Физика горения и взрыва

№ 3
1992 г.

УДК 536.46

Р. С. Буркина, А. Г. Князева

ИССЛЕДОВАНИЕ ОЧАГОВОГО ТЕПЛОВОГО ВОСПЛАМЕНЕНИЯ И РЕЖИМА ЕГО ВЫРОЖДЕНИЯ

Задаче об очаговом тепловом воспламенении посвящено большое количество работ численного и приближенно-аналитического характера (см., например, [1—13]). В [14, 15] авторы вновь обращаются к исследованию развития очагового теплового воспламенения вещества с нулевым порядком реакции при П-образном начальном распределении температуры. В этой связи представляется полезным провести некоторое сравнение полученных результатов, а также рассмотреть условия вырождения очагового воспламенения, затронутые в [14, 15].

В тепловой теории воспламенения задача об очаговом взрыве сводится к анализу развития начального температурного профиля в реакционноспособной среде. Математическая постановка задачи в традиционных безразмерных переменных для П-образного очага имеет вид [16]

$$\frac{\partial\Theta}{\partial\tau} = \frac{1}{\delta}\Delta\Theta + \varphi(Y)\exp\left[\frac{\Theta}{1+\beta\Theta}\right], \tag{1}$$

$$\frac{\partial Y}{\partial\tau} = \frac{\mathrm{Le}}{\delta}\Delta Y + \gamma\varphi(Y)\exp\left[\frac{\Theta}{1+\beta\Theta}\right], \tag{2}$$

$$\Theta(\xi,\ 0) = -\Theta_0\eta(\xi-1),\ Y(\xi,\ 0) = 0, \tag{3}$$

$$\frac{\partial\Theta(0,\tau)}{\partial\xi} = \frac{\partial\Theta(\infty,\tau)}{\partial\xi} = \frac{\partial Y(0,\tau)}{\partial\xi} = \frac{\partial Y(\infty,\tau)}{\partial\xi} = 0. \tag{4}$$

Здесь и в дальнейшем используются следующие обозначения: $\Theta = E(T-T_0)/(RT_0^2)$; $Y = 1 - z/z_0$; $\xi = x/R_0$; $\tau = t/t_а$ — безразмерные температура, глубина превращения, пространственная координата, время; T_0 — максимальная температура в центре очага в начальный момент времени; R — универсальная газовая постоянная; x — пространственная координата; t — время; R_0 — радиус очага разогрева; $t_{ад} = z_0^n\, c\, RT_0^2 \exp(E/RT_0)/(EQk_0)$ —период адиабатической индукции; z_0, E, Q, k_0 — начальная концентрация реагента, энергия активации, тепловой эффект и предэкспонент экзотермической химической реакции; $\delta = R_0^2/(\varkappa t_а)$ — параметр Франк-Каменецкого; $\varkappa$ — температуропроводность вещества; c — теплоемкость; $\beta = RT_0/E$ — малый параметр теории горения; $\Theta_0 = E(T_0 - T_н)/(RT_0^2)$ — температурный напор; $T_н$ — температура окружающей среды; $\tau_в$ — время воспламенения; δ_* — критическое значение δ; $\eta(\xi-1)$ — единичная функция Хевисайда; $\gamma = cRT_0^2/(EQ)$; Y_0 — параметр автокаталитичности; Le — число Льюиса; $\varphi(Y)$ — кинетическая функция скорости химической реакции; $f(\xi)$ — функция, характеризующая начальное распределение температуры.

Помимо температуры и концентрации для задачи важно критическое значение параметра Франк-Каменецкого δ_*, разделяющее режимы воспламенения и потухания очага разогрева.

В рассмотрении данной задачи взяты за основу работы [1, 2], где проведено подробное численное исследование формул (1)—(4) для простой реакции $\varphi(Y) = (1-Y)^n$ и показано, что существовавшие ранее приближенные теории [17—20] критического условия очагового взрыва неудовлетворительны и не дают даже правильной качественной зависимости $\delta_*(\Theta)$. На основе детального анализа закономерностей температурного режима очага сделан вывод о том [2], что из-за сильных градиентов температуры в очаге весь период индукции ошибка решений [17—20] связана в основном с неверной качественной трактовкой поведения экспоненциального слагаемого в уравнении энергии (1).

На основе выводов [2] в [3] предложено новое приближенно-аналитическое решение очаговой задачи, базирующееся на предположении о подобии кривизны температурных профилей в реакционноспособном и инертном очагах. В соответствии с этим в (1) кондукционный член заменен на аналогичный из решения инертной задачи, что позволило свести уравнение в частных производных к обыкновенному дифференциальному. В результате удалось найти критический размер очага в функции от температурного напора, удовлетворительно согласующийся с расчетами [1, 2].

Схема решения, развитая в [3], использована в [4] для поиска критических условий взрыва в случае двух и более «горячих пятен» в веществе. Показано, что критические условия практически не отличаются от полученных для одного очага, если расстояние между очагами составляет более 30 % их радиуса. Численный анализ периодической системы очагов разогрева [5] подтверждает сделанный в [4] вывод.

В [6] асимптотически проанализирована задача для случая $\delta \gg 1$ и $\Theta_0 \gg 1$. Решение получено методом сращиваемых асимптотических разложений, при этом показано, что за погранслойное распределение температуры в очаге отвечает параметр Франк-Каменецкого $\delta \gg 1$. Во внутренней области, где идут химические реакции $(0 < \xi < 1)$, уравнение (1) с точностью $0(\delta^{-1}, \Theta_0^{-1})$ упрощается до адиабатического, во внешней $(1 \leqslant \xi < \infty)$ с точностью до экспоненциально малых слагаемых справедливы инертные уравнения. В результате построено температурное поле в очаге и окружающей среде и получено критическое условие, разделяющее режимы взрывного протекания процесса и постепенного остывания очага.

Развитая в [6] схема асимптотического анализа задачи применена в [7] для различных монотонных начальных температурных распределений внутри очага: $\Theta(\xi, 0) = -\Theta_0(1 - f(\xi))$. Обнаружено, что начальное распределение температуры оказывает на критическое условие самое существенное влияние, а качественный вид зависимости $\delta_*(\Theta_0)$ определяется номером первой, отличной от нуля, производной $f^{(N)}(0) \neq 0$. Такая сильная зависимость критических условий от Θ_0 и $f(\xi)$ связана с отводом тепла из зоны химических реакций (максимум химического тепловыделения приходится на окрестность $\xi = 0$), количество которого определяется характером распределения температуры. Кроме этого, начальные распределения температуры, для которых $f'(0) \neq 0$, не соответствуют граничному условию (4), что приводит к необходимости перестройки температурного профиля в окрестности $\xi = 0$.

В дальнейшем численный анализ [9] показал, что для таких температурных профилей найденное значение δ_* разделяет режимы монотонного повышения температуры в центре очага и начального понижения температуры при дальнейшем его воспламенении. Аналогичным образом рассмотрен очаг с термическим сопротивлением на границе [8]. Получена логарифмическая зависимость $\delta_*(\mathrm{Bi})$; показано, что условия теплообмена на границе очага оказывают существенное влияние на критические характеристики лишь при малых Bi. В случае $\mathrm{Bi} \sim \sqrt{\pi}/4e\Theta_0$ критический размер очага δ_* становится порядка единицы, что может служить нижней границей применимости развитого асимптотического подхода.

В [9] численно проанализировано развитие очага разогрева для различных начальных температурных профилей. Обнаружено, что для гладких температурных профилей (первая производная от которых в центре очага равна нулю: $f'(0)=0$) критическое условие с хорошей точностью описывается асимптотической формулой [7], а динамика поведения очага аналогична случаю П-образного начального распределения температуры. Для негладких температурных профилей ($f'(0)\neq 0$) можно выделить два критических значения параметра Франк-Каменецкого. В случае $\delta<\delta_*''$ очаг «остывает», а при $\delta_*''<\delta<\delta_*'$ после первоначального понижения температуры в центре очага, связанного с геометрической перестройкой температурного профиля, происходит воспламенение. При $\delta>\delta_*'$ очаг воспламеняется, причем температура в центре монотонно возрастает; δ_*' хорошо согласуется с асимптотическим значением δ_* из [7].

Михельсоновский начальный профиль $\Theta(\xi,\ 0)=-\Theta_0(1-\exp(-\xi))$, рассмотренный в [10] при описании повторного воспламенения, удовлетворяет условию $f'(0)\neq 0$. Следовательно, закономерности в развитии процесса очагового воспламенения в этом случае должны быть аналогичными линейному начальному распределению [9]. «Особенно быстрое» изменения $\tau_в$ с δ соответствует окрестности δ_*''. Использование в качестве критерия воспламенения условия монотонного роста температуры в центре очага дает δ_*'.

Вопросам очагового воспламенения посвящена глава монографии [11], где приведены результаты асимптотического анализа.

В работах [12, 13] очаговое воспламенение рассмотрено при условии протекания в веществе автокаталитической реакции $\varphi(Y)=(1-Y)\times\times(Y_0+Y)$. Асимптотический анализ задачи [12] при различных начальных температурных профилях показал, что автокатализ не меняет качественной зависимости критического значения δ_* от температурного напора очага. Влияние параметров γ. Y_0 на δ_* качественно различно в области сильного ($Y_0/\gamma\ll 1$) и слабого ($Y_0/\gamma\gg 1$) автокатализа. Результаты согласуются с численным счетом задачи для функций $f(\xi)$ с нулевой производной в центре очага и со значением δ_*' для негладких начальных температурных профилей. В [13] проведено подробное параметрическое исследование задачи с автокаталитической реакцией для П-образного начального распределения температуры.

В первой части работы [15] предложен приближенный метод определения критических условий. Эта часть опубликована и в [14]. Метод основан на физическом анализе процесса, который проведен ранее в [1, 2, 6]. Для определения критических условий очагового воспламенения авторы используют критическое значение параметра стационарной теории теплового взрыва [16], которое подставляют в решение задачи для инертного охлаждения очага в момент $\tau=1$, соответствующий моменту адиабатического воспламенения. Следует отметить не совсем последовательное использование критических условий стационарной теории. Так, за критическое значение принято $(\xi\sqrt{\delta})_*=1$ вместо $\sqrt{0,88}$ для плоскопараллельного очага. Для цилиндрической и сферической симметрий в [14] за $(\xi\sqrt{\delta})_*$ взяты соответственно $\sqrt{2}$ и $\sqrt{3}$ вместо $\sqrt{2}$ и $\sqrt{3,32}$. По-видимому, такой выбор обеспечивает лучшее согласие с результатами численного счета. Аналогичным образом выбраны и остальные параметры предложенного метода: граница зоны реакции $\Theta=-1$, время развития процесса $\tau=1$. Использование этих значений для несколько измененной постановки задачи (системы очагов, различных начальных температурных профилей и др.), как показано в [4, 5, 7—13], не правомерно. Представление в [14, 15] конечной зависимости $\delta_*(\Theta_0)$ в неявном интегральном виде также ограничивает простоту использования результата.

На рис. 1 приведено сравнение критических условий $\delta_*(\Theta_0)$ полученных в [3, 6, 15], и результатов численного счета. Для нахождения $\delta_*(\Theta_0)$ в широком диапазоне изменения $\Theta_0\in[4]$ рассчитана задача (1)—(4) по неявной разностной схеме методом прогонки с точностью ~ 4 %. Влияние параметра β при $\Theta_0>10$ мало (в расчетах $\beta=0{,}01$).

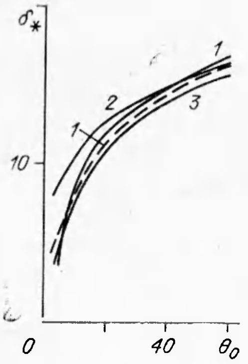


Рис. 1. Критические зависимости $\delta_*(\Theta_0)$.

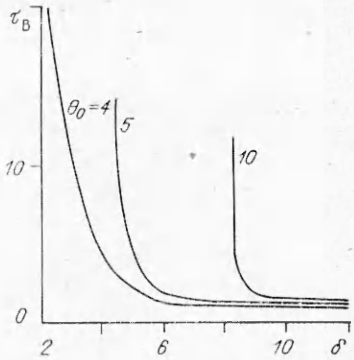


Рис. 3. Время воспламенения при $\beta = 0{,}01$.

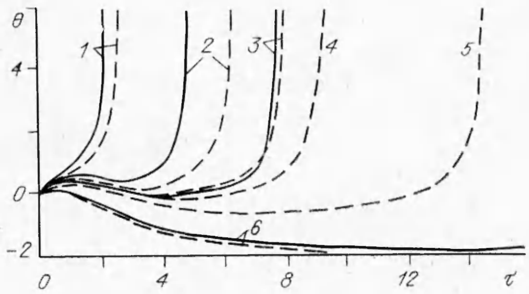


Рис. 2. Зависимость температуры в центре очага от времени при β — 0,01 (сплошные линии), 0,1 (штриховые); $\Theta_0 = 5$.

δ: *1* — 6,0, *2* — 4,95, *3* — 4,85, *4* — 4,8, *5* — 4,7, *6* — 4,0.

В диапазоне $\Theta_0 \in [4]$ расчет совпадает с данными [1, 2]. Кривая *1* взята из [3]: $\delta_* = 4\ln(\Theta_0 \sqrt{\delta_*}/2\sqrt{\pi})$, кривая *2*: $\delta_* = 4\ln[2e\Theta_0(1 + 6/\delta_*)/\sqrt{\pi\delta_*}]$ — результат асимптотического анализа [6], кривая *3* рассчитывалась из соотношения $2/\Theta_0 = \mathrm{erfc}[(\sqrt{\delta_*} - 1)/2]$, приведенного в [14, 15]. Штриховая линия на рис. 1 — результат численного счета. Видно, что при небольших Θ_0 результаты работ [3] и [14] дают приблизительно одинаковое согласие с численным счетом, подходя к нему соответственно сверху и снизу. При увеличении Θ_0 данные [14] начинают отставать от численного счета, т. е. последний не имеет асимптотического характера.

Вторая часть работы [14] посвящена анализу динамики изменения параметров развития П-образного очага, выполненного на основе численного решения задачи в окрестности критических условий. Отметим, что более подробный численный анализ проведен для П-образного начального температурного профиля в [1, 2], для других начальных температурных распределений — в [9, 10].

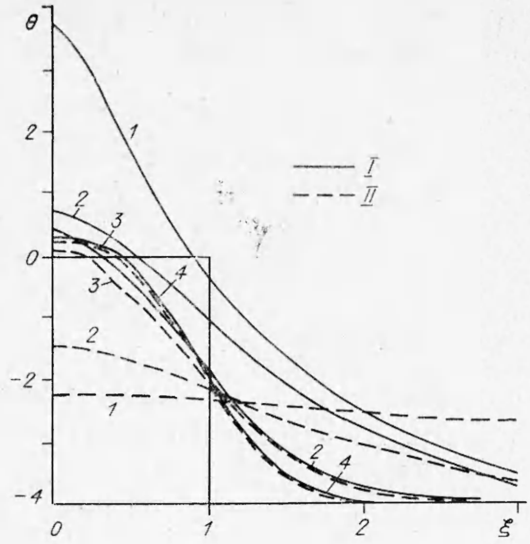
Некоторые выводы авторов [14], в частности о линейной зависимости температуры в центре очага от времени для любых значений параметров, сомнительны. Решение существенно зависит от Θ_0 и δ. При малых Θ_0 вблизи критики температура может иметь два экстремума, природа которых в корне отлична от описанных в [9]. Так, при $\Theta_0 = 5$, $\beta = 0{,}01$, $\delta = 4{,}8$ (рис. 2) температура в центре очага сначала возрастает до 0,5 к моменту $\tau = 0{,}75$; затем уменьшается до $-0{,}3$ вследствие теплоотвода в окружающую среду с границ очага.

Длительное время температура в центре практически не изменяется, и только при $\tau_в = 9{,}2$ происходит воспламенение. Такая особенность характерна для области вырожденного очагового взрыва [1], когда влияние химических реакций в окружающей очаг среде начинает сказываться уже при конечных временах $\tau \approx 0$ (1). Следует отметить, что химическое тепловыделение в окружающей среде при малых Θ_0 приводит к воспламенению очага при любых значениях δ, но оно происходит при больших τ. Этот эффект отмечен в [5, 10].

При низких значениях Θ_0 понятие критических условий носит условный характер, что связано с вырождением очагового взрыва. Зависимость

Рис. 4. Распределение температуры в очаге и в окружающей среде во времени при $\Theta_0 = 4$, $\beta = 0{,}01$, $n = 0$.

I — обычное тепловыделение, τ: *1* — 4,0, *2* — 3,0, *3* — 0,7, *4* — 0,3; *II* — тепловыделение типа (5), τ: *1* — 7,0, *2* — 3,0, *3* — 0,7, *4* — 0,3.



$\tau_в(\delta)$ переходит от скачкообразной (при высоких Θ_0 и $\delta < \delta_*$ $\tau_в \gg 1$, $\tau_в \approx 0(1)$ при $\delta > \delta_*$) в непрерывную (рис. 3) с уменьшением Θ_0. Явно выраженного потухания здесь нет, поэтому требуются дополнительные определения.

Примем за критическое условие δ_* (Θ_0) такое δ, при котором минимум зависимости $\Theta(0, \tau)$ не меньше первоначальной температуры очага (см. рис. 2). Выбранное таким образом значение δ_* совпадает с численным счетом [1]. Например, для случая $\Theta_0 = 5$ $\delta_* \approx 4{,}90$ (если отнести к воспламенению и кривые с $\Theta = -1$, то получим $\delta_* \approx 4{,}6$, что отличается от результата [14, 15]). В случае $\Theta_0 > 8$ критическое значение $\delta_*(\Theta_0)$ существует в обычном смысле: при $\delta \geqslant \delta_*$ очаг разогрева воспламеняется, при $\delta < \delta_*$ остывает после некоторого повышения температуры (воспламенение произойдет при очень больших τ).

В области вырождения очагового воспламенения усиливается влияние параметра $\beta = RT_0/E$ на характеристики процесса (см. рис. 2). Например, для $\Theta_0 = 5$ и $\delta = 4{,}7$ $\tau_в \approx 14{,}5$ и 7,8 при $\beta = 0{,}1$ и 0,01 соответственно.

При низких Θ_0 вдали от условной критики ($\delta > \delta_*$) до момента воспламенения очаг сужается, т. е. область с температурой, близкой к начальному максимуму, ограничена $\xi_1 < 1$, как и при «нормальном» воспламенении [2, 9]. В окрестности δ_* очаг после некоторого сужения вновь расширяется еще до момента $\tau_в$, что связано с подключением реакции в окружающей очаг среде по мере ее прогрева. Такая картина развития процесса и связана с вырождением понятия критических условий при малых Θ_0. Для начального михельсоновского температурного профиля особенности воспламенения очага разогрева описаны в [10] при исследовании процесса с определяющим «нижним уровнем температуры», что соответствует вырождению очага.

Расчет (1)—(4) показал, что увеличение параметра γ в области вырождения существенно сказывается на значениях выгорания в очаге и в окружающей среде и на значениях температуры и времени воспламенения. Например, для случая $\Theta_0 = \delta = 4$, $\beta = 0{,}01$ и реакции первого порядка имеем:

γ	$\tau_В$	$Y(0,\tau_В)$	$Y(1,\tau_В)$	$Y(1{,}5\tau_В)$	$\Theta(1,\tau_В)$	$\Theta(1{,}5\tau_В)$
0,03	5,0	0,223	0,050	0,016	0,11	—1,27
0,06	6,7	0,799	0,177	0,0164	1,10	—0,59
0,1	11,2	0,993	0,993	0,867	5,30	6,78

Вызывает удивление описание в [15] промежуточной волны горения при $\Theta_0 = 4$ для функции тепловыделения

$$W = \begin{cases} \exp\left(\Theta/(1 + \beta\Theta)\right), & \Theta \geqslant 0, \\ 0, & \Theta < 0. \end{cases} \tag{5}$$

На рис. 4 приведены температурные профили, полученные в результате численного счета (при $\Theta_0 = 4$, $\delta = 4$, $\beta = 0{,}01$, $n = 0$), системы

(1)—(4) (сплошные кривые), а также распределения температуры при подстановке в (1) теплового источника вида (5). Прежде всего отметим, что для обоих видов теплового источника описанная в [15] промежуточная волна отсутствует. К сожалению, в [15] не дан физический смысл указанной волны. В проведенных ранее численных исследованиях [1, 2, 5, 9, 10, 13] подобные волны также не обнаружены. Кроме того, как видно из рис. 4, качественное развитие процесса различно: для первого вида теплового источника произойдет воспламенение, для второго — остывание очага. Это обстоятельство объясняется отмеченным выше выводом работы [2] о возникновении ошибок при неправильном описании функции тепловыделения, что всегда должно учитываться при разработке новых теорий.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Мержанов А. Г., Барзыкин В. В., Гонтковская В. Т.** // Докл. АН СССР.— 1963.— 148, № 2.— С. 380.
2. **Merganov A. G.** // Combust. Flame.— 1966.— 10, N 4.— P. 341.
3. **Thomas P. H.** // Ibid.— 1973.— 21, N 1.— P. 99.
4. **Zaturska M. B.** // Ibid.— 1975.— 25.— P. 25.
5. **Ананьев А. В., Земских В. И., Лейпунский О. И.** О тепловом самовоспламенении системы горячих очагов // ФГВ.— 1983.— 19, № 4.— С. 49.
6. **Буркина Р. С., Вилюнов В. Н.** О возбуждении химической реакции в «горячей точке» // Там же.— 1980.— 16, № 4.— С. 75.
7. **Буркина Р. С., Вилюнов В. Н.** // Хим. физика.— 1982.— № 3.— С. 419.
8. **Вилюнов В. Н., Буркина Р. С.** // Горение конденсированных и гетерогенных систем: Материалы VI Всесоюз. симп. по горению и взрыву.— Черноголовка, 1980.— С. 18.
9. **Князева А. Г., Буркина Р. С., Вилюнов В. Н.** Особенности очагового теплового воспламенения при различных начальных распределениях температуры // ФГВ.— 1988.— 24, № 3.— С. 45.
10. **Земских В. И., Лейпунский О. И.** Повторное воспламенение конденсированных реагирующих веществ // Там же.— 1987.— 23, № 2.— С. 3.
11. **Vilynov V. N., Zarko V. E.** Ignition of solids.— Amsterdam; Oxford; N. Y.; Tokyo: Elsevier, 1989.— 442 p.
12. **Князева А. Г., Буркина Р. С.** // Макроскопическая кинетика и химическая газодинамика. 1989.— С. 94.
13. **Буркина Р. С., Князева А. Г.** К задаче об очаговом тепловом воспламенении в веществе, способном к автокаталитическому превращению.— Деп. в ВИНИТИ 23.09.86, № 6809.
14. **Сеплярский Б. С., Афанасьев С. Ю.** // Хим. физика.— 1989.— 8. № 5.— С. 646.
15. **Сеплярский Б. С., Афанасьев С. Ю.** Анализ нестационарной картины воспламенения очага разогрева // ФГВ.— 1989.— 25, № 6.— С. 9.
16. **Франк-Каменецкий Д. А.** Диффузия и теплопередача в химической кинетике.— М.: Наука, 1987.
17. **Zinn J.** // J. Chem. Phys.— 1962.— 36, N 7.— P. 1949.
18. **Boddington T.** // 9th. Symp. on Comb. Acad. Press.— N. Y.: Lond., 1963.— P. 287.
19. **Friedman M. M.** // Trans. Faraday Soc.— 1963.— 59, N 6.— P. 1865.
20. **Thomas P. H.** // Combust. Flame.— 1965.— 9, N 4.— P. 369.

г. Томск

Поступила в редакцию 27/VII 1990,
после доработки — 6/III 1991

УДК 536.413 : 662.611

Л. Я. Кашпоров, Ю. Е. Шелудяк, В. М. Мальцев,
В. Н. Маршаков, В. В. Ухов, А. Г. Распопин

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ПЛОТНОСТИ НА ОЦЕНКИ ТЕПЛОВЫХ ПАРАМЕТРОВ ВОЛНЫ ГОРЕНИЯ НИТРОГЛИЦЕРИНОВЫХ ПОРОХОВ

Проведены экспериментальные исследования линейного коэффициента теплового расширения нитроглицериновых порохов Н, НБ, НМФ-2 в области температур 103—373 К и получены уравнения для температурной зависимости объемного КТР и плотности исследованных порохов. Сильная зависимость плотности нитроглице-