Thermal Dispersion in Spiral Combustion on a Porous Plane Surface

Andrey A. Markov

Ishlinskii Institute for Problems in Mechanics RAS, Moscow, 119526, Russia markov.ipm@yandex.ru

Abstract

The thermal dispersion in spiral combustion on a porous plane surface is studied. The effect of thermal dispersion in a system for which the thermal conductivity of the solid phase significantly exceeds the thermal conductivity of the gas is investigated using the example of the synthesis by combustion of titanium carbide from a mixture of titanium and carbon in air. It has been established that thermal dispersion leads to the formation of a heated circular core resulting from combustion spreading to the region of a large area located near the initiation of combustion. The effect of the ignition duration on the inhomogeneity and expansion of the heated core and the structure of alternating wave zones with local temperature maxima and regions of comparatively low temperature is considered. The study is based on the heat balance equation using the thermal equilibrium of the solid and gas phases. The model includes the dispersion coefficients that depend on local values of gas velocity as well as the Darcy–Brinkman gas filtration equation. The structures of the thermal field are compared with the previously obtained results.

Keywords: thermal dispersion, transient temperature modes, synthesis TiC.



Transient temperature of spiral spin combustion in the region $0 \le \varphi < 2\pi$, $0 < r < R_{ex}$, $R_{ex} = 4$, at time instant t = 0.1. A – dispersion $\zeta_D = 0.2$. B – no dispersion ($\zeta_D = 0$)

УДК 544.42/43

Тепловая дисперсия спирального горения на пористой плоскости

А. А. Марков

ФГБУН Институт Проблем Механики им. А.Ю. Ишлинского РАН Россия, Москва, 119526, просп. Вернадского, 101 markov.ipm@yandex.ru

Аннотация

Предлагается модель тепловой дисперсии для спирального горения на плоской пористой поверхности карбида титана. Изучено влияния тепловой дисперсии на процесс спирального горения в системе, для которой теплопроводность твердой фазы значительно превышает теплопроводность газа, на примере синтеза горением карбида титана из смеси титана с углеродом на воздухе. Установлено, что тепловая дисперсия приводит к образованию нагретого кругового ядра, возникающего вследствие распространения горения на область большой площади, расположенной вблизи инициации горения. Рассмотрено влияние времени инициации горения на неоднородность прогрева ядра и структуру перемежающихся зон с локальными максимумами температуры и областями сравнительно низкой температуры. В основе исследования: уравнения баланса тепла в приближении теплового равновесия твердой и газовой фаз, включающие дисперсионные коэффициенты, которые зависят от локальных величин скорости газа и уравнения фильтрации газа Дарси – Бринкмана. Структуры теплового поля сопоставлены с ранее полученными результатами.

Ключевые слова: численное моделирование спинового горения, нестационарные структуры температуры, синтез TiC.

1. Введение

Передача тепла при горении в пористых средах, наполненных газом, может осуществляться за счет сочетания различных механизмов, а именно теплопроводности, тепловой конвекции, тепловой дисперсии, излучения и др. [1]. Тепловая дисперсия вызывается флуктуациями температуры газа в отдельных порах и обусловлена различиями скорости в порах, извилистостью газового пространства, размерами сгорающих частиц [2–5]. Исследование влияния неравномерности скорости в порах на распределение температуры относится к моделированию на мезо уровне. Поток газа вызывает локальные деформации температурного поля, тем самым увеличивая температурный градиент и улучшая теплопроводность. Дисперсионный поток тепла возникает в результате смешивания локальных потоков газа, движущихся по извилистым траекториям вокруг твердых частиц [1]. Детальная структура пористой среды в значительной степени нерегулярна, и известны лишь некоторые статистические свойства этой структуры. Точное вычисление характеристики течения газа через поровую структуру чрезвычайно сложно. Однако с помощью метода объемного усреднения можно получить уравнение переноса для средней концентрации компонент вещества и средней температуры в пористой среде [1–6].

Были предложены модели усреднения на основе взаимно-проникающих континуумов, в которых утраченная детальная информация о микро-масштабах, таких как конфигурация межфазных границ и присутствует в виде коэффициентов тепло –и массопереноса [1, 2]. В ряде работ показана важность дисперсионных слагаемых в усредненных уравнениях наряду с молекулярной диффузией тепла и вещества [4–6]. Концентрационная и тепловая дисперсия вызывается флуктуациями массового и теплового потока, в то время как причиной диффузии является молекулярное движение. Тепловая дисперсия приводит к неравномерной передаче тепла по различным направлениям в отличие от равномерной по направлениям передачи тепла теплопроводностью. Различные модели анизотропной тепловой и массовой дисперсии изучены в работах [2, 5, 6].

Под спиновым горением (СГ) принято считать режим горения, при котором очаг экзотермической химической реакции движется по спирали. Научный интерес к проблеме СГ обусловлен тем, что это – нелинейное волновое явление, альтернативное обычному послойному горению. В ряде работ экспериментально и теоретически исследовались аспекты СГ при горении в приповерхностном слое около боковой поверхности цилиндрического образца [7–10]. Из [7] следует, что спиновой режим может иметь место и при безгазовом горении. Смену установившихся режимов горения без изменения параметров реагирующих систем удалось реализовать при обдуве горящего образца газовым потоком [8]. Поток газа комнатной температуры направляли вдоль оси цилиндрического образца навстречу фронту горения. Упрощенная математическая модель предложена в [11, 12], где установлено, что СГ является неустойчивым режимом горения. Квазистационарная теория СГ при априорных ограничениях на скорость спина предлагается в [13].

Эксперименты [7–10] показывают влияние режима инициации горения на структуры тепловых полей. Исследовались области температур горения и давления газа в которых спиновый режим горения сменяется апериодическим режимом. С увеличением длительности нагрева реализовалась определенная последовательность режимов горения (спиновое, многоточечное, автоколебательное). Отмечается стабилизирующее влияние газового потока. Наблюдались яркие пятна, которые движутся по спирали. Изучены системы, в которых СГ протекает на поверхности и в объеме. Поведении переходной температуры в СГ, изучено в различных системах, например, при окислении платины на каталитической проволочке из платины, горении гафния и термитных материалов и др.

С нелинейными волнами в СГ связано т.н. неправильное поведение (wrong way behavior) химических реакторов [14–16] при котором происходит повышение переходной температуры из-за быстрого снижения концентрации подаваемых реагентов, флуктуаций тепловых потоков и др. Возникновение неправильного поведения реактора с уплотненным слоем было предсказано в работах [14–16]. Неправильное поведение наблюдалось в эксперименте [17]. Режимы СГ при неправильном поведении переходной температуры в каталитических реакторах изучены в [18, 19]. На переходный режим реактора сильное воздействие оказывает дисперсионный механизм передачи тепла [20, 21].

Более полный обзор работ по СГ можно найти в работах [22, 23], где изучено СГ на плоской поверхности. с применением детального численного анализа в диапазоне чисел Пекле $10^2 \div 10^4$. В итоге, авторам удалось выявить тонкую структуру распространяющегося по образцу спирально раскручивающегося очага горения в широком диапазоне параметров. Показано появление во фронте тонких перемежающихся между собой температурных структур, двигающихся вдоль границы расширяющегося материнского очага и создающих специфическую, пилообразную структуру фронта, характерную для горения на диффузионно-кинетическом пределе распространения фронта реакции. Где горячие выступы – локальные области диффузионно-лимитируемой реакции, холодные выступы – локальные области кинетически лимитируемой реакции.

Данное исследование опирается на результаты [22]. Рассматривается синтез карбида титана в режиме спинового горения: $Le \ll 1$, Ze = 6.03, $T_{ad} = 3300$ K. Целью данного исследования является изучить влияния тепловой дисперсии на процесс СГ в случаях, когда теплопроводность твердой фазы значительно превышает теплопроводность газа, на примере синтеза горением карбида титана на воздухе.

2. Теоретический анализ

2.1. Безразмерные переменные

Рассматривается нестационарное спиральное горение на плоской поверхности. Процессы в толщине слоя пренебрегаются. Это допущение принималось в [21, 22]. Используются безразмерные переменные, отмеченные тильдой: $\tilde{d}_p = d_p/l_0$; $\tilde{t} = t/t_0$; $\tilde{u} = u/u_0$; $\tilde{v} = v/u_0 ; \quad \tilde{a}_g = a_g/a_{0g} ; \quad a_{0g} = \lambda_0/c_{p0}\rho_0 ; \quad \tilde{\rho}_g = \rho_g/\rho_{air} ; \quad \tilde{\lambda}_{\Sigma} = \lambda_{\Sigma}/\lambda_{air} ; \quad \lambda_{\Sigma} = \chi\lambda_{air} + (1-\chi)\lambda_{\text{TiC}} ;$ $\tilde{d}_p = 10^{-2}; \ \hat{\alpha}_{ex} = \alpha_{ex} t_0 \text{ A}/(c_p \rho_0 V); \ \text{Ma} = u_0 / \sqrt{\gamma p_0 / \rho_0} -$ число Маха; $\text{Re} = l_0^2 / t_0 v_{air} -$ число Рейнольдса; $Pe_T = \frac{l_0^2 \left[\chi \rho_{air} c p_{air} + (1 - \chi) \rho_{TiC} c p_{TiC} \right]}{t_c \lambda_c}$ – тепловое число Пекле, которое незначительно зависит от пористости, так при $\chi = 0.1$, $\chi = 0.5$, $\chi = 0.9$ Pe_T = 2.89×10^3 , $Pe_T = 2.87 \times 10^3$, $Pe_T = 2.65 \times 10^3$ соответственно; $Re \approx 1$, (Re = 1.16). Здесь, $t_0 = 2(s)$; $l_0 = 0.015 \text{ (m)}$; $u_0 = 7.5 \times 10^{-3} \text{ (m/s)}$; $p_0 = \rho_0 T_0 R/M_0$; $D_0 = 2 \times 10^{-5} \text{ (m}^2/\text{s)} - 10^{-5} \text{ (m}^2/\text{s)}$ характерный коэффициент диффузии; χ – пористость; $\rho_0 = \rho_{air} = 0.4(\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})$ – плотность воздуха; $\lambda_0 = \lambda_{air} = 0.06 (W/m/K)$ – теплопроводность воздуха; $\lambda_{TiC} = 6.8 (W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1})$ – теплопроводность карбида титана; $c_p = C_{p,air} = 1114 (J/kg/K)$ – теплоемкость воздуха; $C_{\rm TiC} = 1800 ({\rm J/kg/K})$ – теплоемкость карбида титана; $d_p = 10^{-4} ({\rm m})$ – средний диаметр частицы твердой фазы; $v_{air} = 9.7 \times 10^{-5} (\text{m}^2/\text{s})$ –кинематическая вязкость; ρ_g – плотность газовой фазы. Температура находится по формуле $T_g = T_0 \left(1 + \beta \tilde{T}_g\right)$, где $\beta = RT_0/E$ – безразмерный параметр, характеризующий энергию активации, R, E – газовая постоянная; энергия активации $\tilde{Q} = \frac{Qt_0k}{\rho_0 c_n T_0}$, где Q – тепловой эффект горения; $\gamma = c_P T_0 \beta / Q$. Давление газа $p =
ho_g T_0 (1 +
ho ilde{T_g}) R / M_0$, где R – газовая постоянная, R = 8.3 (Дж/моль), M_0 – средняя молярная масса воздуха, $M_0 = 0.2.9(\kappa r/моль); \xi$ – коэффициент извилистости пор; k_f – коэффициент проницаемости в законе Дарси; ho_g – плотность газа; ho_{lS} – плотность карбида титана; k –константа скорости реакции горения, $\tilde{k} = t_0 k / \rho_0$; $\hat{\alpha}_{ex}$ – коэффициент теплообмена с внешней средой; $\tilde{\lambda}_g$ – коэффициент теплопроводности; \tilde{D} – коэффициент диффузии, индекс air относится к параметрам для воздуха при нормальных условиях; u, v – угловая и радиальная компоненты скорости в полярной системе координат ϕ, r . Далее переменные – безразмерные, тильда опускается.

2.2. Базовые уравнения

Уравнение движения газа в модели, является нестационарным, включает: градиент давления, сопротивление движению газа в порах и потерю количества движения на преодоление вязкого трения согласно модели Дарси – Бринкмана [24].

$$\frac{\partial \chi \rho_g \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{1}{\mathrm{Ma}^2} \nabla p = -\frac{\chi}{\mathrm{k}_f \mathrm{Re}} \mathbf{u} + \frac{\chi}{\xi \mathrm{Re}} (\nabla \cdot \mathbf{\tau}), \quad p = \rho_g (1 + \beta T)$$
(1)

Уравнение баланса тепла для теплового равновесия газа и твердой фазы включает тепловыделение в процессе горения, конвективный, кондуктивный и дисперсионный механизмы передачи тепла.

$$\left[\rho_{g}c_{pg}\chi + \rho_{S}c_{S}\left(1-\chi\right)\right]\left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u}\cdot\nabla T\right) = \nabla\cdot\left[\frac{1}{\operatorname{Pe}_{T}}\left(\chi + (1-\chi)\frac{\lambda_{\mathrm{TiC}}}{\lambda_{0}}\right)\nabla T\right] + Q_{D} + Q_{r}$$
(2)

Здесь $Q_r = Q\chi(1-\chi)\rho_{1S}\rho_g k \exp\left(\frac{T}{\beta T+1}\right)$ – тепловой поток экзотермической реакции; Q_D – дисперсионный тепловой поток, $Q_D = \zeta_D \nabla \cdot [(1.8|u|+0.025|v|)\nabla T]$, учитывающий анизо-

тропию тепловой дисперсии в продольном и радиальном направлениях ([3]). Параметр дисперсии записывается в виде

$$\zeta_D = \chi \, d_p \, \frac{\lambda_{\rm TiC}}{\lambda_0},\tag{3}$$

где χ – пористость; d_p – диаметр частиц; $\frac{\lambda_{\text{TiC}}}{\lambda_0}$ – отношение теплопроводностей карбида титана и газа. Уравнение сохранения массы газа

$$\frac{\partial \chi \rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\chi \rho_g \, \mathbf{u} \right) = 0 \tag{4}$$

2.3. Граничные и начальные условия

Решение уравнений (1–4) проводится в области $G_b = \{0 < r \le R_{ex}, \forall \phi\}$.В начальный момент времени задается скорость газа, $v(0, \varphi, r) = V_0$, $u(0, \varphi, r) = U_0$, плотности ρ_g , ρ_S и температура T. На внешней границе ставятся условия свободного теплообмена с внешней средой с коэффициентом теплообмена α_{ex} , индекс *ex* относится к параметрам внешней среды. $\operatorname{Pe}_T^{-1} \cdot \nabla T = \alpha_{ex} (T_{ex} - T)$. Используются условия периодичности. $f(t, r, 0) = f(t, r, 2\pi)$, где f обозначает любую из искомых переменных: скорость, температуру давление и плотность компонент газовой и твердой фаз.

 $f(t,r,0) = f(t,r,2\pi), f = T, u, v, p, \rho_g, \rho_{1S}, \rho_{2S}, где \rho_{1S}, \rho_{2S} - плотность реагента и продукта горения. Горение инициируется в области <math>G_{in}$ нагреванием смеси до температуры T_{in} ,

$$t = 0, \ (x, y) \in G_{in} : T = T_{in}, \ G_0 = \{0 < r \le r_0, \forall \phi\}, \ G_b = \{0 < r \le R_b, \forall \phi\}, G_{in} = \{r_0 < r \le r_0 + s, \ 0 \le \phi \le \pi/2\}, \ (x, y) \in G_b \setminus G_{in} : T = T_{ex}$$

В области G_{in} , $G_{in} = \{r_0 < r \le r_0 + s, 0 \le \phi \le \pi/2\}$ на интервале времени $0 < t < t_{in}$ производится нагрев смеси газа и частиц карбида титана до температуры T_{in} , $(x, y) \in G_{in}$: $T = T_{in}$. В остальной части расчетной области $G_b = \{0 < r \le R_{ex}, \forall \phi\}$ задается начальная температура: t = 0, $(x, y) \in G_b \setminus G_{in}$: $T = T_{ex}$.

3. Результаты моделирования. Обсуждение

Результаты численного решения уравнений (1)–(4) при граничных и начальных условиях представлены на рисунках 1–8 для тонкого пористого горизонтального диска из смеси титана с углеродом, с малым отношением толщины к диаметру (5:50) и без учета вертикальных распределений по толщине диска (как и ранее предполагалось в [22]) при тепловом числе Пекле $Pe_T = 2.87 \times 10^3$, диапазоне температур $0 \le T_{in} \le 5$, $T_{ex} = -1/\gamma$ и параметрах закрутки газового потока: $U_0 = -50$, $V_0 = 10$, где U_0 и V_0 – угловая и радиальная компоненты скорости газа в начальный момент времени. Применена модель Дарси – Бринкмана (1) с

параметрами: Re = 1, k_f = 0.2, $\xi = 1$ для пористости $\chi = 0.5$ и диаметра частиц $\chi \tilde{d}_p \sim 0.001 \div 0.004$. Величина дисперсионного теплового потока Q_D находилась варьированием параметра ζ_D в диапазоне $0 \le \zeta_D \le 1$. Моделирование проводилось в области $0 \le \varphi < 2\pi$, $0 < r < R_{ex}$. Внешняя граница $R_{ex} = 4$ на рис. 1, 2 и $R_{ex} = 2$ на рис. 3–8.

Расчеты спинового горения проведены на основе метода конечных элементов (МКЭ), с использованием разбиения области моделирования на достаточное большое число элементарных ячеек треугольной формы (см. рис. 7), в каждой из которых искомое решение аппроксимируется полиномом от координат (x, y) по значениям искомых величин температуры, плотности компонент фаз, давления и скорости газа в вершинах треугольной ячейки с криволинейными границами при условиях непрерывности потоков на границах ячеек. Аппроксимации – неявные, первого либо второго порядка точности по времени, для расчета текущего временного слоя. Для решения нелинейных уравнений на текущем временном слое применяется стандартная методика [25]. Методика на основе МКЭ ранее успешно применялась в [22, 23], а также при моделировании процессов горения в химических реакторах синтеза микронных порошков см., например [21], где проводилось сравнение результатов с экспериментом и при увеличении числа расчетных ячеек. Согласно оценкам [22, 23] прямое экспериментальное измерение температуры в спине оказывается технически невозможным (на площади головы спина укладывается буквально 3-5 зерен микронного размера и его теплоемкость становится сопоставимой с теплоемкостью термопары). Появление двухголового и трехголового спина изучено экспериментально на боковой поверхности цилиндрического образца. Температура горения не приводится.

В данной работе рассматривается горение на плоскости диска, которое проявляется существенно сложнее, чем на боковой поверхности образца. Вместо прямого сравнения расчетов с экспериментами на боковой поверхности цилиндрического образца [7, 8, 10], приходится ограничиться качественным сопоставлением по появлению трансформаций нагретого ядра (головы спина) по мере движения спина вдоль оси ординат, а также пересечения спином точек на окружности, и превращением нагретого ядра в двухголовую форму спина при различных величинах тепловой дисперсии и режимах начального нагрева зоны инициации горения.

Рисунок 1 показывает поле температуры в одинаковый момент времени в случае дисперсии температуры $\zeta_D = 0.2$ (рис. 1, А) и при нулевой дисперсии $\zeta_D = 0$ (рис. 1, В). Неоднородное поле температуры (рис. 1, С) в начальный момент времени инициации горения генерирует расширяющийся по времени одноголовый спин, с перемежающимися областями нагретых и холодных зон. Максимумы температуры на рис. 1, А и 1, В обусловлены локальными зонами диффузионно-лимитируемой реакции, а холодные выступы – локальным зонам кинетически лимитируемой реакции.



Рис. 1. Сопоставление температурных полей при тепловой дисперсии с расчетом, пренебрегающим дисперсией тепла в области $0 \le \varphi < 2\pi$, $0 < r < R_{ex}$, $R_{ex} = 4$, $t_{init} = 0.05$. А – температура $T(0.1, \varphi, r)$, $\zeta_D = 0.2$ (см. (3)). В – температура $T(0.1, \varphi, r)$, $\zeta_D = 0$ расчет без дисперсии. С – распределение температуры в начальный момент времени. Иллюстрируется зона G_{in}

Дисперсия приводит к образованию устойчивого нагретого ядра (см. рис. 1, А) в центральной области спина. Тепловая дисперсия является своеобразным триггером формирования нагрева в центре спина, посредством теплопередачи из перегретой области инициации горения, интенсифицируя горение на большой площади в центре.

На рис. 2 показаны тепловые поля спинового горения для трех моментов времени t = 0.3.0.4, 0.5 при дисперсии $\zeta_D = 0.2$, $t_{init} = 0.05$. Отметим рост нагретого ядра во времени. Вокруг ядра раскручивается нагретая спираль, занимая расширяющуюся область пористой поверхности. Далее иллюстрируются результаты при продолжительном времени инициации $t_{init} = 0.15$.



Рис. 2. Влияние тепловой дисперсии на температурное поле закрученного спинового горения при, $\zeta_D = 0.2$, $t_{init} = 0.05$ в области $0 \le \varphi < 2\pi$, $0 < r < R_{ex}$, $R_{ex} = 4$. А $- T(0.3, \varphi, r)$; В $-T(0.4, \varphi, r)$; С $- T(0.5, \varphi, r)$

Сравнение максимумов температуры на линиях 1 и 2 (рис. 3, А) показывает опережение в моментах времени появления голов спина в сравнении с моделью $\zeta_D = 0$ [22, 23], причем отмеченное опережение уменьшается при удалении от ядра спина, (сравним линии 1 и 2 на рис. 3, А и рис. 3, В). Линия 3 демонстрирует значительный перегрев ядра спина при большой дисперсии, обусловленный длительным нагревом. С увеличением дисперсии увеличивается площадь инициации горения.



Рис. 3. А – динамика температуры T(t), x = 0, y = 0.25; В – динамика температуры T(t), x = 0, y = 0.5. Линии 1, 2 и 3 – изменение температуры при дисперсии $\zeta_D = 0, \zeta_D = 0.1$ и $\zeta_D = 0.8$

Зона горячего ядра при большой дисперсии $\zeta_D = 0.6$ иллюстрируется также на рис. 4. Второй локальный максимум температуры на линиях 1, 2 и 3 связан с появлением второй головы спина по мере прохождения точек на оси ординат x = 0, y = 0.25 и x = 0, y = 0.5.



Рис. 4. Динамика температуры газа в области 0 < r < 2 при дисперсии $\zeta_D = 0.6$ представлена температурными полями в моменты времени t = 0.05, 0.15. А $- T(0.05, \varphi, r)$ и В $- T(0.15, \varphi, r)$

Отметим охлаждение ядра (рис. 5, А), обусловленное прекращением нагрева при $t > t_{init}$. Волновая динамика температурного поля (рис. 5, В) сменяется почти равномерным нагревом в точках окружности r = 1 от головы спина (линии 2,...,12 мало отличаются друг от друга в интервале 0 < t < 0.7). К моменту времени t = 2 нагретое ядро спина достигает окружности r = 1 в точках которой сохраняется высокая температура. Понижение температуры при t > 0.4 происходит из-за прекращения нагрева при $t > t_{init}$.



Рис. 5. Динамика температуры в области 0 < r < 2 при дисперсии $\zeta_D = 0.4$. А – тепловое поле $T(0.23, \varphi, r)$ в момент времени t = 0.23; В – динамика температуры $T(t, \varphi, r)$. Линия 1 – изменение температуры в начале координат, линии 2,..., 12 – зависимости температуры от времени в точках на окружности единичного радиуса r = 1

Волновая динамика температурного поля (рис. 5, В) сменяется областью с температурой $T \approx 4$, и далее происходит почти равномерный нагрев в точках окружности r = 1 от ядра спина (линии 2,...,12). Дальнейшее понижение температуры при t > 0.4 происходит до температуры на внешней границе из-за прекращения нагрева. С уменьшением дисперсии уменьшается температура головы спина. Отметим, что при $\zeta_D = 0.4$ температура ядра значительно ниже, чем при $\zeta_D = 0.8$ (см. рис. 3).

Рисунок 6 иллюстрирует динамику спина по мере удаления от первоначально сформировавшегося ядра. Отметим второй локальный максимум температуры на линиях 1, 2 и 3. Рис. 6, А, где четко обозначено появление двухголового спина в момент его прохождения точки с координатами x = 0, y = 0.75. На больших удалениях от ядра в точке с координатами x = 0, y = 1.5 происходит формирование многоголовой структупы спина, но при меньшей температуре, вызванной теплообменом на внешней границе.



Рис. 6. А – динамика температуры T(t), x = 0, y = 0.75. В – динамика температуры T(t), x = 0, y = 1.5. Линии 1, 2 и 3 – изменение температуры при дисперсии $\zeta_D = 0$, $\zeta_D = 0.1$ и $\zeta_D = 0.8$

Влияние размера ячеек при расчетах без тепловой дисперсии анализироалось в [20]. В данной работе расчеты на сетках с уменьшением размера ячеек показаны на рис. 7 при диаметре ячеек $d_{grid} = 0.15, 0.1$ и $d_{grid} = 0.05$.



Рис. 7. Сравнение температуры $T(0.15, \varphi, r)$ для дисперсии $\zeta_D = 0.2$ при различном диаметре d_{grid} расчетных ячеек: $d_{grid} = 0.15, 0.1$ и $d_{grid} = 0.05$ (рис. A1, B1, C1) в момент времени t = 0.15 на сетках рис. 8, A, рис. 8, B и рис. 8, C соответственно

Отметим достаточно слабое влияние сеток $d_{grid} = 0.15, 0.1$ и $d_{grid} = 0.05$ на изменение температуры в области моделирования тепловой дисперсии спинового горения на плоскости.

Рисунок 8 демонстрирует достаточную точность моделирования дисперсии при уменьшении размера ячеек расчета на примере сравнения расчетов динамики температуры в точках x = 0, y = 0.25 и x = 0, y = 0.5 на трех сетках $d_{grid} = 0.2, 0.15, 0.1$.



Рис. 8. Сравнение температуры – для дисперсии $\zeta_D = 0.2$ при различном диаметре d_{grid} расчетных ячеек. А – T(t), x = 0, y = 0.25; В – T(t), x = 0, y = 0.5. Линии 1, 2, 3 – $d_{grid} = 0.2, 0.15, 0.1$

Результаты моделирования на рис. 1–8 демонстрируют влияние тепловой дисперсии на развитие спирального спинового горения при удалении от ядра инициации горения. На внешней границе происходит свободный теплообмен с холодной внешней средой. Предложена модель дисперсии с коэффициентами рассеяния тепла в круговом и радиальном направлениях, зависящими от локальной скорости газа в порах. Показано, что формируется нагретое ядро в виде кругового диска, диаметр которого растет со временем. Триггером образования нагретого диска при малой молекулярной теплопроводности является тепловая дисперсия, интенсифицирующая горение на большой площади. Следует отметить, что в пренебрежении дисперсией центральная область диска остается относительно холодной [22]. Спин, вызванный инициацией горения и закруткой газа, трансформируется в нагретое ядро, вокруг которого возникают перемежающиеся зоны с высокой и пониженной температурой. Показана динамика перемежающихся структур в зависимости интенсивности дисперсии, которая задается параметром ζ_D , $0 \leq \zeta_D \leq 1$.

Перемежающиеся структуры тепловых полей были получены ранее в пренебрежении тепловой дисперсией и по́ровым сопротивлением. Результаты данного исследования, (см. рис. 1) качественно соответствуют опубликованным данным [22] при моделировании теплопереноса в области $0 < r < R_{ex}, R_{ex} = 4$ (см. рис. 1, 2). По́ровое сопротивление замедляет конвективный отток тепла из зоны горения. Тепловая дисперсия приводит к повышению температуры вблизи границы r = 1 и этот перегрев увеличивается с ростом тепловой дисперсии (см. рис. 5, 6).

Горячее ядро определяется самосогласованным влиянием трех факторов: тепловой конвекции, дисперсии и теплопроводности.

4. Заключение

Проведено численное исследование перемежающихся тепловых структур (рис. 1–8) спирально раскручивающихся очагов горения на пористой поверхности в режимах существенного влияния тепловой дисперсии (ТД)) на пределе однородного самовоспламенения поверхности кругового плоского диска. Характерное время возникновения двухголового спина происходит с опережением в сравнении с моделью $\zeta_D = 0$. Установлено, что ТД приводит к образованию нагретого кругового ядра, возникающего вследствие дисперсии, которая способствует распространению горения на область большой площади, расположенной вблизи инициации горения. Ядро расширяется со временем. Вокруг ядра формируется структура спирально раскручивающихся зон с локальными максимумами температуры и областями сравнительно низкой температуры. Отмечен эффект перегрева вблизи границы r = 1, возникающий перед последующим охлаждением из-за свободного теплообмена на внешней круговой границе. Расчеты показали, что при малой молекулярной теплопроводности нагретое ядро возникает при взаимном влиянии тепловой дисперсии и быстрого конвективного переноса тепла в радиальном направлении из головы спина.

Благодарности и ссылки на гранты

Работа выполнена по теме государственного задания № госрегистрации 124012500440-9.

Литература

- Whitaker S. Transport equations for multi-phase systems // Chemical Engineering Science. 1973. Vol. 28. Pp. 139–147.
- Hsu C. T., Cheng P. Thermal dispersion in a porous medium // Int. J. Heat Mass Transf. 1990. Vol. 33. Pp. 1587–1597.
- 3. Fatehi M., and Kaviany M. Role of gas-phase reaction and gas-solid thermal nonequilibrium in reverse combustion // Int. J. Heat Mass Transfer. 1997. Vol. 11. Pp. 2607–2620.
- 4. Pereira F. M., Oliveira A. A. M., and Fachini F. F. Theoretical analysis of ultra-lean premixed flames in porous inert media // J. Fluid Mech. 2010. Vol. 657. Pp. 285–307.
- 5. Fatehi M., and Kaviany M. Role of gas-phase reaction and gas-solid thermal nonequilibrium in reverse combustion // Int. J. Heat Mass Transfer. 1997. Vol. 11. Pp. 2607–2620.
- 6. Delgado J.M.P.Q. Longitudinal and transverse dispersion in porous media // Chemical Engineering Research and Design. 2007. Vol. 85, issue 9. Pp. 1245–1252.
- Максимов Ю. М., Пак А. Т., Лавренчук Г. В., Найбороденко Ю. С., Мержанов А. Г. Спиновое горение безгазовых систем // Физика горения и взрыва. Краткие сообщения. 1979. Том 15, вып. 3. С. 156–158.
- 8. Barelko V., Kurochka I. I., Merzhanov A. G., Shkadinskii K. G. Investigation of travelling waves on catalytic wires. Chem. Eng. Sci. 1978. Vol.33, issue 7. Pp.805–811.
- 9. Дворянкин А. В., Струнина А. Г., Мержанов А. Г. Устойчивость горения термитных систем // Физика горения и взрыва. 1985. Т. 21, вып. 4. С. 44–47.
- Vadchenko S. G., Filimonov I. A. Wave combustion modes of hafnium in nitrogen // Combust Explos Shock Waves. 1999. Vol. 35. Pp. 155–161. https://doi.org/10.1007/BF02674429
- 11. Ивлева Т. П., Мержанов А. Г., Шкадинский К. Г. Математическая модель спинового горения // Докл. АН СССР. 1978. Т. 239, номер 5. С. 1086–1088.
- 12. Ивлева Т. П., Мержанов А. Г Трехмерные спиновые волны безгазового горения // Доклады Академии наук. 2000. Т. 371, номер 6. С. 753–758.
- Novozhilov B. V. Quasistationary theory of spiral combustion regime // Internat. J. SHS. 1993. Vol. 2. No. 3. Pp. 207–213.
- 14. Sharma C. S., and Hughes R. The Behavior of an Adiabatic Fixed Bed Reactor for the Oxidation of Carbon Monoxide–I: General Parametric Studies // Chem. Eng. Sci. 1979. Vol. 34, iss. 5. Pp. 613–624.
- 15. Sharma C. S., and Hughes R. The Behavior of an Adiabatic Fixed Bed Reactor for the Oxidation of Carbon Monoxide–II: Effect of Perturbations // Chem. Eng. Sci. 1979. Vol. 34, iss. 5. Pp. 625–634.

- 16. Mehta P. S., Sams W. N., Luss D. Wrong-way behavior of packed-bed reactors: 1. The pseudohomogeneous model // AIChE J. 1981. Vol. 27. Pp. 234–246. https://doi.org/10.1002/aic.690270210
- Boreskov G. K., and Slinko M. G. Modelling of Chemical Reactors // Pure Appl. Chem. 1965. Vol. 10, issue 4. Pp. 611–624.
- 18. Crider J. E., and Foss A. S. Computational Studies of Transients in Packed Tubular Chemical Reactors // AIChE J. 1966. Vol. 12, issue 3. Pp. 514–522.
- 19. Hoiberg J. A., Lyche B. C., and Foss A. S. Experimental Evaluation of Dynamic Models for a Fixed-Bed Catalytic Reactor // AIChE J. 1971. Vol. 17. P. 1434.
- 20. Pinjala V., Chen Y. C., Luss D. Wrong-way behavior of packed-bed reactors. II. Impact of thermal dispersion // AIChE J. 1988. Vol. 34, issue 10. Pp. 1663–1672.
- 21. Марков А. А. Газодинамические и тепловые эффекты синтеза Микронных частиц методом горения углерода в прямоточном и трехзонном реакторе // МЖГ. 2022. № 3. С. 17–29.
- 22. Марков А. А., Филимонов И. А. Модель нестационарного спирального горения на плоскости // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2021. Т. 22, вып. 3. http://chemphys.edu.ru/issues/2021-22-3/articles/935/
- 23. Марков А. А., Филимонов И. А. Нестационарные структуры спирального горения на поверхности // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2021. Т. 22, вып. 3. http://chemphys.edu.ru/issues/2021-22-3/articles/938/
- 24. Scheidegger A. E. The Physics of Flow through Porous Media. University of Toronto Press.1974. 353 p.
- 25. Donea J., A. Huerta A. Finite Element Methods for Flow Problems. John Wiley and Sons. 2003.

References

- 1. Whitaker S., Transport equations for multi-phase systems, *Chemical Engineering Science*, 1973, vol. 28, pp. 139–147. https://doi.org/10.1016/0009-2509(73)85094-8
- 2. Hsu C. T., Cheng P., Thermal dispersion in a porous medium, *Int. J. Heat Mass Transf.*, 1990, vol. 33, pp. 1587–1597. https://doi.org/10.1016/0017-9310(90)90015-M
- Fatehi M., and Kaviany M., Role of gas-phase reaction and gas-solid thermal nonequilibrium in reverse combustion, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 1997, vol. 11, pp. 2607–2620. https://doi.org/10.1016/S0017-9310(96)00282-7
- Pereira F. M., Oliveira A. A. M., and Fachini F. F., Theoretical analysis of ultra-lean premixed flames in porous inert media, *J. Fluid Mech.*, 2010, vol. 657, pp. 285–307. https://doi.org/10.1017/S0022112010001461
- Fatehi M., and Kaviany M., Role of gas-phase reaction and gas-solid thermal nonequilibrium in reverse combustion, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 1997, vol. 11, pp. 2607–2620. https://doi.org/10.1016/S0017-9310(96)00282-7
- 6. Delgado J.M.P.Q., Longitudinal and transverse dispersion in porous media, *Chemical Engineering Research and Design*, 2007, vol. 85, issue 9, pp. 1245–1252. https://doi.org/10.1205/cherd07017
- Maksimov Yu. M., Pak A. T., Lavrenchuk G. V., Naiborodenko Yu. S., Merzhanov A. G., Spin combustion of gasless systems, *Combustion, Explosion and Shock Waves*, 1979, vol. 15, issue 3, pp. 415–418. https://doi.org/10.1007/BF00785083
- Barelko V., Kurochka I. I., Merzhanov A. G., Shkadinskii K. G., Investigation of travelling waves on catalytic wires, *Chem. Eng. Sci.*, 1978, vol.33, issue 7, pp.805–811. https://doi.org/10.1016/0009-2509(78)85169-0
- 9. Dvoryankin A. V., Strunina A. G., Stability of combustion in thermite systems, *Combustion, Explosion and Shock Waves*, 1985, vol. 21, no. 4, pp. 421–425. https://doi.org/10.1007/BF01463412
- 10. Vadchenko S. G., Filimonov I. A. Wave combustion modes of hafnium in nitrogen, *Combust Explos Shock Waves*, 1999, vol. 35, pp. 155–161. https://doi.org/10.1007/BF02674429

- 11. Ivleva T. P., Merzhanov A. G., Shkadinskii K. G., A mathematical model of spin burning, *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 1978, vol. 239, no. 5, pp. 1086–1088 [in Russian].
- 12. Ivleva T.P., Merzhanov A. G., Three-dimensional spinning waves in the case of gas-free combustion, *Doklady Physics*, 2000, vol. 45, no. 4, pp. 136–141. DOI: 10.1134/1.171725
- 13. Novozhilov B. V., Quasistationary theory of spiral combustion regime, *Internat. J. SHS.*, 1993, vol. 2, no. 3, pp. 207–213.
- Sharma C. S., and Hughes R., The Behavior of an Adiabatic Fixed Bed Reactor for the Oxidation of Carbon Monoxide–I: General Parametric Studies, *Chem. Eng. Sci.*, 1979, vol. 34, iss. 5, pp. 613–624. https://doi.org/10.1016/0009-2509(79)85106-4
- Sharma C. S., and Hughes R., The Behavior of an Adiabatic Fixed Bed Reactor for the Oxidation of Carbon Monoxide–II: Effect of Perturbations, *Chem. Eng. Sci.*, 1979, vol. 34, iss. 5, pp. 625–634. https://doi.org/10.1016/0009-2509(79)85107-6
- 16. Mehta P. S., Sams W. N., Luss D., Wrong-way behavior of packed-bed reactors: 1. The pseudohomogeneous model, *AIChE J.*, 1981, vol. 27, pp. 234–246. https://doi.org/10.1002/aic.690270210
- 17. Boreskov G. K., and Slinko M. G., Modelling of Chemical Reactors, *Pure Appl. Chem.*, 1965, vol. 10, issue 4, pp. 611–624. DOI:10.1351/PAC196510040611
- 18. Crider J. E., and Foss A. S., Computational Studies of Transients in Packed Tubular Chemical Reactors, *AIChE J.*, 1966, vol. 12, issue 3, pp. 514–522. https://doi.org/10.1002/aic.690120322
- 19. Hoiberg J. A., Lyche B. C., and Foss A. S., Experimental Evaluation of Dynamic Models for a Fixed-Bed Catalytic Reactor, *AIChE J.*, 1971, vol. 17, p. 1434.
- 20. Pinjala V., Chen Y. C., Luss D., Wrong-way behavior of packed-bed reactors. II. Impact of thermal dispersion, *AIChE J.*, 1988. Vol. 34, issue 10. Pp. 1663–1672. DOI:10.1002/aic.690341010
- Markov A. A., Gasdynamic and Thermal Effects of the Synthesis of Micron-Sized Particles by the Carbon Combustion Method in Straight-Flow and Three-Zone Reactors, *Fluid Dynamics*, 2022, vol. 57, no. 3, pp. 234–246. DOI: 10.1134/S0015462822030132
- Markov A. A., and Filimonov I. A., Unsteady model of spiral combustion on a plane surface, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2021, vol. 22, issue 3 [in Russian]. http://doi.org/10.33257/PhChGD.22.3.935
- 23. Markov A. A., Filimonov I. A., Unsteady patterns of spiral spin combustion, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2021, vol. 22, iss. 3. http://doi.org/10.33257/PhChGD.22.3.938
- 24. Scheidegger A. E., *The Physics of Flow through Porous Media*, University of Toronto Press.1974. 353 p.
- 25. Donea J., Huerta A., Finite Element Methods for Flow Problems, John Wiley & Sons, 2003, 362 p.

Статья поступила в редакцию 7 ноября 2024 г.