

УДК 536.46

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОТЕПЛООВОГО ВЗРЫВА В БЕЗГАЗОВЫХ СИСТЕМАХ, ПОМЕЩЕННЫХ В ЭЛЕКТРОПРОВОДНУЮ СРЕДУ

С. А. Бостанджиян, И. С. Гордополова, В. А. Щербаков

Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения РАН, 142432 Черноголовка
bosschg@gmail.com

Проведено математическое моделирование электротеплового взрыва в цилиндрических образцах, окруженных кольцевым слоем электропроводного материала. Вся система находится в цилиндрическом металлическом корпусе, электроизолированном от электропроводной среды. Теплообмен с окружающей средой протекает по закону Ньютона. Получено аналитическое решение задачи определения стационарных температурных полей при инертном нагреве в отсутствие химических источников тепла. Определены критические условия электротеплового взрыва (мощность электрического тепловыделения). В надкритическом режиме в некотором диапазоне мощности электрического тепловыделения происходит воспламенение на оси образца. При больших значениях мощности электрического тепловыделения осуществляется зажигание с поверхности образца.

Ключевые слова: электротепловой взрыв, моделирование, инертный нагрев, зажигание.

ВВЕДЕНИЕ

Для исследования макрокинетических закономерностей быстропротекающего высокотемпературного взаимодействия в гетерогенных конденсированных системах используется электротепловой взрыв (ЭТВ) [1, 2]. Экспериментальные исследования с использованием гетерогенных смесей титана, тантала, кремния с углеродом и бором показали, что успешная реализация ЭТВ возможна после термовакуумной обработки [3, 4], которая способствует уменьшению электрического сопротивления, содержания примесных газов и увеличению прочности образца. Это позволяет осуществить быстрый нагрев образца и предотвратить его разрушение в ходе эксперимента. Однако в результате термовакуумной обработки в образце накапливается значительное количество ($\approx 30\%$) конечного продукта, который заметно изменяет макрокинетические параметры взаимодействия компонентов в реакционной смеси. Данный недостаток существенно ограничивает возможности метода для получения кинетической информации на начальной стадии экзотермического взаимодействия в гетерогенных конденсированных системах.

В работе [5] предложена методика осу-

ществления ЭТВ без предварительной термобработки образцов. Уменьшение электрического сопротивления и сохранение целостности образца достигалось тем, что образец помещали в электропроводную дисперсную среду, а эксперимент проводили под давлением. С помощью данной методики экспериментально изучали параметры ЭТВ в системе Ti—C. В качестве дисперсной среды использовали порошок карбида титана. Основные характеристики дисперсной среды — высокая тугоплавкость и электропроводность. Сжатие образца в дисперсной среде под действием квазиизостатического давления позволяет уменьшить электрическое сопротивление образца, сохранить его целостность и обеспечить отвод примесного газа, выделяющегося в ходе экзотермического взаимодействия реагентов.

Для определения критических условий ЭТВ и исследования влияния основных параметров процесса (мощности электрического и химического источников тепла, электрического сопротивления реагирующей смеси и дисперсной среды и др.) на режимы воспламенения необходимо знать пространственно-временные поля температуры и глубины превращения. Экспериментальное определение указанных полей представляет большие трудности. Поэтому актуальной задачей является математическое моделирование ЭТВ с учетом основных пара-

метров, влияющих на этот процесс.

Настоящая работа посвящена математическому моделированию ЭТВ в безгазовой системе, окруженной слоем электропроводной дисперсной среды и находящейся в условиях квазистатического сжатия. Последнее позволяет влиять на параметры ЭТВ путем изменения теплофизических свойств и электропроводности гетерогенных конденсированных систем под действием приложенного давления.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В работе [5] изучали закономерности ЭТВ в образце цилиндрической формы, помещенном в электропроводную дисперсную среду, которую в дальнейшем будем называть засыпкой. Образец вместе с засыпкой помещали в цилиндрическую пресс-форму. На внутренней поверхности пресс-формы находился слой диэлектрика, который изолировал электропроводную дисперсную среду от металлического корпуса пресс-формы.

На начальной стадии процесса небольшая часть джоулева тепла идет на нагрев пуансона и корпуса пресс-формы. Строго говоря, температурные поля в образце и засыпке двумерные и осесимметричные. Наружная поверхность пресс-формы граничит с атмосферой, поэтому теплоотдача от пресс-формы слабая. Следует отметить, что в надкритическом режиме время достижения температуры воспламенения очень короткое (секунды или доли секунды), поэтому пуансон и днище реактора не оказывают заметного влияния на тепловой режим образца.

С учетом указанных выше особенностей примем следующую модель для исследования закономерностей ЭТВ в цилиндрическом образце, окруженном электропроводной средой. Будем считать, что бесконечный цилиндрический образец радиуса r_1 окружен кольцевым слоем электропроводной среды с внешним радиусом r_2 . Исходный образец и засыпка находятся в цилиндрической металлической оболочке с внешним радиусом r_3 (рис. 1). Между образцом, средой и оболочкой существует тесный контакт. Наличие тонкого слоя диэлектрика в модели не учитывается, так как он не оказывает заметного влияния на температурные поля всей системы.

Будем считать, что в гетерогенной конденсированной системе протекает реакция первого

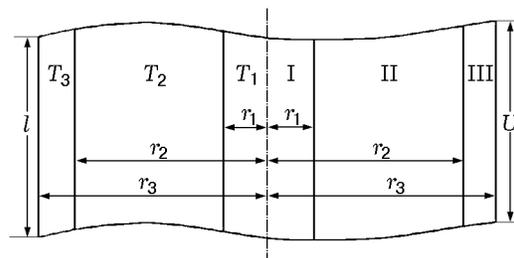


Рис. 1. Схематическое изображение реактора: I — образец ($0 < r < r_1$), II — электропроводная среда ($r_1 < r < r_2$), III — стенка корпуса реактора ($r_2 < r < r_3$)

порядка. Процесс описывается системой уравнений, в которую входят уравнение химической кинетики и три уравнения энергии для образца, засыпки и оболочки:

$$\begin{aligned}
 c_1 \rho_1 \left(\frac{\partial T_1}{\partial t} \right) &= \lambda_1 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_1}{\partial r} \right) + q_1 + \\
 &+ Q k_0 (1 - \eta) \exp \left(- \frac{E}{RT} \right), \quad 0 \leq r \leq r_1, \\
 c_2 \rho_2 \left(\frac{\partial T_2}{\partial t} \right) &= \lambda_2 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_2}{\partial r} \right) + q_2, \quad (1) \\
 & \quad \quad \quad r_1 \leq r \leq r_2, \\
 c_3 \rho_3 \left(\frac{\partial T_3}{\partial t} \right) &= \lambda_3 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_3}{\partial r} \right), \quad r_2 \leq r \leq r_3, \\
 \frac{d\eta}{dt} &= k_0 (1 - \eta) \exp \left(- \frac{E}{RT} \right),
 \end{aligned}$$

где T_i , c_i , ρ_i , λ_i ($i = 1, 2, 3$) — температура, теплоемкость, плотность, коэффициент теплопроводности, $i = 1$ — образец, $i = 2$ — засыпка, $i = 3$ — внешняя оболочка; r — радиальная координата; t — время; η — глубина превращения; Q — тепловой эффект реакции; k_0 — предэкспонент; E — энергия активации; R — универсальная газовая постоянная; q_1 , q_2 — объемные мощности джоулева тепловыделения соответственно в образце и в засыпке.

Начальные условия для системы (1):

$$t = 0: \quad \eta = 0, \quad T_1 = T_2 = T_3 = T_0, \quad (2)$$

граничные условия:

$$r = 0: \quad \frac{\partial T_1}{\partial r} = 0,$$

$$\begin{aligned}
r = r_1: \quad T_1 = T_2, \quad \lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial r} &= \lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial r}, \\
r = r_2: \quad T_2 = T_3, \quad \lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial r} &= \lambda_3 \frac{\partial T_3}{\partial r}, \\
r = r_3: \quad \lambda_3 \frac{\partial T_3}{\partial r} &= -\alpha(T_3 - T_0),
\end{aligned} \tag{3}$$

где α — коэффициент теплоотдачи от внешней оболочки в атмосферу, T_0 — начальная температура.

Прежде чем привести систему уравнений (1) с начальными (2) и граничными условиями (3) к безразмерному виду, получим выражения для объемной мощности джоулева тепловыделения q_1 и q_2 через электрические и геометрические параметры.

Если электрическое напряжение U приложено на участке образца и засыпки длиной l , то выделяемое в них тепло будет обратно пропорционально их электрическому сопротивлению:

$$q_1^0 = \frac{U^2}{R_1}, \quad q_2^0 = \frac{U^2}{R_2}, \tag{4}$$

где R_1, R_2 — электрические сопротивления образца и засыпки, которые можно выразить через их удельные электрические сопротивления φ_1, φ_2 и площади поперечного сечения S_1, S_2 :

$$R_1 = \varphi_1 \frac{l}{S_1}, \quad R_2 = \varphi_2 \frac{l}{S_2}.$$

Умножив числители и знаменатели на l и подставив выражения для R_1 и R_2 в (4), получаем

$$q_1^0 = \frac{U^2 V_1}{\varphi_1 l^2}, \quad q_2^0 = \frac{U^2 V_2}{\varphi_2 l^2},$$

где V_1, V_2 — объемы образца и кольцевого слоя длиной l . Разделив эти выражения на V_1 и V_2 , находим количество джоулева тепла, выделяющегося в единице объема в единицу времени, т. е. мощность электрического тепловыделения в соответствующих областях:

$$q_1 = \frac{U^2}{\varphi_1 l^2}, \quad q_2 = \frac{U^2}{\varphi_2 l^2}. \tag{5}$$

Из (5) видно, что объемная мощность джоулева тепловыделения обратно пропорциональна удельному электрическому сопротивлению. Между q_1 и q_2 существует простая связь:

$$q_2 = \Phi q_1, \quad \Phi = \varphi_1 / \varphi_2. \tag{6}$$

Представим систему уравнений (1), начальные и граничные условия (2), (3) в безразмерной форме

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \theta_1}{\partial \tau} &= \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial \theta_1}{\partial \xi} \right) + \\
&+ \delta^* (1 - \eta) \exp \left(\frac{\theta_1}{1 + \beta \theta_1} \right) + Q_1, \quad 0 \leq \xi \leq 1, \tag{7}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \theta_2}{\partial \tau} &= \beta_{21} \psi_{12} \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial \theta_2}{\partial \xi} \right) + \psi_{12} \Phi Q_1, \\
1 &\leq \xi \leq d_2, \tag{8}
\end{aligned}$$

$$\frac{\partial \theta_3}{\partial \tau} = \beta_{31} \psi_{13} \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial \theta_3}{\partial \xi} \right), \quad d_2 \leq \xi \leq d_3, \tag{9}$$

$$\frac{d\eta}{d\tau} = \delta^* \gamma (1 - \eta) \exp \left(\frac{\theta_1}{1 + \beta \theta_1} \right),$$

начальные условия:

$$\tau = 0: \quad \theta_1 = \theta_2 = \theta_3 = \theta_0, \quad \eta = 0, \tag{10}$$

граничные условия:

$$\begin{aligned}
\xi = 0: \quad \frac{\partial \theta_1}{\partial \xi} &= 0, \\
\xi = 1: \quad \frac{\partial \theta_1}{\partial \xi} &= \beta_{21} \frac{\partial \theta_2}{\partial \xi}, \quad \theta_1 = \theta_2, \\
\xi = d_2: \quad \frac{\partial \theta_2}{\partial \xi} &= \beta_{32} \frac{\partial \theta_3}{\partial \xi}, \quad \theta_2 = \theta_3, \\
\xi = d_3: \quad \frac{\partial \theta_3}{\partial \xi} &= -\frac{\text{Bi}}{d_3} (\theta_3 - \theta_0).
\end{aligned} \tag{11}$$

Безразмерные переменные и параметры определены следующим образом:

$$\theta_i = E \frac{T_i - T_*}{RT_*^2} \quad (i = 1, 2, 3), \quad \xi = \frac{r}{r_1}, \quad \tau = \frac{a_1}{r_1^2} t,$$

$$\delta^* = \frac{Q k_0 E r_1^2}{\lambda_1 RT_*^2} \exp \left(-\frac{E}{RT_*} \right), \quad \beta = \frac{RT_*}{E},$$

$$\gamma = \frac{c_1 \rho_1 RT_*^2}{QE}, \quad \theta_0 = \frac{E}{RT_*^2} (T_0 - T_*),$$

$$Q_1 = \frac{U^2 r_1^2 E}{\varphi_1 l^2 \lambda_1 RT_*^2}, \quad \text{Bi} = \frac{\alpha r_3}{\lambda_3},$$

$$d_2 = r_2 / r_1, \quad d_3 = r_3 / r_1, \quad \beta_{21} = \lambda_2 / \lambda_1,$$

$$\beta_{31} = \lambda_3/\lambda_1, \quad \beta_{32} = \lambda_3/\lambda_2, \quad \psi_{12} = c_1\rho_1/c_2\rho_2,$$

$$\psi_{13} = c_1\rho_1/c_3\rho_3, \quad a_i = \lambda_i/c_i\rho_i \quad (i = 1, 2, 3).$$

Здесь a_i — коэффициент температуропроводности в области i , множители при производных в уравнениях (8) и (9) представляют собой отношение коэффициентов температуропроводностей: $\beta_{21}\psi_{12} = a_2/a_1$, $\beta_{31}\psi_{13} = a_3/a_1$, при этом $\beta_{31} = \beta_{32}\beta_{21}$, где ψ_{12} и ψ_{13} — отношение тепловых инерционностей соответствующих сред.

Безразмерные параметры δ^* , β , γ известны из теории теплового взрыва, поэтому в них фигурируют только теплофизические, кинетические и геометрические характеристики, относящиеся к образцу из смеси реагентов. Параметр Франк-Каменецкого δ^* характеризует мощность химического источника тепла исходной смеси при масштабной температуре T_* ($\theta_1 = 0$). О выборе температуры T_* будет сказано ниже. Специфика данной задачи отражена в параметре Q_1 , представляющем собой мощность электрического тепловыделения в единице объема образца.

Из уравнения (7) видно, что с уменьшением θ_1 от нуля до θ_0 химический источник тепла в силу экспоненциальной зависимости от θ_1 быстро убывает. Если положить $\eta = 1$, то полученная система будет описывать инертный нагрев всей системы. При инертном нагреве со временем установится стационарный профиль температуры с максимумом на оси образца. При фиксированном Q_1 максимальная температура зависит от параметра Bi : чем меньше его значение, тем больше максимальная температура.

Задача об электротепловом взрыве по своей природе близка к задаче о тепловом взрыве в динамических условиях при линейном нагреве [6]. При линейном нагреве тепло на стадии прогрева поступает в систему из окружающей среды, температура которой растет линейно во времени. Нагрев начинается от низких температур, когда реакция практически отсутствует, и смесь нагревается как инертное тело до температур, при которых химическая реакция идет с заметной, все возрастающей скоростью вследствие дальнейшего роста температуры за счет поступления тепла из окружающей среды.

При ЭТВ в рассматриваемом варианте на начальной стадии также происходит инертный

нагрев в результате выделения джоулева тепла в образце и засыпке. В данной задаче инертный нагрев образца протекает более сложным путем из-за наличия засыпки и металлической оболочки.

Между задачей об ЭТВ и задачей о тепловом взрыве при линейном нагреве много общего, но есть и существенное различие. При линейном нагреве в отсутствие химического источника тепла температура растет неограниченно, поэтому при любой скорости нагрева и реакции нулевого порядка происходит тепловой взрыв, но при учете выгорания из-за кинетического торможения реакции существует критическая скорость нагрева, разграничивающая невзрывной и взрывной режимы процесса. В задаче об ЭТВ в тех же условиях со временем наступает равновесие между теплопритоком от электрического источника тепла и теплоотводом в окружающую среду, устанавливается стационарный профиль температур. Если максимальная температура ниже критической в статических условиях, то даже при реакции нулевого порядка теплового взрыва не будет.

Как было сказано выше, при непрерывном росте температуры нет характерной температуры, которая могла бы служить масштабом T_* для обезразмеривания температуры. Начальная температура T_0 не может быть масштабом, так как при T_0 реакция практически не идет. Масштабная температура должна быть такой, чтобы реакция протекала достаточно интенсивно. В качестве масштабной может выступать критическая температура теплового взрыва исходной смеси в статических условиях при граничных условиях первого рода, когда во всем объеме и на поверхности образца задана постоянная температура T_* . Температура T_* вместе с начальной T_0 определяют параметр θ_0 .

При известном значении θ_0 можно определить температуру на поверхности образца, поскольку система уравнений (7)–(9) при отсутствии химического источника тепла позволяет получить аналитическое решение для определения стационарных температурных профилей.

ИНЕРТНЫЙ НАГРЕВ

Приравняв к нулю производные по времени в левых частях уравнений (7)–(9) и положив $\eta = 1$, получаем систему обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial \theta_1}{\partial \xi} \right) + Q_1 &= 0, \quad 0 \leq \xi \leq 1, \\ \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial \theta_2}{\partial \xi} \right) + \frac{\Phi Q_1}{\beta_{21}} &= 0, \quad 1 \leq \xi \leq d_2, \quad (12) \\ \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial \theta_3}{\partial \xi} \right) &= 0, \quad d_2 \leq \xi \leq d_3. \end{aligned}$$

Решение системы (12) должно удовлетворять граничным условиям (11). Из системы уравнений (12) видно, что профили температуры не зависят от отношения тепловых инерционностей, а зависят только от отношения коэффициентов теплопроводностей в соседних областях. Первые влияют только на профили температуры в процессе их установления, а через них — на скорость протекания химической реакции и в конечном счете на критические условия теплового взрыва и поля температуры и глубины превращения в подкритическом и надкритическом режимах.

Решение системы уравнений (12) после удовлетворения первому граничному условию на оси цилиндра принимает вид:

$$\begin{aligned} \theta_1(\xi) &= b_2 - \frac{Q_1 \xi^2}{4}, \\ \theta_2(\xi) &= b_3 \ln \xi - \frac{\Phi Q_1 \xi^2}{4\beta_{21}} + b_4, \quad (13) \\ \theta_3(\xi) &= b_5 \ln \xi + b_6, \end{aligned}$$

где b_2, b_3, b_4, b_5, b_6 — постоянные интегрирования. Удовлетворив решение (13) системы (12) граничным условиям (11), для постоянных интегрирования получаем выражения:

$$\begin{aligned} b_2 &= \theta_0 + \frac{Q_1}{4\beta_{21}} \left[\frac{2}{\beta_{32}} (\Phi - \Phi d_2^2 - 1) \left(\ln \frac{d_2}{d_3} - \frac{1}{\text{Bi}} \right) - \right. \\ &\quad \left. - 2(\Phi - 1) \ln d_2 + \Phi d_2^2 - \Phi + \beta_{21} \right], \\ b_3 &= \frac{Q_1}{2\beta_{21}} (\Phi - 1), \quad (14) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} b_4 &= \theta_0 + \frac{Q_1}{4\beta_{21}} \left[\frac{2}{\beta_{32}} (\Phi - \Phi d_2^2 - 1) \left(\ln \frac{d_2}{d_3} - \frac{1}{\text{Bi}} \right) - \right. \\ &\quad \left. - 2(\Phi - 1) \ln d_2 + \Phi d_2^2 \right], \end{aligned}$$

$$b_5 = \frac{Q_1}{2\beta_{32}\beta_{21}} (\Phi - \Phi d_2^2 - 1),$$

$$b_6 = \theta_0 - \frac{Q_1}{2\beta_{32}\beta_{21}} (\Phi - \Phi d_2^2 - 1) \left(\ln d_3 + \frac{1}{\text{Bi}} \right).$$

В установившемся режиме инертного нагрева максимальная температура при любых значениях параметров всегда находится на оси цилиндра. Из (13) видно, что максимальная температура равна постоянной интегрирования b_2 : $\theta_m = b_2$. Профиль температуры в образце параболический. Температура на поверхности образца

$$\theta_1(1) = b_2 - Q_1/4. \quad (15)$$

Выразив в (15) b_2 согласно (14), запишем формулу для температуры на поверхности образца, выраженную через параметры задачи:

$$\theta_1(1) = A Q_1 + \theta_0, \quad (16)$$

где

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{4\beta_{21}} \left[\frac{2}{\beta_{32}} (\Phi - \Phi d_2^2 - 1) \left(\ln \frac{d_2}{d_3} - \frac{1}{\text{Bi}} \right) - \right. \\ &\quad \left. - 2(\Phi - 1) \ln d_2 + \Phi d_2^2 - \Phi \right]. \end{aligned}$$

Приравняв к нулю левую часть формулы (16), получим значение $Q_1^0 = -\theta_0/A$, при котором в стационарном профиле безразмерная температура на поверхности образца равна нулю: $\theta_* = 0$. Рассматривая задачу о тепловом взрыве бесконечного цилиндра, на поверхности которого поддерживается температура T_* ($\theta_* = 0$) при действии только химического источника тепла, находим критическую температуру из выражения для критического значения параметра Франк-Каменецкого δ^* . Из стационарной теории теплового взрыва известно, что $\delta^* = 2$ для реакции нулевого порядка [7] и

$$\delta^* = 2(1 + \beta)(1 + 2.4\gamma^{2/3}) \quad (17)$$

для реакции первого порядка с поправками на малые параметры β и γ [6, 8] при учете выгорания. Масштабную температуру T_* можно получить из решения трансцендентного уравнения

$$\frac{Qk_0 E r_1^2}{\lambda_1 R T_*^2} \exp\left(-\frac{E}{R T_*}\right) =$$

$$= 2(1 + \beta)(1 + 2.4\gamma^{2/3}). \quad (18)$$

В данной задаче δ^* не является параметром, поскольку при конкретной геометрии и известных кинетических параметрах его числовое значение можно рассчитать. Основным параметром при ЭТВ выступает безразмерная величина Q_1 , зависящая от мощности электрического тепловыделения. Это динамический аналог критерия Франк-Каменецкого. Динамическим аналогом критической температуры в статических условиях при ЭТВ является критическая мощность электрического тепловыделения Q_1^* . Основная задача при ЭТВ заключается в определении Q_1^* и выявлении различных режимов воспламенения при $Q_1 > Q_1^*$ в зависимости от параметров задачи.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Расчеты проводились при фиксированных значениях $d_2 = 3$, $d_3 = 4$, $\beta_{21} = 2$, $\beta_{31} = 10$, $\beta = 0.03$, $\gamma = 0.03$, $\Phi = 2$, $\psi_{12} = \psi_{13} = 1$ и варьировании параметров Q_1 и Bi . Значение δ^* рассчитывали по формуле (15): $\delta^* = 2.537$.

На рис. 2 изображены стационарные профили температуры при фиксированном значении Q_1 и различных значениях Bi . Установившиеся температуры, полученные путем численного интегрирования нестационарной системы уравнений (7)–(9) при тех же значениях параметров, совпадают с профилями на рис. 2.

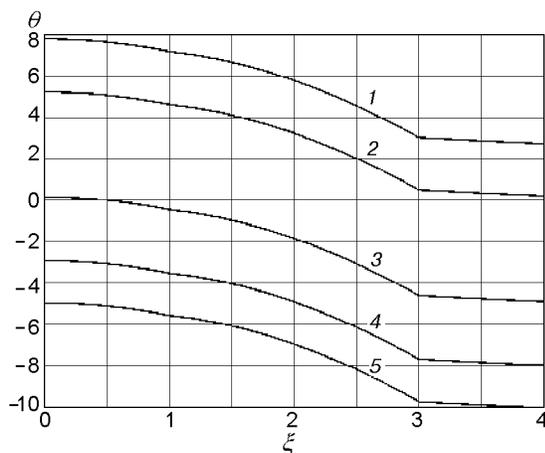


Рис. 2. Стационарные профили температуры в случае инертного нагрева при $Q_1 = 2.4$ и различных значениях Bi :

Bi : 1 — 0.08, 2 — 0.1, 3 — 0.2, 4 — 0.5, 5 — 1000

При анализе кривых, соответствующих различным значениям Bi , бросается в глаза тот факт, что все они получаются параллельным сдвигом вдоль оси ординат кривой 5 ($Bi = 1000$), которая практически соответствует заданию на поверхности пресс-формы граничного условия первого рода. Кривая 5 получается, если в выражениях (13) для постоянных интегрирования приравнять к нулю слагаемые, содержащие Bi в знаменателе. Обозначив полученный таким образом температурный профиль через $\bar{\theta}(\xi)$, профиль для произвольного значения Bi можно рассчитать по формуле

$$\theta(\xi) = \bar{\theta}(\xi) + \Delta\theta, \quad \Delta\theta = \frac{Q_1(\Phi d_2^2 + 1 - \Phi)}{2\beta_{32}\beta_{21}Bi}, \quad (19)$$

причем приращение $\Delta\theta$ зависит от параметров задачи и одинаково для трех рассматриваемых областей. Решение при граничном условии первого рода не имеет прямого отношения к рассматриваемой задаче, но профиль температуры при $Bi \rightarrow \infty$ играет важную роль для расчета профилей при любых значениях Bi .

Если $\Phi < 1$, то мощность электрического тепловыделения в образце больше, чем в засыпке, поэтому в процессе инертного нагрева температура монотонно убывает от оси образца до внешней поверхности реактора, воспламенение всегда происходит на оси образца.

Если $\Phi > 1$, что соответствует реальным условиям эксперимента, то мощность электрического тепловыделения в засыпке больше, чем в образце, в результате чего в ходе инертного нагрева температура на оси отстает от температуры на поверхности образца, как и в задаче о тепловом взрыве при линейном нагреве. Поэтому физическая картина развития ЭТВ при $\Phi > 1$ аналогична физической картине развития теплового взрыва при линейном нагреве, которая подробно описана в работе [6]. Аналогия между двумя задачами наиболее четко проявляется в закритических режимах, а различие — в докритических. Последнее связано с тем, что при линейном нагреве температура растет неограниченно, в подкритическом режиме реакция развивается спокойно, до полного превращения реагентов в конечный продукт, а в задаче об ЭТВ реакция вообще может не начаться, если максимальная температура стационарного профиля отрицательная и далека от нуля.

Из (13) и (14) видно, что максимальная температура, равная постоянной интегрирова-

ния b_2 , линейно повышается с ростом Q_1 . С увеличением Q_1 максимум температуры растет, при приближении его к нулю подключается химический источник тепла и появляется разогрев относительно температур при инертном нагреве. Пространственно-временное развитие этого разогрева зависит от величины Q_1 . При малых значениях Q_1 разогрев небольшой, так как тепловое ускорение реакции компенсируется ее кинетическим торможением, обусловленным выгоранием. Кинетическое торможение реакции препятствует развитию теплового взрыва, реакция протекает спокойно до полного превращения смеси в конечный продукт при температуре, близкой к стационарной температуре инертного нагрева. С увеличением Q_1 достигается некоторое критическое значение Q_1^* , начиная с которого кинетический фактор неспособен остановить развитие теплового взрыва.

Переход от спокойного протекания реакции к тепловому взрыву можно проследить по зависимостям температуры и глубины превращения на оси образца от времени при изменении мощности электрического тепловыделения Q_1 . Из рис. 3 видно, что на начальной стадии нагрев чисто инертный. При приближении безразмерной температуры к нулю подключается химический источник тепла, глубина превращения начинает расти, причем тем быстрее, чем больше Q_1 . В подкритическом режиме (кривая 4) мощность химического источника

тепла невелика, реакция протекает медленно, выделяющееся от нее тепло уходит в засыпку, не приводя к заметному разогреву по сравнению с температурами при инертном нагреве. Полное превращение происходит при больших временах при температуре, близкой к температуре стационарного инертного нагрева. Кривая 4 мало отличается от соответствующей кривой при инертном нагреве. С ростом Q_1 на зависимости появляется максимум (кривая 3), связанный с разогревом относительно температур инертного нагрева. Наличие максимума обусловлено влиянием на мощность химического источника тепла двух конкурирующих факторов: ускорения реакции с ростом температуры и замедления ее с увеличением глубины превращения. Чем больше Q_1 , тем раньше подключается химический источник тепла, тем выше пик температуры на оси образца, который соответствует полному превращению реагентов в конечный продукт (кривые 1 и 2). Таким образом, нет четкой границы между спокойным протеканием реакции и тепловым взрывом, переход от одного режима к другому осуществляется в узкой области значений Q_1 .

Так как при $\Phi > 1$ в ходе инертного нагрева температура на поверхности образца больше, чем на оси, то при значениях Q_1 , близких к Q_1^* , близлежащие к поверхности образца слои реагируют на большую глубину, чем удаленные от поверхности слои. Поскольку химический источник тепла значительно сильнее электрического, максимум температуры переходит из засыпки в образец, при этом направление потока тепла через поверхность образца меняется на противоположное: от образца к засыпке. Но с увеличением глубины превращения скорость реакции уменьшается и максимум температуры перемещается в сторону оси образца. При небольшом удалении Q_1 от Q_1^* максимум температуры достигает оси, в окрестности которой глубина превращения меньше, чем вдали от нее. Создается благоприятная ситуация для воспламенения образца с оси. При больших значениях Q_1 воспламенение осуществляется раньше, чем максимум температуры достигает оси. Чем больше Q_1 , тем дальше от оси воспламенение. При $Q_1 \gg Q_1^*$ воспламенение происходит вблизи поверхности образца, другими словами, наблюдается переход от воспламенения к зажиганию образца.

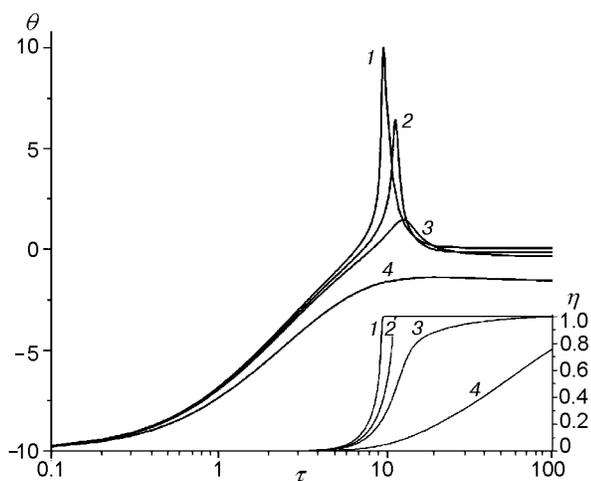


Рис. 3. Зависимости температуры и глубины превращения на оси образца от времени при различных значениях Q_1 :

Q_1 : 1 — 2.4, 2 — 2.35, 3 — 2.3, 4 — 2.0

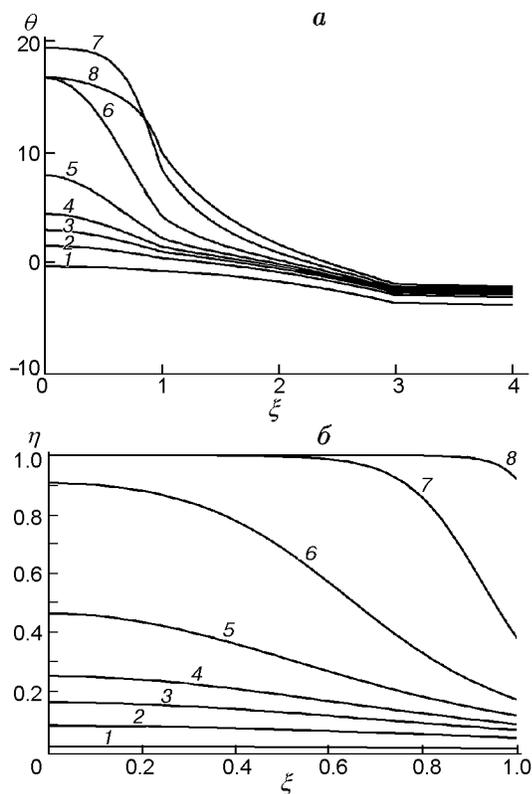


Рис. 4. Профили температуры (а) и глубины превращения (б) в различные моменты времени при $Q_1 = 2.4$, $Bi = 0.05$:

τ : 1 — 4.0, 2 — 4.6, 3 — 4.8, 4 — 4.9, 5 — 5.0, 6 — 5.1, 7 — 5.2, 8 — 5.3

Рис. 4, 5 иллюстрируют два различных режима воспламенения. При $Q_1 = 2.4$ на стадии чисто инертного нагрева и в начале действия химического источника тепла максимум температуры находится внутри засыпки, далее он переходит через поверхность образца и движется к его оси, доходит до нее, где и происходит воспламенение. После воспламенения образуются фронт превращения, который движется к поверхности образца до полного завершения реакции. При $Q_1 = 15$ воспламенение происходит внутри образца до того, как максимум температуры достигнет оси образца. На стадии воспламенения зависимости глубины превращения от координаты имеют максимум. В определенный момент времени кривые в максимуме касаются прямой $\eta = 1$. Абсциссу ξ_0 точки касания условно можно считать точкой воспламенения. Образуются два фронта превращения, движущиеся в обе стороны от точки $\eta(\xi_0) = 1$ до полного превращения реагентов во всем объеме образца.

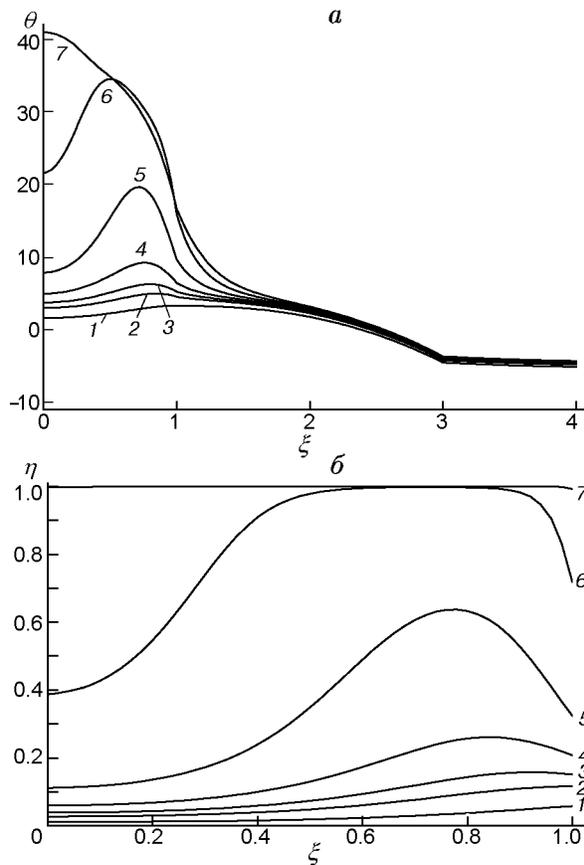


Рис. 5. Профили температуры (а) и глубины превращения (б) в различные моменты времени при $Q_1 = 15$, $Bi = 0.05$:

τ : 1 — 0.55, 2 — 0.58, 3 — 0.59, 4 — 0.60, 5 — 0.61, 6 — 0.62, 7 — 0.64

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

- Предложена математическая модель электротеплового взрыва цилиндрических образцов, помещенных в электропроводную пористую дисперсную среду, граничащую с металлическим корпусом, с поверхности которого осуществляется теплоотвод в окружающую среду по закону Ньютона. Электрический нагрев всей системы начинается при температуре, при которой реакция практически не протекает.

- На начальной стадии процесса идет чисто инертный нагрев до достижения температур, при которых химическое тепловыделение оказывает заметное влияние на температуру. При чисто инертном нагреве устанавливается стационарный профиль температуры. Анализ полученного аналитического решения стационарной системы уравнений показал, что макси-

мальная температура находится на оси образца и линейно зависит от мощности Q_1 электрического тепловыделения.

• Переход от режима спокойного протекания реакции к тепловому взрыву происходит в некоторой узкой области значений Q_1 .

• Если удельное сопротивление образца больше удельного сопротивления засыпки, то в надкритической области до некоторого значения Q_1 воспламенение начинается на оси образца, при больших значениях — внутри образца, причем чем больше Q_1 , тем ближе точка воспламенения к поверхности образца, т. е. с ростом Q_1 наблюдается переход от воспламенения к зажиганию.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Князик В. А., Мержанов А. Г., Соломонов В. Б., Штейнберг А. С.** Макрокинетика высокотемпературного взаимодействия титана с углеродом в условиях электротеплового взрыва // Физика горения и взрыва. — 1985. — Т. 2, № 3. — С. 69–73.
2. **Князик В. А., Штейнберг А. С.** Закономерности теплового взрыва в системе с дополнительным (нехимическим) источником тепловыделения // Докл. АН. — 1993. — Т. 328, № 5. — С. 580–584.
3. **Knyazik V. A., Shteinberg A. S., Gorovenko V. I.** Thermal analysis of high-speed high-temperature reactions of refractory carbide synthesis // J. Therm. Anal. — 1993. — V. 40. — P. 363–371.
4. **Князик В. А., Мержанов А. Г., Штейнберг А. С.** О механизме горения системы титан-углерод // Докл. АН. — 1988. — Т. 301, № 4. — С. 899–902.
5. **Щербаков В. А., Грядунов А. Н., Телеса В. Т., Щербаков А. В.** Влияние квазигидростатического давления на закономерности электротеплового взрыва в системе Ti—C // Высокие технологии, образование, промышленность: сб. ст. / под ред. А. П. Кудинова. — СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2011. — Т. 2. — С. 186–193.
6. **Барзыкин В. В.** Тепловые режимы экзотермических реакций. — Черногоровка: Изд-во ИСМАН, 2004.
7. **Франк-Каменецкий Д. А.** Диффузия и теплопередача в химической кинетике. — М.: Наука, 1987.
8. **Барзыкин В. В., Гонтковская В. Т., Мержанов А. Г., Худяев С. М.** К нестационарной теории теплового взрыва // ПМТФ. — 1963. — № 3. — С. 118–125.

Поступила в редакцию 9/IX 2012 г.