第9卷 第2期　　爆 炸 与 冲 击　　Vol.9, No.2
1989年4月　　EXPLOSION AND SHOCK WAVES　　Apr., 1989

学术讨论

关于热爆炸问题的几点讨论——答冯长根同志

秦承森
（应用物理与计算数学研究所）

我们在文［1］中，使用抛物型方程解的比较法给出了反应热传导系统的爆炸临界特征量δ_{cr}、临界温度Q_{cr}的近似公式。其中临界温度Q_{cr}和转点值ε_{tr}在文［1］的近似条件下，恰好是均温系统的结果[2]（这个结果见于文［1］所引参考文献［2］）。均温系统可以作为非均温系统的近似，这是众所周知的，为行文简洁计，没予以讨论。冯长根同志在文［3］（以下简称冯文）中补充说明了这一点，是必要的，但也提出了一些值得讨论的问题和观点。本文将就有关问题做简要讨论和答复。

一、几点看法

（1）冯文根据T.Boddington、冯长根等人的工作[4]提出，文［1］"以$\beta=0$时的临界值Q_{cr}代入$\beta\neq 0$系统进行估算，应有限制。例如文献［6］（即本文参考文献［4］）把谢苗诺夫系统的理论考虑应用于$\beta\neq 0$的系统时，指出了仅对$\beta\ll 1$是可行的。"

我们在文［1］中所使用的方法是抛物型方程解的比较法，也叫上下解方法。文［1］中的求解过程是典型的比较法迭代过程，不过仅进行了一次迭代。原则上，只要迭代次数足够多，上下解能以任意精确度逼近真解，而与迭代初值的选取无关。关于这一点，请查阅文献［5］第Ⅱ部份及文献［1］所附有关文献。因此，文［1］所得公式适用于$0<\beta<\infty$区间，并且δ_{cr}与数值计算结果符合较好。

Boddington的δ_{cr}公式[4]有$\beta\ll 1$的限制条件，并不是求解过程造成的，其根本的原因是选取了β为小参数，求取的是关于β的幂级数形式近似解。为使级数解收敛于真解，$\beta\ll 1$的条件是必不可少的，很明显，$\beta\ll 1$的条件对使用比较法得到的δ_{cr}公式没有约束力。

（2）冯文强调指出"$\varepsilon_{tr}=1/4$仅仅是针对谢苗诺夫系统（$\beta=0$）的"，并在所列的Frank-Kamenetskii系统（即Thomas系统中$\beta\to\infty$情况）ε_{tr}值表中，注明$\varepsilon_{tr}=1/4$是"不准确"的

$\varepsilon_{tr}=1/4$是谢苗诺夫系统的准确值，在这个意义上说，"$\varepsilon_{tr}=1/4$仅仅是针对谢苗诺夫系统的"是正确的。但是，$\varepsilon_{tr}=1/4$作为近似值，也可以说适用于$0<\beta<\infty$范围，这一点可以直接从冯文所列表中的数据得到证实；对一维（无限大平板，无限长圆柱，球）系统，$\varepsilon_{tr}=1/4$与真值相比，其最大绝对误差约为0.0112，最大相对误差小于5%，因此，$\varepsilon_{tr}=1/4$作为近似值，精确度还是较高的，这是转点特性决定的。

冯文在表中所列的T.Boddington、冯长根等人的数据是近似数值计算结果，也都是近似值[4]，它们与$\varepsilon_{tr}=1/4$一样，都是真值的近似值，只不过精确度不同。对于这种差别，使用术语"不精确"也许更恰当些。

（3）冯文在上述问题中，一直认为谢苗诺夫系统与Thomas系统$\beta=0$情况是等价的，因而

1987年12月17日收到原稿。

有“谢苗诺夫系统（$\beta=0$）”这种提法。并且，根据Boddington、冯长根等人的计算和分析[7,8,9]，提出“谢苗诺夫系统是Thomas系统的极端，即毕奥数β趋于零（$\beta=0$）情况”。

我们认为，这个结论并不确切。Thomas系统的方程中，有两个独立的参数β和δ，规定着三个基本物理过程（化学反应过程，热传导过程，向系统外散热过程）之间的相互关系。β趋于零表示内部热传导过程与向外散热过程相比要快得多，因而边界散热所造成的温度梯度可以忽略。但是，如果化学反应速度比热传导的速度快得多，系统内的温度分布将取决于系统内各点的反应速率，一般情况下温度不可能是均匀的。因此，为了保证系统内温度均匀必须有第二个条件：$\delta\to 0$，它表示系统内部的热传导过程比化学反应过程快得多，以致于化学反应所造成的温差可以认为瞬间就由热传导过程拉平，因此Thomas系统当$\delta\to 0$和$\beta\to 0$两条件同时成立时，才能是均温系统，即谢苗诺夫系统。

如果$\beta\to 0$，而δ是一个有限值时，即化学反应速度与热传导速度相差不多，但散热过程则慢得多，那么，Thomas系统将趋向于绝热系统，当$\beta=0$时，Thomas系统是绝热的。

二、关于Thomas系统

为了便于叙述，我们简要地重温Thomas系统的方程和初、边值条件。

在反应热传导系统Ω内及边界$\partial\Omega$上，有

$$
\begin{cases}
\delta\dfrac{\partial Q}{\partial\tau}-\nabla^2 Q=\delta F(Q) & (\xi\in\Omega,\ \tau>0)\\[2ex]
\dfrac{\partial Q}{\partial n}+\beta Q=0 & (\xi\in\partial\Omega,\ \tau>0)\\[2ex]
Q(\xi,0)=Q_0(\xi) & (\xi\in\Omega)
\end{cases}
\tag{2.1}
$$

其中，

$$F(Q)=\exp[Q/(1+\varepsilon Q)]$$

$$\delta=QA_nC_0^nL^2E\exp(-E/RT_a)/\lambda RT_a^2$$

$$Q=E(T-T_a)/RT_a^2$$

$$\tau=tQA_nC_0^nE\exp(-E/RT_a)/c_v\rho RT_a^2$$

$$\beta=\alpha L/\lambda$$

$$\varepsilon=RT_a/E$$

$$\xi_i=x_i/L\quad(i=1,2,3),\quad \xi=(\xi_1,\xi_2,\xi_3)$$

$$n\text{ 为}\partial\Omega\text{ 外法线方向，}\nabla^2=\left(\frac{\partial^2}{\partial\xi_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial\xi_2^2}+\frac{\partial^2}{\partial\xi_3^2}\right)$$

T、ρ、E、Q、c_v、A_n、C_0、R、n、λ、α、t、x_i、T_a、L分别为温度、密度、活化能、化学反应热，定容比热、速率常数指前因子、反应物初始浓度、气体常数、反应级数、系统内部导热系数、系统与环境热交换系数、时间、空间坐标、环境温度、系统的特征长度。

方程（2.1）成立的条件是单位质量的物质内能可表示成c_vT，且c_v为常数；系统内能量输运

是通过线性热传导完成的；反应是一步不可逆的，且服从Arrhenius关系；略去物质运动、反应物的扩散与反应物的消耗。通常称具有方程（2.1）边值条件的系统为Thomas 系统。

方程（2.1）中有两个独立的参数δ和β，有时也使用另一个参数ψ， 称为谢苗诺夫数，它的定义为

$$\psi=VQA_mC_0^mLE\exp(-E/RT_a)/\alpha RT_a^2S$$

其中V和S为无量纲体积和面积,ψ与β、δ的关系为$\delta=(S\beta/V)\psi$。故ψ,δ，β三个参数中，有两个是独立的。

引入如下的时间尺度

等温反应时间：$t_{chem}=A_m^{-1}C_0^{1-m}\exp(E/RT_a)$；绝热爆炸时间：$t_{ad}=t_{chem}\cdot\rho c_V RT_a^2/C_0QE$；系统内热传导时间：$t_F=\rho c_V L^2/\lambda$；热量传递给环境时间：$t_N=\rho c_V LV/\alpha S$。使用上述时间尺度，参数$\beta$，$\delta$，$\psi$可写为

$$\begin{cases}\beta=\dfrac{V}{S}\dfrac{t_F}{t_N}\\ \delta=\dfrac{t_F}{t_{ad}}=\dfrac{C_0QE}{\rho c_V RT_a^2}\dfrac{t_F}{t_{chem}}\\ \psi=\dfrac{t_N}{t_{ad}}\end{cases}\tag{2.2}$$

这就表明，参数β、δ、ψ规定了反应热扩散系统中三个基本过程——化学反应、内部热传导、系统散热——之间的时间关系。当时间尺度$t_F\ll t_N$时,$\beta\to0$，但此时δ可能是常值，也可能趋于零。在δ为常值时，就表明化学反应与热传导过程的时间尺度是同级量，而$\beta\to0$表明向环境散热的时间尺度t_N要比t_F、t_{ad}长的多，作为极限情况，$t_N\to\infty$，则散热过程可以忽略不计，系统将被认为是绝热的，即δ为常值,而$\delta\to0$的极限情况Thomas 系统将变为绝热的,然而δ也可能趋向于零，此时，热传导过程比系统散热冷却过程和化学反应过程两者都快得多，即:$t_F\ll t_N$,$t_F\ll t_{ad}$，因而，由于化学反应和散热所造成的温度不均匀，可以认为被热传导过程瞬时拉平，于是$\delta\to0$,$\beta\to0$的极限情况下，Thomas 系统将变为均温系统（即谢苗诺夫系统）。可见，不能简单地说，"谢苗诺夫系统是Thomas 系统的极端，即毕奥数β趋于零的情况。"很明显，$\beta\to0$情况和$\beta=0$情况也并不完全等同。$\beta=0$情况就是绝热系统，对于绝热系统不存在爆炸临界现象，因此，"$\beta=0$时的临界值"这个提法也不妥。

下面，我们将首先证明$\beta=0$情况不存在临界爆炸状态，然后求出Thomas系统趋向于均温系统的条件。

三、Thomas 系统β=0情况

Thomas 系统$\beta=0$时,$\partial Q/\partial n=0$，表明系统与外界无热交换，因此是绝热系统。我们分$\delta>0$和$\delta=0$两种情况研究绝热系统。

（1）$\delta>0$

由方程（2.1），当$\beta=0$时，有

$$\delta\frac{\partial Q}{\partial\tau}-\nabla^2Q=\delta F(Q)\qquad(\xi\in\Omega,\ \tau>0)$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial Q}{\partial n}=0 & (\xi\in\partial\Omega,\ \tau>0) \\ Q(\xi,0)=Q_0(\xi) & (\xi\in\Omega) \end{cases} \tag{3.1}$$

对系统所在空间积分，并使用高斯定理及边值条件，有

$$\delta\frac{\partial}{\partial\tau}\int_\Omega Q\,dV=\delta\int_\Omega F(Q)\,dV$$

由于$\delta>0$，$F(Q)>0$，可知，恒有

$$\frac{\partial}{\partial\tau}\int_\Omega Q\,dV>0$$

可见，当$\delta>0$时，绝热系统的温度将一直升高。这物理意义是显然的，$\delta F(Q)>0$意味着系统内不断有化学能放出，它全部用于提高系统内物质的温度，而在边界上无能量的损失。因此，系统温度不断上升。

（2）$\delta=0$

我们仅研究定态解，此时方程为

$$\begin{cases} \nabla^2 Q=0 & (\xi\in\Omega) \\ \dfrac{\partial Q}{\partial n}=0 & (\xi\in\partial\Omega) \end{cases} \tag{3.2}$$

以Q乘以方程（3.2），然后对系统积分，有

$$\int_\Omega Q\nabla^2 Q\,dV=0 \tag{3.3}$$

由格林公式

$$\int_\Omega\left(\frac{\partial u}{\partial\xi_1}\cdot\frac{\partial v}{\partial\xi_1}+\frac{\partial u}{\partial\xi_2}\cdot\frac{\partial v}{\partial\xi_2}+\frac{\partial u}{\partial\xi_3}\cdot\frac{\partial v}{\partial\xi_3}\right)dV+\int_\Omega u\nabla^2 v\,dV=\int_{\partial\Omega}u\frac{\partial v}{\partial n}dS$$

令$u=Q$、$v=Q$，则由式（3.2）边界条件和式（3.3）得

$$\int_\Omega\left[\left(\frac{\partial Q}{\partial\xi_1}\right)^2+\left(\frac{\partial Q}{\partial\xi_2}\right)^2+\left(\frac{\partial Q}{\partial\xi_3}\right)^2\right]dV=0 \tag{3.4}$$

此式仅当Q等于常数时成立。因此，方程（3.4）仅有常温解，并且任何一个常温度均满足方程（3.2），无论这个温度有多高。

综合（1）和（2）可以看出，对于绝热系统，当存在放热反应时，温度将无限上升——发生绝热爆炸。当无化学反应时，系统将处于某一常温状态。不存在爆炸临界状态或临界温度——系统定态温度超过该值时，系统将失稳，微小的扰动将使系统温度上升而永远偏离定态解。这是因为爆炸临界现象是能量的产生和损耗不平衡的结果，而绝热系统中没有能量的损耗，因而也不存在能量产生与损耗是否平衡的问题，也就不存在两种能量从平衡到不平衡的临界点——爆炸临界状态。因此说$\beta=0$的临界值是无意义的。

四、Thomas系统β→0情况

在研究Thomas系统$\beta\to0$情况之前，我们首先给出反应热传导系统能量守恒方程的积分形

式。由其微分形式（2.1）对系统所占空间Ω积分，并使用高斯定理和边值条件，则有

$$\delta\frac{\partial}{\partial\tau}\int_{\Omega}QdV+\beta\int QdS=\delta\int_{\Omega}F(Q)dV \tag{4.1}$$

利用关系式$\delta=S\beta\psi/V$，消去β，有

$$\psi\frac{\partial}{\partial\tau}\int_{\Omega}QdV+\frac{V}{S}\int_{\partial\Omega}QdS=\psi\int_{\Omega}F(Q)dV \tag{4.2}$$

该式对$\beta\neq0$的任何β值均适用，当然对$\beta\to0$的极限情况也成立。显然，这个方程对于$\beta=0$的绝热系统是不成立的。由于$\beta=\alpha L/\lambda$，则$\beta=0$表明$\alpha=0$，而$\psi\propto1/\alpha$，故$\alpha=0$时，$\psi\to\infty$。但我们在推导（4.2）式时，已经假设量ψ有定义，即为有限值。

我们分两种情况研究Thomas系统$\beta\to0$情况。

（1）ψ为常值（或$\delta\to0$）

令$Q_2=\lim\limits_{\beta\to0}Q(\xi,\tau;\beta,\psi)$，其中$\psi$为定值。则将（2.1）取极限

$$\begin{cases}\lim\limits_{\beta\to0}\left(\delta\dfrac{\partial Q}{\partial\tau}\right)-\nabla^2\lim\limits_{\beta\to0}Q=\lim\limits_{\beta\to0}\left(\delta F(Q)\right) & (\xi\in\Omega,\tau>0)\\ \dfrac{\partial}{\partial n}\lim\limits_{\beta\to0}Q+\lim\limits_{\beta\to0}(\beta Q)=0 & (\xi\in\partial\Omega,\tau>0)\end{cases} \tag{4.3}$$

其中，已经假定β与空间坐标无关，因此，对空间坐标求导与极限过程可以互换次序。

由于$\delta=S\beta\psi/V$，以及$F(Q)$，$\partial Q/\partial\tau$是有界的，则（4.3）式化为

$$\begin{cases}\nabla^2Q_2=0 & (\xi\in\Omega,\tau>0)\\ \dfrac{\partial Q_2}{\partial n}=0 & (\xi\in\partial\Omega,\tau>0)\end{cases} \tag{4.4}$$

上节已经证明，这个方程的解为与空间坐标无关的均温值，在此，它是时间的函数$Q_2(\tau)$。注意到$Q_2(\tau)$还应满足式（4.2），将式（4.2）取极限，并使用$Q_2(\tau)$与空间坐标无关的特性，有

$$\psi\frac{dQ_2}{d\tau}=\psi F(Q_2)-Q_2 \qquad (\tau>0) \tag{4.5}$$

这个方程就是谢苗诺夫均温系统方程。因此，如果Thomas系统的初始温度是均匀的，那么在ψ为定值的条件下，Thomas系统$\beta\to0$（但$\beta\neq0$）的极限就是谢苗诺夫均温系统。此时$\beta\to0$与$\beta=0$不等同。

（2）$\psi\to\infty$情况（或$\delta=$常值）

此时，令$Q_1=\lim\limits_{\substack{\beta\to0\\ \psi\to\infty}}Q(\xi,\tau;\beta,\psi)$，将式（2.1）取极限，可得

$$\begin{cases}\delta\dfrac{\partial Q_1}{\partial\tau}-\nabla^2Q_1=\delta F(Q_1) & (\xi\in\Omega,\ \tau>0)\\ \dfrac{\partial Q_1}{\partial n}=0 & (\xi\in\partial\Omega,\ \tau>0)\\ Q(\xi,0)=Q_0(\xi) & (\xi\in\Omega)\end{cases} \tag{4.6}$$

这就是绝热系统的方程。它的解，我们已经在上节中研究过。因此，我们得出结论：当δ为常值时，Thomas系统$\beta\to0$的极限是绝热系统。此时$\beta\to0$与$\beta=0$完全是等同的。

五、简 要 结 论

综上所述，我们得出如下结果

（1）Thomas 系统中存在着两个独立的参数，它们规定了反应热传导系统内的三个物理过程——化学反应过程，热传导过程、散热过程——之间的相互关系。

（2）在Thomas 系统中，当热传导过程比反应放热和向环境散热的过程快得多时，系统内的温度将趋于均匀化，或者说：在参数 ψ 为常值时，Thomas 系统 $\beta\rightarrow 0$ 的极限情况就是均温系统。

（3）在 Thomas 系统中，当散热过程比内部热传导和化学反应过程慢得多时，它将趋于绝热系统。即在参数 δ 为定值时，Thomas 系统 $\beta\rightarrow 0$ 的极限情况就是绝热系统。

（4）Thomas 系统 $\beta\rightarrow 0$ 的极限与Thomas 系统 $\beta=0$ 的情况并不完全等同。

（5）Thomas 系统 $\beta=0$ 情况是绝热系统，对于绝热系统不存在化学反应放热与系统向外散热的平衡与否的问题，因而不存在爆炸临界现象，也不存在爆炸临界状态和临界值。

笔者对章冠人研究员、孙和生研究员、王继海研究员的有益的讨论，致以谢意

参 考 文 献

[1] 秦承森：爆炸与冲击，6（2）（1986），108.
[2] Lermant, J-C., Yip, S., *Combust. Flame*, 57（1）（1984），41.
[3] 冯长根，爆炸与冲击，7（2）（1987），175.
[4] Boddington, T., 冯长根, Gray, P., *Proc. Roy. Soc. Lond.*, **A392**（1984），301.
[5] Smoller, J., Shock Waves and Reaction-Diffusion Equations（1980）.
[6] 北京大学，吉林大学，南京大学计算数学教研室编，计算方法，人民出版社（1961）.
[7] Boddington, T., 冯长根, Gray, P., *Proc. Roy. Soc. Lond.*, **A390**（1983），247.
[8] 冯长根，热爆炸理论，科学出版社（1988）.
[9] Boddington, T., 冯长根, Gray, P., *Proc. Roy. Soc. Lond.*, **A385**（1983），289.

DISCUSSIONS ON SOME PROBLEMS OF THERMAL EXPLOSION ——RESPONSE TO FENG CHANGGEN

Qin Chengsen
(Institute of Applied Physics and Computational Mathematics)