АКАДЕМИЯ НАУК СССР
НАУЧНЫЙ СОВЕТ ПО ПРОБЛЕМЕ «ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ПРОЦЕССОВ ГОРЕНИЯ»
ИНСТИТУТ ХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Я. Б. Зельдович

РАСПРОСТРАНЕНИЕ ПЛАМЕНИ ПО СМЕСИ, РЕАГИРУЮЩЕЙ ПРИ НАЧАЛЬНОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ

(Препринт)

Черноголовка 1978

Послана в ж. «Comb. and Flame» в июне 1978 г.

УДК 536.46

Предлагается способ расчета мгновенной скорости пламени и мгновенного профиля температуры при распространении пламени по взрывчатой смеси, изменяющейся перед фронтом вследствие химической реакции при начальной температуре.

Рассмотрим взрывчатую смесь достаточно высокой начальной температуры и не будем пренебрегать химической реакцией при начальной температуре. Пусть начальное состояние не зависит от координаты, а затем в определенный момент времени в определенной точке взрывчатая смесь поджигается, например путем быстрого каталитического сжигания смеси, без тепловых потерь, но и без подвода тепла извне, так что в окрестности точки зажигания достигается максимальная температура горения.

Очевидно, что от точки зажигания ($x=0$, для простоты) начнет распространяться пламя, т. е. решение будет иметь вид $T(x-ut)$ при $x>0$, где u — нормальная скорость распространения пламени.

Однако при учете химической реакции в начальном состоянии такое решение не может быть точным: независимо от предстоящего прихода пламени следует ожидать самовоспламенения реагирующей смеси по истечении периода индукции адиабатического взрыва. Отсюда $T(x-ut)$ является лишь промежуточной асимптотикой, а не точным решением уравнений теплопроводности, диффузии и химической кинетики. Неудивительно поэтому, что указанная система уравнений не имеет решений вида $T(x-ut)$, если скорость реакции $\Phi(T)$ при $T=T_0$ отлична от нуля, $\Phi(T_0)>0$.

Для преодоления этой трудности ранее прибегали к искусственным приемам: полагали $\Phi(T)\equiv 0$ в конечном интервале $T_1>T>T_0$, после чего приходилось специально доказывать, что в определенных достаточно широких пределах скорость пламени не зависит от введенной величины T_1 [1].

Гиршфельдер с сотрудниками (см. обзор 2) вводил «пламядержатель», т. е. (для случая потока газа) полагал, что при $x<0$

скорость реакции тождественно равна нулю. В последнее время А. П. Алдушин, В. Д. Луговой, А. Г. Мержанов и Б. И. Хайкин численными методами исследуют влияние T_1 или величины $\Phi(T_0)$ на общую нестационарную картину распространения реакции и в частности на эффективное значение скорости. Между тем, нетрудно аналитически рассмотреть задачу с учетом реакции в начальном состоянии без каких-либо искусственных параметров (типа T_1) или предположений. Для простоты рассмотрим случай $D=\varkappa=1$, отсутствие тепловых потерь и каталитического зажигания, так что алгебраическая связь концентрации и температуры тождественно верна везде и всегда. Не будем учитывать также движение газа, связанного с его расширением; коэффициенты переноса и теплоемкость считаем постоянными, задачу однородной. Итак,

$$\frac{\partial T}{\partial t}=\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\Phi(T), \tag{1}$$

$\Phi(T_b)=0$, $\Phi(T)>0$ при $T<T_b$, в частности, $\Phi(T_0)>0$, $t=0$, $T(x,\ 0)=T_0$ при $|x|>x_0$, где $-x_0<x<x_0$ — область зажигания. Ищем решение при $x\gg x_0$ в виде

$$T=T\left(x-\int u\,dt,\ t\right)=T(\xi,\ t), \tag{2}$$

где $\xi=x-\int u\,dt$. Получим уравнение для функции двух переменных

$$\left.\frac{\partial T}{\partial t}\right|_{\xi}+u\frac{\partial T}{\partial \xi}=\frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2}+\Phi(T). \tag{3}$$

Мы знаем, что при $x\to\infty$, $\xi\to\infty$ теплопроводность не играет роли, $\frac{\partial}{\partial\xi}$ и $\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}$ равны нулю, в этой области идет спонтанная адиабатическая химическая реакция, постепенно подводящая смесь к тепловому взрыву

$$\frac{\partial T}{\partial t}=\Phi(T),\ \xi=\infty. \tag{4}$$

Решение этого уравнения запишем в виде

$$T=T_a(t),\ \frac{dT_a}{dt}=\Phi(T_a(t)), \tag{5}$$

где индекс a напоминает об адиабатическом характере реакции. Итак, при

$$\xi=\infty,\ T(\xi,\ t)=T_a(t),\ \frac{\partial T}{\partial\xi}=0.$$

$$\frac{\partial T}{\partial t}=\Phi(T_a(t)).$$

При $\xi=-\infty$, очевидно, полному выгоранию соответствует

$$T(\xi=-\infty,\ t)=T_b=\text{const},\ \frac{\partial T}{\partial\xi}=\frac{\partial T}{\partial t}=0. \tag{6}$$

Рассматривая $\left.\frac{\partial T}{\partial t}\right|_\xi$ в общем уравнении (3) как поправку, выберем простейшую линейную интерполяцию для этой величины, удовлетворяющую обоим предельным условиям

$$\left.\frac{\partial T}{\partial t}\right|_\xi = \frac{T_b - T}{T_b - T_a(t)}\,\Phi(T_a(t)). \tag{7}$$

Представляя это $\left.\frac{\partial T}{\partial t}\right|_\xi$ в уравнение (3), получим уравнение

$$u\frac{\partial T}{\partial \xi} = \frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} + \Phi_e(T), \tag{6а}$$

где

$$\Phi_e(T) = \Phi(T) - \frac{T_b - T}{T_b - T_a(t)}\,\Phi(T_a(t)) \tag{6б}$$

с граничными условиями для $T(\xi, t)$ при фиксировании t.

$$T(-\infty,\ t) = T_b,\ \ T(\infty,\ t) = T_a(t).$$

Итак получено стандартное уравнение задачи о равномерном распространении пламени, позволяющее определить мгновенное значение скорости пламени $u(t)$ и мгновенную форму фронта $T(\xi, t)$. Введем безразмерную температуру (определение которой зависит от времени).

$$\tau = \frac{T - T_a(t)}{T_b - T_a(t)},$$

В данный момент t, рассматривая $T_a(t)$ как фиксированный параметр, получаем

$$u\frac{d\tau}{d\xi} = \frac{d^2\tau}{d\xi^2} + \varphi_e(\tau,\ t),$$

$$\xi = +\infty,\ \tau = 0;\ \xi = -\infty,\ \tau = 1,$$

$$T_a = T_a(t), \varphi_e(\tau,\ t) = \frac{1}{T_b - T_a}\left[\Phi(T_a + \tau(T_b - T_a)) - (1-\tau)\,\Phi(T_a)\right].$$

Возвращаясь к нестационарной задаче в целом, получим решение в естественном виде

$$T(x,\ t) = T_a(t) + \tau\left(x - \int u\,dt,\ t\right)(T_b - T_a(t)),$$

где безразмерная функция τ, характеризующая распространяющуюся волну, получается из уравнения с модифицированным законом тепловыделения (индекс e — effective — при φ_e).

Эта модификация, даже если она численно невелика по сравнению с максимальной скоростью тепловыделения, оказывается крайне важной и полезной в принципиальном отношении. До модификации $\Phi(T)$ обращалась в ноль при T_b (за счет исчерпания горючего), имела более или менее высокий максимум более или менее близко от T_b, но не равнялась нулю на правом краю, при

$\xi=+\infty$, т. е. при $T=T_0$ или $T=T_a(t)$, при безразмерном $\tau=0$. Как уже говорилось в начале, уравнение распространения пламени не имеет решения с $\tau\to 0$ при $\xi\to+\infty$, если функция тепловыделения не обращается в нуль при $\xi\to+\infty$. Новая модифицированная функция Φ_e как раз и отличается тем, что $\Phi_e(T)$ тождественно равно нулю при $T=T_a$. Новая функция, в которую t входит как параметр, позволяет точно решить уравнение для мгновенной скорости распространения $u(t)$ и мгновенной формы профиля $\tau(\xi, t)$. При этом важно то, что модификация произошла естественно, без произвольного обрезания или привязывания пламени. Модификация $\Phi\to\Phi_e$ есть следствие понимания того, что распространение пламени с постоянной скоростью есть промежуточно-асимптотическое решение (см. [3—5]) общей задачи о нестационарной химической реакции с выделением тепла.

Представляет интерес сравнение с численным расчетом предлагаемого способа замены уравнения в частных производных на два обыкновенных уравнения для $T_a(t)$ (первого порядка) и $\tau(\xi)$ (второго порядка), с неизвестным заранее параметром $u(t)$.

Аналогичный прием может быть проведен в более сложной ситуации с несколькими уравнениями при $\varkappa\neq D$ и при нескольких реакциях.

И все же главной мне представляется не вычислительная, а педагогическая сторона дела, конструктивное доказательство возможности точного рассмотрения распространения пламени, как промежуточной асимптотики без искусственных предположений или искусственной модификации $\Phi(t)$.

ПРИЛОЖЕНИЕ, НОРМИРОВКА РЕШЕНИЯ И ЗАМЕЧАНИЯ

Уравнение равномерного распространения содержит $\xi=x-\int u dt$ лишь под знаком дифференциала. Поэтому хотя для значения скорости получается определенная величина $u(t)$, но функция определяющая вид фронта $T(\xi, t)$ или безразмерная $\tau(\xi, t)$ оказывается определенной лишь с точностью до сдвига $T(\xi+c, t)$ или $\tau(\xi+c, t)$ также является решением дифференциального уравнения. Используем это обстоятельство для того, чтобы наложить на $T(\xi, t)$ и $\tau(\xi, t)$ дополнительное условие, которое к тому же увеличит точность и надежность линейной экстраполяции поправки, модифицирующей функцию тепловыделения.

Как известно, значение u можно найти, понижая порядок уравнения и преобразуя его к виду:

$$p=\frac{d\tau}{d\xi},\quad up=p\frac{dp}{d\tau}+\varphi_e(\tau),\ p=0 \text{ при } \tau=0\ \tau=1,$$

вид $p(\tau)$ не содержит произвола. При переходе к ξ появляется произвольная константа интегрирования $\xi=\int p^{-1}d\tau+\text{const}$, фиксируем ее, потребовав чтобы $\xi=0$ при $\tau=1/2$, т. е. напишем

$$\xi = \int_{1/2}^{\tau} p^{-1} d\tau.$$

Таким образом, мы зафиксировали

$$\tau(0,\ t) = \frac{1}{2},\quad T(\xi=0,\ t) = \frac{T_b + T_a(t)}{2}.$$

При такой нормировке решения

$$\left.\frac{\partial T(\xi,\ t)}{\partial t}\right|_{\xi=0} = \frac{1}{2}\frac{dT_a}{dt} = \frac{1}{2}\Phi(T_a).$$

Такой выбор соответствует тому, что интерполяционное значение линейной поправочной функции оказывается точным в середине интервала интерполяции при $\tau=0{,}5$, в добавление к правильным значениям на краях при $\tau=0$ и $\tau=1$.

Обращая это рассуждение, можно сказать, что при использовании линейной функции, рекомендованной выше, следует нормировать решение, как указано выше.

Заметим, что модифицированная функция имеет общее свойство

$$\varphi_e(0) = 0,\quad \left.\frac{d\varphi_e}{d\tau}\right|_0 \neq 0.$$

Поэтому в соответствии с общей теорией распространения пламени спектр собственных значений u, при которых решение $\tau(\xi)$ удовлетворяет граничным условиям, является континуумом с точным нижним значением u_m. (Колмогоров, Петровский, Пискунов [6] — теория КПП). Реализуется в рассматриваемой задаче именно минимальное значение скорости и соответствующее ему решение $\tau_m(\xi)$. Как правило, условие цитированной работы

$$\frac{d^2\Phi}{dT^2} < 0,\quad \varphi_e < \tau\left.\frac{d\varphi_e}{d\tau}\right|_0$$

не выполняется, а потому и минимальная скорость u_m определяется областью максимума $\varphi_e(\tau)$. При большой теплоте активации можно применять приближенную теорию, при меньшей — необходим численный расчет*. В обоих случаях необходимо подчеркнуть, что вычисление u_m является теперь (после введения φ_e) абсолютно корректной операцией. В предлагаемом решении

---

* Лишь тогда, когда $T_a(t)$ вплотную приблизится к T_b, теория КПП станет применимой. Так, если $\Phi \sim Te^{-E/RT}$, то перегиб имеет место при $\theta=2$, т. е. при $T_a = T_b - \dfrac{2RT_b^2}{E}$ и формула КПП справедлива.

Примечание при корректуре: в последнее время численные расчеты А. П. Алдушина и С. И. Худяева показали, что формула КПП применима в более широком интервале, условие на φ_e является достаточным, но не необходимым.

скорость сперва растет с ростом времени пропорционально $[T_b - T_a(t)]^{-1/2}$ согласно приближенной теории. Затем, по мере приближения T_a к T_b, рост замедляется и после выхода на режим Колмогорова, Петровского и Пискунова $u(t)$ становится падающей функцией температуры T_a, а следовательно, и падающей функцией времени t.

При этом надо уточнить, что u есть скорость движения температуры средней между постоянной T_b и переменной $T_a(t)$. Скорость любой изотермы $T = T(x, t) = T_1 = \text{const}$, равная

$$u(T_1, t) = \left.\frac{dx}{dt}\right|_{T=T_1} = \left(-\frac{\partial T}{\partial x}\right)^{-1} \frac{\partial T}{\partial t},$$

мало отличается от $u(t)$ при $T_1 > T_a$, но $u(T_1, t)$ обращается в бесконечность в тот момент t_1, когда $T_a(t_1) = T_1$, т. к. в этот момент $T = T_1$ при $x = \infty$.

Возможно ли дальнейшее уточнение процедуры с использованием точного решения $T(\xi, t)$ и его вариации при изменении с течением времени $T_a(t)$, с целью получения $\left.\frac{\partial T}{\partial t}\right|_{\xi}$ как функции от ξ, t, с тем, чтобы избавиться от произвола, связанного с линейной интерполяцией поправки? Оказывается, что такая процедура не только сложна, но и приводит к неприемлемому виду поправки $-\tau \ln \tau$. После введения такой поправки сохраняется $\varphi_e(\tau = 0) = 0$, но $\left.\frac{d\varphi_e}{d\tau}\right|_{\tau=0} \to \infty$ как $-\ln \tau$ и решения с конечным u не существует, так как согласно Колмогорову, Петровскому, Пискунову $u_m \geqslant \sqrt{2 \left.\frac{d\varphi}{d\tau}\right|_{\tau=0}}$. Это явление связано с тем, что приближение истинного нестационарного решения $T(x, t)$ к волне горения $T(x - ut)$ является неравномерным: асимптотика нестационарного решения имеет вид $t^{-1/2} e^{-x^2/4t}$, тогда как асимптотика волны есть Михельсоновское* решение $e^{-u(x-ut)}$.

Поэтому в любой, даже поздний момент, есть такое большое значение x, при котором Михельсоновская асимптотика $e^{-u\xi}$ еще не успела установиться. С течением времени соответствующее x растет и при этом экспоненциально убывает тот интервал $T_2 > T > T_0$ при $t \to \infty$, $T_2 > T_0$, в котором волновое распределение не имеет место.

В рассматриваемой здесь задаче, в которой учитывается реакция в начальном состоянии и изменение со временем $T_a(t)$ и $u(t)$, происходит непрерывное изменение асимптотики и весь рассматриваемый интервал времени ограничен временем адиабатической

---

* В решении Колмогорова, Петровского, Пискунова при $d\varphi/d\tau|_0 \neq 0$ несколько изменяется множитель в экспоненте, но линейность по x и t выражения в экспоненте сохраняется.

реакции. Поэтому волновые формулы на протяжении всего процесса остаются несправедливыми вблизи $T_a(t)$ на переднем фронте волны. Можно догадываться, что область неприменимости порядка

$$T_2 - T_a = (T_b - T_a) \exp - [\Phi(T_b) / \Phi(T_a)]^n,$$

где n положительно и предположительно равно 1/2 или 1. Существование ничтожной области неприменимости не повлияет на численное совпадение нестационарного расчета с предлагаемым волновым расчетом с линейной интерполяцией поправки. Однако эта малая область неприменимости создает отмеченные выше формальные трудности при попытке дальнейшего уточнения метода. Это уточнение не только излишне, но и невозможно, внутренне противоречиво — нельзя искать уравнение для $u(t)$ и $\tau(\xi, t)$ с точностью большей, чем точность, с которой в действительности существуют сами эти промежуточно-асимптотические понятия.

Пользуюсь случаем выразить благодарность А. П. Алдушину, Г. И. Баренблатту, А. Г. Мержанову и С. И. Худяеву за обсуждение и помощь.

ЛИТЕРАТУРА

1. Я. Б. Зельдович. «Ж. физ. химии», 1948, **22**, № 1, стр. 27.

2. Th. Karman. 6th Symp. (Internat) combustion. New York, Reinhold Publ. Corp, London, Charman and Hall, 1957.

3. Г. И. Баренблатт, Я. Б. Зельдович. «Успехи матем. наук», 1971, **26**, № 2, стр. 115.

4. G. I. Barenblatt, Ya. B. Zeldovich. Ann. Rev. Fluid Mech., 1972, **4**, p. 285.

5. Г. И. Баренблатт. Подобие, автомодельность, промежуточная асимптоматика. Л., Гидрометеоиздат, 1978.

6. А. Н. Колмогоров, И. Г. Петровский, Н. С. Пискунов. «Бюлл. МГУ», сек. А, 1937, **1**, № 16, стр. 1.