

## ЛИТЕРАТУРА

1. Франк-Каменецкий Д. А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике.— М.: Наука, 1967.
2. Виллюнов В. Н. Теория зажигания конденсированных веществ.— Новосибирск: Наука, 1984.
3. Коздоба Л. А. Методы решения нелинейных задач теплопроводности.— М.: Наука, 1975.
4. Дик И. Г., Зурер А. Б. ФГВ, 1982, 18, 4, 16.
5. Зельдович Я. Б. Докл. АН СССР, 1963, 150, 2, 283.
6. Merzhanov A. G., Averson A. E. Comb. Flames, 1971, 16, 86.

*Поступила в редакцию 22/III 1988,  
после доработки — 7/VI 1988*

УДК 536.46

## АНАЛИЗ НЕСТАЦИОНАРНОЙ КАРТИНЫ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ ОЧАГА РАЗОГРЕВА

*Б. С. Сеплярский, С. Ю. Афанасьев  
(Куйбышев)*

Для конденсированных реакционноспособных веществ очень большое значение имеет тепловой взрыв, начинающийся в отдельных малых объемах — очагах воспламенения, нагретых до высокой температуры. Подобные очаги образуются при механических воздействиях на химически активное вещество: ударе и трении. Анализ очагового воспламенения в простейшей постановке проведен в работе [1] путем численного решения на ЭВМ.

В общепринятых приближениях тепловой взрыв плоского П-образного очага разогрева при протекании в нем реакции нулевого порядка описывается уравнением

$$\begin{aligned} \partial\Theta/\partial\tau &= \partial^2\Theta/\partial\xi^2 + \exp(\Theta/(1 + \beta\Theta)), \\ \tau = 0: \Theta &= \begin{cases} 0, & \xi \leq R_0, \\ -\Theta_n, & \xi > R_0, \end{cases} \\ \xi = 0, \xi = \infty: \partial\Theta/\partial\xi &= 0. \end{aligned}$$

Безразмерные переменные и параметры:

$$\begin{aligned} \Theta &= (T - T_0) E/RT_0^2, & \xi &= r (\lambda RT_0^2 \exp(E/RT_0)/(Q\rho k_0 E))^{-0.5}, \\ \Theta_n &= (T_0 - T_n) E/RT_0^2, & \tau &= t Q k_0 E \exp(-E/RT_0)/(c RT_0^2), \\ \beta &= RT_0/E, & Fk &= r_0^2 Q \rho k_0 E \exp(-E/RT_0)/(\lambda RT_0^2) = R_0^2, \end{aligned}$$

где  $Fk$  — параметр Франк-Каменецкого;  $T_0$  — температура очага;  $T_n$  — температура среды;  $r_0$  — размер очага;  $t$  — время;  $E$  — энергия активации;  $k_0$  — предэкспонент;  $Q$  — тепловой эффект реакции;  $\lambda$  — коэффициент теплопроводности;  $c$  — теплоемкость;  $\rho$  — плотность.

Авторами разработан метод приближенного анализа критических условий очагового воспламенения, учитывающий следующие характерные особенности процесса:

1) период индукции очагового теплового взрыва много меньше времени тепловой релаксации очага. Отсюда следует, что за время развития процесса в очаге успевает остыть только лишь слой вещества у поверхности ( $\xi = R_0$ ) очага, а вещество в центральной части очага охлаждается слабо;

2) для очагового воспламенения необходимы большие начальные перепады температуры очага и окружающей его среды ( $\Theta_n > 4$ ). По-

этому внутри очага можно выделить аналогично волне горения зоны реакции в узком температурном интервале вблизи максимальной температуры и инертного охлаждения, где имеется большой градиент температуры. Окружающую очаг среду, как показано в [1], можно считать практически инертной.

Таким образом задача об очаговом воспламенении сводится к изучению динамики зоны реакции в условиях охлаждения очага инертной средой.

Для выяснения поведения температурного профиля в зоне реакции проведем оценку отдельных членов в исходном уравнении. В соответствии с выбранными масштабами изменение безразмерных величин на начальной стадии процесса в зоне реакции составляет:

$$\Theta_p \approx 1, \xi_p \approx R_0,$$

где  $\Theta_p$  — температурный интервал зоны реакции;  $\xi_p$  — ее ширина.

Мощность химического источника тепла в течение периода индукции можно приближенно считать постоянной и равной единице,  $d^2\Theta/d\xi^2 \approx 1/R_0^2 \ll 1$ ,  $\exp(\Theta/(1+\beta\Theta)) \approx 1$ .

Проведенная оценка показывает, что на начальном этапе развития процесса в центральной области очага можно пренебречь кондуктивным теплоотводом по сравнению с источником тепла, а рост температуры в центре очага описывать уравнением адиабатического теплового взрыва. Поэтому определяет время процесса адиабатический период индукции, равный в выбранных масштабах единице.

С течением времени вещество у поверхности очага остывает, граница зоны реакции смещается к центру. Если к моменту  $\tau = 1$  ширина зоны реакции будет такой, что тепло из нее не будет успевать отводиться, произойдет воспламенение очага.

Критическим является условие достижения к моменту  $\tau = 1$  равенства теплоотвода и тепловыделения в зоне реакции. Отсюда можно оценить критический размер зоны реакции:

$$d^2\Theta/d\xi^2 = \exp(\Theta/(1+\beta\Theta)), 1/(\xi_p^{kp})^2 \approx 1, \xi_p^{kp} \approx 1.$$

Полученное значение  $\xi_p^{kp}$  близко к критическому размеру сосуда в теории теплового воспламенения Франк-Каменецкого.

Таким образом, для воспламенения очага нужно, чтобы за время индукции размер зоны реакции не стал меньше критического. Для определения критического размера очага разогрева  $R_{0кр}$  необходимо выяснить, как изменяется ширина зоны реакции во времени. Определим закон движения границы зоны реакции из решения задачи об охлаждении инертной пластины толщины  $2R_0$  неограниченной средой:

$$\Theta(\xi, \tau) = -\frac{\Theta_H}{2} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \left[ \operatorname{erfc} \left( \frac{(2n-1)R_0 - \xi}{2\sqrt{\tau}} \right) + \operatorname{erfc} \left( \frac{(2n-1)R_0 + \xi}{2\sqrt{\tau}} \right) \right].$$

Учитывая, что время индукции много меньше времени тепловой релаксации очага, профиль температуры в зоне инертного охлаждения приближенно описывается первым членом ряда

$$\Theta(\xi, \tau) = -\frac{\Theta_H}{2} \operatorname{erfc} \left( \frac{R_0 - \xi}{2\sqrt{\tau}} \right).$$

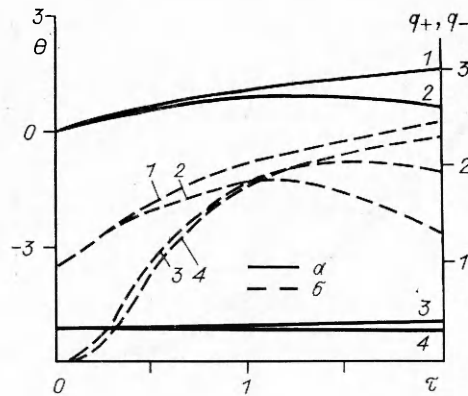
Принимая за границу зоны реакции точку, температура в которой  $\Theta = -1$ , получаем закон ее движения:

$$\frac{z}{\Theta_H} = \operatorname{erfc} \left( \frac{R_0 - \xi_p}{2\sqrt{\tau}} \right).$$

В критических условиях в момент  $\tau = 1$   $\xi_p = \xi_p^{kp} \approx 1$ .

Рис. 1. Изменение температуры в характерных точках очага (а) и тепловой баланс в центральной части очага ( $0 \leq \xi \leq 1$ ) (б).

$R_0$ : 1, 3 — 2,87, 2, 4 — 2,82; а) 1, 2 — центр очага, 3, 4 — температура поверхности химически активного и инертного очага ( $\xi = R_0$ ); б) 1, 2 — тепловыделение, 3, 4 — теплоотвод.



Для  $R_{0кр}$  получаем выражение

$$2/\Theta_n = \operatorname{erfc}((R_{0кр} - 1)/2). \quad (1)$$

Критический размер очага, рассчитанный по этой формуле, хорошо согласуется с определенным численным счетом [1], ошибка не более 4% во всем практически интересном интервале изменения  $\Theta_n$  ( $4 < \Theta_n < 25$ ). Так как ранее при численном анализе процесса не изучалась динамика его характерных величин, возникла необходимость сравнить выводы и предположения приближенной теории с результатами расчетов процесса на ЭВМ.

Численное решение задачи проводилось на неравномерной пространственной сетке по неявной схеме на четырехточечном Т-образном шаблоне. Расчеты проведены во всем практически интересном интервале изменения  $\Theta_n$ . Иллюстрации сделаны для расчетов при следующих значениях параметров:  $\Theta_n = -10,5$ ,  $\beta = 0,01$ ,  $R_{0кр} = 2,83$ . Выявленные особенности процесса сохраняются во всем интервале  $4 < \Theta_n < 25$ .

Сравнив температуру на поверхности ( $\xi = R_0$ ) химически активного и инертного очагов размером  $R_0 \sim R_{0кр}$  (рис. 1), видим, что за время развития процесса на поверхности активного очага температура практически не меняется и равна половине начального перепада  $\Theta_n$ . Следовательно, поверхностные слои химически активного очага охлаждаются так же, как и инертного того же размера, что мало отличается от закона остывания полубесконечного тела.

Зависимость температуры в центре очага от времени для очагов размером больше и меньше критического практически линейная до  $\tau = 1$ , разогрев в момент  $\tau = 1$  для  $R_0 = 2,82$  равен 0,94, а для  $R_0 = 2,87 - 1,04$ . Это позволяет сделать вывод о том, что оценка мощности химического источника тепла в приближенной теории сделана правильно.

Границей зоны реакции в очаге является точка, температура которой на один характерный интервал ниже, чем в центре очага. В приближенной теории за границу зоны реакции принималась точка, где  $\Theta = -1$  на профилях температуры, соответствующих охлаждению инертного очага. Как видно, динамика точки с  $\Theta = -1$  из решения инертной задачи хорошо отражает поведение зоны реакции (рис. 2). В момент  $\tau = 1$  для очага с  $R_0 < R_{0кр}$  из решения инертной задачи  $\xi_r = 0,95$ , из активной — 0,98, для  $R_0 > R_{0кр}$  при  $\tau = 1$  из инертной задачи  $\xi_r = 1,02$ , из активной — 1,01. Таким образом, критический размер зоны реакции в приближенной теории определен верно и его можно с хорошей точностью найти из решения инертной задачи.

Рассмотрим динамику теплового баланса в зоне реакции. На рис. 3 показано изменение запаса тепла в зоне реакции  $q_s$ :

$$q_s(\tau) = \int_0^{\xi_p} (\Theta(\xi, \tau) + \Theta_n) d\xi.$$

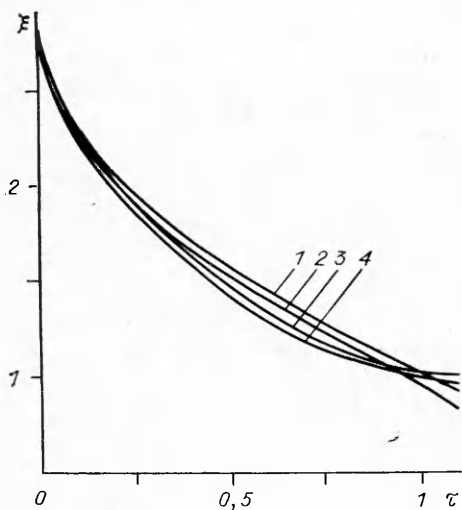


Рис. 2. Зависимость размера зоны реакции от времени.

$R_0$ : 1, 3 — 2,87; 2, 4 — 2,82; 1, 2 — решение задачи об охлаждении инертного очага; 3, 4 — для химически активного очага.

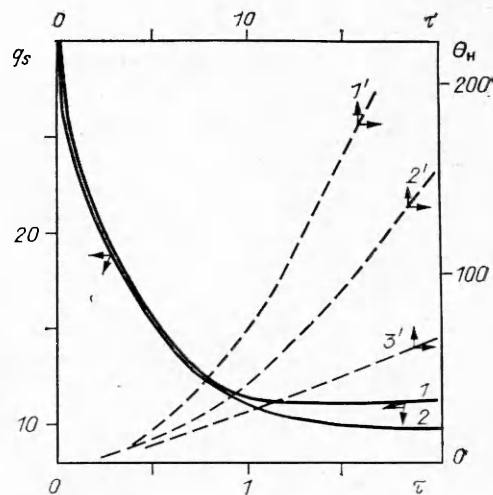


Рис. 3. Изменение запаса тепла в зоне реакции во времени и температуры.

1 —  $R_0 = 2,87$ ; 2 —  $R_0 = 2,82$ ; 1' — в зоне прогрева стационарной волны горения; 2' — в сосуде критического размера задачи о несимметричном воспламенении; 3' — в очаге критического размера.

Для очага с  $R_0 < R_{0кр}$  запас тепла в зоне реакции монотонно уменьшается, т. е. теплоотвод из зоны реакции больше тепловыделения в ней, очаг остывает. При  $R_0 > R_{0кр}$  запас тепла до момента  $\tau = 1$  убывает, в основном за счет сокращения размера зоны, а затем начинает расти. Это значит, что при  $\tau > 1$  тепловыделение в зоне реакции больше теплоотвода, в ней происходит накопление тепла, приводящее к тепловому взрыву.

Особенно наглядно это можно показать, сравнивая тепловыделение и теплоотвод в центральной части очага с  $\xi = 1$  (см. рис. 1):

$$q^+ = \int_0^1 \exp(\Theta/(1 + \beta\Theta)) d\xi, \quad q^- = \partial\Theta/\partial\xi|_{\xi=1}.$$

Вначале, при  $\tau \ll 1$ , теплоотвод в этой зоне мал, вещество нагревается в адиабатических условиях. При  $\tau = 1$  для  $R_0 < R_{0кр}$  теплоотвод становится больше тепловыделения, очаг остывает; при  $R_0 > R_{0кр}$  тепловыделение в этой зоне всегда больше теплоотвода из нее, происходит воспламенение очага.

Теплоотвод с поверхности очага  $(\partial\Theta/\partial\xi|_{\xi=R_0})$  для очагов с  $R_0 > R_{0кр}$  и  $R_0 < R_{0кр}$  практически одинаков все время развития процесса, но тепловыделение существенно различается. Для очага с  $R < R_{0кр}$  суммарное тепловыделение всегда меньше теплоотвода, а если очаг имеет размер больше критического, то тепловыделение при  $\tau > 1$  становится больше теплоотвода, однако в зоне реакции равенство  $q_p^+$  и  $q_p^-$  достигается раньше при  $\tau = 1$ . Это говорит о том, что слой вещества у поверхности очага не дает заметного вклада в суммарное тепловыделение, являясь практически инертным теплоизолятором зоны химической реакции.

Таким образом, все предположения, сделанные на основе оценок в приближенной теории, подтвердились результатами численного анализа.

Требуется обсуждения вопрос о вырождении очагового теплового взрыва при малых начальных перепадах температур ( $\Theta_n < 4$ ). В [1] вырождение связывают с влиянием химической реакции в окружающей очаг среде на характеристики процесса. Однако если учесть, что характерное время очагового воспламенения есть адиабатический период индукции, то разогрев среды за счет протекания в ней химической реак-

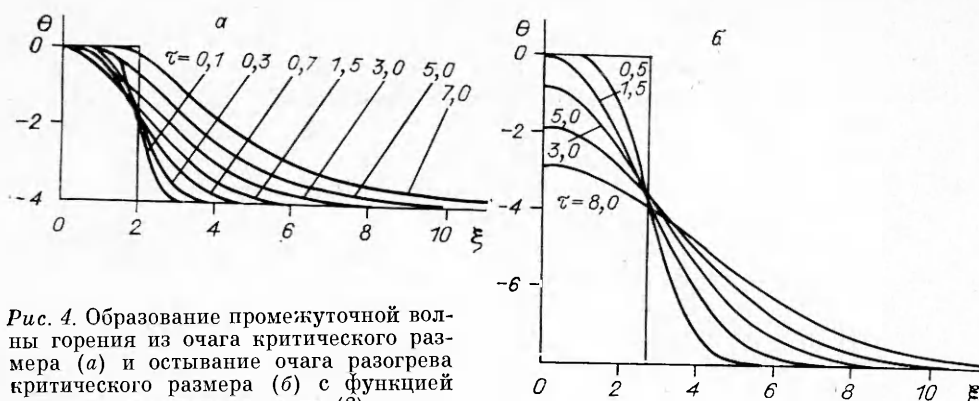


Рис. 4. Образование промежуточной волны горения из очага критического размера (а) и остывание очага разогрева критического размера (б) с функцией тепловыделения типа (2).

ции при  $\Theta_n = 4$  за это время есть величина порядка  $\exp(-4) \ll 1$ . Этот разогрев достаточно мал для того, чтобы существенно повлиять на воспламенение.

Для решения этого вопроса сравним начальный запас тепла в очаге критического размера с запасом тепла в стационарной волне горения при одинаковых значениях  $\Theta_n$  (см. рис. 3). Видно, что при больших  $\Theta_n$  начальный запас тепла в очаге намного меньше запаса тепла в зоне прогрева волны горения. При  $\Theta_n \approx 4$  они сравниваются, поэтому при  $\Theta_n < 4$  начального запаса тепла в очаге достаточно для формирования промежуточной волны горения с максимальной температурой, равной начальной температуре очага. Этот вывод проверен численным счетом. Для этого использовалась функция тепловыделения следующего вида:

$$W = \begin{cases} \exp(\Theta/(1 + \beta\Theta)), & \Theta \geq 0, \\ 0, & \Theta < 0. \end{cases} \quad (2)$$

На рис. 4 показаны профили температуры при различных  $\tau$  для очагов размером, равным критическому, рассчитанному по формуле (1) для соответствующего перепада температур. При  $\Theta_n = 4$  происходит образование промежуточной волны горения, при  $\Theta_n = 8$  очаг остывает. Найденный при  $\Theta_n = 8$  критический размер очага с функцией тепловыделения типа (2) показал, что начальный запас тепла в очаге в критических условиях существенно меньше запаса тепла в зоне прогрева волны горения. Это становится понятным, если учесть, что в критических условиях в момент  $\tau = 1$  профиль температуры в зоне инертного охлаждения близок к линейному, а не к михельсоновскому профилю [2]. Поэтому критический размер очага нужно находить из условия равенства начального запаса тепла в очаге запасу тепла в сосуде критического размера задачи о несимметричном воспламенении Я. Б. Зельдовича [3] (см. рис. 3, 2').

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Merzhanov A. G. Comb. Flames, 1966, 10, 64, 341.
2. Алдушин А. П. ФГВ, 1984, 20, 3, 10.
3. Зельдович Я. Б., Баренблатт Г. И., Либрович В. Б. и др. Математическая теория горения и взрыва.— М.: Наука, 1980.

Поступила в редакцию 1/IV 1988