

热爆炸的临界条件和点火时间 (II) 有反应物消耗情况

秦承森

本文使用抛物型方程解的比较法,给出了低超临界化学反应系统的点火临界条件,点火临界温度和点火时间。这组近似公式反映了反应物的消耗,系统形状和温度有空间分布对临界特性的影响。它比温度均匀近似更接近实际,温度均匀近似结果可做为本文公式的特例。

一、引言

热爆炸(或热自燃)理论是爆轰学和燃烧学的基础理论之一^[1,2]。在工程上也有广泛的应用。

热爆炸是用具有Arrhenius反应速率常数的反应扩散方程描述的。由于反应项的非线性,不可能求得精确的解析解。人们往往通过各种近似或者使用摄动法求出临界状态的本质特征。但是,以前所得到的结果,或者是在一维形状(无限大平板,无限长园柱,球形)下,或者是在温度均匀近似下取得的。而实际问题往往要求研究具有三维形状的温度不均匀的反应系统。对于这种情况,用解方程的办法,用难更大。因此,寻求一种不依赖解方程的方法,独立地求出临界特征量与系统形状的关系,就十分必要了。Bebernes和Kassoy(1981)^[3]在大活化能($\epsilon=0$)近似下,使用比较法给出了Boit数无限大时无反应物消耗系统的临界条件和点火时间,从而给出了几何形状和温度空间分布对临界特性的影响。我们认为这是一个很有希望的方向,并在文献[4]中,使用Pao(1987)^[5]所发展的抛物型方程解的比较法,给出了任意活化能和Boit数条件下的无反应物消耗系统的临界条件和点火时间公式。

本文的目的是进一步推进这个方向的工作,使用Pao(1982)^[6]提出的抛物型方程组解的比较法,研究有反应物消耗时,系统形状,活化能和温度空间分布对临界值的影响。给出了一组近似的解析公式。在做温度均匀近似后,它们可以化为Boddington(1984)^[7],Kassoy(1978)^[8],Boddington(1977)^[9]相应的结果。在无反应物消耗的假设($b=0$)下,本文公式自然退化为文[4]中的结果。将本文公式中的临界参数 δ_{cr} 与Kordylewski(1982)^[10],Boddington(1984)^[11]的建立在数值解基础上的精确公式结果所做的对比表明,反应物消耗引起的小量修正项的误差在10%以内。而 δ_{cr} 的总误差与文[4]中结果相同,在6%以内。但本文公式的优点是不依赖于数值解,可以直接估算系统的临界量。

二、基本方程和不等式

我们研究处于常温 T_0 环境中的反应系统 Ω ,它通过热传导或对流,与外界交换能量,但

1986年7月31日收到原稿,1987年3月12日收到修改稿

无质量交换。化学反应服从Arrhenius反应速率常数。略去物质运动和扩散, 考虑反应物的消耗, 热爆炸理论的基本方程为

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \theta}{\partial \tau} - \nabla \cdot k \nabla \theta &= \delta f^m F(\theta), & (\xi \in \Omega, \tau > 0) \\ \frac{\partial f}{\partial \tau} &= -b \delta f^m F(\theta), \\ \theta(0, \xi) &= \theta_0(\xi), & (\xi \in \Omega) \\ \frac{\partial \theta}{\partial n} + \beta \theta &= 0, & (\xi \in \partial \Omega, \tau > 0) \end{aligned} \right\} \quad (2.1)$$

其中, $F(\theta) = \exp[\theta/(1 + \varepsilon\theta)]$, $\partial\Omega$ 为系统边界。无量纲量由下列各式规定

$$\begin{aligned} \theta &\equiv \frac{E}{RT_\infty^2}(T - T_\infty); & \tau &\equiv \lambda_0 t / (\rho c_V L^2); \\ \delta &\equiv Q A_m C_0^m L^2 E \exp(-E/RT_\infty) / (\lambda_0 RT_\infty^2); \\ f &\equiv C/C_0; & b &\equiv RT_\infty^2 c_V \rho / EQC_0; \\ \varepsilon &\equiv RT_\infty / E; & \beta &\equiv aL / \lambda(x); & k &\equiv \lambda(x) / \lambda_0; \\ \xi_i &\equiv x_i / L \quad (i=1, 2, 3); & \xi &\equiv (\xi_1, \xi_2, \xi_3); \\ \nabla &\equiv \left(\frac{\partial}{\partial \xi_1}, \frac{\partial}{\partial \xi_2}, \frac{\partial}{\partial \xi_3} \right); & \frac{\partial}{\partial n} &: \partial\Omega \text{ 上外法向导数} \end{aligned}$$

量纲量: T 温度; ρ 密度; E 活化能; Q 化学反应热; c_V 定容比热; A_m 速率常数的指前因子; C_0 反应物初始浓度; C 反应物浓度; R 气体常数; m 反应级数; $\lambda(x)$ 物质的导热系数 ($\lambda_0 \equiv \lambda_{max}$); a 反应系统表面传热系数; L 系统的特征长度; t 时间; x_i 空间坐标。

设 $(\tilde{\theta}, \tilde{f})$ 和 $(\underline{\theta}, \underline{f})$ 分别为上解和下解, 则根据化学反应项的函数特性⁽⁶⁾, 我们有不等式

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \tilde{\theta}}{\partial \tau} - \nabla \cdot k \nabla \tilde{\theta} - \delta f^m F(\tilde{\theta}) &\geq 0 > \frac{\partial \underline{\theta}}{\partial \tau} - \nabla \cdot k \nabla \underline{\theta} - \delta \underline{f}^m F(\underline{\theta}) \\ \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tau} + b \delta \tilde{f}^m F(\underline{\theta}) &\geq 0 > \frac{\partial \underline{f}}{\partial \tau} + b \delta \underline{f}^m F(\tilde{\theta}) \quad (\xi \in \Omega, \tau > 0) \end{aligned} \right\} \quad (2.2)$$

及初边值条件

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \tilde{\theta}}{\partial n} + \beta \tilde{\theta} &\geq 0 > \frac{\partial \underline{\theta}}{\partial n} + \beta \underline{\theta}, \quad (\xi \in \partial \Omega, \tau > 0) \\ \tilde{\theta}(0, \xi) &> \theta_0(\xi) > \underline{\theta}(0, \xi), & (\xi \in \Omega) \\ \tilde{f}(0, \xi) &= 1 > \underline{f}(0, \xi). \end{aligned} \right\} \quad (2.3)$$

Pao (1982)⁽⁶⁾ 证明, 通过迭代可以构造收敛于真解 θ, f 的上下解列 $\{\tilde{\theta}_n\}, \{\underline{\theta}_n\}, \{\tilde{f}_n\}, \{\underline{f}_n\} (n=1, 2, \dots)$ 。如果初始尝试函数选取合适, 则经少数几次迭代, 就可以找到接近真解的上下解。

下节, 我们将在 b 是小量的假设下, 通过分析, 选取上下解, 进行迭代, 求出一个与真解逼近的下解的临界特性, 作为真解的相应临界量的近似值。

三、上下解的选取和迭代

对于高超临界 ($\delta \gg \delta_{cr}$, δ_{cr} 为 δ 的临界参数) 系统, 反应物的消耗可以忽略。因此, 我们只考虑低超临界 ($0 < (\delta/\delta_{cr} - 1) \ll 1$) 系统, 且 b 为小量的情况。

比较法允许在满足 (2.2)、(2.3) 式的条件下, 自由选取上下解的具体形式^[6]。我们选上下解的形式为 $\tilde{\theta}_n = \tilde{p}_n(\tau)\Psi(\xi)$, $\underline{\theta}_n = \underline{p}_n(\tau)\Psi(\xi)$, 其中 $\Psi(\xi)$ 为特征值问题

$$\left. \begin{aligned} \nabla \cdot k \nabla \Phi + \mu \Phi &= 0, & (\xi \in \Omega) \\ \partial \Phi / \partial n + \beta \Phi &= 0, & (\xi \in \partial \Omega) \end{aligned} \right\} \quad (3.1)$$

对应于最小特征值 μ_1 的特征函数, 且已归一化, 即 $\max[\Psi(\xi)] = 1$ 。

将 $\underline{\theta}_n = \underline{p}_n(\tau)\Psi(\xi)$, $\tilde{\theta}_n = \tilde{p}_n(\tau)\Psi(\xi)$ 代入 (2.2)、(2.3) 式取等号, 使用 (3.1) 式并将 ξ 视为参数, 可得

$$\left. \begin{aligned} \frac{d \underline{\theta}_n}{\underline{\theta}_n d\tau} &= \delta \int_0^m g(\underline{\theta}_n) - \mu_1, & (\xi \in \Omega, \tau > 0) \\ \underline{\theta}_n(0; \xi) &= \underline{p}_n(0)\Psi(\xi), & (\xi \in \Omega) \end{aligned} \right\} \quad (3.2)$$

$$\tilde{f}_n \approx 1 - b\delta \int_0^{\tau} F[\underline{\theta}_n(t)] dt, \quad (\xi \in \Omega, \tau > 0) \quad (3.3)$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{d \tilde{\theta}_{n+1}}{\tilde{\theta}_{n+1} d\tau} &= \delta \tilde{f}_n g(\tilde{\theta}_{n+1}) - \mu_1, & (\xi \in \Omega, \tau > 0) \\ \tilde{\theta}_{n+1}(0; \xi) &= \tilde{p}_{n+1}(0)\Psi(\xi), & (\xi \in \Omega) \end{aligned} \right\} \quad (3.4)$$

$$\tilde{f}_{n+1} = 1 - b\delta \int_0^{\tau} F[\tilde{\theta}_{n+1}(t)] dt, \quad (\xi \in \Omega, \tau > 0) \quad (3.5)$$

其中 $g(\theta) \equiv F(\theta)/\theta$; $\underline{p}_n(0)$, $\tilde{p}_{n+1}(0)$ 的选取必须满足不等式: $\underline{\theta}_n(0, \xi) < \theta_0(\xi) < \tilde{\theta}_{n+1}(0, \xi)$ 。

我们从 (3.2) 式开始迭代。由于 b 是一个小量, 作为 $\underline{\theta}_1$ 的近似值, 我们可以取反应物无消耗 ($b=0$) 条件下的解 $\bar{\theta} = \bar{p}(\tau)\Psi(\xi)$, 它满足方程

$$\left. \begin{aligned} \frac{d \bar{\theta}}{\bar{\theta} d\tau} &= \delta g(\bar{\theta}) - \mu_1, & (\xi \in \Omega, \tau > 0) \\ \bar{\theta}(0) &= \bar{p}_1(0)\Psi(\xi), & (\xi \in \Omega) \end{aligned} \right\} \quad (3.6)$$

取 $\underline{\theta}_1 \approx \bar{\theta}$, 代入 (3.3) 式可得 \tilde{f}_1 , 由于无反应物消耗的低超临界系统的温度分布在大部份时间内 (除初始时刻一小段时间外) 是在临界状态附近, 即近似有 $\underline{\theta}_1 \approx \bar{\theta}_{cr} \equiv \bar{p}_{cr}\Psi(\xi)$, $F(\underline{\theta}_1) \approx F(\bar{\theta}_{cr})$, 由 (3.3) 式应有近似式

$$\tilde{f}_1(\tau) = 1 - b\delta g_0 \bar{\theta}_{cr} \tau \quad (3.7)$$

其中 $g_0 \equiv F(\bar{\theta}_{cr})/\bar{\theta}_{cr}$ 。

将 (3.7) 式代入 (3.4) 式得到 $\tilde{\theta}_2$ 满足的方程

$$\left. \begin{aligned} \frac{d \tilde{\theta}_2}{\tilde{\theta}_2 d\tau} &= \delta (1 - b\delta g_0 \bar{\theta}_{cr} \tau) g(\tilde{\theta}_2) - \mu_1, & (\xi \in \Omega, \tau > 0) \\ \tilde{\theta}_2(0, \xi) &= \tilde{p}_2(0)\Psi(\xi) \end{aligned} \right\} \quad (3.8)$$

注意到 $F(\tilde{\theta}_2)dt = g(\tilde{\theta}_2) \frac{\tilde{\theta}_2 dt}{d\tilde{\theta}_2} \cdot d\tilde{\theta}_2$, 使用 (3.8) 式, 则由 (3.5) 式可得

$$f_2 \approx 1 - b\delta \int_0^{\theta_2} \frac{g(\theta)}{\delta \tilde{f}_1^m g(\theta) - \mu_1} d\theta \quad (3.9)$$

由 (3.2)、(3.4) 式可以看出, 在临界点附近, $\tilde{\theta}_2$ 与 $\underline{\theta}_2$ 仅相差一与 b 有关的小量, 故可近似有

$$f_2 \approx 1 - b\delta \int_0^{\theta_2} \frac{g(\theta)}{\delta \tilde{f}_1^m g(\theta) - \mu_1} d\theta \quad (3.10)$$

将其代入 (3.2) 式, 可得到 $\underline{\theta}_2$ 满足的近似方程

$$\left. \begin{aligned} \frac{d\underline{\theta}_2}{\underline{\theta}_2 d\tau} &= \delta \left[1 - b\delta \int_0^{\theta_2} \frac{g(\theta)}{\delta \tilde{f}_1^m g(\theta) - \mu_1} d\theta \right]^m \\ &\quad \cdot g(\underline{\theta}_2) - \mu_1, \quad (\xi \in \Omega, \tau \sim 0) \\ \underline{\theta}_2(0, \xi) &= \underline{\rho}_2(0) \Psi(\xi), \quad (\xi \in \Omega) \end{aligned} \right\} \quad (3.11)$$

我们将把 $\underline{\theta}_2$ 当成真解的近似值, 求出 $\underline{\theta}_2$ 的临界特性, 做为真解临界特性的近似值。

四、点火临界条件和点火时间

为简单计, 我们令:

$$\begin{aligned} G(\underline{\theta}_2) &\equiv \left[1 - b\delta \int_0^{\theta_2} \frac{g(\theta)}{\delta \tilde{f}_1^m g(\theta) - \mu_1} d\theta \right]^m g(\underline{\theta}_2) \\ \Theta(\tau) &\equiv \underline{\rho}_2(\tau) \end{aligned}$$

则 $\underline{\theta}_2 = \underline{\rho}_2(\tau) \Psi(\xi) \equiv \Theta(\tau) \Psi(\xi)$, 方程 (3.11) 可写为

$$\frac{d\Theta}{\Theta d\tau} = \delta G(\Theta) - \mu_1, \quad (\xi \in \Omega, \tau \sim 0) \quad (4.1)$$

由于系统临界特性与系统温度极大值状态关系最大, 我们在上式中取 $\Psi = 1$, 并且研究均匀温度方程

$$\frac{d\Theta}{\Theta d\tau} = \delta G(\Theta) - \mu_1 \quad (4.2)$$

它的点火临界条件为⁴

$$\left. \begin{aligned} \delta_{cr} &= \mu_1 / G(\Theta_{cr}) \\ G'(\Theta_{cr}) &= 0, \quad G''(\Theta_{cr}) < 0 \end{aligned} \right\} \quad (4.3)$$

其中“'”“''”分别表示对自变量的一阶和二阶导数。为了由 (4.3) 求出 δ_{cr} , Θ_{cr} 的显式表达式, 又由于 b 是小量, 可令 $\Theta_{cr} \approx \Theta_{0cr} + \Theta_{1cr}$, $\delta_{cr} = \delta_{0cr}(1 + \Delta^2)$, 其中 Θ_{0cr} , δ_{0cr} 为无反应物消耗条件下的临界量, 而 Θ_{1cr} , Δ^2 则是由小量 $b \neq 0$ 而产生的对临界值的微小修正量。代入 (4.3) 式, 我们有零级量方程

$$\left. \begin{aligned} g'(\Theta_{0cr}) &= 0, \quad g''(\Theta_{0cr}) < 0 \\ \delta_{0cr} &= \mu_1 / g(\Theta_{0cr}) \end{aligned} \right\} \quad (4.4)$$

它们给出了表达式

$$\left. \begin{aligned} \delta_{0cr} &= \mu_1 [1 - 2\varepsilon - (1 - 4\varepsilon)^{1/2}] \exp\{2[1 \\ &\quad - (1 - 4\varepsilon)^{1/2}]^{-1} - \varepsilon^{-1}\} / 2\varepsilon^2 \end{aligned} \right\} \quad (4.5)$$

$$\Theta_{0cr} = \left[1 - 2\varepsilon - (1 - 4\varepsilon)^{1/2} \right] / 2\varepsilon^2$$

这正是文献〔4〕中所求出的公式。其中 Θ_{0cr} 为温度均匀条件下的临界值，没有温度空间分布的影响，但 δ_{0cr} 表达式却包含了温度不均匀性的影响。

在(4.1)式中，令 $b=0$ ，取点火温度为 ∞ ，初始温度为0。考虑到低超临界系统的温度极大值 Θ 在大部份时间处于 Θ_{0cr} 附近，则使用Laplace近似积分方法^{〔12〕}，可得到无反应物消耗条件下的点火时间

$$\tau_{0\infty} = \int_0^{\infty} \frac{d\Theta}{(\delta g(\Theta) - \mu_1)\Theta} \approx \frac{\pi}{\omega_0 \mu_1 \Theta_{0cr}} \left(\frac{2g_c}{g_c''} \right)^{1/2} \quad (4.6)$$

其中： $\delta \equiv \delta_{0cr}(1 + \omega^2)$ ， $\omega^2 \ll 1$ 。 $g_c = g(\Theta_{0cr})$ ， $g_c'' = g''(\Theta_{0cr})$ 。

将 $g(\Theta)$ ， \tilde{f}_1 在 Θ_{0cr} 附近展开。由(3.7)式 $\tilde{f}_1(\Theta_{0cr}) \approx 1 - b\delta g_c \tau_{0\infty}$ ，及(4.4)式 $\delta_{0cr} = \mu_1/g_c$ ，略去高阶小量，并注意到 $\delta = \delta_{cr}$ 时， $\omega_0 = \Delta$ ，则可用Laplace方法^{〔12〕}近似积分

$$\int_0^{\Theta_{0cr}} \frac{\delta_{cr} g(\Theta)}{\delta_{cr} \tilde{f}_1^m g(\Theta) - \mu_1} d\Theta \approx \frac{\pi}{2\Delta[1 - (mb\pi/\Delta^2)(2g_c/g_c'')^{1/2}]^{1/2}} \left(\frac{2g_c}{g_c''} \right)^{1/2} \quad (4.7)$$

令：

$$\left. \begin{aligned} \Theta_{1cr} &= (4mbg_c^2/g_c'')^{1/3} \chi_1 \\ \Delta &= [mb(2g_c/g_c'')^{1/2}]^{1/3} \chi_2 \end{aligned} \right\} \quad (4.8)$$

由(4.3)式得一阶小量方程为

$$\chi_1^3 + \pi^{2/3} \chi_1 \chi_2^2 \left(1 - \frac{1}{\chi_2^3} \right) - \frac{1}{2} = 0$$

$$\chi_2^3 + \pi^{-(2/3)} \chi_2 \chi_1^2 - \frac{1}{2(1 - \chi_2^3)^{1/2}} = 0$$

它的一对实根近似值为 $\chi_1 = 0.6792$ ， $\chi_2 = 1.0424$ 。于是得到 δ_{cr} ， Θ_{cr} 的表达式

$$\delta_{cr} = \frac{\mu_1}{g_c} \left\{ 1 + 2.937 [mb(g_c/g_c'')^{1/2}]^{2/3} \right\} \quad (4.9)$$

$$\Theta_{cr} = \Theta_{0cr} + 1.078 \left(mb \frac{g_c^2}{g_c''^2} \right)^{1/3} \quad (4.10)$$

由(4.2)式，取点火温度为 ∞ ，初始温度为0，可得点火时间

$$\tau_{\infty} = \int_0^{\infty} \frac{d\Theta}{(\delta G(\Theta) - \mu_1)\Theta} \quad (4.11)$$

对低超临界系统 $\delta = \delta_{cr}(1 + \omega^2)$ ， $\omega^2 \ll 1$ ，将 G 在 Θ_{cr} 附近展开，使用近似积分方法^{〔12〕}，可近似求出

$$\tau_{\infty} \approx \frac{\pi}{\Theta_{cr} \mu_1 \omega} \left(\frac{2G(\Theta_{cr})}{G''(\Theta_{cr})} \right)^{1/2} \quad (4.12)$$

五、讨 论

我们应用抛物型方程组解的比较法，通过迭代，给出一个下解满足的方程。然后，采用反应物消耗为小量时的临界状态是无反应物消耗条件下临界量附加一小扰动。这种常用的临界状态定义^[10,11]，使用摄动法给出了有反应物消耗时的临界量公式(4.9)，(4.10)，及点火时间公式(4.11)。这组公式是以系统最大温度随时间的变化方程代替方程(4.1)得到的。实际上，也可以将方程(4.1)对整个系统空间进行积分之后，再求方程的临界值，则可给出一组更准确的公式

$$\left. \begin{aligned} \delta_{ocr} &= \mu_1 / \langle g \rangle \approx \mu_1 / g_c + O(B^2) \\ \delta_{cr} &= \delta_{ocr} \left\{ 1 + 2.937 \left[mb \left(\frac{g_c}{g_c''} \right)^{1/2} \right]^2 + O(Bb^{2/3}) \right\} \end{aligned} \right\} \quad (5.1)$$

其中

$$B \equiv \frac{1}{2} \int_{\Omega} \left\{ \left[\sum_{i=1}^j (\xi_i - \xi_{0i}) \frac{d}{d\xi} \right]^2 \Psi(\xi_0) \right\} \Psi dV / \int_{\Omega} \Psi dV$$

$$\langle g \rangle = \int_{\Omega} g(\Theta_c, \Psi(\xi)) dV / V$$

ξ_0 为临界状态温度极大值的位置， dV 为体积元， V 为系统的无量纲体积。计算表明， $O(B^2)$ 大约为百分之一量级，而 $O(Bb^{2/3}) \approx O(0.1b^{2/3})$ 。

Kordylewski(1982)^[10] 和 Boddington(1984)^[11] 曾给出一个公式

$$\delta_{cr} = \delta_{ocr} [1 + 2.946\chi(mb)^{2/3}] \quad (5.2)$$

其中 χ 是一个与形状有关，依赖于数值解的因子。与(5.2)式对比，(4.9)式可写为

$$\delta_{cr} = \delta_{ocr} [1 + 2.937\chi'(mb)^{2/3}] \quad (5.3)$$

其中 $\chi = (g_c/g_c'')^{1/2}$ 。下表是 Kordylewski 通过数值计算给出的 χ 值与我们给出的 χ' 值比较。由表可见 χ' 与 χ 值的误差在 10% 之内。因此形状对反应物消耗修正项的影响是一个更高阶小量 $O(0.1b^{2/3})$ 。而形状对 δ_{cr} 的影响主要表现在(4.9)式的 μ_1 上。当 $\beta = \infty$ 时，对于无限大平板 $\mu_1 = 2.4674$ ，无限长圆柱 $\mu_1 = 5.7831$ ，球 $\mu_1 = 9.8696$ 。可见，形状引起 μ_1 值的改变是倍数关系，而对 χ 的影响仅为 10%。因此，作为一个近似公式，可以略去量 $O(0.1b^{2/3})$ ，而仍能反应形状对 δ_{cr} 的主要影响。

	$\beta = \infty$		球	$\varepsilon = 0, \beta = 0$ 各种形状
	$\varepsilon = 0$ 无限大平板	$\varepsilon = 0$ 无限长圆柱		
χ	0.9721	0.9399	0.9019	1.00
χ'	1.00	1.00	1.00	1.00

在温度均匀假设下，可由(3.1)式得出 $\mu_1 = \beta S / V$ ，其中 S 为系统的无量纲面积。则(4.9)式化为

$$\delta_{cr} = \frac{\beta S}{g_c V} \left\{ 1 + 2.937 \left[mb \left(\frac{g_c}{g_c''} \right)^{1/2} \right]^2 + O(Bb^{2/3}) \right\}$$

这实际上就是 Boddington⁷ 得到的结果。仅系数比2.946略小一些。进一步令 $\epsilon = 0$, 则可得 Kassoy⁸, Boddington⁹ 的结果, 也仅系数略有不同。

应该指出, 在目前的近似下, 公式(4.10)实际上是温度均匀近似结果。更精确的处理才能给出温度空间分布对 θ_{cr} 的影响。

最后, 我们指出:

(1) 本文公式仅适用于 b 是小量情况。所给出的公式适用于任何形状系统, 例如 $R_1 \times R_2 \times R_3$ 的正六面体, 有限长圆柱等, 只要用分离变量法或其它近似解法¹³, 由方程(3.1)给出特征值 μ 即可。但对不同形状的反应系统, 其误差各不相同。这组公式的优点是不依赖于数值计算结果。

(2) 本文结果可以推广到一般的反应速率函数形式, 只要 $F(\theta)$ 是 θ 的增函数, 且 $F''(\theta) > 0$ (对点火) 或 $F''(\theta) < 0$ (对熄火)。并且使用完全类似的过程, 可以求出一组熄火临界公式。

笔者对孙和生, 叶其孝, 王继海等同志的热情帮助和讨论, 以及冯长根同志提供的颇有助益的意见, 仅致谢意。

参 考 文 献

- [1] Mader, C. L., Numerical Modeling of Detonation, Univ. Calif. Press, (1979), 138.
- [2] 付维标, 卫景林, 燃烧物理学基础, 机械工业出版社, (1981), 50.
- [3] Bebernes, J. W., Kassoy, D. R., *SIAM J. Appl. Math.*, **40**(3)(1981), 176.
- [4] 秦承森, 爆炸与冲击, **6**(2), (1986), 108.
- [5] Pao, C. V., *J. Math. Anal. Appl.*, **65**(3), (1978), 616.
- [6] Pao, C. V., *J. Math. Anal. Appl.*, **87**(1)(1982), 105.
- [7] Boddington, T., Feng, C. G. et al., *J. Chem. Soc. Faraday Trans. II*, **80**, (1984), 1155.
- [8] Kassoy, D. R., Linan, A., *Q. J. Mech. Appl. Math.*, **31**, pt. 1, (1978), 99.
- [9] Boddington, T., Gray, P. et al., *Proc. R. Soc. Lond.* **357** (1691)(1977), 403.
- [10] Kordylewski, W., Wach, J., *Combust. Flame* **45**(1981), 219.
- [11] Boddington, T., 冯长根 et al., 兵工学报, (1)(1981), 1.
- [12] Nayfeh, A. H., Introduction to Perturbation Techniques, Wiley, New York, (1981), 65.
- [13] 柯朗, R., 希尔伯特, D., 数学物理方法, 科学出版社, 北京, (1958), 213.

CRITICAL CONDITION AND TIME-TO-IGNITION FOR THERMAL EXPLOSIONS (II) REACTANT CONSUMPTION INCLUDED

Qin Chengsen

Abstract

This paper gives the critical condition, critical temperature and time -

to-ignition for a marginally supercritical system by means of comparison techniques. Discussions about the effects of reactant consumption and activation energy on ignition are given.