12. **Дудоров В. В., Мартыничева Т. Г.** ЖФХ, 1975, 49, 5.
13. **Щетинков Е. С.** Физика горения газов.— М.: Наука, 1965.
14. **Семенов Н. Н.** О некоторых проблемах химической кинетики и реакционной способности.— М.: Изд-во АН СССР, 1958.
15. **Абрамович Г. Н., Крашенинников С. Ю., Секундов И. П. и др.** Турбулентное смешение газовых струй.— М.: Наука, 1974.
16. **Бабкин В. С., Вьюн А. В.** Горение и взрыв.— М.: Наука, 1972.

п. Черноголовка *Поступила в редакцию 7/VII 1988, после доработки — 18/V 1989*

УДК 541.125

В. Д. Филиппов

К ТЕОРИИ ТЕПЛОВОГО ВЗРЫВА В НЕГЕРМЕТИЧНЫХ СОСУДАХ

При решении задач о тепловом взрыве широко используется идея Н. Н. Семенова о том, что тепловой взрыв наступает при критических параметрах задачи, при которых стационарные решения перестают существовать. Математически критические значения параметров стационарной нелинейной задачи представляют собой предельные точки ветвления, в которых низкотемпературное устойчивое решение сливается с высокотемпературным неустойчивым. Теория Семенова о тепловом взрыве в закрытом сосуде [1] оперирует алгебраическим нелинейным уравнением, предполагающим, что теплоотвод к стенкам сосуда осуществляется по закону Ньютона. В данной работе наряду с теплоотводом в стенки учтены гидродинамические утечки тепла из-за негерметичности сосуда.

Пусть в неограниченной реакционноспособной среде находится негерметичный сосуд с плоскими горизонтальными основанием, крышкой и вертикальными боковыми стенками. В последних имеются проемы произвольной геометрии. Предполагается, что реакционноспособная среда находится при температуре ниже температуры самовоспламенения, так что все тепло, выделившееся в результате реакции, уходит на бесконечность. Сосуд играет роль аккумулятора тепла, теплообмен которого с окружающей средой может осуществляться либо посредством перетеканий, либо с помощью кондуктивного механизма через стенки сосуда.

Координату z будем отсчитывать от крышки сосуда вертикально вниз. Конфигурацию неплотностей можно характеризовать функцией $F(z)$, представляющей собой суммарную длину просветов по периметру сосуда на высоте, характеризующейся координатой z. Ясно, что с помощью функции $F(z)$ можно смоделировать негерметичность любой геометрии. Температуру T и плотность ρ смеси внутри сосуда считаем однородными по его объему. Тогда разность Δp между давлением внутри сосуда и снаружи определяется выражением

$$\Delta p(z) = \rho RT - \rho_0 RT_0 + (\rho - \rho_0) gz, \tag{1}$$

где T_0 и ρ_0 — соответственно температура и плотность внешней среды; R — газовая постоянная для данной смеси.

Координата нейтральной плоскости z^*, определяющая нулевой перепад давлений, дается, как это следует из (1), следующим выражением:

$$z^* = -\frac{R}{g}\frac{\rho T - \rho_0 T_0}{\rho - \rho_0}. \tag{2}$$

С учетом (2) соотношение (1) перепишется в виде

$$\Delta p(z) = (\rho - \rho_0) g (z - z^*). \tag{3}$$

Поскольку в сосуде смесь разогревается ($\rho < \rho_0$), то через неплотности, расположенные ниже нейтральной плоскости ($z > z^*$, $\Delta p(z) < 0$), в сосуд втекает свежая смесь, в то время как разогретая в результате химической реакции смесь вытекает наружу через верхние неплотности ($z < z^*$, $\Delta p(z) > 0$).

Запишем уравнения баланса массы и тепла в сосуде

$$
\begin{gathered}
V\frac{d\rho}{dt} = \eta\rho_0\int\limits_{z^*}^{H} v(z)F(z)\,dz - \eta\rho\int\limits_{0}^{z^*} v(z)F(z)\,dz,\\
\frac{d}{dt}(Vc_V\rho T) = c_pT_0\eta\rho_0\int\limits_{z^*}^{H} v(z)F(z)\,dz - c_pT\eta\rho\int\limits_{0}^{z^*} v(z)F(z)\,dz + Q,
\end{gathered} \tag{4}
$$

где c_p и c_V — удельные теплоемкости; V — объем сосуда; H — его высота; η — коэффициент расхода; $v(z)$ — модуль скорости течения в проемах; Q — количество тепла, идущее на нагрев смеси в сосуде в единицу времени. Величина Q представляет собой разность тепловыделения, обусловленного химической реакцией, и кондуктивных потерь через стенки сосуда. Модуль скорости течения в неплотностях определяем по формуле [2]

$$
v(z) = \sqrt{\frac{2\,|\Delta p(z)|}{\rho_{\text{эфф}}(z)}}, \tag{5}
$$

$$
\rho_{\text{эфф}}(z) = \begin{cases}\rho, & z \leqslant z^* \quad (\Delta p \geqslant 0),\\ \rho_0, & z > z^* \quad (\Delta p < 0).\end{cases}
$$

Исключая из (4) посредством (2) величину ρ как функцию T и z^* и проводя обезразмеривание, с учетом (3) и (5) придем к следующей системе уравнений относительно T и z^*:

$$
\begin{aligned}
\frac{dT}{dt} = \frac{T+\varepsilon z^*}{1+\varepsilon z^*}\Bigg\{\sqrt{\frac{T-1}{T+\varepsilon z^*}}\Bigg[K_2(z^*)(\varkappa - T) -\\
-K_1(z^*)\sqrt{\frac{1+\varepsilon z^*}{T+\varepsilon z^*}}\,T(\varkappa-1)\Bigg] + \varkappa Q\Bigg\},
\end{aligned} \tag{6.1}
$$

$$
\begin{aligned}
\varepsilon\frac{dz^*}{dt} = \frac{T+\varepsilon z^*}{T-1}\Bigg\{\sqrt{\frac{T-1}{T+\varepsilon z^*}}\Bigg[K_2(z^*)(\varepsilon z^* + \varkappa) -\\
- K_1(z^*)\sqrt{\frac{1+\varepsilon z^*}{T+\varepsilon z^*}}(\varepsilon z^* + \varkappa T)\Bigg] + \varkappa Q\Bigg\},
\end{aligned} \tag{6.2}
$$

$$
\varkappa = \frac{c_p}{c_V},\quad \varepsilon = \frac{gH}{RT_0},\quad K_1(z^*) = \int\limits_a^{z^*}\sqrt{z^*-z}\,F(z)\,dz,\quad K_2(z^*) = \int\limits_{z^*}^{b}\sqrt{z-z^*}\,F(z)\,dz.
$$

Температура обезразмерена по T_0, в качестве масштаба для линейных размеров взята высота помещения, а скорость тепловыделения отнесена к величине $\eta c_pT_0\rho_0H^2\sqrt{2gH}$. Масштаб времени $t^* = V/\eta H^3\cdot\sqrt{H/2g}$. Постоянные a и b обозначают соответственно нижнюю и верхнюю границу носителя функции $F(z)$, определенной на отрезке [0, 1]. В отличие от общепринятого определения под носителем $F(z)$ здесь понимается отрезок минимальной длины на оси z, вне которого $F(z) = 0$ (при этом допускается возможность $F(z)$ принимать нулевые значения и на некоторых интервалах внутри носителя).

Параметр ε с точностью до коэффициента равен квадрату числа Маха для течения в неплотностях, обусловленного гидростатикой ($\sqrt{gH}$ — характерное значение скорости). Поэтому можно воспользоваться приближением $\varepsilon \ll 1$. В этом приближении уравнение (6.2) сингулярно возмущено. В пограничном слое ($t \leqslant \varepsilon$) существенные изменения претерпевает лишь координата нейтральной плоскости, в то время как температура меняется на величину порядка ε. Этим изменением можно пренебречь и пользоваться уравнениями

$$\frac{dT}{dt} = -(T-1)^{3/2}T^{1/2}K_2(z^*) + TQ, \tag{7.1}$$

$$\frac{Q}{\sqrt{T-1}} = K_1(z^*) - \frac{K_2(z^*)}{\sqrt{T}}, \tag{7.2}$$

которые получаются из (6) предельным переходом $\varepsilon \to 0$.

Стационарные значения температуры и координаты нейтральной плоскости удовлетворяют следующей системе уравнений:

$$K_2(z^*) = \frac{Q\sqrt{T}}{(T-1)^{3/2}}, \quad K_1(z^*) = \sqrt{T}K_2(z^*). \tag{8}$$

Для начала пренебрежем кондуктивными потерями тепла через стенки сосуда и представим $Q = \xi e^{-\alpha/T}$ $(\alpha = E/R_0T_0)$. Преобразуя эту зависимость по Франк-Каменецкому [3] и вводя новую безразмерную температуру $\Theta = \frac{E}{R_0T_0}(T-1)$, (8) перепишем так:

$$K_2(z^*) = \Psi e^{\Theta}\Theta^{-3/2}\left[1 + \frac{\Theta}{\alpha}\left(\frac{1}{2} - \Theta\right)\right] + 0\left(\frac{1}{\alpha^2}\right), \tag{9.1}$$

$$K_1(z^*) = \left(1 + \frac{1}{2}\frac{\Theta}{\alpha}\right)K_2(z^*) + 0\left(\frac{1}{\alpha^2}\right), \tag{9.2}$$

$$\Psi = \xi e^{-\alpha}\alpha^{3/2}.$$

При получении (9.1) и (9.2) применялось разложение по степеням $1/\alpha$ $(\alpha \gg 1)$, которое корректно при условии $1/\alpha \gg \varepsilon$ (это, как правило, имеет место), поскольку система (8) справедлива с точностью до членов порядка ε. Для определения критического значения параметра Ψ, характеризующего тепловой эффект реакции, необходимо выписать условие касания в плоскости (Θ, z^*) кривых, определенных уравнениями (9.1) и (9.2). Это условие, как нетрудно показать, имеет вид

$$\frac{\dot{K}_1(z^*)}{\dot{K}_2(z^*)} = \frac{1 - \dfrac{3}{2\Theta} - \dfrac{2\Theta^2 - \Theta + 1}{2\alpha}}{1 - \dfrac{3}{2\Theta} - \dfrac{4\Theta^2 + 1}{4\alpha}}, \tag{10}$$

где

$$\dot{K}_1(z^*) = \frac{dK_1(z^*)}{dz^*} = \frac{1}{2}\int_a^{z^*}\frac{F(z)}{\sqrt{z^*-z}}dz;\ \dot{K}_2(z^*) = \frac{dK_2(z^*)}{dz^*} = -\frac{1}{2}\int_{z^*}^{b}\frac{F(z)}{\sqrt{z-z^*}}dz.$$

Критические значения параметров $\bar{\Psi}$, $\bar{\Theta}$ и $\bar{z}^*$ (критические величины будем помечать чертой сверху) определяются системой уравнений (9.1), (9.2) и (10). Качественный ход кривых в плоскости (Θ, z^*), отвечающих уравнениям (9.1) и (9.2), показан на рис. 1, *1*, *2* соответственно. При $\Psi = \bar{\Psi}$ эти кривые касаются друг друга, при $\Psi > \bar{\Psi}$ стационарных решений не существует (нет точек пересечения) и в сосуде происходит тепловой взрыв.

Решение системы (9.1), (9.2), (10) будем искать в виде

$$\bar{\Psi} = \bar{\Psi}_0 + \Psi_1/\alpha, \quad \bar{\Theta} = \bar{\Theta}_0 + \Theta_1/\alpha, \quad \bar{z}^* = \bar{z}_0^* + z_1^*/\alpha, \tag{11}$$

где $\bar{\Psi}_0$, $\bar{\Theta}_0$ и $\bar{z}_0^*$ — критические значения в пределе $\alpha \to \infty$. Критическое значение координаты нейтральной плоскости $\bar{z}_0^*$, как видно из (9.2), совпадает с гидростатическим центром, координата которого z_0^* определяется только геометрией неплотностей и находится из уравнения

$$K_1(z_0^*) = K_2(z_0^*) = K_0. \tag{12}$$

Последнее равенство в (12) служит определением величины K_0.

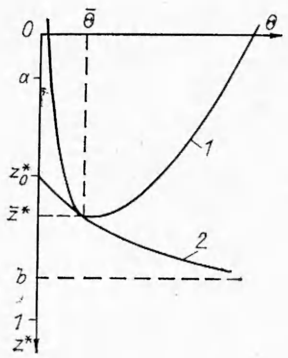

Рис. 1.

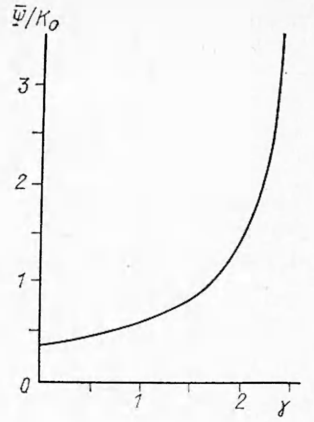

Рис. 2.

Решение в нулевом приближении при разложении по степеням $1/\alpha$:

$$\bar{\Psi}_0 = (3/2e)^{3/2}K_0 \approx 0{,}41K_0, \quad \bar{\Theta}_0 = 3/2, \quad \bar{z}_0{}^* = \bar{z}_0{}^*. \tag{13}$$

Решение в первом приближении:

$$\Psi_1 = \frac{3\bar{\Psi}_0}{4}\left[1 + \frac{\dot{K}_1(z_0^*)}{\dot{K}_1(z_0^*) - \dot{K}_2(z_0^*)}\right] > 0,$$

$$\Theta_1 = \frac{3}{4}\left[5 + \frac{\dot{K}_2(z_0^*)}{\dot{K}_1(z_0^*) - \dot{K}_2(z_0^*)}\right], \quad z_1^* = \frac{3}{4}\,\frac{K_0}{\dot{K}_1(z_0^*) - \dot{K}_2(z_0^*)} > 0. \tag{14}$$

Формулы (11), (13) и (14) определяют решение системы уравнений (9.1), (9.2) и (10). В частности, они показывают, что чем больше размеры неплотностей, характеризующиеся величиной K_0, тем больше критическое значение параметра Ψ ($\bar{\Psi} \sim K_0$). Например, в случае структуры неплотностей

$$F(z) = F_1\delta(z - z_1) + F_2\delta(z - z_2), \quad z_2 > z_1$$

($\delta(z)$ — импульсная функция Дирака), представляющей собой два проема площадью F_1 и F_2, линейные размеры которых малы по сравнению с расстоянием между их центрами тяжести, критические параметры определяются следующими соотношениями:

$$\bar{\Psi} = \left(\frac{3}{2e}\right)^{3/2} F_1F_2\sqrt{\frac{z_2 - z_1}{F_1^2 + F_2^2}}\left[1 + \frac{3}{4\alpha}\left(1 + \frac{1}{1 + \frac{F_2^2}{F_1^2}}\right)\right] + 0\left(\frac{1}{\alpha^2}\right),$$

$$\bar{\Theta} = \frac{3}{2}\left[1 + \frac{1}{2\alpha}\left(5 + \frac{1}{1 + \frac{F_1^2}{F_2^2}}\right)\right] + 0\left(\frac{1}{\alpha^2}\right),$$

$$\bar{z}^* = \frac{z_2F_2^2 + z_1F_1^2}{F_2^2 + F_1^2} + \frac{3(z_2 - z_1)}{2\alpha}\left(\frac{F_1F_2}{F_1^2 + F_2^2}\right)^2 + 0\left(\frac{1}{\alpha^2}\right).$$

Теперь изучим влияние кондуктивных потерь γ на $Q \sim (e^\Theta - \gamma\Theta)$ величину критических параметров. Исследуем только нулевое приближение ($1/\alpha \to 0$). В этом случае уравнение (9.1) необходимо заменить следующим:

$$K_2(z^*) = \Psi(e^\Theta - \gamma\Theta)\Theta^{-3/2}. \tag{15}$$

Координата нейтральной плоскости, как и при $\gamma = 0$, совпадает с гидростатическим центром, а критическое значение температуры, как нетрудно показать, является корнем алгебраического уравнения

$$e^{\Theta} = -\frac{\gamma}{2}\frac{\Theta}{\Theta - 3/2}, \tag{16}$$

решение которого существует, единственно и не превышает 3/2. Из (15) с учетом (16) следует

$$\overline{\Psi} = K_0 \frac{\sqrt{\overline{\Theta}}\,(3/2 - \overline{\Theta})}{\gamma(\overline{\Theta} - 1)}.$$

Как видно, при $\overline{\Theta} \to 1 + 0$ $\overline{\Psi} \to +\infty$ и $\gamma \to e - 0$. Таким образом, при $\gamma > e$ теплового взрыва вообще не происходит независимо от структуры негерметичностей. Зависимость $\overline{\Psi}/K_0$ от γ показана на рис. 2. В случае $\gamma \ll 1$ можно пользоваться приближенными соотношениями

$$\overline{\Psi} \approx \left(\frac{3}{2e}\right)^{3/2}\left(1 + \frac{5\gamma}{4e^{3/2}}\right)K_0, \quad \overline{\Theta} \approx \frac{3}{2} - \frac{3\gamma}{4e^{3/2}}.$$

Заметим, что при $\gamma < e$ и заданной величине Ψ условие теплового взрыва в негерметичном сосуде можно формулировать следующим образом: тепловой взрыв произойдет, если величина K_0 (прямо пропорциональная размерам негерметичностей) не превышает некоторой критической величины.

Определим динамику изменения температуры и координаты нейтральной плоскости в процессе развития теплового взрыва и сделаем оценки времени его индукции. Для этого воспользуемся системой уравнений (7.1), (7.2), записанной относительно Θ при $\gamma \neq 0$:

$$\frac{d}{dt}\left(\Theta\sqrt{\alpha}\right) = -\Theta^{3/2}K_2(z^*) + \Psi\left(e^{\Theta} - \gamma\Theta\right), \tag{17.1}$$

$$\frac{e^{\Theta} - \gamma\Theta}{\sqrt{\Theta}} = \frac{\alpha}{\Psi}\left[K_1(z^*) - K_2(z^*)\right]. \tag{17.2}$$

При переходе от (7.1), (7.2) к (17.1), (17.2) там, где это не сказывалось принципиальным образом на поведении системы, использовалось приближение $\alpha \to \infty$. Как следует из (17.2), в начальный момент времени ($\Theta = 0$) координата нейтральной плоскости равна $+\infty$ и затем по мере увеличения температуры начинает приближаться к носителю $F(z)$ сверху. Пока величина z^* не достигла $F(z)$ $K_2(z^*) = 0$. Функция от Θ, стоящая в левой части (17.2), имеет минимум при $\Theta = \Theta^*$, где Θ^* — корень алгебраического уравнения

$$e^{\Theta} = \gamma\Theta/(2\Theta - 1),$$

решение которого всегда существует, единственно и больше 1/2 (при $\gamma \to 0$ $\Theta^* \to 1/2 + 0$). Очевидно, Θ^* зависит только от γ. Функция от Θ, стоящая в левой части (17.2), при увеличении Θ от 0 до Θ^* убывает от $+\infty$ до $A(\gamma) = \left(e^{\Theta^*} - \gamma\Theta^*\right)/\sqrt{\Theta^*}$, а при дальнейшем возрастании Θ начинает увеличиваться. Таким образом, уменьшаясь на начальном этапе теплового взрыва (при $0 < \Theta < \Theta^*$), координата нейтральной плоскости при дальнейшем разогреве начинает возрастать и стремится в $+\infty$ вместе с температурой. Из (17.2) следует, что если $\Psi > \Psi^*$ (Ψ^* определяется соотношением $\Psi^* = \alpha K_1(b)/A(\gamma)$), то точка поворота координаты нейтральной плоскости находится вне носителя $F(z)$. Поэтому при $\Psi > \Psi^*$ время индукции теплового взрыва можно найти из уравнения (17.1), положив $K_2(z^*) = 0$. В этом случае оно совпадает с временем индукции теплового взрыва в герметичном сосуде.

Любопытно отметить, что зависимость комплекса $\Psi^*/\alpha K_1(b)$ от γ почти совпадает с зависимостью $\overline{\Psi}/K_0(\gamma)$, изображенной на рис. 2 (отличие не превышает 6 % во всем диапазоне $0 \leqslant \gamma < e$, за исключением очень малой окрестности точки $\gamma = e$). Поэтому имеет место приближенное равенство

$$\frac{\Psi^*}{\overline{\Psi}} \approx \alpha \frac{K_1(b)}{K_0} \gg 1,$$

правая часть которого определяется только конфигурацией неплотностей и не зависит от их размеров в том смысле, что при умножении функции $F(z)$ на любое число величина правой части этого равенства не меняется.

При $\overline{\Psi} < \Psi < \Psi^*$ точка поворота координаты нейтральной плоскости в процессе теплового взрыва находится внутри носителя $F(z)$, а значит, в течение времени, пока $a < z^* < b$, первое слагаемое в правой части (17.1) отлично от нуля. Поскольку знак этого слагаемого отрицательный, можно сказать, что при $\overline{\Psi} < \Psi < \Psi^*$ время индукции теплового взрыва в негерметичном сосуде больше, чем в герметичном.

Оценим время τ индукции теплового взрыва в негерметичном сосуде в предположении малой закритичности $\Psi/K_0 = \overline{\Psi}/K_0(1+s)$, $s \ll 1$. Это предположение подразумевает, что подавляющую часть времени параметры системы близки к критическим: $z^* = z_0^*(K_2(z^*) \approx K_0)$, $\Theta = 3/2 + \chi$, $\chi \ll 1$. Учитывая это обстоятельство при интегрировании (17.1), получим

$$\tau = \frac{\sqrt{\alpha}}{K_0} \int\limits_0^\infty \frac{d\Theta}{-\Theta^{3/2} + \Psi/K_0\,(e^\Theta - \gamma\Theta)} \approx \frac{\sqrt{\alpha}}{\overline{\Psi}} \int\limits_{-1}^\infty \frac{d\chi}{\frac{e^{3/2}}{2}\chi^2 + \left(e^{3/2} - \frac{3}{2}\gamma\right)s}.$$

Поскольку $\Psi = \overline{\Psi}$ является предельной точкой ветвления (такой тип бифуркаций характерен для подавляющего большинства задач горения), χ^2 и s представляют собой величины одного порядка малости. Вводя новую переменную интегрирования $\varphi = \chi/\sqrt{s}$ и заменяя при этом нижний предел интегрирования на $-\infty$, окончательно получим

$$\tau \approx \frac{2}{\overline{\Psi}e} \sqrt{\frac{\alpha}{se}} \int\limits_{-\infty}^\infty \frac{d\varphi}{\varphi^2 + \left(2 - \frac{3\gamma}{e^{3/2}}\right)} \approx \frac{1{,}7}{\overline{\Psi}} \sqrt{\frac{\alpha}{s(3-\gamma)}}.$$

Таким образом, в данной работе сделано обобщение теории теплового взрыва Семенова на случай негерметичного сосуда с неплотностями произвольной величины и конфигурации. Найдены аналитические представления критических параметров. Показано, что вывод теории Семенова о том, что при $\gamma > e$ теплового взрыва не происходит, остается верным и для негерметичных сосудов. При условии $\gamma < e$, которое является необходимым и достаточным условием теплового взрыва в теории Семенова, в негерметичном сосуде, как показано в данной работе, тепловой взрыв наступает только в случае, если K_0, определяющая величину и конфигурацию негерметичностей, не превышает некоторой критической величины. Критический разогрев уменьшается от $\Theta = 3/2$ до 1 при изменении коэффициента кондуктивных потерь γ от 0 до e. Доказано, что при интенсивности тепловыделения, превышающей величину Ψ^*, негерметичность не оказывает никакого влияния на время индукции теплового взрыва. Получена аналитическая оценка этой величины при малой закритичности.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Зельдович Я. Б., Баренблатт Г. И., Либрович В. Б. и др.** Математическая теория горения и взрыва.— М.: Наука, 1980.
2. **Prahl J., Emmons H. W.** Comb. Flames, 1975, 25, 369.
3. **Франк-Каменецкий Д. А.** Диффузия и теплопередача в химической кинетике.— М.: Наука, 1987.

г. Балашиха *Поступила в редакцию 14/I 1989, после доработки — 3/V 1989*