

УДК 532.529

Время задержки воспламенения мелкодисперсных частиц при случайной температуре газа*

И.В. Деревич, Д.Д. Галдина

Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана

E-mail: DerevichIgor@bmstu.ru

На основе уравнения Понтрягина для среднего времени первого выхода случайного процесса из заданного интервала исследуется среднее время ожидания момента воспламенения частиц в турбулентном потоке газа. Разработан метод прямого численного моделирования флуктуаций температуры газа с заданной автокорреляционной функцией и флуктуаций температуры частиц с экзотермической химической реакцией. Метод основан на численном решении системы стохастических дифференциальных уравнений. Результаты прямого численного моделирования тестируются путем сравнения с аналитическими решениями, полученными ранее для частиц без тепловыделения. Аналитические расчеты времени воспламенения и расчеты, выполненные методом прямого численного моделирования, удовлетворительно согласуются между собой.

Ключевые слова: турбулентность, воспламенение, экзотермические химические реакции, функция плотности вероятности, тепловая инерция частиц, флуктуации температуры, уравнение Понтрягина.

Введение

Изучение поведения систем взрывного типа в среде с флуктуирующими параметрами имеет важное научное и практическое значение. В связи с этим исследуются вопросы, связанные, в частности, с воспламенением дисперсного топлива в турбулентных потоках в энергетических установках, с анализом аварийных ситуаций при хранении и транспортировке мелкодисперсных материалов, прогнозом тепловых взрывов в реакторах синтеза и в угольных шахтах (см., например, работы [1–3]).

Существенный прогресс в теоретическом исследовании проблемы влияния шумов на взрывное поведение рассматриваемых систем обусловлен привлечением современных методов теории случайных процессов и функционального анализа [4–7]. Показано, что поведение динамических систем взрывного типа в среде с флуктуациями параметров качественно отличается от детерминированного случая. В динамических системах взрывного типа существует критический уровень параметров, малое превышение которых приводит к неконтролируемым изменениям (см., например, [8]). Случайный процесс, в отличие от детерминированных вариаций, с ненулевой вероятностью пересечет любой установленный уровень [9–11]. Очевидно, что чем дальше удален этот уровень от начального состояния, тем больше время ожидания первого пресечения случайным процессом

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект проекта 14-08-00970).

этого уровня. Для процесса Маркова Понтрягиным получено уравнение для расчета моментов времени первого выхода случайного процесса из границ заданного интервала (см., например, работу [11]).

Настоящая работа является продолжением исследований, связанных с анализом тепловой стабильности частиц с экзотермической химической реакцией в газе с флуктуациями температуры [12], в ней представлен анализ времени ожидания воспламенения частиц в турбулентном неизотермическом потоке газа. Изменение границы начала воспламенения частиц в турбулентных потоках может повлиять на размеры и компоновку камер сгорания, на критерии безопасности эксплуатации и транспортировки мелкодисперсной горючей примеси.

В случае гетерогенных экзотермических химических реакций в частицах термины “воспламенение” и “тепловой взрыв” будем считать синонимами [12]. Время ожидания воспламенения трактуется как среднее время первого пересечения случайной температурой частиц критического уровня, величина которого следует из классической диаграммы Семенова.

В настоящей работе исследование времени ожидания теплового взрыва реализовано двумя принципиально различными подходами. Аналитический подход основан на уравнении Понтрягина [11] для среднего времени первого выхода случайной температуры частиц за критический уровень. Следует отметить, что случайный процесс независимо от начальной координаты всегда с ненулевой вероятностью пересечет границы заданного интервала. Для записи уравнения Понтрягина привлекается уравнение Колмогорова для функции плотности вероятности (ФПВ) температуры частиц, полученное в работе [12]. Аналитическое исследование позволяет проанализировать физику процесса и основные факторы, влияющие на время задержки воспламенения. Другой подход основан на прямом численном моделировании случайной температуры газа и частиц с экзотермической химической реакцией. Временная структура флуктуаций температуры газа моделируется на основе решения стохастического обыкновенного дифференциального уравнения (СОДУ) релаксационного типа. Система СОДУ для случайных температур газа и частиц интегрируется численно методом Эйлера–Маруямы (см., например, [13, 14]). Прямое численное моделирование представляет детальную картину изменения случайной температуры частиц. Однако для получения выводов, имеющих практическую ценность, необходимо осреднение десятков тысяч случайных траектории в фазовом пространстве температур. Поэтому в настоящей работе метод прямого численного моделирования используется для иллюстрации корректности результатов, полученных аналитическим путем. Предложенная методика прямого численного моделирования в свою очередь тестируется на основе сопоставления осредненных параметров с результатами точных аналитических решений, полученных для системы СОДУ при отсутствии тепловыделения в частицах [15, 16].

1. Уравнение для времени ожидания теплового взрыва

Из результатов работы [12] следует, что воспламенение — неконтролируемый рост температуры частиц — наступает в случайный момент времени ζ_{cr} , когда актуальная температура частиц превосходит критическое значение $\Theta_p(\zeta_{cr}) \geq \Theta_{cr}$. Критическое значение температуры Θ_{cr} следует из классической диаграммы Семенова. Осредненное значение первого времени выхода температуры частиц за пределы Θ_{cr} равно среднему времени ожидания воспламенения. Уравнением для расчета среднего времени задержки теплового взрыва является уравнение Понтрягина, которое получается на основе прямого уравнения Колмогорова (см., например, [10]). Прямое уравнение Колмогорова для ФПВ определяется динамикой изменения актуальной температуры частиц $\Theta_p(t)$ [12]

$$\frac{d\Theta_p(t)}{dt} = \frac{1}{\tau_\Theta} [\Theta_f(t) - \Theta_p(t)] + \frac{QA}{c_p} \exp\left[-\frac{E}{R_u \Theta_p(t)}\right], \quad (1)$$

здесь $\Theta_f(t)$ — случайная температура газа, Q — тепловой эффект реакции, A — предэкспоненциальный множитель, E — энергия активации, R_u — универсальная газовая постоянная, c_p — теплоемкость материала частиц, τ_Θ — время тепловой релаксации частиц.

Параметры случайной температуры газа вдоль траектории частиц считаются известными. Флуктуации температуры газа, которые “видит” частица, моделируются статистически стационарным случайным процессом Гаусса с заданной автокорреляционной функцией. Введем функцию плотности вероятности перехода $G(\Theta_p, t | \Theta_p^0, t^0)$ случайной температуры частиц из значения Θ_p^0 в момент времени t^0 в значение Θ_p в момент времени $t \geq t^0$

$$G(\Theta_p, t | \Theta_p^0, t^0) = \left\langle \delta\left(\Theta_p - \Theta_p^0 - \left\{ \Theta_p(t) - \Theta_p(t^0) \right\}\right) \right\rangle,$$

здесь $\Theta_p(t)$, $\Theta_p(t^0)$ — актуальные температуры частиц в моменты времени t , t^0 соответственно, $\delta(x)$ — дельта функция Дирака.

ФПВ случайной температуры частиц выражается через функцию плотности вероятности перехода:

$$\begin{aligned} \Phi(\Theta_p, t) &= \left\langle \delta(\Theta_p - \Theta_p(t)) \right\rangle = \int_0^\infty G(\Theta_p, t | \Theta_p^0, t^0) \Phi(\Theta_p^0, t^0) d\Theta_p^0 = \\ &= \int_0^\infty \left\langle \delta\left(\Theta_p - \Theta_p^0 - \left\{ \Theta_p(t) - \Theta_p(t^0) \right\}\right) \right\rangle \left\langle \delta(\Theta_p^0 - \Theta_p(t^0)) \right\rangle d\Theta_p^0, \end{aligned}$$

где $\Phi(\Theta_p^0, t^0) = \left\langle \delta(\Theta_p^0 - \Theta_p(t^0)) \right\rangle$ — ФПВ температуры частиц в момент времени t^0 . На основе последней формулы записываем прямое уравнение Колмогорова для функции плотности вероятности перехода

$$\frac{\partial G(\Theta_p, \zeta | \Theta_p^0)}{\partial \zeta} + \frac{\partial}{\partial \Theta_p} C(\Theta_p) G(\Theta_p, \zeta | \Theta_p^0) = \frac{\partial^2}{\partial \Theta_p^2} B(\Theta_p, \zeta) G(\Theta_p, \zeta | \Theta_p^0), \quad (2)$$

здесь $\zeta = t - t^0$ — период времени, $G(\Theta_p, \zeta | \Theta_p^0)$ — функция плотности вероятности перехода частиц за время ζ от температуры Θ_p^0 к значению Θ_p , коэффициенты дрейфа $C(\Theta_p)$ и диффузии $B(\Theta_p, \zeta)$ в пространстве температур равны [12]

$$C(\Theta_p) = \frac{\langle \Theta_f \rangle - \Theta_p}{\tau_\Theta} + \frac{QA}{c_p} \exp\left(-\frac{E}{R_u \Theta_p}\right), \quad B(\Theta_p, \zeta) = \frac{\langle \theta_f^2 \rangle}{\tau_\Theta} f_\Theta(\Theta_p, \zeta),$$

где $\langle \Theta_f \rangle$ — осредненная температура газа, $f_\Theta(\Theta_p, \zeta)$ — функция отклика флуктуаций температуры частиц на вариации температуры газа, $\langle \theta_f^2 \rangle$ — дисперсия флуктуаций

температуры газа; угловыми скобками обозначается результат осреднения по ансамблю реализаций случайной температуры газа. Начальное условие при $\zeta = 0$ для уравнения (2) имеет вид $G(\Theta_p, 0 | \Theta_p^0) = \delta(\Theta_p - \Theta_p^0)$. Выражение для функции отклика при экспоненциальной аппроксимации автокорреляционной функции флуктуаций температуры газа с интегральным временным масштабом T_Θ приведено в работе [12].

В настоящей работе исследуется среднее время воспламенения, то есть среднее время первого пересечения случайной температурой частиц критического значения Θ_{cr} . В этом случае функция отклика не зависит от времени и равна [12]

$$f_\Theta(\Theta_p, \zeta) = f_\Theta^0(\Theta_p) = \left\{ 1 + \Omega_\Theta \left[1 - \frac{T_\Theta}{\tau_Q(\Theta_p)} \right] \right\}^{-1},$$

здесь $\Omega_\Theta = \tau_\Theta / T_\Theta$ — параметр тепловой инерции частиц, $\tau_Q(\Theta_p) = \left\{ \frac{QA}{c_p \Theta_p} \cdot \frac{E}{R_u \Theta_p} \exp\left(-\frac{E}{R_u \Theta_p}\right) \right\}^{-1}$ — характерное время роста температуры частиц за счет экзотермической химической реакции [12]. Среднее время достижения температурой частиц границ заданного интервала $[\Theta_{min}, \Theta_{max}]$ является функцией начальной температуры $\Theta_p^0 = \Theta_p(0)$. Уравнение Понтрягина для среднего времени $T_{[\Theta_{min}, \Theta_{max}]}(\Theta_p^0)$ первого пересечения температурой частиц границ интервала $[\Theta_{min}, \Theta_{max}]$ имеет вид (см., например, [11])

$$B^0(\Theta_p^0) \frac{d^2 T_{[\Theta_{min}, \Theta_{max}]}(\Theta_p^0)}{d(\Theta_p^0)^2} + C(\Theta_p^0) \frac{dT_{[\Theta_{min}, \Theta_{max}]}(\Theta_p^0)}{d\Theta_p^0} + 1 = 0, \quad (3)$$

здесь $B^0(\Theta_p^0) = \langle \theta_f^2 \rangle \cdot f_\Theta^0(\Theta_p^0) / \tau_\Theta$. Граничные условия для уравнения (3) соответствуют первому выходу случайного процесса за правую границу интервала:

$$\left. \frac{dT_{[\Theta_{min}, \Theta_{max}]}(\Theta_p^0)}{d\Theta_p^0} \right|_{\Theta_p^0 = \Theta_{min}} = 0, \quad T_{[\Theta_{min}, \Theta_{max}]}(\Theta_{max}) = 0. \quad (4)$$

Дальнейший анализ удобно проводить в безразмерных переменных. Безразмерные границы температурного интервала можно записать как $\Gamma_{min} = \Theta_{min} / \langle \Theta_f \rangle$ и $\Gamma_{max} = \Theta_{max} / \langle \Theta_f \rangle$, безразмерное время выхода из температурного интервала $\Xi_{[\Gamma_{min}, \Gamma_{max}]} = T_{[\Theta_{min}, \Theta_{max}]} / T_\Theta$, безразмерная начальная температура гранулы $\Gamma_p^0 = \Theta_p^0 / \langle \Theta_f \rangle$. Уравнение Понтрягина в безразмерном виде запишется следующим образом:

$$\beta(\Gamma_p^0) \frac{d^2 \Xi_{[\Gamma_{min}, \Gamma_{max}]}(\Gamma_p^0)}{d\Gamma_p^{02}} + \sigma(\Gamma_p^0) \frac{d\Xi_{[\Gamma_{min}, \Gamma_{max}]}(\Gamma_p^0)}{d\Gamma_p^0} + 1 = 0, \quad (5)$$

здесь безразмерные коэффициенты дрейфа и диффузии составляют

$$\sigma(\Gamma_p^0) = \frac{1 - \Gamma_p^0}{\Omega_\Theta} + Q^* \exp\left(-\frac{E^*}{\Gamma_p^0}\right), \quad \beta(\Gamma_p^0) = \frac{\langle \gamma_f^2 \rangle}{\Omega_\Theta} f_\Theta^0(\Gamma_p^0),$$

где $\langle \gamma_f^2 \rangle = \langle \theta_f^2 \rangle / \langle \Theta_f \rangle^2$ — безразмерная дисперсия флуктуаций температуры газа.

Граничные условия (4) переписываются в безразмерном виде как

$$\left. \frac{d\Xi_{[\Gamma_{\min}, \Gamma_{\max}]}(\Gamma_p^0)}{d\Gamma_p^0} \right|_{\Gamma_p^0 = \Gamma_{\min}} = 0, \quad \Xi_{[\Gamma_{\min}, \Gamma_{\max}]}(\Gamma_{\max}) = 0. \quad (6)$$

Численное решение краевой задачи (5), (6) представляет безразмерное время ожидания момента потери тепловой стабильности в зависимости от начальной температуры частиц.

2. Метод прямого численного моделирования

Метод основан на численном решении системы СОДУ для актуальных температур газа и частиц с гетерогенной экзотермической химической реакцией. Уравнение релаксационного типа для актуальной температуры газа позволяет моделировать случайный процесс с экспоненциально спадающей во времени автокорреляционной функцией. Система СОДУ имеет вид

$$d\gamma_f(\xi)/d\xi = \eta(\xi) - \gamma_f(\xi), \quad (7)$$

$$d\Gamma_p(\xi)/d\xi = \left((1 + \gamma_f(\xi)) - \Gamma_p(\xi) \right) / \Omega_\Theta + Q^* \exp(-E^*/\Gamma_p(\xi)), \quad (8)$$

здесь $\xi = t/T_\Theta$ — безразмерное время, $\Gamma_p(\xi) = \Theta_p(t) / \langle \Theta_f \rangle$ — безразмерная температура частиц, $\gamma_f(\xi) = \theta_f(t) / \langle \Theta_f \rangle$ — безразмерные флуктуации температуры газа, $\eta(\xi)$ — затравочный дельта-коррелированный во времени случайный процесс Гаусса с нулевым средним значением, дисперсией $\langle \eta^2 \rangle$ и автокорреляционной функцией $\langle \eta(\xi') \eta(\xi'') \rangle = \langle \eta^2 \rangle \Psi_0(\xi' - \xi'') = 2\tau_0 \langle \eta^2 \rangle \delta(\xi' - \xi'')$, где $\tau_0 = \int_0^\infty \Psi_0(\xi) d\xi = 2\tau_0 \int_0^\infty \delta(\xi) d\xi$ — интегральный

временной масштаб. Численное интегрирование системы СОДУ (7) и (8) осуществляется методом Эйлера–Маруямы (см, например, [13, 14]). Сбор и обработка информации, получаемой в результате решения системы СОДУ, начинается после достаточно больших времен интегрирования $\xi \gg (\tau_0, \Omega_\Theta, 1)$. Для таких времен устанавливается статистически стационарное состояние флуктуаций температуры газа и частиц без тепловыделения. В связи с этим начальное значение для уравнения (7) выбирается произвольным образом, например, $\gamma_f(0) = 0$. Начальное значение температуры частиц в уравнении (8) $\Gamma_p(0) = \Gamma_p^0$. Тестирование предложенного алгоритма осуществляется путем сравнения с аналитическими решениями системы СОДУ для частиц без тепловыделения. В этом случае уравнение для безразмерной флуктуации температуры частиц $\gamma_p(\xi) = \theta_p(t) / \langle \Theta_f \rangle$ ($\langle \Theta_p(t) \rangle = 0$) имеет вид

$$d\gamma_p(\xi)/d\xi = [\gamma_f(\xi) - \gamma_p(\xi)] / \Omega_\Theta. \quad (9)$$

Начальное условие для уравнения (9), например, отсутствие флуктуаций температуры — $\gamma_p(0) = 0$.

В работах [15, 16] на основе спектрального анализа случайных процессов из уравнений (7) и (9) были получены осредненные характеристики случайных флуктуаций

температуры газа и частиц. Автокорреляционная функция флуктуаций температуры газа имеет вид

$$\Psi_f(\xi) = \exp(-\xi). \quad (10)$$

Квадратный корень из отношения дисперсий флуктуаций температуры частиц и газа равен

$$\sqrt{\langle \gamma_p^2 \rangle / \langle \gamma_f^2 \rangle} = 1 / \sqrt{1 + \Omega_\Theta}. \quad (11)$$

Автокорреляционная функция $\Psi_p(\xi)$ флуктуаций температуры частиц определяется следующим образом: $\langle \gamma_p(\xi' + \xi) \gamma_p(\xi') \rangle = \langle \gamma_p^2 \rangle \Psi_p(\xi)$. Для частиц без тепловыделения автокорреляционная функция $\Psi_p(\xi)$ ($\xi \geq 0$) имеет вид

$$\Psi_p(\xi) = \frac{\exp(-\xi) - \Omega_\Theta \exp(-\xi/\Omega_\Theta)}{1 - \Omega_\Theta}. \quad (12)$$

Из выражений (11) и (12) видно, что для частиц с малой тепловой инерцией $\Omega_\Theta \ll 1$ интенсивности флуктуаций температуры газа и частиц близки, а автокорреляционная функция (12) стремится к автокорреляционной функции газа (10). Для частиц с большой тепловой инерцией $\Omega_\Theta \gg 1$ дисперсия флуктуаций температуры частиц снижается $\langle \gamma_p^2 \rangle / \langle \gamma_f^2 \rangle \approx 1/\Omega_\Theta$, а автокорреляционная функция стремится к $\Psi_p(\xi) \approx \exp(-\xi/\Omega_\Theta)$.

3. Результаты расчетов

На рис. 1 показаны рассчитанные по уравнениям (7) и (9) актуальные температуры газа и частиц с различной тепловой инерцией. Видно, что с ростом параметра тепловой инерции амплитуда тепловых колебаний частиц снижается. Этот вывод подтверждается также иллюстрацией рис. 2, где представлено сравнение аналитического результата (11) с данными численного моделирования на основе решения системы СОДУ (7), (9). Расчеты интегральных параметров флуктуаций температуры осуществляются по 10^4 реализациям актуальных температур газа и частиц. На рис. 3 отображены автокорреляционные функции флуктуаций температуры газа и частиц. С ростом тепловой инерции автокорреляционные

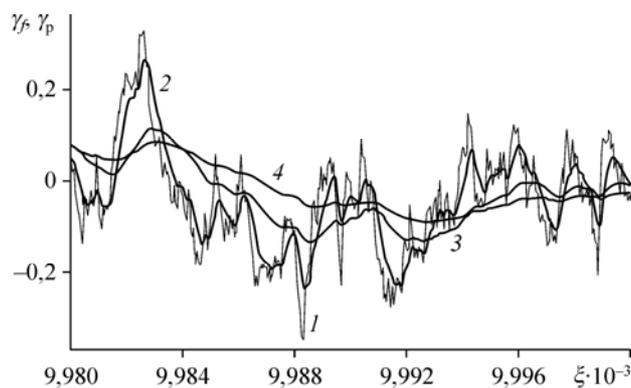


Рис. 1. Случайные актуальные температуры газа (1) и частиц (2–4) при $\Omega_\Theta = 0,3$ (2), 2 (3), 5 (4).

$$\text{Уровень флуктуаций температуры газа } \langle \gamma_f^2 \rangle^{1/2} = 12\%.$$

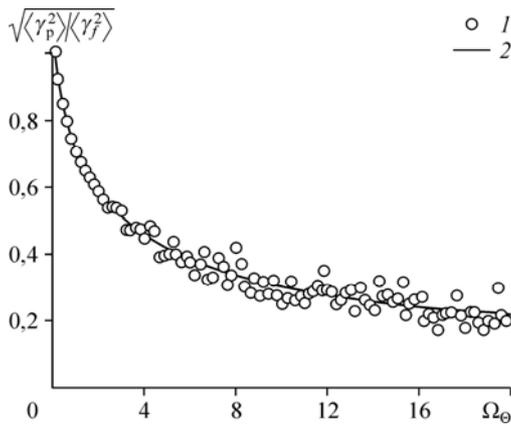


Рис. 2. Отношение амплитуд флуктуаций температуры частиц и газа в зависимости от параметра тепловой инерции.

1 — данные численного моделирования, 2 — расчет по формуле (11).

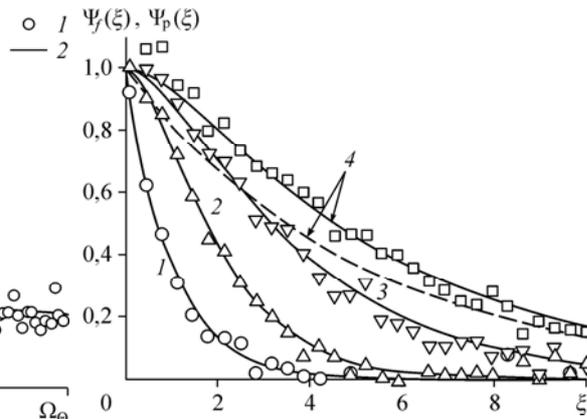


Рис. 3. Автокорреляционные функции газа (1) и частиц (2)–(4) при $\Omega_\Theta = 1$ (2), 3 (3), 5 (4).

Символы — данные численного моделирования, сплошные линии — расчет по формулам (10) и (12), штриховая линия — расчет по формуле (12) при $\Omega_\Theta \gg 1$.

функции частиц затухают медленнее, чем функции газа. Из рис. 2 и 3 видно удовлетворительное согласование между аналитическими результатами и данными прямого численного моделирования.

Влияние экзотермической химической реакции на температуру частиц в газе с флуктуациями температуры исследуется на основе решения системы СДУ (7) и (8). Все расчеты проведены при фиксированных значениях безразмерного тепловыделения и энергии активации: $Q^* = 31$, $E^* = 7$.

На рис. 4а, 4б представлены фрагменты результатов численного расчета актуальных температур частиц для двух параметров тепловой релаксации. Диапазон рисунка по оси абсцисс равен $\pm 3 \langle \gamma_f^2 \rangle^{1/2}$. С ростом параметра тепловой релаксации тепловой взрыв происходит при более ранних временах. Начальные температуры частиц равны температуре газа. Видно, что вследствие случайных флуктуаций температуры газа температура частиц может стать даже ниже осредненной температуры среды. Однако с течением

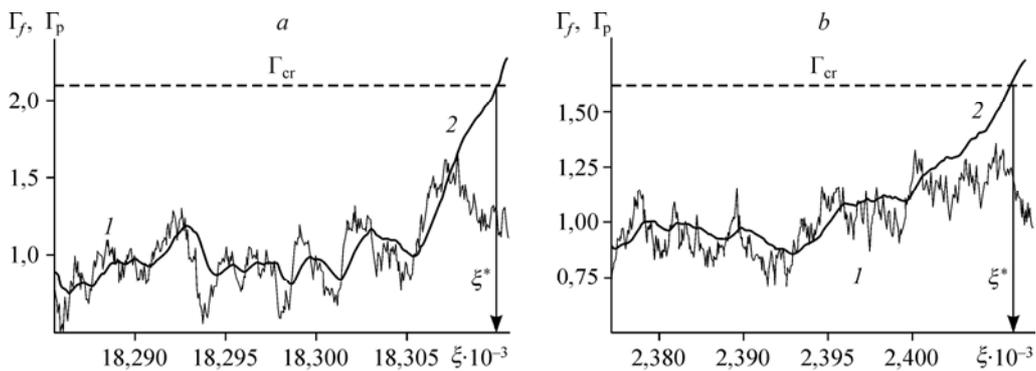


Рис. 4. Пример случайных температур газа (1) и частиц с тепловыделением (2).

Уровень флуктуаций температуры газа $\langle \gamma_f^2 \rangle^{1/2} = 12\%$; $\Omega_\Theta = 1$ (а), 1,5 (б); точка пересечения температурой частиц критического уровня Γ_{cr} (штриховая линия) является случайным временем воспламенения ξ^* .

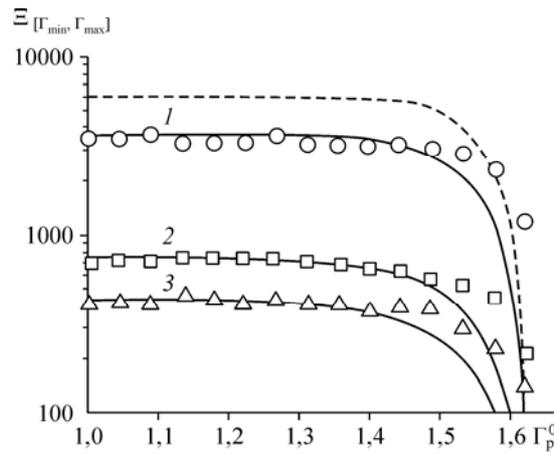


Рис. 5. Влияние амплитуды флуктуаций температуры газа на время ожидания теплового взрыва частиц $\Omega_{\Theta} = 1,5$.

Символы — результаты прямого численного моделирования, сплошные линии — решение задачи (5), (6):

$$\langle \gamma_f^2 \rangle^{1/2} = 10 (1), 12 (2), 13 (3) \%, \text{ пунктирная линия — решение уравнения Понтрягина}$$

для дельта-коррелированных во времени флуктуаций температуры газа при $\langle \gamma_f^2 \rangle^{1/2} = 13 \%$.

времени корреляция случайных флуктуаций температуры частиц и скорости химической реакции выведет температуру частиц к критическому значению. Следует заметить, что сравнительно долгие высокие «экскурсии» температуры газа обусловлены временной структурой флуктуаций температуры [10].

На рис. 5 представлены результаты расчетов среднего времени воспламенения в зависимости от начальной температуры частиц. Расчеты проведены путем численного решения задачи, и путем осреднения по 10^3 – 10^4 траекториям случайного времени первого пересечения температурой частиц критического уровня. Видно, что независимо от начальной температуры частиц тепловой взрыв всегда произойдет. По мере приближения начальной температуры частиц к критическому значению $\Gamma_{cr} = \Theta_{cr} / \langle \Theta_f \rangle$ время ожидания воспламенения резко сокращается.

Начальная температура частиц совпадает с температурой среды $\Gamma_p^0 = 1$. С позиций детерминированной теории для подобной начальной температуры стационарная температура частиц будет совпадать с первым корнем на диаграмме Семенова [12] и теплового взрыва не произойдет [1–3, 12]. Ситуация кардинально меняется в случайном поле температуры газа. До момента пересечения случайной температурой частиц критического уровня $\Gamma_p(\xi) < \Gamma_{cr}$ колебания скорости химической реакции вносят существенный вклад в дисперсию флуктуаций температуры частиц. В случайном поле температуры газа температура частиц монотонно дрейфует к критическому уровню, превышение которого приводит к развитию теплового взрыва (рис. 4). Из рис. 5 также видно, что моделирование флуктуаций температуры газа белым шумом на порядок завышает время ожидания воспламенения частиц. Следует также отметить существенную зависимость времени воспламенения от амплитуды флуктуаций температуры газа.

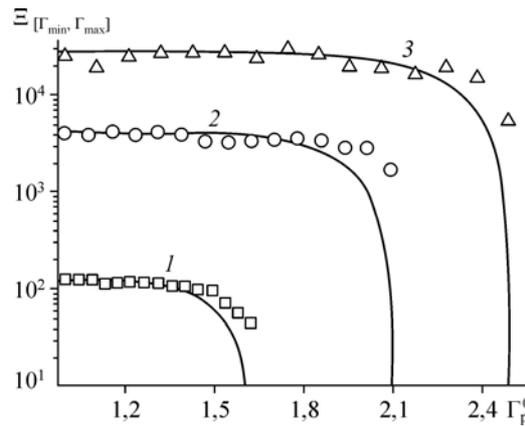


Рис. 5. Влияние параметра тепловой инерции частиц на время ожидания теплового взрыва.

Линии — решение задачи (5), (6) при $\langle \gamma_f^2 \rangle^{1/2} = 17\%$, символы — результаты

прямого численного моделирования: $\Omega_\Theta = 1,5$ (1), 1 (2), 0,8 (3).

Уменьшение параметра тепловой инерции частиц соответствует улучшению теплообмена со средой, что приводит к смещению критического значения Θ_{cr} в сторону больших значений температур. На рис. 6 представлено среднее время пересечения случайной температурой частиц критического уровня для частиц с различным значением параметра тепловой инерции. Снижение времени ожидания теплового взрыва с увеличением параметра Ω_Θ объясняется ухудшением теплообмена между газом и частицами с ростом их тепловой инерции. Из рис. 5 и 6 следует, что данные, полученные путем аналитического исследования и методом стохастического моделирования, удовлетворительно согласуются.

Заключение

Разработан метод расчета времени воспламенения частиц с гетерогенной экзотермической реакцией в газе с флуктуациями температуры. Исследование проведено в рамках двух принципиально различных подходов. Первый подход — аналитический, он основан на уравнении Понтрягина для среднего времени выхода процесса Маркова за пределы заданного интервала. Записано уравнение Понтрягина и граничные условия для расчета среднего времени первого пересечения температурой частиц критического уровня, после которого начинается потеря тепловой стабильности. Второй подход — метод прямого численного моделирования, основанный на решении системы стохастических обыкновенных дифференциальных уравнений для актуальных температур газа и частиц. Метод стохастического моделирования тестируется на основе сопоставления с точными решениями, найденными для случая частиц без тепловыделения. Результаты расчетов времени ожидания теплового взрыва, полученные на основе уравнения Понтрягина, удовлетворительно согласуются с данными метода прямого численного моделирования. Показано, что в отличие от детерминированной теории случайные флуктуации температуры качественно меняют условия возникновения воспламенения. Случайные колебания температуры приводят к безусловному возникновению теплового взрыва независимо от начальной температуры частиц. Это связано с тем, что случайный процесс с ненулевой вероятностью пересечет любой уровень. Среднее время ожидания пересечения температурой частиц критического уровня конечно при любой их начальной температуре.

Обозначения

A — предэкспоненциальный множитель в зависимости Аррениуса, моль/с,	Q — тепловой эффект реакции, Дж/моль,
c_p — теплоемкость материала гранулы, Дж/(моль·К),	R_u — универсальная газовая постоянная, Дж (моль·К),
E — энергия активации, Дж/моль,	T_Θ — интегральный временной масштаб, с,

Греческий алфавит

Γ, γ — безразмерные температура и ее флуктуации,	τ_Θ — время тепловой релаксации, с,
η — случайный процесс,	ξ — безразмерное время,
$\delta(x)$ — дельта функция Дирака,	Ψ — автокорреляционная функция,
Θ, θ — абсолютная температура и ее флуктуации, К,	Ω_Θ — параметр тепловой инерции.

Индексы

p — гранула, f — среда, * — безразмерные величины, $\langle \dots \rangle$ — осреднение по ансамблю.

Список литературы

1. Зельдович Я.Б., Баренблатт Г.И., Либрович В.Б., Махвиладзе Г.М. Математическая теория горения и взрыва. М.: Наука, 1980. 478 с.
2. Варнатц Ю., Маас У., Диббл Р. Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ. М.: Физматлит, 2003. 352 с.
3. Мержанов А.Г., Барзыкин В.В., Абрамов В.Г. Теория теплового взрыва от Н.Н. Семенова до наших дней // Химическая физика. 1996. Т. 15, № 6. С. 3–44.
4. Кляцкин В.И. Стохастические уравнения и волны в случайно-неоднородных средах. М.: Наука, 1980. 335 с.
5. Liang G.Y., Cao L., Wu D.J. Approximate Fokker–Planck equation of system driven by multiplicative colored noises with colored cross-correlation // Physica A. 2004. Vol. 335. P. 371–384.
6. Hasegawa H. Dynamics of the Langevin model subjected to colored noise: functional-integral method // Physica A. 2008. Vol. 387. P. 2697–2718.
7. Zhang H., Xu W., Xu Y. The study on a stochastic system with non-Gaussian noise and Gaussian colored noise // Physica A. 2009. Vol. 388. P. 781–788.
8. Хорстхемке В., Лефевр Р. Индуцированные шумом переходы: теория и применение в физике, химии, биологии. М.: Мир, 1987. 400 с.
9. Тихонов В.И., Хименко В.И. Выбросы случайных процессов. М.: Наука, 1970. 305 с.
10. Линдбеттер М., Линдгрэн Г., Ротсен Х. Экстремумы случайных последовательностей и процессов. М.: Мир, 1989. 392 с.
11. Тихонов В.И., Миронов М.А. Марковские процессы. М.: Советское радио. 1977. 488 с.
12. Деревич И.В., Галдина Д.Д. Влияние временной структуры флуктуаций температуры газа на воспламенение мелкодисперсных частиц // Теплофизика и аэромеханика. 2016. Т. 23, № 6. С. 935–949.
13. Higham D.J. An algorithmic introduction to numerical simulation of stochastic differential equations // SIAM Review. 2001. Vol. 43, No. 3. P. 525–546.
14. Anderson D.F., Mattingly J.C. A weak trapezoidal method for a class of stochastic differential equations // Commun. Math. Sci. 2011. Vol. 9, No. 1. P. 301–318.
15. Derevich I., Galdina D. Simulation of thermal explosion of catalytic granule in fluctuating temperature field // J. Appl. Math. Phys. 2013. Vol. 1, № 5. P. 1–7.
16. Деревич И.В., Галдина Д.Д. Численное исследование тепловой стабильности гранулы катализатора с внутренним тепловыделением в случайном поле температуры среды // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Серия «Естественные науки». 2014. Т. 2, № 53. С. 3–11.

Статья поступила в редакцию 10 декабря 2015 г.,
после доработки — 19 апреля 2016 г.