

## ЛИТЕРАТУРА

1. Д. А. Франк-Каменецкий. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М., Наука, 1967.
2. В. В. Барзыкин, В. Т. Гоптковская и др. НМТФ, 1964, 3.
3. А. И. Вольперт, С. И. Худяев. Анализ в классах разрывных функций и уравнений математической физики. М., Наука, 1975.
4. Л. А. Вулис. Тепловой режим горения. М., ГЭИ, 1954.
5. D. A. Vaganov, N. G. Samoilenko, V. G. Abramov. Chem. Eng. Sci., 1978, 33, 8.
6. А. Н. Тихонов. Математический сборник. Т. 31, № 3, 1952.

## О ВОЗБУЖДЕНИИ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ В «ГОРЯЧЕЙ ТОЧКЕ»

*Р. С. Буркина, В. П. Вилюнов*

*(Томск)*

Понятие «горячей точки» широко используется при решении проблемы чувствительности взрывчатых веществ к внешним нетепловым возмущениям [1]. В рамках макрокинетического подхода тепловая часть проблемы чувствительности формулируется как задача об очаговом тепловом взрыве, которому посвящено большое количество работ приближенно-аналитического [2—5] и вычислительного [4, 6, 7] характера. Наиболее полный численный анализ задачи очагового взрыва при моделировании энерговыделения в виде  $\Pi$ -образного распределения начальной температуры «горячей точки» дан в [7].

В [8] показано, что приближенные теории критического условия очагового взрыва [2—5] неудовлетворительны: они не дают даже правильной качественной картины зависимости  $\delta_*$  от температурного напора  $\Theta_0$  (здесь  $\delta_*$  — критическое значение параметра Франк-Каменецкого,  $\Theta_0$  — температурный напор). В [9] предложено новое аналитическое решение, базирующееся на предположении, что кривизна температурных профилей подобна как в реакционноспособном теле, так и в инертном. В соответствии с этим член, учитывающий теплопередачу, заменялся на аналогичное выражение из решения задачи для инертного тела, что позволило свести уравнение в частных производных к обыкновенному дифференциальному уравнению. В результате удалось найти критический размер очага  $\delta_*$  в функции от  $\Theta_0$ , удовлетворительно согласующийся с расчетами [8]. Ключом анализа в работах [2—5, 9] служат упрощения (не всегда достаточно обоснованные) математической формулировки задачи, в связи с чем, по-видимому, не был замечен асимптотический характер решения.

В настоящей работе поле температур в очаге и окружающей его среде, время воспламенения и критический размер очага в зависимости от условий протекания процесса найдены с помощью асимптотического анализа.

**Постановка задачи.** Температурные изменения в очаге (с  $\Pi$ -образным энерговыделением и аррениусовской кинетикой) и в окружающей его среде можно описать уравнением теплопроводности

$$c\rho\partial T/\partial t = \lambda\Delta T + Qz\rho \exp(-E/RT) \quad (1)$$

с начальными и граничными условиями:

$$T(x, 0) = \begin{cases} T_0, & 0 < x < r, \\ T_n, & x \geq r, \end{cases} \quad (2)$$

$$\partial T(0, t)/\partial x = \partial T(\infty, t)/\partial x = 0, \quad (3)$$

где  $T$  — температура;  $c$  — теплоемкость;  $\rho$  — плотность;  $\lambda$  — теплопроводность;  $Q$  — тепловой эффект;  $z$  — предэкспонента;  $E$  — энергия активации;  $R$  — универсальная газовая постоянная;  $T_0$  — начальная температура очага;  $T_n$  — начальная температура вне очага;  $x$  — пространственная координата;  $r$  — радиус очага;  $t$  — время.

При переходе к безразмерным переменным выделим в исследуемом объекте две существенно различные пространственные области поведения температуры: при  $x < r$  происходит быстрый рост температуры за счет интенсивных химических реакций, а в области  $x > r$  повышение температуры идет медленнее и обеспечивается в основном теплопроводностью. Соответственно характерным масштабам внутри очага для температуры является интервал  $RT_0^2/E$ , для времени — период адиабатической реакции  $t_{ад} = cRT_0^2 \exp(E/RT_0)/EQz$ , для пространственной координаты — радиус очага  $r$ . В остальной области в качестве характерных будут масштабы теплопроводности в инертном теле:  $(T_0 - T_n)$ ,  $t_n = t_{ад}$ ,  $x_n = \sqrt{\lambda t_n / c\rho}$  ( $t_n$ ,  $x_n$  — масштабы области прогрева).

Условие, необходимое для возникновения очагового теплового взрыва, с помощью введенных характерных масштабов можно выразить неравенством

$$r/x_n = [\rho EQzr^2 \exp(-E/RT_0)/\lambda RT_0^2]^{1/2} = \sqrt{\delta} \gg 1. \quad (4)$$

Последнее соотношение позволяет использовать  $\delta$  в качестве параметра разложения при построении решения.

Ниже рассматривается случай активированной реакции. Чтобы явление очагового взрыва не вырождалось, накладывается требование несоразмерности химических реакций вне и в пределах очага

$$\Theta_0 = E(T_0 - T_n)/RT_0^2 \gg 1. \quad (5)$$

**Асимптотическое решение.** В безразмерном виде задача (1) — (3) формулируется следующим образом:

$$\begin{aligned} \partial V / \partial \tau &= \delta^{-1} \Delta V - \exp\{-V/[1 - \gamma V / \Theta_0]\}, \\ \partial V(0, \tau) / \partial \xi &= \partial V(\infty, \tau) / \partial \xi = 0, \\ V(\xi, 0) &= \Theta_0 \eta(\xi - 1), \end{aligned} \quad (6)$$

где  $V = E(T_0 - T)/RT_0^2$ ;  $\tau = t/t_{ад}$ ;  $\xi = x/r$ ;  $\gamma = (T_0 - T_n)/T_0$ ;  $\eta(\xi - 1)$  — единичная функция Хевисаанда.

Перейдем к зависимой переменной  $\Phi = V - V_I$ , где  $V_I(\xi, \tau)$  находится из решения задачи для инертного тела

$$\begin{aligned} \partial V_I / \partial \tau &= \delta^{-1} \Delta V_I, \quad V_I(\xi, 0) = \Theta_0 \eta(\xi - 1), \\ \partial V_I(0, \tau) / \partial \xi &= \partial V_I(\infty, \tau) / \partial \xi = 0. \end{aligned} \quad (7)$$

Тогда задача для  $\Phi(\xi, \tau)$  записывается в виде

$$\begin{aligned} \partial \Phi / \partial \tau &= \delta^{-1} \Delta \Phi - \exp\left[-\frac{\Phi + V_I}{1 - \gamma(\Phi + V_I)/\Theta_0}\right], \\ \partial \Phi(0, \tau) / \partial \xi &= \partial \Phi(\infty, \tau) / \partial \xi = \Phi(\xi, 0) = 0. \end{aligned} \quad (8)$$

При выполнении (4), (5) внутри очага ( $\xi < 1$ ) с точностью до величины порядка  $o(\delta^{-1}, \Theta_0^{-1})$  из (8) следует

$$\begin{aligned} \partial \Phi / \partial \tau &= -\exp[-(\Phi + V_I)], \\ \partial \Phi(0, \tau) / \partial \xi &= \Phi(\xi, 0) = 0, \end{aligned} \quad (9)$$

Формулы (9), характеризующие температурный режим очага до воспла-

менения, решаются по соотношению

$$\Phi(\xi, \tau) = \ln \left\{ 1 - \int_0^\tau \exp[-V_I(\xi, y)] dy \right\}. \quad (10)$$

Для определения температурного поля в области  $\xi \geq 1$  перейдем к новым переменным  $\varphi = \Phi/\Theta_0$  и  $\xi_1 = \sqrt{\delta}(\xi - 1)$ . Тогда задача (8) с точностью до экспоненциально малых величин  $o(\Theta_0^{-1}e^{-\Theta_0})$  преобразуется к виду

$$\partial\varphi/\partial\tau = \Delta\varphi, \quad (11)$$

$$\varphi(\xi_1, 0) = \partial\varphi(\infty, \tau)/\partial\xi_1 = 0.$$

Вторым граничным условием для (11) служит условие срачивания

$$\Theta_0^{-1}\Phi(\xi \rightarrow 1, \tau) = \varphi(\xi_1 \rightarrow -\sqrt{\delta}, \tau),$$

откуда

$$\varphi(-\sqrt{\delta}, \tau) = \Theta_0^{-1} \ln \left\{ 1 - \int_0^\tau \exp[-V_I(1, y)] dy \right\} = f(\tau). \quad (12)$$

Решение задачи (11)–(12) находится в соответствии с конкретной формой очага. Так, для сферически симметричного очага

$$\Delta\varphi = \partial^2\varphi/\partial\xi_1^2 + [2/(\xi_1 - \sqrt{\delta})] \partial\varphi/\partial\xi_1,$$

и соответствующее решение с точностью  $o(\delta^{-1/2}e^{-\delta/4}, \Theta_0^{-1}e^{-\Theta_0})$  принимает вид

$$\varphi(\xi_1, \tau) = \frac{\xi_1 + \sqrt{\delta}}{2\sqrt{\pi}} \int_0^\tau \frac{f(y)}{(\tau - y)^{3/2}} \exp\left[-\frac{(\xi_1 + \sqrt{\delta})^2}{4(\tau - y)}\right] dy,$$

где

$$f(\tau) = \Theta_0^{-1} \ln \left\{ 1 - \int_0^\tau \exp\left[-\Theta_0 \left[ \sqrt{y/\pi\delta} (1 - e^{-\delta/y}) + (1 + \operatorname{erfc} \sqrt{\delta/y})/2 \right] \right] dy \right\}.$$

Определяемое таким образом распределение температуры (10), (11) позволяет найти время воспламенения и критический размер очага.

За момент воспламенения очага  $\tau_b$  примем условие неограниченного возрастания температуры в его центре

$$\Phi(0, \tau \rightarrow \tau_b) \rightarrow -\infty.$$

Тогда (10) можно записать в виде

$$1 = \int_0^{\tau_b} \exp\{-V_I(0, y)\} dy. \quad (13)$$

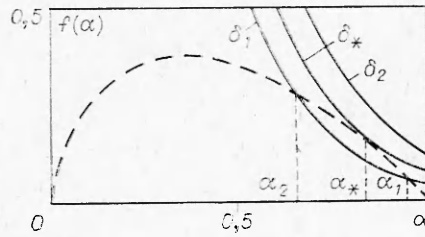
Для сферического очага из (7) следует

$$V_I(0, \tau) = \Theta_0 \{ \sqrt{\delta/\pi\tau} \exp(-\delta/4\tau) + \operatorname{erfc}(\sqrt{\delta/4\tau}) \}. \quad (14)$$

Обезразмеривая  $\tau_b \sim O(1)$  (при  $\delta \gg 1$ ) с учетом (14) подынтегральное выражение в (13) можно разложить в асимптотический ряд по  $\delta$ . Последующее интегрирование этого ряда с точностью до величин порядка  $o(\Theta_0\delta^{-3/2}e^{-\delta/4\tau_b})$  дает выражение

$$\tau_b [1 - 4\Theta_0\sqrt{\tau_b/\pi\delta} \exp(-\delta/4\tau_b)] = 1. \quad (15)$$

Ниже будет показано, что  $\Theta_0\delta^{-3/2} \exp(-\delta/4\tau_b) \ll 1$ .



Для поиска корней полученного уравнения воспользуемся графической интерпретацией его решения. Обозначим  $1/\tau_b = \alpha$ , тогда (15) преобразуем к виду

$$\sqrt{\alpha}(1-\alpha) = (4\Theta_0/\sqrt{\pi\delta}) \exp(-\delta\alpha/4). \quad (16)$$

На рисунке показано поведение левой и правой частей равенства (16)  $f_1(\alpha) = \sqrt{\alpha}(1-\alpha)$  и  $f_2(\alpha) = (4\Theta_0/\sqrt{\pi\delta}) \exp(-\delta\alpha/4)$  (соответственно штриховая и сплошные линии). Видно, что уравнение (16) имеет два корня: больший из которых (он соответствует меньшему  $\tau_b$ ) определяет время воспламенения  $\tau_b = 1/\alpha_1$ . Второй корень не имеет физического смысла, поскольку процесс рассматривается лишь для  $\tau < \tau_b$ . При уменьшении  $\delta$  корни сближаются и при некотором критическом  $\delta_*$  существует лишь один корень. Таким образом,  $\delta_*$  определяет наименьший размер очага, при котором еще возможно взрывное протекание процесса.

Искомые выражения для  $\alpha_*$ ,  $\delta_*$  определяются из условия равенства функций  $f_1(\alpha)$  и  $f_2(\alpha)$  и их производных в точке касания. Это условие дает систему уравнений

$$(1 - 3\alpha_*)/2\sqrt{\alpha_*} = -\Theta_0\sqrt{\delta_*}/\pi \exp(-\delta_*\alpha_*/4), \quad (17)$$

$$\sqrt{\alpha_*}(1-\alpha_*) = (4\Theta_0/\sqrt{\pi\delta_*}) \exp(-\delta_*\alpha_*/4),$$

решая которую, получим

$$\alpha_* = 1 - 4/\delta_* + \dots, \quad (18)$$

$$\tau_{b*} = 1 + 4/\delta_* + \dots$$

При  $\delta > \delta_*$  время воспламенения находится из (15) итерациями

$$\tau_{b(i+1)} = 1 + (4\Theta_0\tau_{bi}^{3/2}/\sqrt{\pi\delta}) \exp(-\delta/4\tau_{bi}). \quad (19)$$

Наличие экспоненты в (19) делает  $\tau_b$  очень чувствительным к изменениям  $\delta$ . Так, небольшое увеличение  $\delta$  приводит к  $\tau_b \rightarrow 1$ , т. е. к адиабатическому периоду индукции.

Критическое значение радиуса очага воспламенения следует из (17) при подстановке в него (18)

$$\delta_* = 4 \ln \{e\Theta_0\sqrt{\delta_*}/\pi(1 + 2/\delta_*)\}. \quad (20)$$

С помощью (18)–(20) порядок отбрасываемых слагаемых в (15) для критического случая  $\delta = \delta_*$  оценивается величиной  $o(\delta_*^{-2})$ , а для  $\delta > \delta_* = o(\Theta_0\delta^{-3/2}e^{-\delta/4})$ . Следовательно, исходная посылка в (15) справедлива.

Асимптотическое представление  $\delta_*(\Theta_0)$ , вытекающее из (20)

$$\delta_{*\infty} \rightarrow 4 \ln \Theta_0, \quad \Theta_0 \rightarrow \infty,$$

может быть использовано как нулевое приближение корня уравнения (20). Оно правильно отражает слабую логарифмическую зависимость параметра Франк-Каменецкого от температурного напора [7]. Следующее уточнение дает формулу

$$\delta_* = 4 \ln \{2e\Theta_0\sqrt{\ln \Theta_0}/\pi(1 + 1/2 \ln \Theta_0)\}. \quad (21)$$

Сравнение (21) с аппроксимационной формулой из [7, 8] показывает отличие в среднем порядка 15%.

Аналогично для плоскопараллельного очага получены следующие выражения:

$$\tau_B = 1 + (8\Theta_0 \tau_B^{5/2} / \pi^{1/2} \delta^{3/2}) \exp(-\delta/4\tau_B).$$
$$\delta_* = 4 \ln \{2e\Theta_0 (1 + 6/\delta_*) / \sqrt{\pi\delta_*}\}.$$

В заключение отметим, что развитая схема решения задачи может быть применена к исследованию других форм очага, с иными условиями на границе (например, с конвективным теплообменом), а также для очагов с распределенной начальной температурой, при известном положении ее максимума.

Поступила в редакцию  
29/V 1979

#### ЛИТЕРАТУРА

1. А. В. Дубовик, В. К. Бобоев. Чувствительность жидких взрывчатых систем к удару. М., Наука, 1978.
2. J. Zinn. J. Chem. Phys., 1962, 36, 7.
3. T. Boddington. 9-th Symp. on Comb. Acad. Press, New York — London, 1963.
4. M. H. Friedman. Trans. Faraday Soc., 1963, 59, 8.
5. P. H. Thomas. Comb. and Flame, 1965, 9, 4.
6. H. E. Goheen. J. Math. and Phys., 1949, 28, 2.
7. А. Г. Мержанов, В. В. Барзыкин, В. Г. Гонтковская. Докл. АН СССР, 1963, 148, 2.
8. A. G. Merzhanov. Comb. and Flame, 1966, 10, 4.
9. P. H. Thomas. Comb. and Flame, 1973, 21, 1.

## ЗАМКНУТАЯ МОДЕЛЬ ПРЯМОГО ИНИЦИИРОВАНИЯ ГАЗОВОЙ ДЕТОНАЦИИ С УЧЕТОМ НЕУСТОЙЧИВОСТИ. II. НЕТОЧЕЧНОЕ ИНИЦИИРОВАНИЕ

В. Ю. Ульяницкий  
(Новосибирск)

Разработанная в [1] модель описывает процесс инициирования при точечном и мгновенном выделении энергии и позволяет рассчитать в этом случае критическую энергию. Однако в реальных задачах невозможно полностью удовлетворить условию точечности и мгновенности энерговыделения. Как показывают эксперименты [2, 3], критическая энергия при определенных условиях существенно зависит от пространственно-временных характеристик энерговыделения.

Цель настоящей работы — выяснить влияние пространственно-временных характеристик источника на процесс инициирования и установить критерий точечности и мгновенности энерговыделения. В работе используются следующие обозначения:  $p$ ,  $\rho$ ,  $T$  — давление, плотность и температура смеси соответственно;  $E_u$  — энергия (энергия на единицу длины, энергия на единицу площади) источника инициирования при  $\nu = 3$  (2, 1);  $Q$  — химическая энергия смеси на единицу массы;  $D$ ,  $M$  — скорость и число Маха ударной волны соответственно;  $D_0$ ,  $M_0$  — скорость и число Маха детонации Чепмена — Жуге;  $\gamma$  — показатель адиабаты;  $\tau$  — период индукции;  $A$  — константа в формулах для периода индукции;  $E_a$  — энергия активации;  $R$  — газовая постоянная;  $\rho_a$  — плотность смеси при атмосферном давлении;  $\alpha$  — параметр сильного точечного взрыва;  $\nu$  — показатель размерности ( $\nu = 1, 2, 3$ );  $r$ ,  $t$  — координаты фронта ударной волны. Индексы: 0 — начальное состояние; 1 — точка