ОСОБЕННОСТИ ОЧАГОВОГО ТЕПЛОВОГО ВОСПЛАМЕНЕНИЯ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ НАЧАЛЬНЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЯХ ТЕМПЕРАТУРЫ

А. Г. Князева, Р. С. Буркина, В. Н. Вилюнов

(Томск)

Очаговый тепловой взрыв наиболее полно исследован в случае равномерного начального распределения температуры [1—5]. Установлено [1, 2, 5], что критическое значение параметра Франк-Каменецкого δ_* определяется слабой логарифмической зависимостью от температурного напора Θ_0. При этом если начальное распределение температуры близко к П-образному профилю, то критериальное соотношение $\delta_*(\Theta_0)$ практически не зависит от выгорания реагента в веществе [1, 2]. В [6] вскрыто существенное влияние профиля начального распределения температуры на зависимость $\delta_*(\Theta_0)$.

В настоящей работе численно исследуется температурный режим очага для различных начальных распределений температуры, определяются соответствующие зависимости $\delta_*(\Theta_0)$. Анализируется влияние выгорания реагента на процесс воспламенения.

Математическая формулировка задачи имеет вид [1, 6]

$$\frac{\partial\Theta}{\partial\tau} = \delta^{-1}\frac{1}{\xi^2}\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi^2\frac{\partial\Theta}{\partial\xi}\right) + (1-Y)^n\exp\left(\frac{\Theta}{1+\beta\Theta}\right), \quad (1)$$

$$\frac{\partial Y}{\partial\tau} = \delta^{-1}\,\mathrm{Le}\frac{1}{\xi^2}\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi^2\frac{\partial Y}{\partial\xi}\right) + \gamma(1-Y)^n\exp\left(\frac{\Theta}{1+\beta\Theta}\right). \quad (2)$$

Начальные и граничные условия:

$$\Theta(\xi,\ 0) = \Theta_0[f(\xi) - 1],\ \ Y(\xi, 0) = 0, \quad (3)$$

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

где $\Theta = E(T - T_0)/RT_0^2$, $\xi = x/r$, $\tau = t/t_{\text{ад}}$ — безразмерные температура, пространственная и временна́я переменные; Θ_0, Le, γ, β — общепринятые параметры теории воспламенения.

Процесс воспламенения анализировали для четырех вариантов начального распределения температуры в (3), симметричного относительно центра очага: а) линейное $f(\xi) = (1 - |\xi|)\eta(1 - |\xi|)$, б) экспоненциальное $f(\xi) = \exp(-2|\xi|/\sqrt{\pi})$, в) вероятностное $f(\xi) = \exp(-\xi^2)$ и г) П-образное $f(\xi) = \eta(|\xi| - 1)$.

Численная реализация системы (1)—(4) проводилась по неявной разностной схеме методом прогонки. Сгущение расчетной сетки в центре очага достигалось переходом из бесконечной пространственной области $[0, \infty[$ в конечную с помощью преобразования $x = 1/(1 + \xi)$. Точность счета 4% достигалась подбором шага по координате и соответствующего числа Куранта. Параметры, определяющие процесс, изменялись в следующих пределах: $10 \leqslant \Theta_0 \leqslant 50$, $0 \leqslant \mathrm{Le} \leqslant 5$, $0{,}001 \leqslant \gamma \leqslant 0{,}1$, $0 \leqslant n \leqslant 3$, $\beta = 0{,}5/\Theta_0$.

Поведение температуры $\Theta(0, \tau)$ и выгорания $Y(0, \tau)$ в центре очага для линейного начального распределения температуры показано на рис. 1. Видно, что рассматриваемый случай, в отличие от П-образного [1], характеризуется двумя критическими значениями параметра Франк-Каменецкого δ_*' и δ_*''. Для $\delta \geqslant \delta_*'$ температура очага монотонно возрастает (кривая *1*), и при $\tau \approx 2$ происходит воспламенение. Изменение пространственного распределения температуры на этапе воспламенения идет только в узкой зоне у центра очага ($\xi_\text{р} \approx 0{,}05$). Выгорание реагента сказывается лишь вблизи $\xi = 0$. Кривая *1'* показывает, что к моменту воспламенения реагент в центре очага практически полностью выгорает.

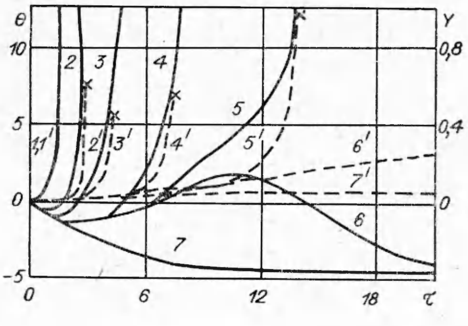


Рис. 1. Зависимость температуры (сплошные линии) и глубины превращения вещества (штриховые) в центре очага от времени при линейном начальном распределении для реакции первого порядка; $\Theta_0 = 20$, $\gamma = 0{,}01$, $\mathrm{Le} = C$, $n = 1$.

δ: *1*, *1'* — 23 000, *2*, *2'* — 15 425, *3*, *3'* — 4220, *4*, *4'* — 3000, *5*, *5'* — 2870, *6*, *6'* — 2830, *7*, *7'* — 1490.

При $\delta_*'' < \delta < \delta_*'$ температура сначала падает, что связано с радиальным перераспределением начального температурного профиля $f(\xi)$ и недостаточным теплоприходом от химических реакций для его поддержания в центре. В дальнейшем профиль $\Theta(0,\ \tau)$ стабилизируется, химическая реакция приводит к росту температуры в очаге и последующему воспламенению (кривые *2*—*5*). Такой режим может существовать длительное время. Так, при $\delta \gtrsim \delta_*''$ время воспламенения $\tau_в \approx 12$ (см. рис. 1, *4*, *5*). Выгорание реагента также зависит от значения δ. При изменении δ от δ_*' до δ_*'' выгорание сначала уменьшается (кривые *2'*, *3'*), что связано с изменением температурного профиля, а затем возрастает (кривые *4'*, *5'*) в результате увеличения $\tau_в$.

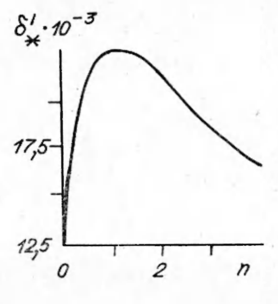
Заметим, что область изменения $\delta \in [\delta_*'',\ \delta_*']$ в рассмотренном случае линейного начального распределения температуры достаточно велика (почти на порядок превосходит δ_*'').

При $\delta \leqslant \delta_*''$ решающую роль на развитие процесса оказывает теплоотдача с границ очага. В результате уменьшаются геометрические размеры очага, и он постепенно остывает (см. рис. 1, *6*). При малых значениях параметра Франк-Каменецкого температура в центре очага монотонно падает (см. рис. 1, *7*). Выгорание в этом режиме остается незначительным.

Проведенные расчеты показали, что варьирование n, Le и γ практически не влияет на δ_*'', а δ_*' существенно зависит лишь от порядка реакции. Зависимость $\delta_*'(n)$ имеет максимум в окрестности $n \simeq 1$ (рис. 2). Выгорание увеличивается с ростом γ и при уменьшении Le, n. Характер зависимости выгорания от времени при различных n, Le, γ такой же, как и при $n = 1$, $\mathrm{Le} = 0$, $\gamma = 0{,}01$. Основное выгорание происходит в момент воспламенения (см. рис. 1).

Процесс воспламенения очага разогрева происходит аналогично в случае экспоненциальной зависимости $f(\xi)$. Для вероятностного и П-образного распределений $f(\xi)$ режим воспламенения, соответствующий $\delta \in [\delta_*'',\ \delta_*'[$, отсутствует. Процесс характеризуется одним значением δ_*. Данное обстоятельство связано с тем, что гладкие температурные профили уже в начальный момент времени удовлетворяют условию $(\partial f/\partial\xi)_{\xi\to 0} = 0$. В результате рассмотренная выше перестройка начального температурного профиля и связанное с этим понижение темпера-

Рис. 2. Зависимость критического значения параметра δ_*', разделяющего термические режимы в очаге, от порядка реакции для линейного распределения начальной энергии. $f(\xi) = (1 - |\xi|) \times \eta(1 - |\xi|)$, $\Theta_0 = 20$, $\mathrm{Le} = 0$, $\gamma = 0{,}01$.



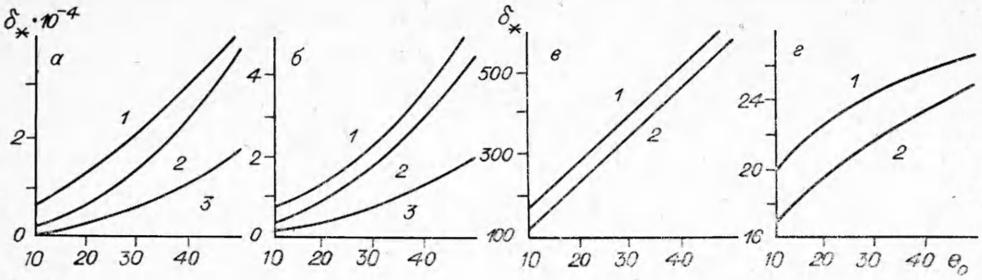


Рис. 3. Зависимости $\delta_*(\Theta_0)$ для различных начальных распределений температуры; $n = 0$.

$f(\xi)$: *а*) $(1-|\xi|)\,\eta(1-|\xi|)$, *б*) $\exp(-2|\xi|/\sqrt{\pi})$, *в*) $\exp(-\xi^2)$, *г*) $\eta(|\xi|-1)$;

1 — δ'_* для функций *а*, *б* и δ_* для *в*, *г*; *2* — δ_* [6]; *3* — δ''_*.

туры в центре очага отсутствуют. Изменение пространственного распределения температуры для этих режимов показывает, что реакция развивается на всем характерном размере начального очага. Влияние выгорания на δ_* и развитие процесса несущественно. Подробно картина поведения $\Theta(0, \tau)$ для П-образного начального разогрева рассмотрена в [1].

Зависимости $\delta'_*(\Theta_0)$, $\delta''_*(\Theta_0)$ и $\delta_*(\Theta_0)$ для рассмотренных случаев начального распределения приведены на рис. 3. С асимптотическим значением $\delta_*(\Theta_0)$, полученным в [6], хорошо согласуется зависимость $\delta'_*(\Theta_0)$ для первых двух распределений $f(\xi)$ и $\delta_*(\Theta_0)$ в случае гладких начальных температурных профилей.

В качестве примера рассмотрим воспламенение гексогена по нулевому порядку реакции для двух начальных распределений температуры с одинаковым запасом энергии: $f_1(\xi) = \exp(-\xi^2)$ и $f_2(\xi) = \exp(-2|\xi|/\sqrt{\pi})$. Физико-химические характеристики взяты из [7], $T_0 = 573$ К, $T_н = 273$ К. Переход к безразмерным переменным дает $\Theta_0 = 19{,}1$, $\beta = 0{,}027$. Численный счет уравнения (1) с условиями (3), (4) определяет критические характеристики: $\delta_* = 1234{,}3$, $\tau_* = 6{,}2$ для $f_1(\xi)$ и $\delta'_* = 12181$, $\delta''_* = 2938$, $\tau_* = 17{,}34$ для $f_2(\xi)$. Соответствующие размерные величины принимают значения: в первом случае — критический радиус $r_* = 0{,}63 \cdot 10^{-3}$ м, $t_* = 32{,}46$ с; во втором — $r''_* = 2{,}13 \cdot 10^{-3}$ м, $t_* = 90{,}72$ с. Монотонное повышение температуры в центре очага для второго начального распределения обеспечивается лишь при $r > 4{,}35 \cdot 10^{-3}$ м, время воспламенения в этом случае менее 10,2 с. При увеличении T_0 критический радиус уменьшается. Так, при $T_0 = 1273$ К в первом случае $r_* = 3{,}3 \cdot 10^{-7}$ м, а во втором $r''_* = 1{,}4 \cdot 10^{-7}$ м.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Мержанов А. Г., Барзыкин В. В., Гонтковская В. Т.** Докл. АН СССР, 1963, 148, 2, 380.
2. **Merzhanov A. G.** Comb. Flame, 1966, 10, 4, 341.
3. **Thomas P. H.** Comb. Flame, 1973, 21, 1, 99.
4. **Zaturska M. B.** Comb. Flame, 1975, 25, 1, 25.
5. **Буркина Р. С., Вилюнов В. Н.** ФГВ, 1980, 16, 4, 75.
6. **Буркина Р. С., Вилюнов В. Н.** Хим. физика, 1982, 1, 3, 419.
7. **Страковский Л. Г., Уляков П. И.**— В кн.: Химическая физика процессов горения и взрыва. Горение конденсированных систем.— Черноголовка, 1977.

Поступила в редакцию 9/VI 1986