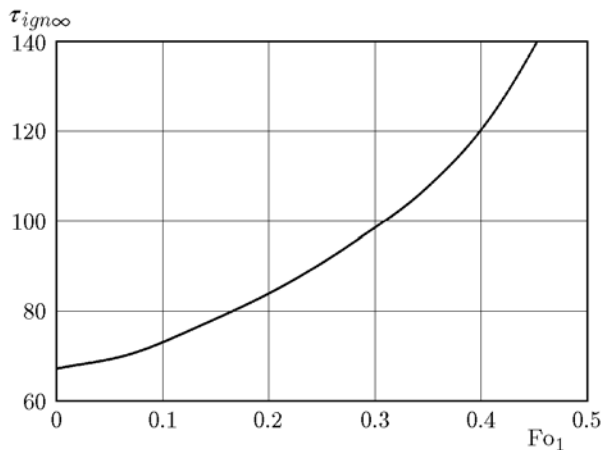


Рис. 6. Зависимость времени зажигания от коэффициента релаксации

Отсюда следует, что граничные условия первого рода (тепловой удар) не могут быть установлены мгновенно ни при каких условиях теплообмена с окружающей средой.

Зависимость времени задержки теплового воспламенения $\tau_{ign\infty}$ от коэффициента релаксации Fo_1 представлена на рис. 6. Видно, что она имеет нелинейный характер, причем с увеличением коэффициента релаксации время задержки теплового воспламенения увеличивается.

ВЫВОДЫ

1. С учетом ускорения во времени теплового потока и градиента температуры в законе Фурье разработана математическая модель теплового воспламенения в пластине с нелинейным (экспоненциально зависящим от температуры) источником тепла при граничных условиях первого рода с учетом пространственно-временной нелокальности.

2. Численные исследования полученной модели показали существенную зависимость времени задержки теплового воспламенения от релаксационных свойств материала. Этот факт объясняется тем, что ввиду тепловой инерционности материалов тепловой поток на стенке возрастает от нулевого значения в начальный момент времени до значения, задаваемого граничным условием первого рода, в течение некоторого конечного временного интервала.

ЛИТЕРАТУРА

1. Франк-Каменецкий Д. А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. — 2-е изд. — М.: Наука, 1967.
2. Мержанов А. Г., Дубовицкий Ф. И. Современное состояние теории теплового взрыва // Успехи химии. — 1966. — Т. 35, вып. 4. — С. 656–682.
3. Виллюнов В. Н. Теория зажигания конденсированных веществ. — Новосибирск: Наука, 1984.
4. Кудинов В. А., Кудинов И. В. Исследование теплопроводности с учетом конечной скорости распространения теплоты // Теплофизика высоких температур. — 2013. — Т. 51, № 2. — С. 301–310.
5. Соболев С. Л. Процессы переноса и бегущие волны в локально-неравновесных системах // Успехи физ. наук. — 1991. — Т. 161, № 3. — С. 5–29.
6. Соболев С. Л. Локально-неравновесные модели процессов переноса // Успехи физ. наук. — 1997. — Т. 167, № 10. — С. 1096–1106.
7. Жоу Д., Касас-Баскес Х., Лебон Дж. Расширенная необратимая термодинамика. — М.; Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2006.
8. Sobolev S. L. Nonlocal diffusion models: Application to rapid solidification of binary mixtures // Intern. J. Heat Mass Transfer. — 2014. — V. 71. — P. 295–302.
9. Дэй У. А. Термодинамика простых сред с памятью. — М.: Мир, 1986.
10. Петров Н., Бранное И. Современные проблемы термодинамики. — М.: Мир, 1986.
11. Бубнов В. А. Замечания к волновым уравнениям теории теплопроводности // Инж.-физ. журн. — 1975. — Т. 28. — С. 670–676.
12. Ерёмин А. В., Кудинов В. А., Кудинов И. В. Математическая модель теплообмена в жидкости с учетом ее релаксационных свойств // Изв. РАН. Механика жидкости и газа. — 2016. — № 1. — С. 33–44.
13. Кудинов В. А., Кудинов И. В. Получение точных аналитических решений гиперболических уравнений движения при разгонном течении Куэтта // Изв. РАН. Энергетика. — 2012. — № 1. — С. 119–133.

Поступила в редакцию 16/XI 2017 г.,
в окончательном варианте — 29/I 2018 г.