

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛООВОГО ВЗРЫВА ЧАСТИЦЫ МАГНИЯ ПРИ УЧЕТЕ ИСПАРЕНИЯ МЕТАЛЛА

Ю. А. Гостеев, А. В. Федоров

Институт теоретической и прикладной механики СО РАН, 630090 Новосибирск

Построено многообразие катастроф/воспламенения для модели теплового взрыва частицы магния, учитывающей химическую реакцию окисления, испарение металла и конвективный теплообмен с окружающим газом. Это позволило определить типы тепловой динамики частицы в плоскости бифуркационных параметров модели (указать области воспламенения, погасания и регулярного нагрева); найти из экспериментальных данных кинетические константы в эмпирическом законе воспламенения; показать устойчивость интегрального параметра времени задержки воспламенения относительно наборов кинетических констант, определяемых для математических моделей с учетом и без учета испарения металла.

В [1–3] дан обзор работ по физико-математическому моделированию воспламенения мелких частиц магния и методами элементарной теории катастроф и численно исследовано это явление в рамках точечной и распределенной моделей, учитывающих гетерогенную химическую реакцию. В то же время в литературе имеются указания на важность учета испарения металла и его окисла с поверхности частицы. Это явление не принималось во внимание в [1–3]. Изучение этого процесса представляет интерес и с точки зрения общей теории теплового взрыва систем с двумя химическими реакциями, протекающими с различными характерными временами и энергиями активации [4]. Настоящая работа посвящена построению многообразия катастроф/воспламенения для модели теплового взрыва частицы магния, учитывающей испарение металла, и определению на ее основе типов тепловой динамики частицы в плоскости бифуркационных параметров модели. Расчетные данные по различным моделям сопоставлены между собой.

1. ОСНОВНОЕ УРАВНЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Изучим влияние испарения металла на процесс воспламенения частицы под действием высокой температуры окружающего газа (см., например, [5]) в рамках точечной модели [6]. Близкая по виду математическая модель возникает и при исследовании особенностей превращения в системе с двумя параллельными химическими реакциями, одна из которых экзотермическая, а другая эндотермическая [4].

Уравнение, описывающее изменение температуры частицы во времени, имеет вид [6]

$$\frac{1}{3} \frac{c_s r_s}{qk} \frac{dT}{dt} = \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) - c \exp\left(-\frac{E_1}{RT}\right) - \alpha(T - \bar{T}) \equiv g(T), \quad (1)$$

где $\alpha = \lambda Nu / 2qr_s \rho_s k$, $k = k_0 c_{ок}$, $c = v/k$; c_s , ρ_s , r_s — соответственно теплоемкость, плотность металла и радиус частицы; $c_{ок}$ — массовая концентрация окислителя; Nu — число Нуссельта; q , E , k_0 — тепловой эффект, энергия активации, предэкспонент реакции окисления; E_1 — теплота испарения; λ , \bar{T} — теплопроводность и температура окружающей среды.

Для того чтобы дать качественный анализ решения задачи Коши для (1) —

$$t = 0: \quad T = T_0, \quad (1a)$$

проанализируем в области переменных $(T, \alpha, \bar{T}, c, E, E_1)$ нулевую изоклину уравнения (1), используя методы элементарной теории катастроф.

2. ИССЛЕДОВАНИЕ МНОГООБРАЗИЯ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ

2.1. Основные соотношения для построения многообразия катастроф/воспламенения. Аналогично [1, 2, 7] рассмотрим условия, позволяющие найти трижды вырожденные критические точки (ТКТ) потенциальной функции

$$G(T) = \int g(T) dT:$$

$$e^{-2/T} - ce^{-2/\gamma T} = \alpha(T - \bar{T}),$$

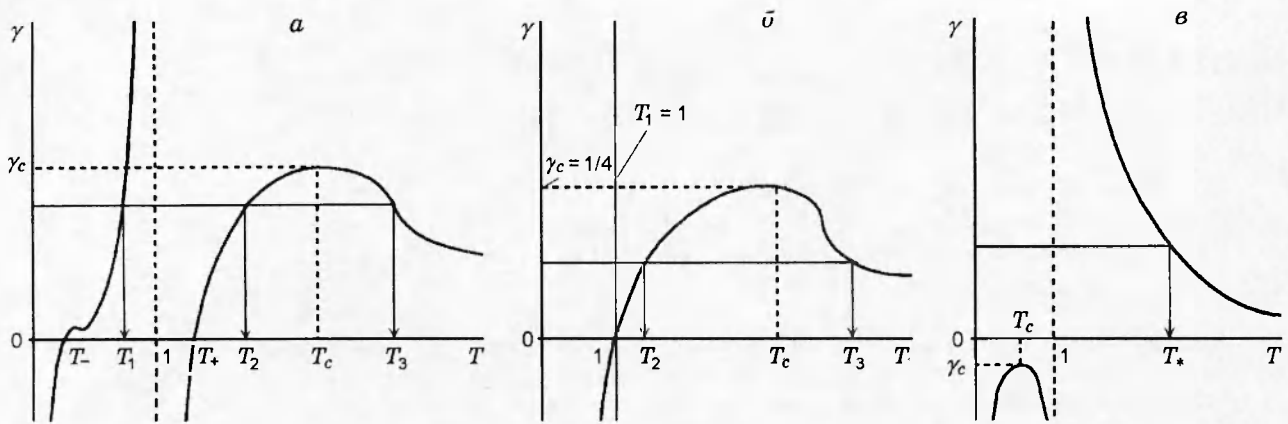


Рис. 1. Диаграмма корней для определения ТКТ:

а — $\bar{T} < 1/2$, б — $\bar{T} = 1/2$, в — $\bar{T} > 1/2$

$$\frac{2}{T^2} e^{-2/T} - \frac{2}{T^2} \frac{c}{\gamma} e^{-2/\gamma T} = \alpha, \quad (2)$$

$$e^{-2/T} \left(\frac{1}{T} - 1 \right) - \frac{c}{\gamma} e^{-2/\gamma T} \left(\frac{1}{\gamma T} - 1 \right) = 0.$$

Здесь в качестве масштаба температуры принята величина $T_M = E/2R$ и введены параметры $\gamma = E/E_1$, $\alpha = \alpha T_M$. Решение системы (2), определяющей ТКТ (T_* , α_* , c_*) в пространстве (T, α, c) , сводится к решению уравнения

$$\gamma T^2(T-1) = T^2 - 2T + 2\bar{T} \quad (3)$$

или

$$P(T) \equiv \gamma T^3 - (\gamma + 1)T^2 + 2T - 2\bar{T} = 0.$$

Из (3) следует, что корни данного уравнения зависят параметрически от γ , \bar{T} . Имеет место представление (при $\bar{T} < 0,5$)

$$\gamma = \frac{(T - T_+)(T - T_-)}{T^2(T - 1)}, \quad (4)$$

где $T_{\pm} = 1 \pm \sqrt{1 - 2\bar{T}}$.

Проведем качественный анализ решений уравнения (3), пользуясь диаграммой корней $T_* = T_*(\gamma, \bar{T})$ (рис. 1). Результаты этого исследования сформулируем в виде следующего утверждения.

• **УТВЕРЖДЕНИЕ 1** (о существовании трижды вырожденных критических точек). Число и порядок следования корней уравнения (3) определяются в зависимости от величин γ , \bar{T} следующим образом.

1. Пусть $\bar{T} < 1/2$. Тогда

а) если $0 < \gamma \leq \gamma_c$, то существуют три действительных корня $T_* = T_{1,2,3}$ ($T_- < T_1 < 1 < T_2 < T_c < T_3$);

б) если $\gamma > \gamma_c$, то существует один действительный корень T_* ($T_- < T_* < 1$) и два комплексно-сопряженных.

2. Пусть $\bar{T} = 1/2$. Тогда

а) если $0 < \gamma \leq \gamma_c = 1/4$, то существуют три действительных корня $T_* = T_{1,2,3}$ ($T_1 = 1 < T_2 < T_c < T_3$), причем $T_2 = T_3$ при $\gamma = \gamma_c$;

б) если $\gamma > \gamma_c$, то имеется один действительный корень $T_* = 1$ и два комплексно-сопряженных.

3. Пусть $\bar{T} > 1/2$. Тогда существует один действительный корень $T_* > 1$ для всех $\gamma > 0$.

Здесь критическая величина

$$\gamma_c = \max \gamma(T)|_{T>1} = \gamma_c(\bar{T}) \text{ при } \bar{T} \leq 1/2.$$

Функция $\gamma_c(\bar{T})$ определяется параметрически: $\gamma_c = \gamma(T_c)$ согласно (4), а связь $\bar{T} = H(T_c)$ следует из равенства $\frac{d\gamma(T)}{dT}|_{T=T_c} = 0$. График зависимости $\gamma_c(\bar{T})$ приведен на рис. 2. Видно, что для реальных значений \bar{T} ($\leq 0,2 \div 0,3$) величина γ_c всегда меньше единицы. Доказательство утверждения 1 следует из элементарных построений функции $\gamma(T)$, определенной по (4) и ее непрерывности при $T > 1$.

2.2. Асимптотическое и численное представление корней для ТКТ. Выпишем асимптотические выражения для действительных решений уравнения (3) при условиях $\gamma \ll 1$ и $\gamma \gg 1$.

• **УТВЕРЖДЕНИЕ 2** (об асимптотическом представлении корней уравнения (3)). Пусть $\bar{T} \leq 1/2$. Тогда уравнение (3) при $\gamma \ll 1$ имеет три действительных приближенных решения:

2.2. Асимптотическое и численное представление корней для ТКТ. Выпишем асимптотические выражения для действительных решений уравнения (3) при условиях $\gamma \ll 1$ и $\gamma \gg 1$.

• **УТВЕРЖДЕНИЕ 2** (об асимптотическом представлении корней уравнения (3)). Пусть $\bar{T} \leq 1/2$. Тогда уравнение (3) при $\gamma \ll 1$ имеет три действительных приближенных решения:

$$T_{1,2} = T_{\mp} + \gamma \frac{T_{\mp}^2}{2} + \gamma^2 \frac{T_{\mp}^3}{2} \left(1 - \frac{3}{2} \bar{T}_{\mp} \right) + O(\gamma^3),$$

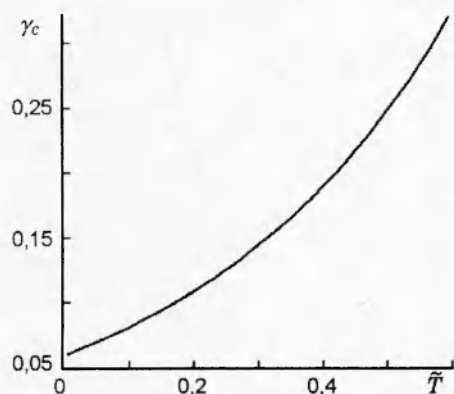


Рис. 2. Зависимость критической величины γ_c от температуры окружающей среды

$$T_3 = \frac{\gamma + 1}{\gamma} - (T_1 + T_2) + O(\gamma^3),$$

при $\gamma \gg 1$ — единственное действительное приближенное решение

$$T_* = 1 + \gamma^{-1}(2\bar{T} - 1) - \gamma^{-2}2(2\bar{T} - 1)^2 + O(\gamma^{-3}).$$

О точности приведенных разложений можно судить по численным данным, представленным в табл. 1 и 2.

В общем случае, когда γ конечно, решение уравнения (3) осуществлялось численно. Результаты представлены на рис. 3 в виде диаграммы корней $T_* = T_*(\bar{T}, \gamma)$ для ряда значений γ .

Таблица 1

Точность асимптотических решений уравнения (3) при $\gamma \ll 1$ ($T = 0,1$)

Корень и невязка	$\gamma = 0,001$	$\gamma = 0,01$	$\gamma = 0,1$
T_1	0,10561	0,10563	0,10613
$P(T_1)$	$-2 \cdot 10^{-8}$	$2 \cdot 10^{-8}$	$-1,51 \cdot 10^{-6}$
T_2	1,8962	1,9117	2,0112
$P(T_2)$	$2 \cdot 10^{-5}$	$2 \cdot 10^{-4}$	$1,86 \cdot 10^{-1}$
T_3	998,9982	98,9982	8,88266
$P(T_3)$	$3,64 \cdot 10^{-2}$	1,6072	-0,9

Таблица 2

Точность асимптотического решения уравнения (3) при $\gamma \gg 1$ ($T = 0,1$)

Корень и невязка	$\gamma = 2$	$\gamma = 10$	$\gamma = 100$
T_*	0,9200	0,9320	0,9920
$P(T_*)$	-0,39	$2 \cdot 10^{-2}$	$1,1 \cdot 10^{-3}$

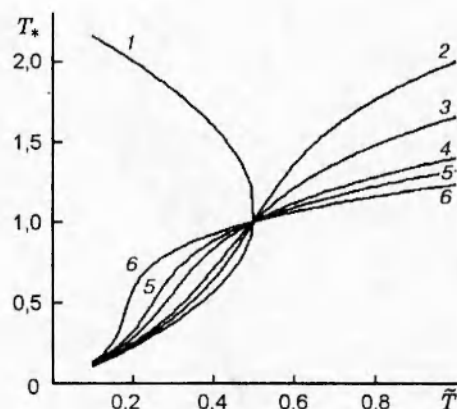


Рис. 3. Диаграмма корней $T_* = T_*(\bar{T}, \gamma)$ для определения ТКТ:

$\gamma = 0,1$ (1); 0,5 (2); 0,8 (3); 1,5 (4); 2,0 (5); 3,0 (6) (в случае $\gamma = 0,1$ ветвь третьего, наибольшего корня не показана)

Отметим, что в практически важном случае $\gamma > \gamma_c < 1$ многообразие катастроф обладает единственной трижды вырожденной критической точкой, как и в модели воспламенения, не учитывающей испарение. Новым обстоятельством является существование многообразия катастроф с тремя ТКТ, когда процесс испарения по сравнению с окислением намного более активирован ($E \ll E_1$). Это указывает на наличие в системе (при данном соотношении параметров) усложненной тепловой динамики и на возможность нетривиальных сценариев воспламенения частицы.

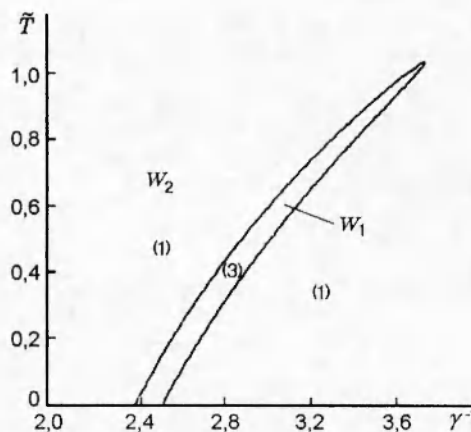


Рис. 4. Разбиение плоскости параметров (γ, \bar{T}) на области с одной (W_2) и тремя (W_1) ТКТ (цифры в скобках — число ТКТ)

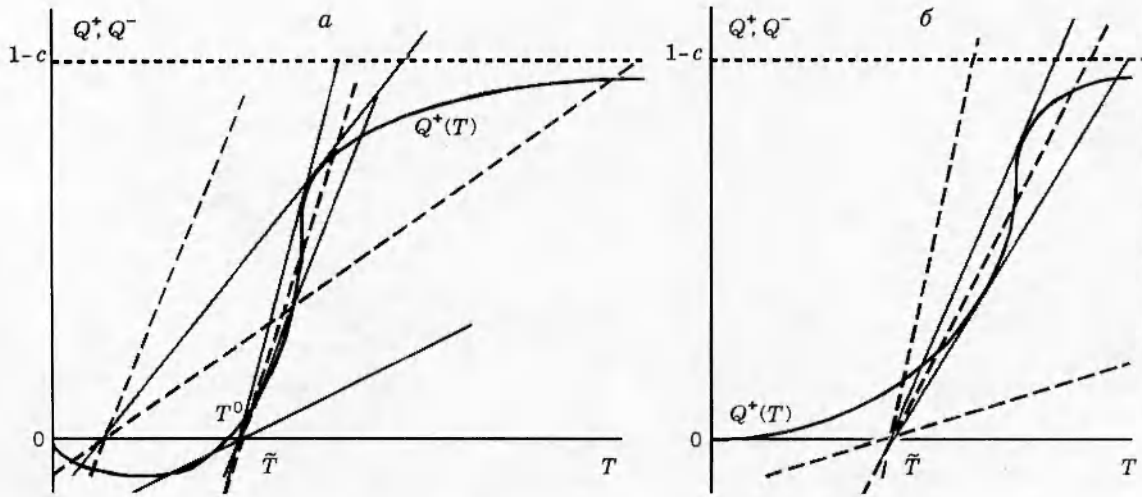


Рис. 5. Вид диаграммы Семенова в зависимости от стационарной адиабатической температуры T_0 (при $c < 1$):

$a - T_0 > 0$, $b - T_0 < 0$; штриховыми линиями показаны различные положения кривой конвективно-теплоотвода $Q^-(T)$, а сплошными прямыми линиями — предельные (касательные) положения этой кривой

Приведем также бифуркационную диаграмму для корней уравнения (3) на плоскости (γ, \bar{T}) , которая разделяет области параметров с различным числом ТКТ и получается при построении кривых $\bar{T} = \bar{T}_{1,2}(\gamma)$, вдоль которых обращается в нуль дискриминант данного кубического уравнения (рис. 4).

3. БИФУРКАЦИОННАЯ ДИАГРАММА И ОПРЕДЕЛЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ КОНСТАНТ

3.1. Построение нулевых изоклин уравнения (1) в сечениях $c = \text{const}$ поверхности равновесия. Обратимся к рис. 5, где представлена диаграмма Семенова с кривыми суммарного теплоприхода

$$Q^+(T) = e^{-2/T} - ce^{-2/\gamma T}$$

и теплоотвода

$$Q^-(T) = \alpha(T - \bar{T}).$$

Уравнение $Q^+(T) = 0$ обладает корнями

$$T = 0 \quad \text{и} \quad T = T^0 = \frac{2(\gamma - 1)}{\gamma \ln(1/c)},$$

где T^0 имеет смысл стационарной адиабатической температуры в системе.

Очевидно, что в зависимости от знака T^0 и соотношения между \bar{T} и T^0 могут реализовываться различные случаи касания кривых

$Q^+(T)$ и $Q^-(T)$ (мы ограничиваем наше рассмотрение вариантом $c < 1$). Результаты анализа сведем в следующее

• УТВЕРЖДЕНИЕ 3 (о критических условиях теплового взрыва).

1. Пусть $T^0 > 0$. Тогда:

1.1) если $\bar{T} < T^0$, то имеется одна точка касания (T_k, α_k) , причем:

— при $\alpha < \alpha_k$ существуют три положения равновесия, находящиеся в $(0, \bar{T})$, (T^0, T_k) и (T_k, ∞) соответственно,

— при $\alpha > \alpha_k$ существует одно положение равновесия, лежащее в $(0, \bar{T})$;

1.2) если $\bar{T} > T^0$, то имеются три точки касания $(T_{k,i}, \alpha_{k,i})_{i=1,2,3}$, пронумерованные в порядке возрастания α_k , причем:

— при $\alpha < \alpha_{k,1}$ имеются три положения равновесия, лежащие в $(0, T_{k,1})$, $(T_{k,1}, T^0)$ и $(T_{k,3}, \infty)$ соответственно,

— при $\alpha_{k,1} < \alpha < \alpha_{k,2}$ существует одно равновесное положение, лежащее в $(T_{k,3}, \infty)$,

— при $\alpha_{k,2} < \alpha < \alpha_{k,3}$ имеются три равновесных положения, лежащие в $(T, T_{k,2})$, $(T_{k,2}, T_{k,3})$ и $(T_{k,3}, \infty)$,

— при $\alpha > \alpha_{k,3}$ существует одно положение равновесия, лежащее в $(\bar{T}, T_{k,2})$.

2. При $T^0 < 0$ имеются две точки касания $(T_{k,i}, \alpha_{k,i})_{i=1,2}$, причем:

— при $\alpha < \alpha_{k,1}$ существует единственное положение равновесия, находящееся в $(T_{k,2}, \infty)$;

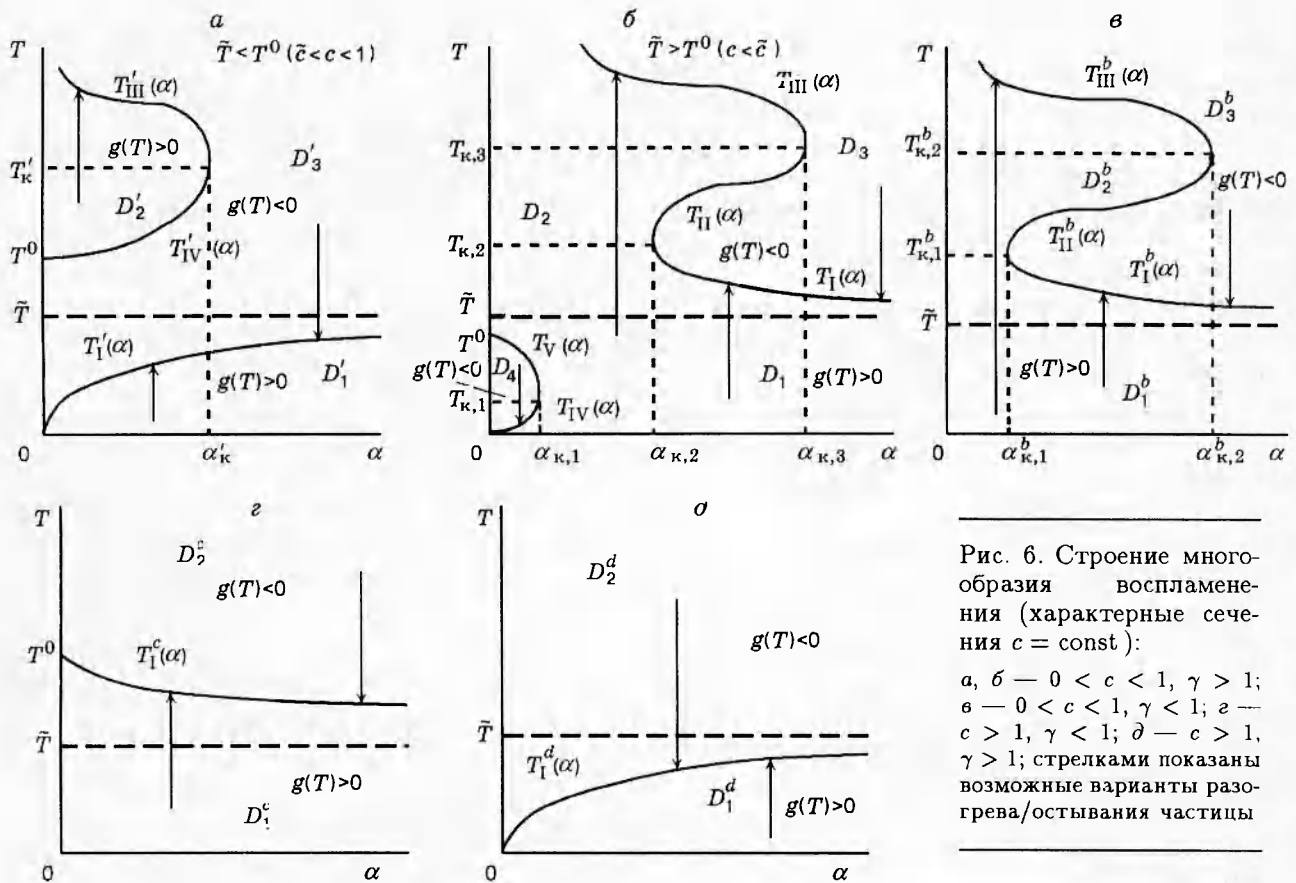


Рис. 6. Строение многообразия воспламенения (характерные сечения $c = \text{const}$):

а, б — $0 < c < 1, \gamma > 1$; в — $0 < c < 1, \gamma < 1$; г — $c > 1, \gamma < 1$; д — $c > 1, \gamma > 1$; стрелками показаны возможные варианты разогрева/остывания частицы

— при $\alpha_{к,1} < \alpha < \alpha_{к,2}$ существуют три равновесных положения, лежащие в $(\bar{T}, T_{к,1}), (T_{к,1}, T_{к,2}), (T_{к,2}, \infty)$;
 — при $\alpha > \alpha_{к,2}$ имеется одно положение равновесия, находящееся в $(\bar{T}, T_{к,1})$.

Доказательство высказанного утверждения легко просматривается из качественного анализа кривых $Q^\pm(T)$ (рис. 5).

Далее сформулируем некоторые полезные в дальнейшем свойства источниковой функции $Q^+(T)$, необходимые для построения поверхности равновесия:

- 1) $Q^+(T) \rightarrow 0$ при $T \rightarrow 0$;
- 2) $Q^+(T) \rightarrow (1 - c)$ при $T \rightarrow \infty$;
- 3) $T^0 > 0$, если (а) $0 < c < 1, \gamma > 1$ или (б) $c > 1, \gamma < 1$; $T^0 < 0$, если (в) $0 < c < 1, \gamma < 1$ или (г) $c > 1, \gamma > 1$.

Теперь обратимся к анализу типичных сечений $c = \text{const}$ многообразия катастроф, что необходимо для описания температурной динамики частицы.

3.2. Бифуркационная диаграмма. Типы тепловой динамики. После определения координат

ТКТ можно построить образы кривых складок на плоскости (α, c) . Они являются проекциями соответствующих дважды вырожденных критических точек на поверхности равновесия (многообразии катастроф) в пространстве (T, α, c) , задаваемой первым уравнением в (2). В параметрическом виде линии складок определяются из соотношений

$$c = \gamma \frac{T^2 - 2(T - \bar{T})}{\gamma T^2 - 2(T - \bar{T})} e^{-2(\gamma-1)/\gamma T}, \tag{5}$$

$$\alpha = \frac{2(\gamma - 1)}{\gamma T^2 - 2(T - \bar{T})} e^{-2/T},$$

где параметр T пробегает положительную полуось $0 \leq T < \infty$. Линии (5) имеют особенности, определяемые корнями знаменателей. Найдем эти корни: $T_{v\pm} = (1/\gamma)(1 \pm \sqrt{1 - 2\gamma\bar{T}})$. Функция $c(T)$ обращается в нуль в точках $T = T_\pm$. Тем самым вид линий складок (5) существенно зависит от взаимного расположения корней $T_{v\pm}$ и T_\pm . В частности, при $\gamma < 1$ имеем $\gamma T_{v-} < T_- < T_+ < T_{v+}$, а при $\gamma > 1$ — $T_- < \gamma T_{v-} < T_{v+} < T_+$.

На основе свойств функции $Q^+(T)$, оценок на $T_{v\pm}$ можно построить качественный вид многообразия катастроф в сечениях $c = \text{const}$ (рис. 6). Определение характерных областей дано ниже.

Рассмотрим вначале ситуацию, когда реакция окисления более активирована по сравнению с процессом испарения, что соответствует $\gamma > 1$. Если $T^0 \leq \bar{T}$, то, как показывает рис. 6,б, разогрев частицы может протекать двумя путями в зависимости от величины коэффициента теплоотдачи α и температуры T :

— регулярный нагрев до температуры, большей, чем \bar{T} при $\alpha > \alpha_{к,2}$, $T_0 < T_I(\alpha)$, или до температуры, не превосходящей \bar{T} при $\alpha < \alpha_{к,1}$, $T_0 < T_{IV}(\alpha)$;

— воспламенение при $\alpha_{к,1} < \alpha < \alpha_{к,2}$, $T_0 < T_{III}(\alpha)$, или при $\alpha < \alpha_{к,1}$, $T_0 > T_V(\alpha)$, или при $\alpha_{к,2} < \alpha < \alpha_{к,3}$, $T_{II}(\alpha) < T_0 < T_{III}(\alpha)$.

Довольно интересно наличие двустороннего предела воспламенения по коэффициенту теплоотдачи ($\alpha_{к,1}$ и $\alpha_{к,2}$), что может быть связано с «провоцирующей» ролью конвективного теплоподвода от газа в интервале температур частицы $0 < T < \bar{T}$. Отметим также появление дополнительной области \bar{D}_4 низкотемпературного погасания.

Если $T^0 > \bar{T}$, то согласно рис. 6,а разогрев частицы ограничен сверху температурой $T'_I(\alpha) > \bar{T}$, если ее начальная температура не превышает $T'_I(\alpha)$; в противном случае частица может погаснуть либо воспламениться в зависимости от принадлежности точки (α, T_0) области D'_3 или D'_2 соответственно.

Наконец, когда $v > k$ (при $\gamma > 1$), тепловыделение всегда уравновешено теплоотводом при определенной температуре частицы, не превышающей температуры окружающей среды, и возникновение теплового взрыва невозможно (см. рис. 6,д). Здесь доля испарения в общих тепловых потерях достаточно существенна.

Теперь рассмотрим случай, когда теплота испарения превосходит энергию активации для окисления ($\gamma_c < \gamma < 1$). Тепловая эволюция частицы (при $v < k$) (см. рис. 6,е) совершенно сходна с поведением, которое предсказывается моделью, не учитывающей испарение:

— регулярный нагрев частицы, если коэффициент теплоотдачи больше критического $\alpha_{к,1}^b$ и начальная температура меньше $T_I^b(\alpha)$;

— воспламенение, если $\alpha < \alpha_{к,1}^b$, $T_0 < T_{III}^b(\alpha)$ или $\alpha_{к,1}^b < \alpha < \alpha_{к,2}^b$, $T_{II}^b(\alpha) < T_0 < T_{III}^b(\alpha)$;

— погасание частицы, если параметры (α, T_0) принадлежат области D_3^b .

В случае $v > k$ (см. рис. 6,з) доля испарения в тепловых потерях относительно небольшая, здесь реализуется всегда безвзрывной регулярный нагрев частицы до температуры, превышающей температуру окружающей среды, но меньшей своей равновесной адиабатической температуры.

Далее, используя анализ нулевых изоклин в сечениях $c = \text{const}$, можно дать подробную классификацию типов тепловой динамики частицы. Прежде чем перейти к формулировке утверждения, определим характерные области параметрической плоскости (α, T) :

$$D_1 = \{(\alpha, T) : \alpha \in (\alpha_{к,2}, \infty), T \in (0, T_I(\alpha))\},$$

$$D_2 = \{(\alpha, T) : \alpha \in (0, \alpha_{к,1}), T \in (0, T_{IV}(\alpha))\} \cup$$

$$\cup \{(\alpha, T) : \alpha \in (0, \alpha_{к,1}), T \in (T_V(\alpha), T_{III}(\alpha))\} \cup$$

$$\cup \{(\alpha, T) : \alpha \in (\alpha_{к,1}, \alpha_{к,2}), T \in (0, T_{III}(\alpha))\} \cup$$

$$\cup \{(\alpha, T) : \alpha \in (\alpha_{к,2}, \alpha_{к,3}), T \in (T_{II}(\alpha), T_{III}(\alpha))\},$$

$$D_4 = \{(\alpha, T) : \alpha \in (0, \alpha_{к,1}), T \in (T_{IV}(\alpha), T_V(\alpha))\},$$

область D_3 есть $\{(\alpha, T)\} \setminus (D_1 \cup D_2 \cup D_3)$ (см. рис. 6,б);

$$D'_1 = \{(\alpha, T) : \alpha \in (0, \infty), T \in (0, T'_I(\alpha))\},$$

$$D'_2 = \{(\alpha, T) : \alpha \in (0, \alpha'_{к}), T \in (T'_{IV}(\alpha), T'_{III}(\alpha))\},$$

область D'_3 есть $\{(\alpha, T)\} \setminus (D'_1 \cup D'_2)$ (см. рис. 6,а);

$$D_1^b = \{(\alpha, T) : \alpha \in (\alpha_{к,1}^b, \infty), T \in (0, T_I^b(\alpha))\},$$

$$D_2^b = \{(\alpha, T) : \alpha \in (0, \alpha_{к,1}^b), T \in (0, T_{III}^b(\alpha))\} \cup$$

$$\cup \{(\alpha, T) : \alpha \in (\alpha_{к,1}^b, \alpha_{к,2}^b), T \in (T_{II}^b(\alpha), T_{III}^b(\alpha))\},$$

область D_3^b есть $\{(\alpha, T)\} \setminus (D_1^b \cup D_2^b)$ (см. рис. 6,в);

$$D_1^c = \{(\alpha, T) : \alpha \in (0, \infty), T \in (0, T_I^c(\alpha))\},$$

область D_2^c есть $\{(\alpha, T)\} \setminus D_1^c$ (см. рис. 6,з);

$$D_1^d = \{(\alpha, T) : \alpha \in (0, \infty), T \in (0, T_I^d(\alpha))\},$$

область \bar{D}_2^d есть $\{(\alpha, T)\} \setminus D_1^d$.

Тогда справедливо

• УТВЕРЖДЕНИЕ 4 (типы тепловой динамики температуры частицы).

1. Если $\gamma > 1$ и

1.1) $c < \bar{c}$, то:

— при $(\alpha, T_0) \in D_1$ температура стабилизируется на нижней ветви $T_I(\alpha) > \bar{T}$; при $(\alpha, T_0) \in D_2$ решение описывает воспламенение и стабилизируется на верхней ветви $T_{III}(\alpha)$ стационарных состояний;

— при $(\alpha, T_0) \in D_3$ решение описывает погасание, т. е. выход температуры на ветвь $T_I(\alpha)$, когда $\alpha > \alpha_{к,3}$ либо $\alpha \in (\alpha_{к,2}, \alpha_{к,3})$, $T_0 \in (T_I(\alpha), T_{II}(\alpha))$; на ветвь $T_{III}(\alpha)$, когда $\alpha < \alpha_{к,3}$, $T_0 > T_{III}(\alpha)$;

— при $(\alpha, T_0) \in D_4$ решение описывает погасание — выход температуры на ветвь $T_{IV}(\alpha)$;

1.2) $\tilde{c} < c < 1$, то:

— при $(\alpha, T_0) \in D'_1$ решение описывает безвзрывной нагрев с переходом в равновесие на нижней ветви $T'_I(\alpha) < \bar{T}$;

— при $(\alpha, T_0) \in D'_2$ имеет место режим воспламенения с выходом температуры на верхнюю устойчивую ветвь $T'_{III}(\alpha)$ стационарных состояний;

— при $(\alpha, T_0) \in D'_3$ реализуется режим погасания со стабилизацией температуры на ветви $T'_I(\alpha)$, когда $\alpha > \alpha'_к$ либо $\alpha \in (0, \alpha'_к)$, $T_0 \in (T'_I(\alpha), T'_{IV}(\alpha))$; на ветви $T'_{III}(\alpha)$, когда $\alpha \in (0, \alpha'_к)$, $T_0 > T'_{III}(\alpha)$;

1.3) $c > 1$, то:

— при $(\alpha, T_0) \in D^t_1$ происходит безвзрывной нагрев частицы со стабилизацией температуры на нижней ветви $T^d_I(\alpha) < \bar{T}$;

— при $(\alpha, T_0) \in D^t_2$ реализуется режим погасания с выходом на ветвь $T^d_I(\alpha)$.

2. Если $\gamma < 1$ и

2.1) $0 < c < 1$, то:

— при $(\alpha, T_0) \in D^b_1$ реализуется безвзрывной нагрев со стабилизацией температуры на нижней ветви $T^b_I(\alpha) > \bar{T}$ стационарных состояний;

— при $(\alpha, T_0) \in D^t_2$ реализуется режим воспламенения с выходом температуры на верхнюю ветвь $T^b_{III}(\alpha)$;

— при $(\alpha, T_0) \in D^t_3$ происходит погасание со стабилизацией на ветви $T^b_I(\alpha)$, когда $\alpha > \alpha^b_{к,2}$ либо $\alpha \in (\alpha^b_{к,1}, \alpha^b_{к,2})$, $T_0 \in (T^b_I(\alpha), T^b_{II}(\alpha))$; на ветви $T^b_{III}(\alpha)$, когда $\alpha < \alpha^b_{к,2}$, $T_0 > T^b_{III}(\alpha)$;

2.2) $c > 1$, то:

— при $(\alpha, T_0) \in D^c_1$ реализуется безвзрывной нагрев с переходом в равновесие на ветви $T^c_I(\alpha) > \bar{T}$;

— при $(\alpha, T_0) \in D^c_2$ происходит погасание и температура частицы стабилизируется на ветви $T^c_I(\alpha)$.

ЗАМЕЧАНИЕ. Описание динамики температуры частицы, когда $\gamma < \gamma_c$ и у многообразия катастроф имеется три ТКТ, здесь не приведено.

3.3. Численная иллюстрация утверждения 4. Следующий численный пример иллюстрирует строение многообразия катастроф в случае

$\gamma > 1 > \gamma_c$, т. е. при наличии одной ТКТ. Набору параметров $\gamma = 1,4$, $\bar{T} = 0,18$, $T_+ = 1,8$, $T_- = 0,2$, $T_{v+} = 1,2173$, $T_{v-} = 0,2112$, $\tilde{c} = 4,18 \cdot 10^{-2}$, $\tilde{\alpha} = 2,63 \cdot 10^{-4}$ соответствует координата $T_* = 0,239$ для ТКТ и бифуркационная диаграмма в плоскости (α, c) , показанная качественно на рис. 7. Цифры в скобках обозначают число состояний теплового равновесия в системе. Стрелки указывают направление возрастания параметра T в уравнениях (5) вдоль линий складок. Символом \diamond отмечены контрольные точки $M_j = (\alpha, c)_j$ ($j = 1, \dots, 8$), в которых решалась задача Коши (1), (1а). Для интегрирования (1), (1а) использовался жесткоустойчивый метод Гира. Значения параметров приведены в табл. 3.

Таблица 3

Значения параметров в контрольных точках

Номер точки j	α_j	c_j	T^∞
1	0,1	1,1	0,1767
2	0,1	10^{-4}	0,1801
3	0,002	0	$4,98 \cdot 10^3$
4	$2,63 \cdot 10^{-4}$	0,1	0,1536
5	$1 \cdot 10^{-5}$	0,9	0,0562
6	$1 \cdot 10^{-5}$	1,1	0,0578
7	$2,63 \cdot 10^{-4}$	0,04	$3,65 \cdot 10^4$
8	$1 \cdot 10^{-5}$	0,04	0,110

Примечание. T^∞ — конечная равновесная температура частицы.

3.4. Определение кинетических констант. Сравнение времен задержки воспламенения по разным моделям. Проведенный анализ многообразия катастроф/воспламенения позволяет перейти к конкретизации кинетического закона окисления Mg-частицы в воздухе с учетом испарения к-фазы. Для этого запишем уравнения, определяющие предвзрывное состояние (см. (2)):

$$k e^{-E'/T} - v e^{-E'_1/T} = \alpha_0 (T - \bar{T}),$$

$$k \frac{E'}{T^2} e^{-E'/T} - v \frac{E'_1}{T^2} e^{-E'_1/T} = \alpha_0, \quad (6)$$

где $\alpha_0 = \lambda Nu / 2 r_s \rho_s q$, масштабная температура $T_m = 300$ К, энергия активации E' и теплота испарения E'_1 отнесены к RT_m . Примем, следуя данным [5], $E'_1 = 53,333$ и возьмем (6) в двух произвольных точках $(r_{s,j}, \bar{T}_j)_{j=1,2}$ экспериментальной кривой, описывающей зависимость радиуса частицы от предельной темпе-

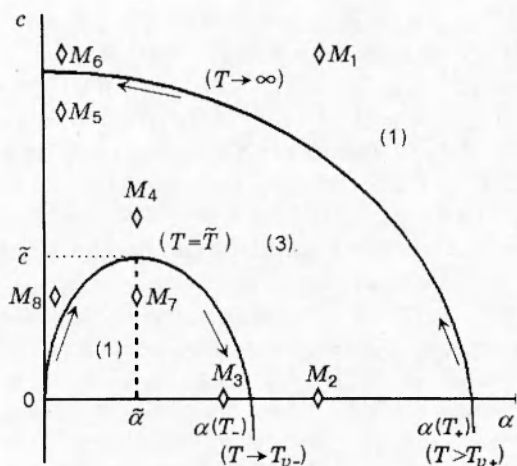


Рис. 7. Бифуркационная диаграмма системы в плоскости (α, c) (при $\gamma = 1,4, \bar{T} = 0,18$):

◊ — контрольные точки M_j ; цифры в скобках — число ТКТ

ратуры окружающего воздуха [1, 2, 8]. Это позволяет получить замкнутую систему трансцендентных уравнений для определения неизвестных величин E, k (если они существуют) и температур частицы на пределе воспламенения. Так, нами были найдены кинетические параметры при $v = 0,15$ м/с: $E' = 40,315$ ($E/R = 12094$ К), $k = 0,169$ м/с для мелких частиц (радиусом от 15 до 60 мкм) и $E' = 96,452$ ($E/R = 28936$ К), $k = 6,855 \cdot 10^5$ м/с для крупных частиц (радиусом от 300 до 600 мкм).

Интересно сравнить времена задержки воспламенения по полученным кинетическим законам окисления с аналогичными данными модели [1, 2], не учитывающей испарение. Как видно из табл. 4, для мелких частиц различия незначительны. Для крупных частиц они не превышают 11%.

Таблица 4
Время задержки воспламенения, мс

Радиус, мкм	Модель [1, 2]	Обсуждаемая модель
15	22,0	22,0
22	39,6	39,2
30	64,0	64,1
60	200,0	202,3
300	2200	1990
400	3800	3460
500	6000	5320
600	8500	7560

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Дан качественный и количественный анализ многообразия катастроф/воспламенения для модели воспламенения частицы магния, учитывающей химическую реакцию окисления, испарение металла и конвективный теплообмен с окружающим газом, что позволило:

- указать области воспламенения, погасания и регулярного нагрева частицы в плоскости управляющих параметров модели;
- найти кинетические константы в эмпирическом законе воспламенения;
- показать устойчивость интегрального параметра времени задержки воспламенения относительно наборов кинетических констант, определяемых для математических моделей с учетом и без учета испарения металла.

ЛИТЕРАТУРА

1. Федоров А. В. Физико-математическое моделирование воспламенения мелких частиц магния. Новосибирск, 1993. (Препр. / РАН. Сиб. отд-ние. ИТПМ; № 12-94).
2. Федоров А. В. Численно-аналитическое исследование воспламенения частиц магния // Физика горения и взрыва. 1996. Т. 32, № 1. С. 75-84.
3. Гостеев Ю. А., Федоров А. В. Воспламенение частицы магния (распределенная модель) // Физика горения и взрыва. 1996. Т. 32, № 4. С. 5-12.
4. Боровиков М. Б., Гольдшлегер У. И. Критические явления в системе с двумя параллельными экзо- и эндотермическими реакциями // Докл. АН СССР. 1981. Т. 261, № 2. С. 392.
5. Хайкин Б. И., Блошенко В. И., Мержанов А. Г. О воспламенении частиц металлов // Физика горения и взрыва. 1970. Т. 6, № 4. С. 474-488.
6. Петухова Е. В., Федоров А. В. Воспламенение частиц магния вблизи торца ударной трубы // Физика горения и взрыва. 1991. Т. 27, № 6. С. 139-142.
7. Fedorov A. V., Gosteev Yu. A. Physical-mathematical investigation of magnesium particle ignition // Prepr. of the 7th Intern. Colloquium on Dust Explosions. Bergen, Norway, 1996. P. 258-274.
8. Cassel H. V., Libman I. Combustion of magnesium particles II. Ignition temperatures and thermal conductivities of ambient atmospheres // Combust. Flame. 1963. V. 7, N 1.

Поступила в редакцию 20/1 1997 г.