

**О ЗАКОНОМЕРНОСТЯХ СПИНОВОГО РЕЖИМА  
РАСПРОСТРАНЕНИЯ ФРОНТА ГОРЕНИЯ**

*Т. П. Ивлева, А. Г. Мержанов, К. Г. Шкадинский*  
(Черноголовка)

Спиновый режим распространения фронта экзотермической реакции представляет собой одно из интереснейших явлений, обнаруженных в последнее время при экспериментальном исследовании горения конденсированных систем. При поджигании цилиндрических образцов из порошка металла в среде азота и смеси азота с инертным газом в определенных условиях возникает спиновая форма распространения волны химической реакции [1—3]. На боковой поверхности формируется светящееся пятно (очаг), движущееся по поверхности образца от места возникновения до конца горения по спирали. Из эксперимента следует, что спиновой режим представляет собой разновидность поверхностного горения и реализуется вблизи пределов погасания.

В работе [4] предложена теоретическая модель такого процесса. Поверхностное горение моделируется безгазовым горением цилиндрической прослойки. Модель содержит наиболее существенные элементы, обуславившие распространение фронта реакции в спиновом режиме. При построении модели учитывались экспериментальные данные и результаты цикла теоретических работ [5—7], касающихся закономерностей одномерного горения рассматриваемых сред. В данной работе проведено исследование некоторых закономерностей спинового горения, вытекающих из модели [4].

Рассмотрим поведение цилиндрической прослойки, или, что то же самое, тонкой приповерхностной части цилиндрического образца, горящего в поверхностном режиме. Усредняя по толщине и учитывая влияние окружающей среды через теплопотери (подобно [8]), изучим распределение температуры и глубины превращения на цилиндрической поверхности. Для удобства анализа микрокинетику экзотермического превращения рассмотрим в простейшем виде. Математическая модель рассматриваемого явления запишется в следующем виде:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Theta}{\partial \tau} &= \frac{\partial^2 \Theta}{\partial x^2} + \nu \cdot \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \varphi^2} - \alpha(\Theta - \Theta_n) + (1 - \eta) \exp[\Theta/(1 + \beta\Theta)], \\ \frac{\partial \eta}{\partial \tau} &= \gamma(1 - \eta) \exp[\Theta/(1 + \beta\Theta)]. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь  $\Theta = (T - T_*) E/RT_*^2$  — безразмерная температура;  $\eta$  — глубина превращения;  $\tau = t/t_*$  — безразмерное время;  $x = z\sqrt{c\rho/\lambda t_*}$ ;  $\varphi$  — координаты;  $t_* = \frac{cRT_*^2}{QE k} \exp(E/RT_*)$ ;  $\beta = RT_*/E$ ,  $\gamma = \frac{cRT_*^2}{QE}$ ,  $\nu = \frac{\lambda t_*}{\pi^2 c\rho d^2}$  — безразмерные параметры;  $\alpha$  — характеризует теплоотвод. Размерные переменные имеют общепринятые обозначения:  $T$  — температура;  $E$  — энергия активации;  $R$  — универсальная постоянная;  $k$  — предэкспоненциальный множитель;  $T_*$  — характерная температура;  $c$  — удельная теплоемкость;  $\rho$  — плотность;  $\lambda$  — коэффициент теплопроводности;  $Q$  — тепло-

вой эффект;  $t$  — время;  $z$  — координата;  $d$  — диаметр цилиндрического образца.

Решение системы (1) определяется в полуполосе  $x > 0$ ,  $0 \leq \varphi < 1$ ,  $\tau > 0$  и удовлетворяет следующим краевым и начальным условиям:

$$\begin{aligned} \text{условие периодичности} & - \Theta(x, \varphi, \tau) = \Theta(x, \varphi + 1, \tau), \quad \eta(x, \varphi, \tau) = \\ & = \eta(x, \varphi + 1, \tau); \\ \text{условие на торце} & - \Theta(0, \varphi, \tau) = \Theta_n + 1/\gamma; \\ \text{начальные условия} & - \Theta(x, \varphi, 0) = \Theta_0(x, \varphi), \quad \eta(x, \varphi, 0) = \eta_0(x, \varphi). \end{aligned}$$

**Метод численного решения.** Сформулированная выше математическая модель представляет собой систему двумерных нелинейных уравнений в частных производных; для исследования свойств ее решений применяются численные методы. При построении разностного аналога (1) учитывался опыт решения аналогичных одномерных задач и методы решения многомерных параболических уравнений [9]. Использовалась неявная, консервативная, двумерная разностная схема и метод перекрестной прогонки для решения соответствующей системы уравнений. При этом из-за периодичности по одному из направлений применялся метод циклической прогонки [10]. Специфическая особенность данной задачи — фронтальный характер; имеется относительно узкий слой, где происходит фактическое изменение решения во времени. Обеспечить качественный численный расчет удается благодаря применению алгоритма построения подвижной, неравномерной, адаптирующейся к решению пространственной сетки [11].

**Начальные данные.** Рассмотрим установившиеся режимы распространения фронта химической реакции. Это не обязательно стационарные режимы, наибольший интерес представляют динамические режимы. Установление понимается в смысле установления характера развития процесса (стационарного или периодического) и в том смысле, что характеристики процесса уже не зависят от способа иницирования реакции (некоторое уточнение последнего требования будет дано ниже). С целью сокращения времени выхода на установившийся режим, а следовательно, и сокращения времени счета на ЭВМ начальные данные выбирались по следующей схеме. Сначала независимо определялся одномерный фронт горения (он мог быть и неустойчивым) и в качестве начальных данных использовались соответствующие значения температуры и глубины превращения, отвечающие одномерному фронту, но при этом сама поверхность фронта возмущалась по поперечной координате. Выбранная схема задания начальных данных позволяет эффективно определять установившиеся режимы, исследовать их асимптотическую устойчивость относительно возмущений условий иницирования.

При задании начальных данных предусматривалось отсутствие периодичности по поперечной координате с периодом, меньшим периметра цилиндрической поверхности. Это замечание связано с тем, что численный алгоритм обеспечивает хорошее сохранение периодичности и будут получаться установившиеся режимы, отвечающие меньшему периметру, в то время как объединение таких решений в одно может оказаться неустановившимся (из-за неустойчивости) для цилиндрической поверхности с суммарным периметром.

Аналогичное соображение можно высказать относительно начальных данных, удовлетворяющих условиям четности. Все возможные начальные данные делятся на две группы (например, если  $\Theta_0(x, \varphi)$  принадлежит первой группе, то  $\Theta_0(x, 1 - \varphi)$  — второй), соответственно приводящие к двум устойчивым установившимся режимам распространения фронта, (подробно левой и правой нарезке). В этом смысле начальные данные, обладающие условиями четности, лежат на границе этих двух групп. В качестве примера приведена четность относительно  $\varphi = 0,5$ , фактически же условия четности понимаются шире, так как на цилиндрической поверхности имеется произвол в выборе начала отсчета координаты  $\varphi$ .

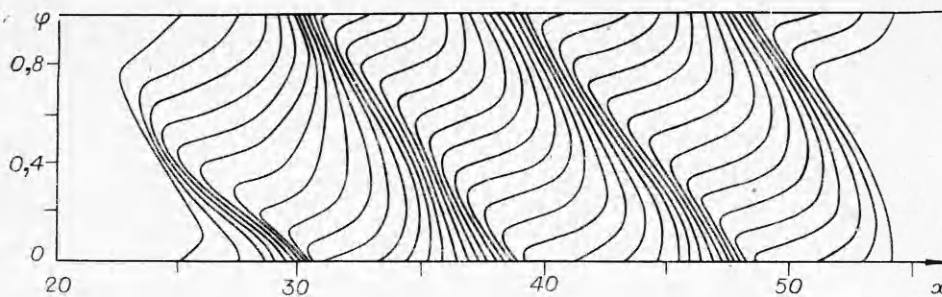


Рис. 1. Пространственно-временное положение фронта горения в спиновом режиме распространения ( $\nu=10^{-3}$ ,  $\alpha=10^{-3}$ ,  $\Theta_{II}=-9,5$ ,  $\beta=0,03$ ,  $\gamma=0,08$ ).

**Спиновый режим горения.** Рассматриваемая математическая модель (1) в зависимости от значений определяющих параметров описывает либо одномерный (стационарный или пульсирующий) режим горения, либо спиновый. Стационарный [12] и пульсирующий [5] режимы ранее изучены и в дальнейшем основное внимание уделяется спиновому режиму. Как будет видно ниже, режим спинового горения может трактоваться как проявление двумерной неустойчивости поверхностного горения. Возможность потери устойчивости стационарного горения подобных систем методом малых возмущений рассматривалась в [13—16]. Представляет большой интерес режим распространения фронта горения, на который выходит неустойчивый стационарный фронт.

При пульсирующем режиме горение осуществляется путем последовательного чередования «вспышек» и «депрессий» (см. [5]). Если структуру фронта в момент «депрессии» возмутить на некотором участке локальной вспышкой, то на фоне исходного фронта образуется новый нестационарный фронт, которому предпочтительно распространяться в поперечном направлении относительно направления движения первоначального фронта. В этом направлении перед нестационарным фронтом расположена зона с повышенной температурой и практически непрореагировавшим исходным веществом. Нестационарное горение в направлении движения первоначального фронта быстро замедляется и затухает из-за падения температуры перед нестационарным фронтом, увеличения теплоотвода потери устойчивости и перехода в состояние «депрессии», в течение которой подготавливается новый прогретый слой. При одних условиях сглаживание возмущения с восстановлением пульсирующего режима, при других нестационарный фронт превращается в распространяющийся по спирали высокотемпературный очаг.

Описанная физическая природа спинового режима хорошо подтверждается результатами численных расчетов. На рис. 1 представлено положение спинового фронта горения (за координаты фронта принималась изолиния с  $\eta=0,5$ ) в различные моменты времени с интервалом  $\Delta t=2,5$ . В этом случае взятый в качестве начальных данных искривленный одномерный фронт не спрямляется, а наоборот, стабилизируется к установившемуся спиновому режиму. Если рассмотреть пространственно-временное распределение температуры и глубины превращения в сечении  $\varphi = \text{const}$ , то оно очень похоже на распределение при пульсирующем горении, однако выход из состояния «депрессии» здесь обусловлен другими физическими факторами.

Внутренняя структура спинового режима также меняется в зависимости от определяющих параметров. Кроме левозаходных и правозаходных (что зависит от условий инициирования процесса) существуют двузаходные, трехзаходные и т. д. режимы горения (подобно резьбе). Указанные модификации спинового горения наблюдались и экспериментально. Существование многозаходных режимов легко понять из простых фи-

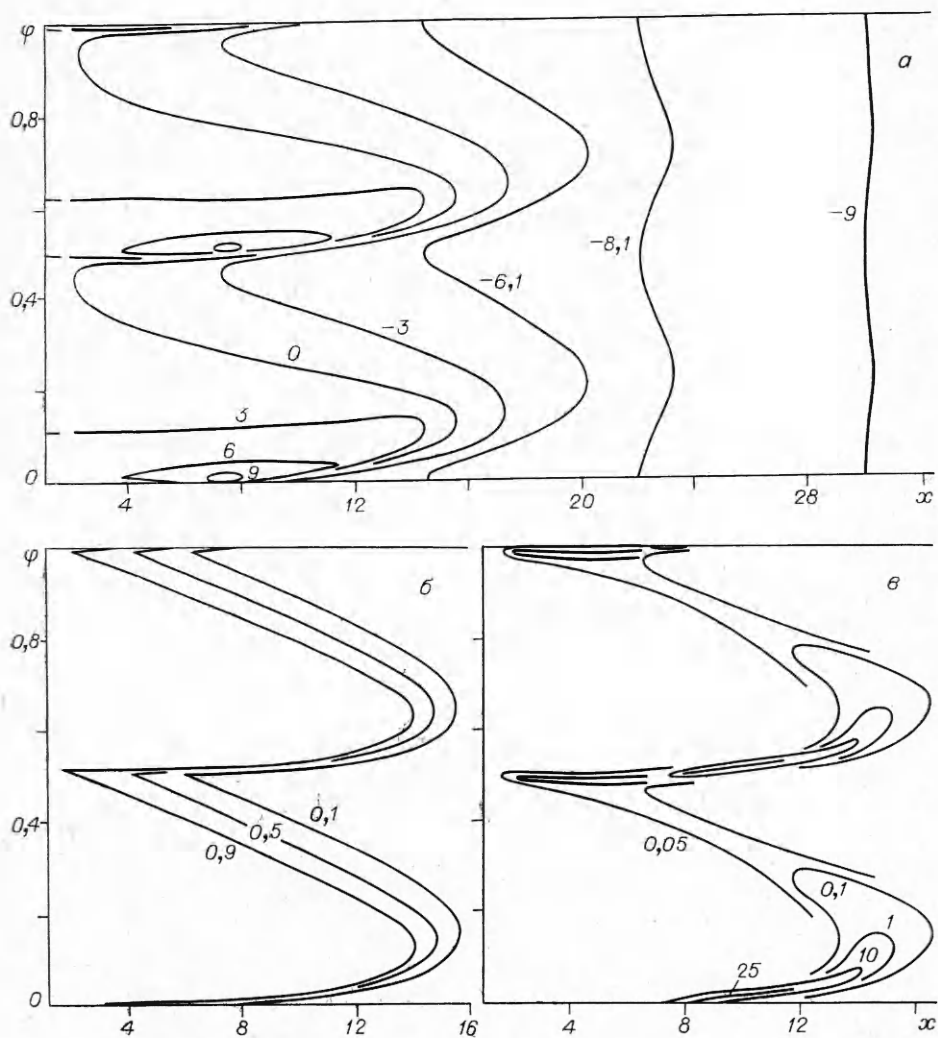


Рис. 2. Изотермы мгновенного состояния температурного поля (а), линии уровня глубины превращения (б) и уровня величины скорости тепловыделения (в), отвечающие двухзаходному спиральному режиму горения ( $\nu=0,5 \cdot 10^{-4}$ ,  $\alpha=0,195 \cdot 10^{-2}$ ,  $\Theta_n=-9,5$ ,  $\beta=0,08$ ,  $\gamma=0,08$ ).

зических соображений. Выше уже говорилось, что в процессе спирального горения в направлении оси образца нестационарный фронт попадает в состояние депрессии, подготавливая прогретый слой для нового витка спирали. Время прихода того же самого очага существенно зависит от величины периметра и увеличивается с его ростом. В то же время нестационарный фронт может сам выйти из состояния «депрессии» через определенный (практически независимый от периметра, согласно [5]) период времени. Следовательно, нельзя осуществить однозаходный спиральный режим на образцах с достаточно большим периметром. Реально устанавливаются многозаходные спиральные режимы с несколькими очагами. При этом если очаг в силу каких-либо возмущений несколько отстанет от другого (по сравнению с установившимся режимом), то перед ним образуется более развитый прогретый слой с более высокой температурой, что будет способствовать увеличению скорости распространения очага и устранению отставания. Аналогичные рассуждения справедливы, когда расстояние между очагами из-за возмущения сократилось.

Рассмотрим детально структуру фронта в фиксированный момент времени на примере двухзаходного спинового режима. На рис. 2, представлены характерные линии уровня поля температур, глубины превращения и скорости тепловыделения (значения функций характеризуются приведенными рядом цифрами). В отличие от обычного стационарного горения фронт горения в спиновом режиме имеет существенно более сложную структуру, для которой характерны следующие черты. По изотермам видно, что во фронте имеются высокотемпературные очаги, положение которых коррелировано с зонами повышенного тепловыделения. Очаги перемещаются по спирали, и их количество определяет число заходов спирали. Зона интенсивной химической реакции спинового фронта всегда существенно меньше зоны прогрева. Линия уровня  $\eta = 0,5$  в пределах точности расчетов совпадает с линией «главного водораздела» для поверхности скорости тепловыделения и может служить в качестве характеристики мгновенного положения нестационарного фронта. Подобное соответствие наблюдалось и в одномерном пульсирующем режиме горения. Линии уровня глубины превращения показывают, что очаги реакции распространяются по практически непрореагировавшему составу. Видно, что основное превращение вещества осуществляется в направлении спирали, вне очага скорость реакции быстро падает и линии уровня практически не меняют своего положения. В своей высокотемпературной части изотермы описывают очаги, тогда как скорость перемещения низкотемпературных изотерм характеризует среднюю скорость фронта.

**Понятие скорости перемещения фронта** для стационарного горения тривиально. Для пульсирующего и спинового режимов горения эта важная физическая характеристика требует более четкого определения. Как отмечалось в (5), пульсирующий режим удобно описывать двумя скоростями — средней и мгновенной. В качестве мгновенной скорости рассматривалась скорость перемещения максимума источника тепловыделения (практически точки, где  $\eta = 0,5$ ). В случае спинового горения удобно ввести в рассмотрение три скорости: среднюю, перемещения очага и мгновенную скорость перемещения линии фронта. Линию фронта удобно отождествлять с линией «главного водораздела» функции скорости тепловыделения (двумерный аналог точки максимума тепловыделения), которая хорошо совпадает с линией уровня  $\eta = 0,5$ . Каждая из введенных характеристик может оказаться удобной в конкретном случае, но наиболее информативна мгновенная скорость.

**Параметрическая зависимость.** Рассматриваемая модель (1) — многопараметрическая. Параметр  $\nu$  характеризует квадрат отношения характерной ширины стационарного фронта к периметру цилиндрического образца. С целью сокращения изучаемой параметрической области будем полагать, что  $\beta$  и  $\gamma$  близки, так как  $\gamma = \beta \bar{T}_* / (\bar{T}_r - T_n)$ , а  $T_* \approx T_r - T_n$ . Ограничимся также наиболее интересной областью значений параметров, где стационарный фронт горения неустойчив (см. [5, 16]). К сожалению, на исследования влияют еще и ограничения, обусловленные уровнем численного метода решения, особенно при изучении многозаходных режимов.

Рассмотрим влияние величины диаметра образца  $\nu$  на процесс горения. При малых периметрах наблюдается одномерное горение. В силу малых поперечных размеров температура и остальные характеристики успевают усредниться. В этом случае процесс протекает в соответствии с [5]; при больших  $\gamma$  наблюдается устойчивое стационарное горение, которое при уменьшении  $\gamma$  переходит в пульсирующее. С увеличением диаметра в области неустойчивости дискретно происходит усложнение режима горения. До определенного диаметра горение одномерное пульсирующее (оно может отсутствовать, о причинах будет сказано ниже). Затем осуществляются спиновые режимы с малой интенсивностью очага, по мере увеличения диаметра очаг становится все более выраженным. Однако после опреде-

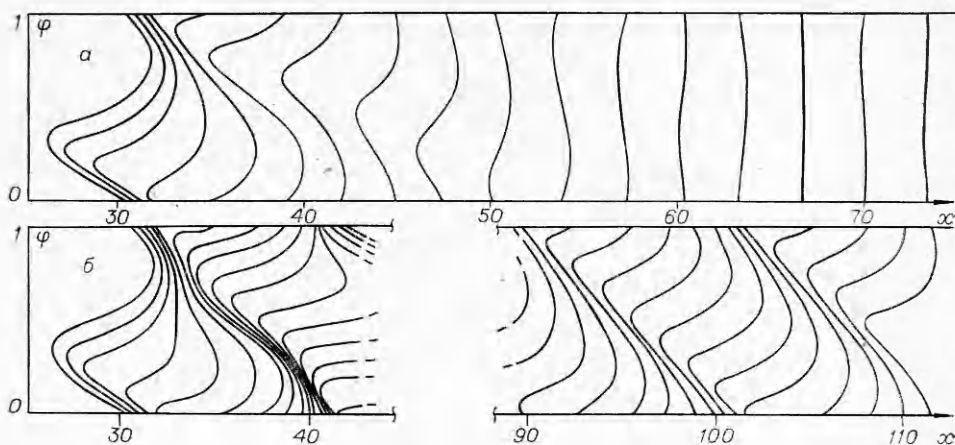


Рис. 3. Пространственно-временное положение фронта горения ( $\nu=5 \cdot 10^{-4}$ ,  $\Theta_n = -8,694$ ,  $\beta=0,1048$ ,  $\gamma=0,0855$ ), отвечающее различным теплопотерям.  
 а)  $\alpha = 6 \cdot 10^{-4}$ ; б)  $\alpha = 2 \cdot 10^{-3}$  (при  $\alpha = 2,4 \cdot 10^{-3}$  — погасание).

ленной величины диаметра реализуется уже двухзаходный спиновый режим с двумя очагами меньшей интенсивности, чем у развитого однозаходного. В дальнейшем интенсивность их растет. Таким образом, очаг эволюционирует до критической величины, после чего происходит увеличение числа очагов и, следовательно, заходов спирали.

Прежде чем исследовать влияние теплопотерь, кратко напомним установленные ранее факты. В области устойчивого горения в соответствии с [8] при росте теплопотерь скорость горения падает, достигая критического значения, после чего горение невозможно. Вблизи границы устойчивости фронта (см. [15] и рис. 3) рост теплопотерь приводит сначала к потере устойчивости стационарного режима горения, и критические явления срыва горения уже обуславливаются процессами, протекающими в неустойчивом фронте. В случае одномерного горения срыв происходит в момент «депрессии», когда тепловыделение наиболее слабое. В процессе численного эксперимента установлено, что пульсирующий режим более чувствителен к теплопотерям, чем спиновый. В последнем случае имеются высокотемпературные очаги с интенсивным тепловыделением, которые поддерживают процесс горения.

В качестве примера можно указать на спиновое горение при  $\gamma = 0,068$ ,  $\nu = 0,0001$ ,  $\alpha = 0,001$ , тогда как пульсирующий режим при тех же значениях теплофизических параметров и при том же уровне теплопотерь невозможен. Это подтверждает относительную «жизнестойкость» спинового режима. В то же время следует отметить, что, хотя спиновый режим горения и существует при более высоком уровне теплопотерь, его трудно инициировать. Расчеты показывают, что далеко не из любых начальных данных на него можно выйти. Ввиду близости к пределу своего существования такой режим горения весьма чувствителен к возмущениям и легко исчезает. Физически из этого следует ожидать затруднений при зажигании и поддержании процесса горения. Выход на подобные режимы горения достигался путем постепенного повышения теплопотерь.

В случае спинового режима горения рост теплопотерь влияет как на характеристики фронта (увеличение максимальной температуры очага, изменение скорости его распространения и др.), так и на структуру фронта (в том числе и количество заходов). Пример влияния теплопотерь приведен на рис. 3. Эволюция срыва многозаходного спинового горения при увеличении теплопотерь осуществляется через изменение количества очагов, изменение их интенсивности и, наконец, через собственно срыв горения. Представляется интересным экспериментальное исследование роли

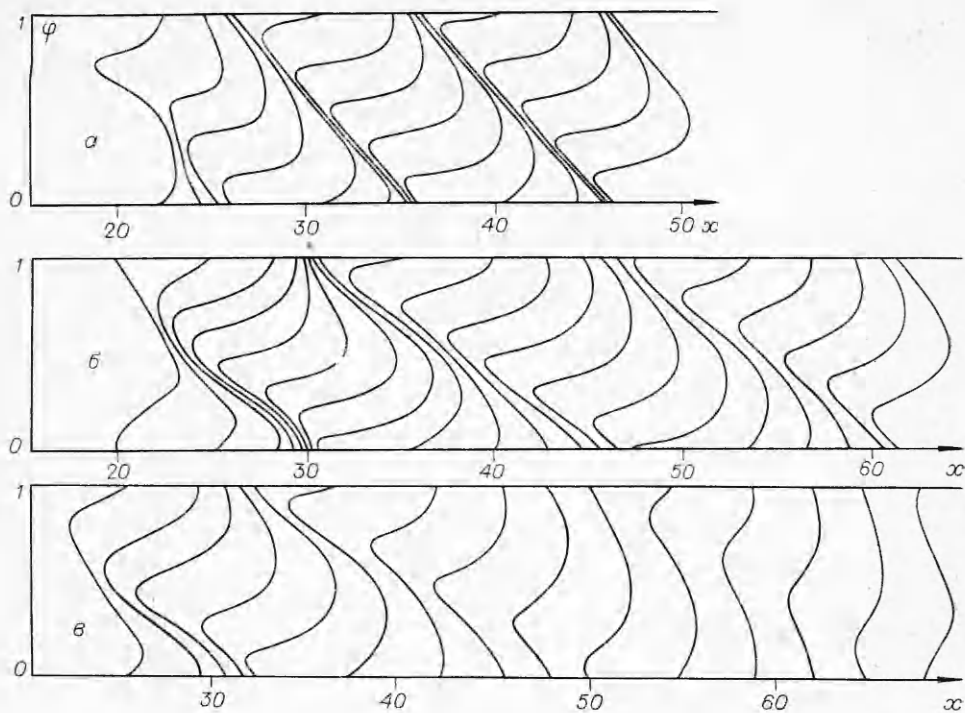


Рис. 4. Процесс установления спиновое режима горения при различной степени удаления от границы устойчивости.

а)  $\nu = 5 \cdot 10^{-4}$ ,  $\alpha = 10^{-3}$ ,  $\Theta_H = -11,7$ ,  $\beta = 0,07527$ ,  $\gamma = 0,068$ ,  $\Delta\tau = 10$ ; б)  $\nu = 5 \cdot 10^{-4}$ ,  $\alpha = 10^{-3}$ ,  $\Theta_H = -9,74$ ,  $\beta = 0,0924$ ,  $\gamma = 0,0785$ ,  $\Delta\tau = 10$ ; в)  $\nu = 5 \cdot 10^{-4}$ ,  $\alpha = 10^{-3}$ ,  $\Theta_H = -9,06$ ,  $\beta = 0,1$ ,  $\gamma = 0,083$ ,  $\Delta\tau = 12,5$ .

теплопотерь на модельных трубчатых образцах, где относительно просто управлять внешним теплообменом.

Уже при одномерном горении (в нашем случае малые диаметры образцов) показана существенная роль параметра  $\gamma$ . Из [5] известно, что с уменьшением  $\gamma$  происходит потеря устойчивости стационарного горения. Численные расчеты показывают, что поверхностное горение столь же чувствительно к изменению этого параметра. Четко выраженное спиновое горение (при малых  $\gamma$ ), при котором превращение вещества практически полностью осуществляется в очаге, с ростом  $\gamma$  вырождается. На рис. 4 приведены положения линий уровня  $\eta = 0,5$  во времени для ряда значений параметра  $\gamma$ . Процесс вырождения заключается в следующем. Интенсивность очагов падает, наблюдается все увеличивающийся процесс превращения вещества вне очага. Фронт спрямляется и слабо пульсирует. При приближении к границе устойчивости амплитуда искривления фронта стремится к нулю.

**Заключение.** Исследование неустойчивости волновых решений рассмотренной системы (1) представляет большой самостоятельный интерес. Любой другой физический или химический процесс, математическая модель которого близка к (1), будет обладать подобными свойствами. Тем не менее хотелось бы провести более детальное сопоставление закономерностей реального спинового горения с результатами исследования теоретической модели.

Первый и самый существенный результат — это совпадение спинового характера процесса, наличие вращающегося по спирали очага (или очагов). В качественном согласии находятся и другие выводы теории. Приведенная в [2] область существования спинового горения находит вполне естественное обоснование. Граница перехода устойчивого стационарного го-

рения в спиновое при разбавлении продуктами или инертным газовым компонентом связана с уменьшением параметра  $\gamma$  и ростом теплопотерь. Срыв горения обусловлен увеличением относительных теплопотерь. Подтверждается падение частоты спинового горения от увеличения степени разбавления инертным газом, так как последнее увеличивает эффективные теплопотери; численные расчеты показывают, что при этом увеличивается время сгорания витка спирали. Аналогично находит объяснение и зависимость скорости и частоты горения от диаметра. В согласии с теорией находится и возможность прямого перехода с устойчивого горения на спиновый режим (ср. с рис. 3), минуя пульсационный.

*Поступила в редакцию  
13/IV 1979*

#### ЛИТЕРАТУРА

1. А. Г. Мержанов, А. К. Филоненко, И. П. Боровинская. Докл. АН СССР, 1972, 208, 6.
2. А. К. Филоненко. Archiwum termodynamiki i spalania, 1975, 6, 1.
3. А. К. Филоненко, В. И. Вершинников. ФГВ, 1975, 11, 3.
4. Т. П. Ивлева, А. Г. Мержанов, К. Г. Шкадинский. Докл. АН СССР, 1978, 239, 5.
5. К. Г. Шкадинский, Б. И. Хайкин, А. Г. Мержанов. ФГВ, 1971, 7, 1.
6. А. П. Алдушин, Б. И. Сенлярский. Теория фильтрационного горения пористых металлических образцов. Препринт ОИХФ АН СССР, Черногловка, 1977.
7. А. П. Алдушин, Т. М. Мартемьянова и др. ФГВ, 1973, 9, 5.
8. Я. Б. Зельдович. ЖЭТФ, 1941, 11, 1.
9. Н. Н. Яненко. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. Новосибирск, Наука, 1967.
10. А. А. Самарский. Введение в теорию разностных схем. М., Наука, 1971.
11. Т. П. Ивлева, К. Г. Шкадинский. Госфонд алгоритмов и программ, П003381, 1978.
12. Б. В. Новожилов. Докл. АН СССР, 1964, 141, 1.
13. Г. И. Баренблатт, Я. Б. Зельдович, А. Г. Истратов. ПМТФ, 1962, 4.
14. Г. М. Махвиладзе, Б. В. Новожилов. ПМТФ, 1971, 5.
15. К. Г. Шкадинский, Б. И. Хайкин.— В сб.: Горение и взрыв. М., Наука, 1972.
16. А. П. Алдушин, С. Г. Каспарян. Теплодиффузионная неустойчивость стационарной волны горения. Препринт ОИХФ АН СССР, Черногловка, 1978.

### К ТЕОРИИ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ ЧАСТИЦ МЕТАЛЛОВ. II. ВОСПЛАМЕНЕНИЕ ЧАСТИЦ МЕТАЛЛОВ ПРИ ОДНОВРЕМЕННОМ ОБРАЗОВАНИИ ПЛЕНКИ ПРОДУКТА И ТВЕРДОГО РАСТВОРА

*А. Б. Арутюнян, С. Л. Харатян, А. Г. Мержанов  
(Ереван)*

При взаимодействии металлов с элементами внедрения ( $O_2$ ,  $N_2$ , В, С и др.) в общем случае образуется целый спектр продуктов: новые фазы — соединения и твердые растворы со своими диффузионными и тепловыми характеристиками [1—7]. Число и порядок расположения слоев фаз-продуктов соответствует диаграмме состояния данной системы металл — неметалл.

Многофазность образующихся продуктов и конечность размера частиц металлов не позволяют описать кинетику взаимодействия металлов с неметаллами одним брутто-уравнением простого типа. Влияние конеч-