Доклады Академии наук СССР
1973. Том 208, № 1

УДК 536.46

ФИЗИКА

В. Н. ВИЛЮНОВ

К ТЕОРИИ ИСКРОВОГО ВОСПЛАМЕНЕНИЯ

(Представлено академиком Я. Б. Зельдовичем 2 III 1972)

Вопросам воспламенения реагирующих веществ при различных условиях подвода тепла посвящено большое количество теоретических работ (см. обзоры ([1], [2])). Менее исследованной является задача о тепловом воспламенении газообразных смесей электрической искрой. Известные результаты ([3–5]) опираются на принцип, впервые сформулированный Я. Б. Зельдовичем ([3]): «Воспламеняющее количество тепла должно быть достаточно для того, чтобы нагреть до температуры горения шаровой объем, радиус которого порядка ширины зоны распространяющегося пламени». Иная точка зрения развита в ([6]).

1. В настоящей статье искра моделируется $\mathscr{E}\delta(r)$-образным источником тепла, где $\mathscr{E}$ — энерговыделение, $\delta(r)$ — функция Дирака. Рассматривается нестационарная система уравнений теплопроводности и диффузии

$$\frac{\partial\theta}{\partial\tau}=\frac{1}{\xi^\nu}\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi^\nu\frac{\partial\theta}{\partial\xi}\right)+(1-\eta)^n\exp\left(\frac{\theta}{1+\beta\theta}\right), \tag{1}$$

$$\frac{\partial\eta}{\partial\tau}=\frac{D_+}{a_+\xi^\nu}\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi^\nu\frac{\partial\eta}{\partial\xi}\right)+\frac{(1-\eta)^n}{\theta_0}\exp\left(\frac{\theta}{1+\beta\theta}\right) \tag{2}$$

с начальными и граничными условиями

$$\theta(0,\xi)+\theta_0=A\,\frac{\delta(\xi)}{\xi^\nu},\quad \eta(0,\xi)=0, \tag{3}$$

$$\frac{\partial\theta(\tau,0)}{\partial\xi}=\frac{\partial\eta(\tau,0)}{\partial\xi}=0,\quad \frac{\partial\theta(\tau,\infty)}{\partial\xi}=\frac{\partial\eta(\tau,\infty)}{\partial\xi}.$$

Здесь

$$\theta=E(T-T_+)/(RT_+^2),\quad \tau=\theta_0 t/t_+,\quad \xi=r/r_+,\quad r_+=\sqrt{a_+t_+/\theta_0},$$

$$t_+=\rho_+^{1-n}Z_0^{-1}\exp\left(\frac{E}{RT_+}\right),\quad \theta_0=\frac{E}{RT_+^2}\frac{Q}{c_p},\quad \beta=\frac{RT_+}{E},$$

$$A=(4\pi)^{-\nu/2}\frac{E}{RT_+^2}\frac{\mathscr{E}}{c_p\langle\rho\rangle}r_+^{-(\nu+1)/2};$$

θ — разогрев, η — глубина превращения, τ — время, ξ — координата, θ_0, β, D_+/a_+ — параметры задачи, A — безразмерное энерговыделение, $\nu=0, 1, 2$ соответственно для плоскопараллельного и сферически симметричного электрического разряда. Размерные переменные: T — температура; t — время; r — координата; a, D — коэффициенты температуропроводности и диффузии, n — порядок реакции; E — энергия активации; Z_0 — предэкспонент, $Q=c_p(T_+-T_-)$ — тепловой эффект; c_p — теплоемкость при постоянном давлении; R — универсальная газовая постоянная; λ — теплопроводность, ρ — плотность. Индексами $+$, $-$ обозначаются соответственно параметры при адиабатической температуре пламени и исходной смеси.

2. В сферически симметричном случае система (1), (2) решена численно на ЭВМ. Диапазон изменения параметров: $6\leqslant\theta_0\leqslant 12$, $n=1$; 2, $\beta\theta_0=0{,}9$, $0{,}8\leqslant D_+/a_+\leqslant 2$. Минимальная энергия воспламенения A_* находилась методом пристрелки. О воспламенении или потухании судили по поведению температуры в центре симметрии θ_c.

Обнаружено, что в зависимости от величины знака разности D_+-a_+ и величины энерговыделения качественная картина развития процесса такова. а) На пределе воспламенения ($A=A_*$) при $D_+\leqslant a_+$ θ_c сначала падает, достигая в момент τ_m отрицательного минимума, а затем монотонно растет, асимптотически приближаясь к адиабатической температуре пламени $\theta = 0$. С ростом a_+ / D_+, при прочих равных условиях, происходит увеличение модуля θ_{cm}. Под пределом воспламенения θ_c монотонно падает, стремясь к начальной температуре $-\theta_0$. б) При $D_+ > a_+$ θ_c падает до положительного минимума, потом увеличивается, достигая максимума и сверху стремится к адиабатической температуре пламени. Вблизи предела воспламенения наблюдаются нерегулярные пульсации температуры, которые обусловлены эффектом теплодиффузионной неустойчивости пламени ([7], [8]).

Минимальную (на пределе воспламенения) температуру в центре можно оценить по приближенной формуле $\theta_{cm} = [(D_+ / a_+)^{1/2} - 1]\theta_0$, вытекающей из законов сохранения потоков вещества и энергии.

Некоторые количественные характеристики воспламенения, полученные на ЭВМ (при $\theta_0 = 6$, $\beta\theta_0 = 0{,}9$, $n = 1$) приводятся ниже.

D_+/a_+	2	0,8
θ_{cm}	$+2$	$-1{,}01$
τ_m	210	2325
$\theta_{\max}$	$+3$	—

3. **Приведем результаты приближенной теории воспламенения, справедливой для** $D_+ / a_+ = 1$. Система (1), (2) имеет первый интеграл

$$\theta + \theta_0 (1 - \eta) = \frac{A}{2\sqrt{\pi}} \tau^{-(\nu+1)/2} \exp(-\xi^2/4\tau).$$

Видно, что подобие между глубиной выгорания и температурой достигается лишь в предельном случае, когда $\tau \gg 1$ при конечном ξ, или для $\xi^2 / (4\tau)$ при конечном τ. Вне этих пределов в образующемся пламени существует избыток энтальпии. Вблизи предела воспламенения, как показал расчет на ЭВМ, условное время воспламенения (например, то время, при котором достигается минимум температуры в центре) $\tau_m \gg 1$, а следовательно, можно принять $\theta + \theta_0(1 - \eta) \approx 0$.

Интегрируя по пространству уравнение теплопроводности (1), получим

$$\int_0^{\xi_0} \frac{\partial\theta}{\partial\tau} \xi^\nu d\xi = \xi^\nu \frac{\partial\theta}{\partial\xi}\Big|_0^{\xi_0} + \int_0^{\xi_0} \left(-\frac{\theta}{\theta_0}\right)^n \exp\left(\frac{\theta}{1+\beta\theta}\right) \xi^\nu d\xi, \tag{4}$$

где ξ_0 — координата, где химическая реакция уже не существенна. Поэтому тепловой поток $\partial\theta / \partial\xi|_{\xi_0}$ определим из решения линейной задачи теплопроводности

$$\theta + \theta_0 = \frac{A}{2\sqrt{\pi}} \tau^{-(\nu+1)/2} \exp\left(-\frac{\xi^2}{4\tau}\right), \tag{5}$$

т. е.

$$\frac{\partial\theta}{\partial\xi}\Big|_{\xi_0} = -\frac{A}{4\sqrt{\pi}} \frac{\xi_0}{\tau^{(\nu+3)/2}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{4\tau}\right). \tag{6}$$

Проводя в (4) осреднение по ξ и исключая τ в (6) с помощью (5), полагая $\tau \gg 1$, $\xi_0^2 / (4\tau) \ll 1$, приходим к приближенному уравнению

$$\frac{d\langle\theta\rangle}{d\xi} = \left(-\frac{\langle\theta\rangle}{\theta_0}\right)^n \exp\left(\frac{\langle\theta\rangle}{1+\beta\langle\theta\rangle}\right) - \frac{C_1(\nu+1)}{2A^{2/1+\nu}} (\langle\theta\rangle + \theta_1)^{(\nu+3)/(\nu+1)}. \tag{7}$$

Весовой коэффициент C_1 порядка единицы учитывает ошибки усреднения.

Уравнение (7) аналогично классическому уравнению нестационарного теплового взрыва. Расчет критических условий проводится по методу Н. Н. Семенова. При $\theta_0 \gg 1$, $\beta \ll 1$, температура и минимальная энергия воспламенения определяются равенствами (символ осреднения опущен)

$$-\theta_{*1}\approx n\theta_0\left(\theta_0+n-\frac{\nu+3}{\nu+1}\right)^{-1}\approx n,\qquad -\theta_{*2}\approx\theta_0-\frac{\nu+3}{\nu+1}(1-\beta\theta_0)^2;$$

$$A_*=C_2\left[\frac{\nu+1}{2}\left(-\frac{\theta_0}{\theta_*}\right)^n\exp\left(\frac{-\theta_*}{1+\beta\theta_*}\right)(\theta_0+\theta_*)^{(\nu+3)/(\nu+1)}\right]^{(\nu+1)/2}.$$

Два значения температуры соответствуют двум точкам касания кривой прихода и расхода тепла (рис. 1). В задаче зажигания искрой осуществляется высокотемпературный режим, когда температура воспламенения близка к температуре T_+. Точка K соответствует $T_*=T_+-nRT_+/E$. Режимы правее M представляют экзотермическую реакцию при температуре, близкой к T_-; в точке M $T_*=T_-+(\nu+3)RT_-^2/(\nu+1)E$. Низкотемпературный режим может быть реализован при медленном вводе тепловой энергии (а не в виде $\mathscr{E}\delta(r)$!). При $\theta_0\gg1$ для высокотемпературного режима результат слабо зависит от β, причем приближенно

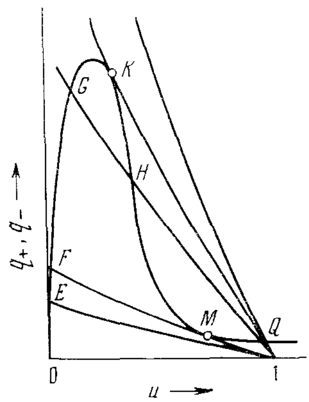

Рис. 1. Диаграмма Семенова. Зависимости $q=u^n\exp\left(\frac{-\theta_0u}{1-\beta\theta_0u}\right)$ и $q_-\sim(1-u)^{\frac{\nu+3}{\nu+1}}$ от $u=-\frac{\langle\theta\rangle}{\theta_0}$

$$A_*=C_2\left[\frac{\nu+1}{2}\left(\frac{\theta_0e}{n}\right)^n(\theta_0-n)^{(\nu+3)/(\nu+1)}\right]^{(\nu+1)/2}. \qquad (8)$$

Коэффициент C_2 находился из результатов счета исходных уравнений (1), (2) на ЭВМ. Для сферически симметричного случая получена интерполяционная формула $C_2=0,2+0,6n$.

В физических переменных минимальная энергия воспламенения представляется в виде

$$\mathscr{E}_*=4\pi\langle\rho\rangle A_*\frac{RT_+^2}{E}\left(\frac{a_+t_+}{\theta_0}\right)^{3/2}. \qquad (9)$$

Поскольку высокотемпературная кинетика многих реакций известна приближенно, выразим t_+ через скорость распространения пламени w_+ (по отношению к сгоревшим продуктам). Согласно ([9]),

$$t_+=2n!\,a_+/(\theta_0^{n+1}w_+^2). \qquad (10)$$

Несмотря на то, что формула (10) получена в предположении $\theta_0\gg1$, $\beta\ll1$, численный счет уравнений распространения стационарного пламени ([10–12]) показал ее высокую точность и для области реальных значений θ_0, β.

В постановке задачи (1), (2) термическое расширение не учтено. При его приближенном учете нужно просто все теплофизические параметры вычислять при адиабатической температуре пламени. Полагая в (9) $\langle\rho\rangle=\rho_+$ и используя (10), получим

$$\mathscr{E}_*=4\pi(0,2+0,6n)\left[\frac{3n!}{\theta_0}\left(\frac{e}{n}\right)^n\right]^{3/2}\left(1-\frac{n}{\theta_0}\right)^{5/2}\frac{\lambda_+^3Q}{c_\rho^3\rho_+^2w_+^3}. \qquad (11)$$

Сопоставляя (11) с принципом воспламенения ([3]) $\mathscr{E}_*={}^4/_3\pi R^3\rho_+Q$, находим величину эффективного радиуса очага воспламенения

$$R_*=[3(0,2+0,6n)]^{1/3}\left[\frac{3n!}{\theta_0}\left(\frac{e}{n}\right)^n\right]^{1/2}\left(1-\frac{n}{\theta_0}\right)^{5/6}\delta_+, \qquad (12)$$

где $\delta_+=a_+/w_+$ — тепловая ширина фронта пламени.

В ([13]) получена аналитическая оценка

$$R_*\geqslant2\sqrt{2}\delta_+,\qquad \mathscr{E}_*\geqslant64\sqrt{2}\pi\lambda_+^3Q/(3c_p^3\rho_+^2w_+^3), \qquad (13)$$

а в работе ([3]) отношение R_* / δ_+ найдено экспериментально. Для воспламенения окиси углерода в кислороде величина R_* / δ_+ колебалась от 2,2 до 6,5; среднее значение равно трем. В пламени горения CO в O_2 (при избытке CO), по литературным данным ([3, 14]), $E = 25$ ккал/моль, $T_+ = 2100°$ K, $T_- = 293°$ K, $\theta_0 = 5{,}12$, $\beta = 0{,}17$.

Принимая $n = 2$, из (12) получаем $R_* / \delta_+ = 1{,}6$; при $n = 1$ $R_* / \delta_+ = 1{,}43$. Формула Я. Б. Зельдовича (13) дает $R_* / \delta_+ = 2{,}83$ независимо от кинетики реакции.

4. Следует отметить существенную зависимость R_* и $\mathcal{E}_*$ от отношения a_+ / D_+. При численном счете (1), (2) получено, что при $n = 1$, $\theta_0 = 6$, $\beta\theta_0 = 0{,}9$, $0{,}8 \leqslant D_+ / a_+ \leqslant 2$ величина $A_* \sim (a_+ / D_+)^3$. Если $a_+ / D_+ \neq 1$, то, в соответствии с теорией пламени ([9, 10]), правая часть (10) умножается на $(a_+ / D_+)^n$, а следовательно, правая часть (11) умножится на величину $(a_+ / D_+)^{9/2}$, а (12) на $(a_+ / D_+)^{3/2}$. Результаты находятся в качественном согласии с результатами работы ([15]), где решена задача очагового воспламенения. Для реакции n-го порядка из ([15]) следует $R_* \sim (a_+ / D_+)^{3n/2}$, $\mathcal{E}_* \sim (a_+ / D_+)^{9n/2}$.

Автор выражает благодарность акад. Я. Б. Зельдовичу за постановку задачи и ее обсуждение; В. С. Баушеву и А. М. Тимохину за составление программы и счет на ЭВМ.

Томский государственный университет
им. В. В. Куйбышева

Поступило
15 I 1972

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] В. Н. Вилюнов, Первый Всесоюзн. симпозиум по горению и взрыву, Тез. докл., «Наука», 1968, стр. 9. [2] A. G. Merzhanov, A. E. Averson, Combustion and Flame, 16, № 1 (1971). [3] Я. Б. Зельдович, Н. Н. Симонов, ЖФХ, 23, в. 11 (1949). [4] Д. Б. Сполдинг, Основы теории горения, М., 1959. [5] Ф. А. Вильямс, Теория горения, «Наука», 1971. [6] Б. Льюис, Г. Эльбе, Горение, пламя и взрывы в газах, М., 1968. [7] Я. Б. Зельдович, Теория горения и детонации газов, Изд. АН СССР, 1944. [8] Г. И. Баренблатт, Я. Б. Зельдович, А. Г. Истратов, Журн. прикл. мех. и техн. физ., № 4 (1962). [9] Я. Б. Зельдович, ЖФХ, 22, в. 1 (1948). [10] Y. B. Zeldovich, G. I. Barenblatt, Combustion and Flame, 3, № 1 (1959). [11] А. Н. Иванов, Физика горения и взрыва, 5, в. 2 (1969). [12] К. Г. Шкадинский, А. К. Филоненко, там же, 5, в. 1 (1969). [13] Я. Б. Зельдович, В. В. Воеводский, Тепловой взрыв и распространение пламени в газах, 1947. [14] Я. Б. Зельдович, Н. Н. Семенов, ЖЭТФ, 10, 1116, 1427 (1940). [15] В. Н. Вилюнов, Физика горения и взрыва, 4, в. 4 (1968).