

01;12
©1994

ОБ ОПИСАНИИ ДВИЖЕНИЯ ФРОНТА ЭКЗОТЕРМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ В ПОРОШКОВОЙ СРЕДЕ

С.Г.Псахъе, Е.В.Шилько, С.И.Негрессула

Описание фронта распространения экзотермического процесса в химически активной среде как фронта переключения впервые было проведено Зельдовичем и Франк-Каменецким в 1938 г. [1] при изучении фронта горения. В рамках такого подхода среда, в которой распространяется волна горения (переключения), может рассматриваться состоящей из так называемых бистабильных клеточных автоматов. Бистабильный (или так называемый триггерный клеточный) автомат обладает двумя стационарными состояниями, между которыми возможен переход под влиянием внешних воздействий. При этом интенсивность воздействия должна превысить некоторый пороговый уровень [2]. Зависимость изменения температуры u от времени для бистабильного автомата описывается уравнением $du/dt = f(u)$, правая часть которого имеет характерный вид, показанный на рис. 1.

Следует отметить, что использование формализма клеточных бистабильных автоматов позволяет осуществить также непосредственное моделирование процесса распространения фронта горения. Так, в [3] были получены пространственные структуры поля температур в порошковой среде при самораспространяющемся высокотемпературном синтезе (СВС) интерметаллического соединения Ni_3Al .

В настоящей работе формализм бистабильных клеточных автоматов используется для аналитического исследования закономерностей распространения фронта горения в порошковых смесях. Как отмечалось, центральной проблемой при этом является выбор вида функции $f(u)$. Естественно полагать, что зависимость $f(u)$ для бистабильного клеточного автомата в химически-активной среде определяется

$$f(u) = \frac{q}{c} \varphi(u), \quad (1)$$

где q — мощность источника химической реакции, c — теплоемкость среды, $\varphi(u)$ — безразмерная определяющая функция. Для бистабильного клеточного автомата функция

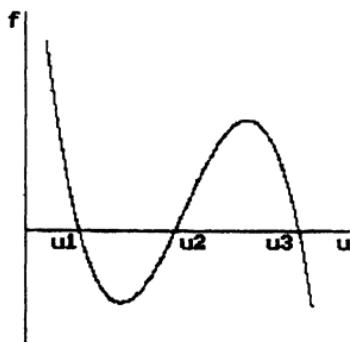


Рис. 1. Зависимость скорости изменения температуры бистабильного клеточного автомата от температуры.

$f(u)$ должна иметь три стационарные точки, показанные на рис. 1. Точка u_1 соответствует начальной температуре среды, u_2 — температуре зажигания (начала реакции), а u_3 — температуре равновесного процесса горения. Если ограничиться линейным приближением для описания поведения такой функции в области стационарных точек, то $\varphi(u)$ может быть представлена в виде:

$$\varphi(u) = \frac{(u - u_1)(u - u_2)(u - u_3)}{u_1 u_2 u_3}. \quad (2)$$

Тогда, как и в [2,4], $f(u)$ описывается кубической параболой. Для описания распространения фронта горения в порошковых смесях необходим учет пористости среды — γ , который может быть эффективно осуществлен введением в (1) множителя $\gamma(1 - \gamma/\gamma_{kp})$ (γ_{kp} — максимальная пористость, при которой еще наблюдается устойчивый фронт):

$$\frac{du}{dt} = \frac{q}{c} \gamma \left(1 - \frac{1}{\gamma_{kp}} \gamma\right) \frac{(u - u_1)(u - u_2)(u - u_3)}{u_1 u_2 u_3}. \quad (3)$$

При этом скорость стационарного плоского фронта горения может быть получена из (3), как и в [2,4]:

$$C_0 = \frac{1}{2} \left(\frac{q}{c} \frac{\gamma(1 - \gamma/\gamma_{kp})}{u_1 u_2 u_3} D \right)^{1/2} (u_1 + u_3 - 2u_2), \quad (4)$$

где D — температуропроводность среды, характеризующая интенсивность стока.

Из (4) видно, что скорость волны переключения при горении явно зависит от начальной температуры смеси. Подобная зависимость является важной физической и технологической характеристикой процесса. Результаты расчета зависимости скорости фронта горения C_0 от величины

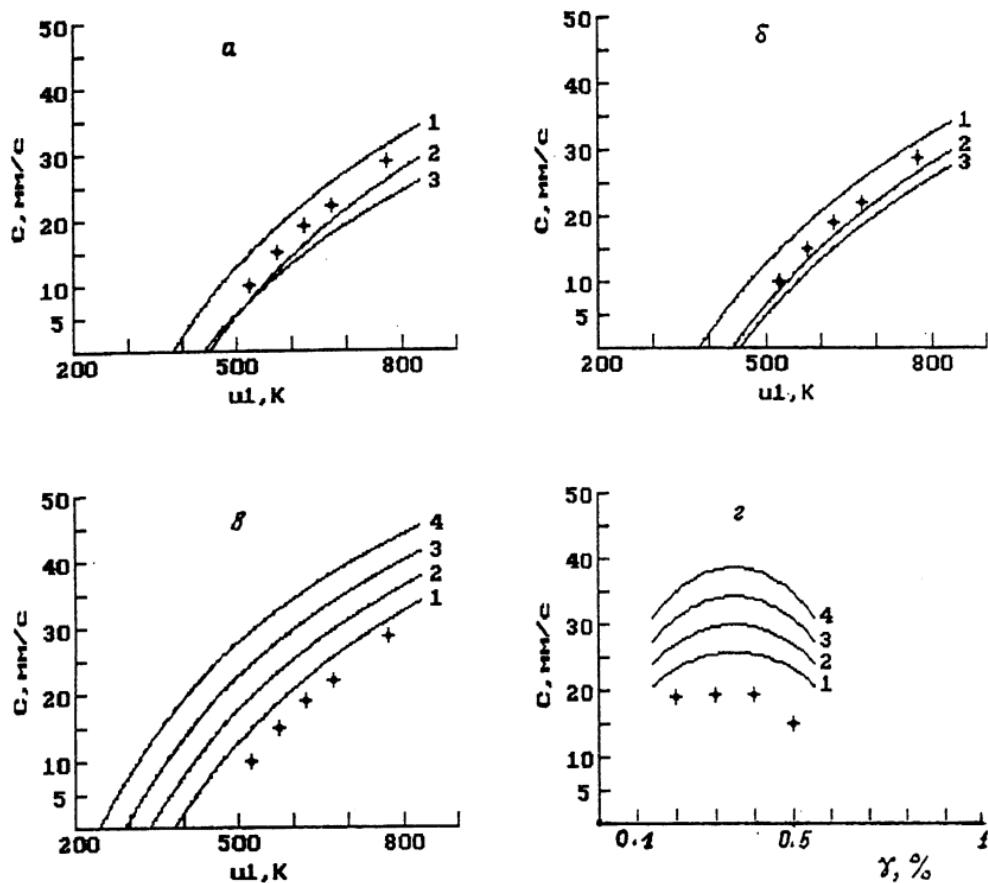


Рис. 2. Зависимость скорости фронта горения от начальной температуры (*a, б, в*) и пористости (*г*) среды. Использованы экспериментальные значения C_0 (+) и эмпирическая зависимость $u_3 = 1100 + u_1$ из [5].

а — состав смеси: 1 — Ni — 13.28 мас% Al, 2 — Ni — 11.88 мас% Al — 10 мас% W, 3 — Ni — 11.88 мас% Al — 10 мас% Al_2O_3 . *б* — состав смеси: 1 — Ni — 13.28 мас% Al, 2 — Ni — 23.28 мас% Al, 3 — Ni — 3.28 мас% Al. *в* — 1 — $u_2 = 933$ К (температура плавления Al), 2 — $u_2 = 903$, 3 — $u_2 = 873$, 4 — $u_2 = 843$ К. *г* — исходная температура смеси — $u_1 = 673$ К, 1 — $u_2 = 933$, 2 — $u_2 = 903$ К, 3 — $u_2 = 873$, 4 — $u_2 = 843$ К.

начального прогрева u_1 для порошковой смеси Ni — 13.28 мас.% Al, в которой осуществляется фронтальная реакция, приведены на рис. 2, *а* (кривая 1). Экспериментальные значения C_0 для рассматриваемой системы взяты из [5]. Видно, что имеет место достаточно хорошее согласие с экспериментальными данными.

Для получения методом СВС композиционных материалов в реагирующую смесь добавляют различные инертные компоненты. На рис. 2, *б* показано влияние добавок W и Al_2O_3 на скорость распространения фронта горения. Видно, что даже небольшое добавление инертных компонентов

существенно замедляет течение реакции и повышает минимально необходимую температуру начального прогрева.

В приведенных выше расчетах среда считалась однородно перемешанной. Реально в порошковой смеси присутствуют локальные неоднородности распределения компонентов, причем избыток любого из реагирующих компонентов в одной области должен компенсироваться его недостатком в другой. В этом случае преобладающая доля компонента является инертом, так как не вступает в экзотермическую реакцию. Это приводит к тому, что скорость фронта горения в реальной смеси всегда ниже, чем в идеально перемешанной. На рис. 2, в изображены зависимости $C_0(u_1)$ для идеальной смеси и смесей с избытком компонентов 10 мас.%. Очевидно, что скорость горения для такой неоднородной системы изменяется в диапазоне между кривыми 2 и 3 (рис. 2, в). Таким образом, если известна верхняя граница величины локальных отклонений концентраций компонентов, тогда можно сделать оценку снизу скорости фронта волны горения в такой системе. Максимальной скорость горения будет в однородно перемешанной среде.

Анализ влияния величины u_2 на скорость фронта горения показал, что даже небольшие изменения температуры воспламенения смеси могут оказывать заметное влияние на скорость распространения фронта (рис. 2, в, г). Из рисунка видно, что уменьшение u_2 на 10% вызывает увеличение C_0 до 200%. Таким образом, варьируя величину u_2 , например, введением активных добавок в реагирующую смесь, можно существенно влиять на скорость процесса.

Влияние морфологических характеристик порошковых смесей может быть учтено при записи в явном виде коэффициента температуропроводности и скорости тепловыделения при химической реакции.

В заключение отметим, что вид определяющей функции (2) является универсальным для всех многообразных процессов, описываемых бистабильными клеточными автоматами. При этом интенсивность источника определяется аналогом скорости тепловыделения в (1), а интенсивность стока — аналогом коэффициента температуропроводности в (4).

Список литературы

- [1] Зельдович Я.Б., Баренблатт Г.И., Либрович В.Б., Махевладзе Г.М. Математическая теория горения и взрыва. М.: Наука, 1980. 478 с.
- [2] Лоскутов А.Ю., Михайлов А.С. Введение в синергетику. М.: Наука, 1990. 272 с.
- [3] Астапенко А.В., Кушниренко А.Е., Псахье С.Г. // Тр. Междунар. конф. по новым методам в физике и механике деформируемого твердого тела. — Томск, 1990. Ч. 1. С. 287–291.
- [4] Сөирәжев Ю.М. Нелинейные волны, диссипативные структуры и катастрофы в экологии. М.: Наука, 1987. 368 с.
- [5] Итин В.И., Найдороденко Ю.С. Высокотемпературный синтез интерметаллических соединений. Томск, 1989. 214 с.

Институт физики
прочности и материаловедения
Томск

Поступило в Редакцию
25 ноября 1993 г.
