

# 用变分法估计热爆炸临界状态参数

秦承森 张同金

(应用物理与计算数学研究所,北京 10008)

**摘要** 本文利用作者给出的关于爆炸临界状态的变分原理,并用变分的直接方法,得到了六种不同形状(平板、无限长圆柱,球,无限长方形杆,有限长圆柱,正方体)系统的临界 F-K 参数和临界温度的近似公式,与精确的数值计算结果比较表明,对点火临界参数,本文公式均能给出较好的估计值。

**关键词** 热爆炸 临界参数 变分法

## 一、引言

当放热化学反应热产生速率超过了系统向环境散热损失速率时,反应系统将由于热量的迅速积累而发生爆炸。热爆炸理论研究的一个重要课题就是给出 F-K 参数  $\lambda$  的临界值  $\lambda_c$ ,当  $\lambda > \lambda_c$  时,系统将发生爆炸。

热爆炸理论的基本方程是带反应能源项的反应扩散方程。化学反应速率一般用 Arrhenius 反应率。由于能源项的强非线性,即使在忽略反应物消耗条件下,也很难求出方程的解析解。因此,以前的研究者集中研究了无限大平板,无限长圆柱,球形等一维系统,寻求反应项在各种近似条件下的解析解和临界特性<sup>[1-6]</sup>。一维系统的一个明显优点是稳态方程可以化为常微分方程。

对于几何形状更复杂的系统,有一些近似研究,例如:Wake 和 Walker 提出的等价球概念<sup>[7]</sup>,稍后,Wake 又提出了等价圆柱体的方法<sup>[8]</sup>,以及后来 Zaturka 的阶梯函数近似方法<sup>[9]</sup>。

对于非一维系统,可能存在着较复杂的边界条件。例如,不同的边界散热条件不同,边界温度也可不同。最近,这个方面的工作也有一些新的进展,其中有 Alder<sup>[10]</sup>,Herbert<sup>[11]</sup>,Greenway 和 Spence<sup>[12]</sup>,Alder 和 Nhamuro<sup>[13]</sup>,Zaturka 和 Banks<sup>[14,15]</sup>的工作。这些工作大都限于对反应项作指数近似或边界 Biot 数为无限大情况,对于反应项不作近似而 Biot 数为任意情况下,目前解析研究结果甚少。

很明显,对于非一维的反应系统又附加复杂的边界条件,只能采用不求解原方程,而直接寻求临界参数的方法。例如,使用 Liapanov 稳定性理论(B. F. Gray<sup>[16]</sup>),抛物方程的比较法(J. W. Bebernes and D. R. Kassoy<sup>[17]</sup>, A. A. Lacey<sup>[18]</sup>, 秦承森<sup>[19,20]</sup>),变分法(G. C. Wake<sup>[21]</sup>),但这些工作大都限于一维系统,在文献[22]中从热爆炸临界状态是定态方程解的分歧点出发,导出一个变分原理:热爆炸临界状态是某一确定泛函的极值曲线,临界

F-K 参数是该泛函的极值,转折点的 F-K 参数是该泛函一、二阶变分为零的值。本文应用文献[22]中的变分原理,采用变分的直接方法给出反应系统的临界 F-K 参数近似解析式。将所得到的近似公式应用于各种形状的反应系统,给出了无限大平板,无限长圆柱体,球体,有限长圆柱体,无限长方形杆,正方体等六种形状的临界 F-K 参数和临界温度近似公式,并与已有的计算结果相比较,一般误差在 3—6%,个别情况下,误差接近 10%。

## 二、热爆炸临界参数的变分特性

略去反应物的消耗,热爆炸定态方程可写为:

$$\begin{cases} \nabla^2 \theta + \lambda f(\theta) = 0 & (\bar{r} \in \Omega) \\ \frac{\partial \theta}{\partial n} + \beta \theta = 0 & (\bar{r} \in \partial\Omega) \end{cases} \quad (2.1)$$

其中  $f(\theta) = \exp[\theta/(1+\theta)]$  为 Arrhenius 反应项,  $\Omega$  为反应系统所占据的空间区域,  $\partial\Omega$  为其边界。无量纲温度  $\theta = E(T - T_0)/RT_0$ ; 无量纲活化能的倒数  $\varepsilon = RT_0/E$ ; Biot 数  $\beta = (\alpha/k)a$ ; F-K 参数  $\lambda = Q\alpha^2 E \exp(-E/RT_0)/(kRT_0^2)$ 。所使用的符号  $T$  为温度;  $T_0$  为参考温度;  $E$  为活化能;  $R$  为气体常数;  $\alpha$  为环境的导热系数;  $k$  为反应物的导热系数;  $Q$  为化学反应热;  $A$  为指前因子;  $a$  为系统的特征长度;  $\bar{r}$  为无量纲空间坐标;  $(\partial/\partial n)$  为边界法向导数。边界散热已取牛顿冷却定律,  $\beta > 0$  为常数。

我们定义泛函  $J[\varphi, \psi]$  为:

$$J[\varphi, \psi] = \frac{\int_{\Omega} \psi \nabla^2 \varphi dv}{\int_{\Omega} \psi f(\varphi) dv} \quad (2.2)$$

其中可取函数  $\varphi, \psi$  为在边界  $\partial\Omega$  上满足

$$\begin{cases} \frac{\partial \varphi}{\partial n} + \beta \varphi = 0 \\ \frac{\partial \psi}{\partial n} + \beta \psi = 0 \end{cases} \quad (2.3)$$

的任意函数。

在文献[22]中,已证明,泛函  $J[\varphi, \psi]$  的极值曲线为临界状态温度分布和分歧方程的解;点火条件满足  $\delta J = 0, \delta^2 J < 0$ , 点火临界系统的 F-K 参数(以下简称点火临界 F-K 参数)  $\lambda_i = J_{\min}$ ; 熄火临界条件满足  $\delta J = 0, \delta^2 J > 0$ , 熄火临界 F-K 参数  $\lambda_e = J_{\max}$ ; 转点条件,即系统既不可能出现爆炸临界状态又不可能出现点火临界状态的条件为:  $\delta J = 0, \delta^2 J = 0$ , 转点 F-K 参数  $\lambda_r$  为满足上述条件的泛函值  $J_r$ 。

## 三、用变分的直接方法求临界参数

我们可以利用文献[22]给出的变分原理,采用变分的直接方法求临界参数。

设  $\phi_1$  为特征值问题

$$\begin{cases} \nabla^2 \phi + \mu \phi = 0 & (\bar{r} \in \Omega) \\ \frac{\partial \phi}{\partial n} + \beta \phi = 0 & (\bar{r} \in \partial\Omega) \end{cases} \quad (3.1)$$

对应于最小特征值  $\mu_0$  的归一化了的特征函数, 我们可选取函数形式为

$$\begin{cases} \varphi = \theta_1 \Phi_1 \\ \psi = u_1 \Phi_1 \end{cases} \quad (3.2)$$

其中  $\theta_1, u_1$  为待定常数。将式(3.2)代入式(2.2), 使用式(3.1)和归一化条件  $\int_0 \Phi_1^2 dv = 1$ , 有

$$J(\theta_1, u_1) = \frac{\mu_0 u_1 \theta_1}{\int_0 u_1 \Phi_1 f(\theta_1 \Phi_1) dv} \quad (3.3)$$

按极值条件

$$\begin{cases} \frac{\partial J}{\partial \theta_1} = 0 \\ \frac{\partial J}{\partial u_1} = 0 \end{cases} \quad (3.4)$$

则式(3.4)第二式恒满足, 表明  $u_1$  可以取任意值, 不妨令  $u_1 = 1$ , 由式(3.4)第一式可得  $\theta_1$  满足

$$\int_0 \Phi_1 [\theta_1 \Phi_1 f'(\theta_1 \Phi_1) - f(\theta_1 \Phi_1)] dv = 0 \quad (3.5)$$

记  $\theta = \theta_1 \Phi_1$ ,  $F(\theta) \equiv \theta f'(\theta) - f(\theta)$ 。令  $\Phi_1$  的极大值为  $\Phi_m$ , 位于  $\vec{r} = \vec{r}_0$ , 即  $\Phi_1(\vec{r}_0) = \Phi_m$ , 若令  $\theta_m \equiv \theta_1 / \Phi_m$ , 则  $\theta = \theta_1 \Phi_1 = \theta_m \Phi_m \Phi_1 = \theta_m \Phi_1$ , 其中  $\theta_m = \theta_1 \Phi_m$ , 表示临界温度分布的最大值, 我们简称为临界温度。

在新的符号下, 式(3.5)可写为

$$\int_0 \theta [\theta f'(\theta) - f(\theta)] dv = 0 \quad (3.6)$$

我们由式(3.6)求  $\theta_m$  的近似表达式。将  $F(\theta)$  在  $\vec{r} = \vec{r}_0$  处展开, 并注意到在  $\vec{r} = \vec{r}_0$  处有  $\nabla \theta = 0$ , 则

$$F(\theta) = F(\theta_m) + \frac{1}{2} F''(\theta_m) \Delta \vec{r}' \cdot \left( \frac{\partial^2 \theta}{\partial r^2} \right)_0 \cdot \Delta \vec{r} + \dots \quad (3.7)$$

其中  $\Delta \vec{r}' = \vec{r} - \vec{r}_0$  为行向量,  $\Delta \vec{r}$  为列向量,  $(\frac{\partial^2 \theta}{\partial r^2})_0$  为二阶张量, 其元素为  $\{\partial^2 \theta / \partial x_i \partial x_j\}$ , 将式(3.7)代入式(3.6)有

$$F(\theta_m) + \theta_m F''(\theta_m) \omega = 0 \quad (3.8)$$

其中:

$$\omega = \frac{1}{2} \frac{\int_0 \Phi_1 \Delta \vec{r}' \cdot \left( \frac{\partial^2 \theta}{\partial r^2} \right)_0 \cdot \Delta \vec{r} dv}{\int_0 \Phi_1 dv} \quad (3.9)$$

一般情况下,  $\omega$  为小量, 可求出  $\theta_m$  为

$$\theta_m = \theta_{0m} (1 - \omega) \quad (3.10)$$

其中  $\theta_{0m}$  为方程

$$\theta_{0m} f'(\theta_{0m}) - f(\theta_{0m}) = 0 \quad (3.11)$$

的解

利用式(3.6),式(3.3)可化为

$$\lambda_c = J(\theta_m) = \frac{\mu_0}{\int_0^{\theta_m} \phi_1^2 f^*(\theta) d\theta} \quad (3.12)$$

此即为临界 F-K 值的一般表达式。在点火条件下,  $\lambda_c = \lambda_i$ ; 在熄火条件下,  $\lambda_c = \lambda_v$ 。在式(3.12)中,进一步做近似,取  $\theta \approx \theta_{0m}$ , 则临界 F-K 参数的近似表达式为

$$\lambda_c = \frac{\mu_0}{f^*(\theta_{0m})} \quad (3.13)$$

式(3.10)~式(3.13)即为临界参数的一般近似表达式。只要由式(3.1)式计算出  $\mu_0$ ; 由式(3.11)和式(3.9)给出  $\theta_{0m}$ ;  $\omega$  则可求出  $\theta_m, \lambda_c$ 。这样,使用变分原理,就使求临界参数的问题简化为一个求特征值的问题。

#### 四、应用举例

对于无限大平板,无限长圆柱,球体,有限长圆柱体,无限长方形杆,正方体,这六种形状的化学反应系统,均可使用分离变量法<sup>[23]</sup>,给出方程(3.1)的特征值  $\mu_0$  和特征函数  $\phi_1$ ,从而使用上节公式给出其临界参数  $\theta_m, \lambda_c$  的表达式,结果如下

$$\begin{aligned} \theta_{0m}^{\pm} &= (1 - 2\varepsilon \mp \sqrt{1 - 4\varepsilon})/2\varepsilon^2 \\ \theta_m^{\pm} &= \theta_{0m}^{\pm} (1 - \omega) \\ \lambda_c^{\pm} &= \mu_0/f^*(\theta_{0m}^{\pm}) = \mu_0 \left[ \frac{1 - 2\varepsilon \mp \sqrt{1 - 4\varepsilon}}{2\varepsilon^2} \right] \exp \left[ \frac{\pm \sqrt{1 - 4\varepsilon} - 1}{2\varepsilon} \right] \end{aligned} \quad (4.1)$$

其中“+”表示点火值,“-”表示熄火值。 $\lambda^+ = \lambda_i, \lambda^- = \lambda_v$ 。对不同形状系统  $\mu_0, \omega$  表达式也不同:

无限大平板:

$$\begin{aligned} \beta \text{ctg} \sqrt{\mu_0} &= \sqrt{\mu_0} \\ \omega &= -\frac{1}{2} \left[ \left(1 + \frac{2}{\beta}\right) \mu_0 - 2 \right] \end{aligned}$$

无限长圆柱体:

$$\begin{aligned} \beta \frac{J_0(\sqrt{\mu_0})}{J_1(\sqrt{\mu_0})} &= \sqrt{\mu_0} \\ \omega &= -\frac{1}{2} \left[ \frac{1}{2} \left(1 + \frac{2}{\beta}\right) \mu_0 - 2 \right] \end{aligned}$$

其中  $J_0, J_1$  分别为零阶,一阶贝塞尔函数。

球体:

$$\begin{aligned} (\beta - 1) \text{tg} \sqrt{\mu_0} &= -\sqrt{\mu_0} \\ \omega &= -\frac{1}{2} \left[ \frac{1}{3} \left(1 + \frac{2}{\beta}\right) \mu_0 - 2 \right] \end{aligned}$$

半径为  $R$ , 高为  $2R$  的圆柱体:

$$\frac{\beta J_0(\sqrt{\mu_1})}{J_1(\sqrt{\mu_1})} = \sqrt{\mu_1}; \quad \beta \text{ctg} \sqrt{\mu_2} = \sqrt{\mu_2}$$

$$\mu_0 = \mu_1 + \mu_2$$

$$\omega = -\frac{1}{2} \left[ \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{2}{\beta} \right) \mu_1 + \left( 1 + \frac{2}{\beta} \right) \mu_2 - 4 \right]$$

无限长方形杆:

$$\beta \text{ctg} \sqrt{\mu} = \sqrt{\mu} \quad \mu_0 = 2\mu$$

$$\omega = - \left[ \left( 1 + \frac{2}{\beta} \right) \mu - 2 \right]$$

正方体:

$$\beta \text{ctg} \sqrt{\mu} = \sqrt{\mu} \quad \mu_0 = 3\mu$$

$$\omega = -\frac{3}{2} \left[ \left( 1 + \frac{2}{\beta} \right) \mu - 2 \right]$$

用上述公式计算的点火临界参数  $\theta_i(\varepsilon, \beta)$ ,  $\lambda_i(\varepsilon, \beta)$  值见下表

表 1 临界参数近似值与数值计算准确值 ( $\varepsilon=0, \beta \rightarrow \infty$ )

Table 1 The approximate values and the exact numerical computational values for the critical parameters ( $\varepsilon=0, \beta \rightarrow \infty$ )

		无限大 平板	无限长 圆柱	球	圆柱 ( $h=2R$ )	正方体	无限长 方形杆
$\lambda^+$	文献[24,25,26]	0.8783	2.003	3.324	2.77	2.52	1.70
	本文公式	0.9077	2.128	3.631	3.04	2.72	1.81
$\theta^+$	文献[24]	1.187	1.386	1.607			
	本文公式	1.236	1.449	1.648	1.684	1.708	1.472

表 2  $\varepsilon=0.05$  时, 近似公式计算值与精确数值计算结果的比较

Table 2 The comparison between the approximate values of  $\lambda^+, \theta^+$  and the corresponding exact numerical results provided  $\varepsilon=0.05$

		$\beta$	0.1	1	10	100	1000
平 板	$\lambda^+$	文献[24]	0.03752	0.2855	0.7703	0.9101	0.9265
		本文公式	0.03753	0.2870	0.7918	0.9380	0.9567
	$\theta^+$	文献[24]	1.132	1.233	1.325	1.329	1.329
		本文公式	1.133	1.237	1.365	1.375	1.378
柱	$\lambda^+$	文献[24]	0.0957	0.6075	1.751	2.077	2.114
		本文公式	0.0957	0.6116	1.842	2.198	2.243
	$\theta^+$	文献[24]	1.142	1.326	1.550	1.561	1.561
		本文公式	1.142	1.318	1.588	1.611	1.615

表 2 (续)

球	$\lambda_c^+$	文献[24]	0.1141	0.9506	2.906	3.457	3.520
		本文公式	1.1141	0.9569	3.120	3.752	3.827
	$\theta_c^+$	文献[24]	1.148	1.400	1.800	1.820	1.820
		本文公式	1.147	1.375	1.793	1.833	1.837

从表中可以看出,本文公式对六种形状系统的临界参数  $\lambda_c^+$ ,  $\theta_c^+$  的估计值都有一定的准确度。在  $\beta$  值较小时,近似公式的精度较高,当  $\beta \leq 1$  时,  $\lambda_c^+$  误差小于 1%,  $\theta_c^+$  误差小于 2%; 当  $\beta \rightarrow \infty$  时误差最大。公式在  $\epsilon$  趋于  $\epsilon_0$  过程中,误差逐渐减小,在  $\epsilon = 0$  时,误差达到最大。公式对各种不同形状,准确度也不同,例如,  $\beta \rightarrow \infty, \epsilon = 0$ , 误差最大,对平板,  $\lambda_c^+$  相对误差为  $\Delta\lambda_c^+/\lambda_c^+ \approx 3.4\%$ ,  $\Delta\theta_c^+/\theta_c^+ \approx 4.1\%$ ; 对柱,  $\Delta\lambda_c^+/\lambda_c^+$  误差约为  $6.2\%$ ,  $\Delta\theta_c^+/\theta_c^+ \approx 4.1\%$ ; 对球形,  $\Delta\lambda_c^+/\lambda_c^+ \approx 9.2\%$ ,  $\Delta\theta_c^+/\theta_c^+ = 2.6\%$ 。六种形状系统的临界参数曲线绘于图 1~图 6。

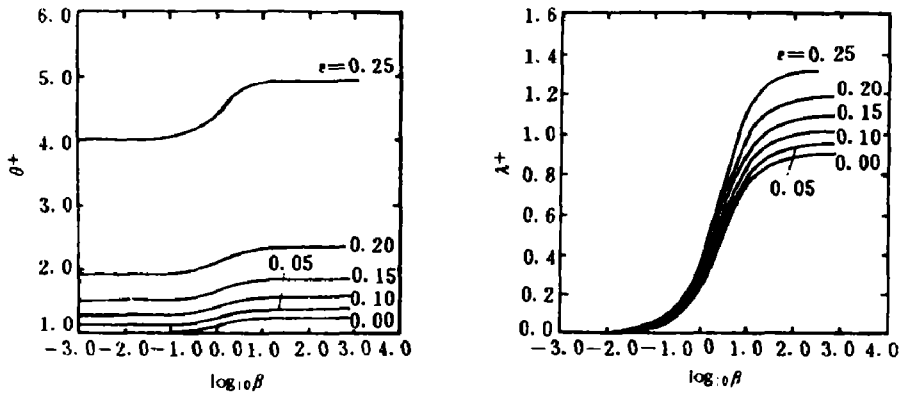


图 1 无限大平板系统参数  $\theta^+ - \log_{10} \beta$  和  $\lambda^+ - \log_{10} \beta$  曲线

Fig. 1 Parameters  $\theta^+$  and  $\lambda^+$  versus  $\log_{10} \beta$  for the slab

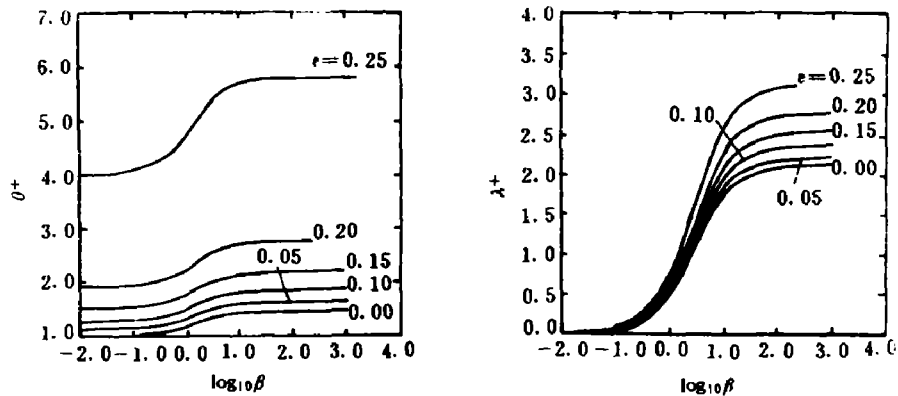


图 2 无限长圆柱系统参数  $\theta^+ - \log_{10} \beta$  和  $\lambda^+ - \log_{10} \beta$  曲线

Fig. 2 Parameters  $\theta^+$  and  $\lambda^+$  versus  $\log_{10} \beta$  for the infinitely long circular cylinder

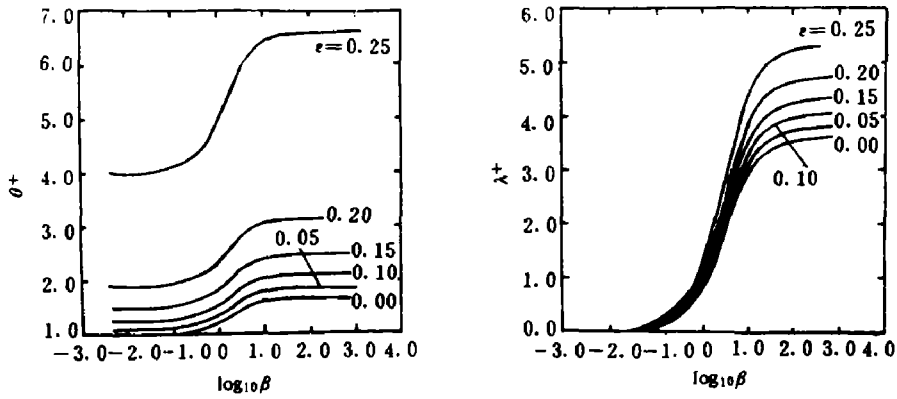


图3 球形系统参数  $\theta^+$ — $\log_{10} \beta$  和  $\lambda^+$ — $\log_{10} \beta$  曲线

Fig. 3 Parameters  $\theta^+$  and  $\lambda^+$  versus  $\log_{10} \beta$  for the sphere

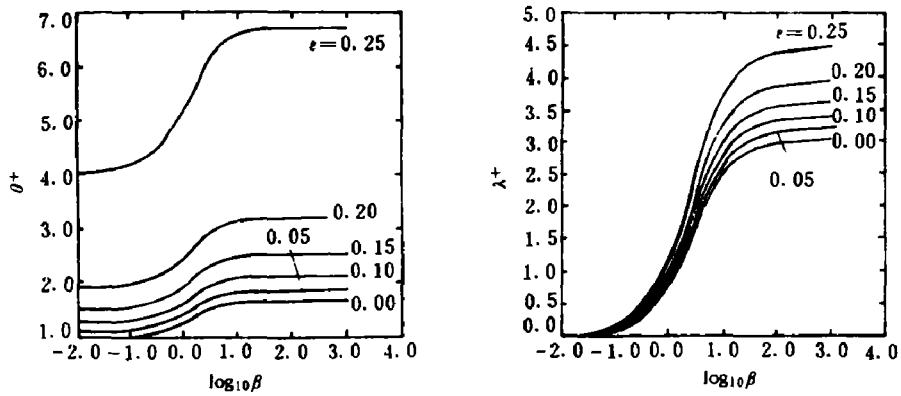


图4 圆柱( $H=2R$ )系统参数  $\theta^+$ — $\log_{10} \beta$  和  $\lambda^+$ — $\log_{10} \beta$  曲线

Fig. 4 Parameters  $\theta^+$  and  $\lambda^+$  versus  $\log_{10} \beta$  for the equicylinder

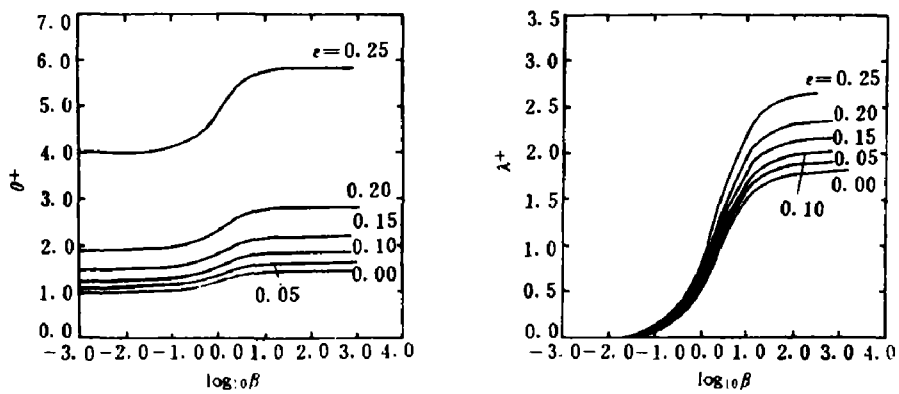
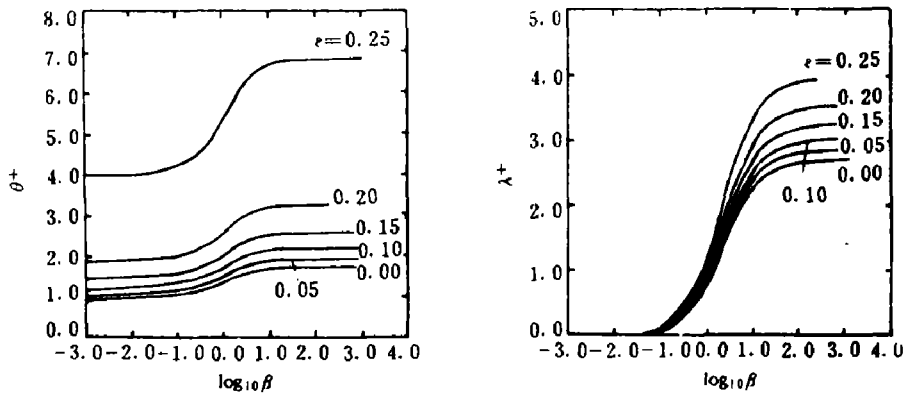


图5 无限长方形杆系统参数  $\theta^+$ — $\log_{10} \beta$  和  $\lambda^+$ — $\log_{10} \beta$  曲线

Fig. 5 Parameters  $\theta^+$  and  $\lambda^+$  versus  $\log_{10} \beta$  for the infinite square rod

图6 正方体系统参数  $\theta^+ - \log_{10}\beta$  和  $\lambda^+ - \log_{10}\beta$  曲线Fig. 6 Parameters  $\theta^+$  and  $\lambda^+$  versus  $\log_{10}\beta$  for the cube

## 六、结束语

利用热爆炸临界状态的变分特性,即使在较粗糙的近似条件下得到的近似公式,仍然能给出较好的临界 F-K 参数的估计值,这是由临界状态 F-K 参数是泛函  $J$  的极值特性所决定的。采用变分的直接方法,也可以选取其他形式的试验函数和足够多的项,以改善准确度。使用本文给出的变分原理也可以进行精确的数值计算以给出临界特征参数的准确值。

对于不同的边界上具有不同散热条件下的热爆炸临界特性,使用本文的方法,原则上也可以处理。对于其他形状,如椭球,截面为椭圆的有限长柱体,只要取合适的坐标系,也可以给出热爆炸临界参数的估计。

## 参 考 文 献

- [1] Frank-Kamenetskii K A. Diffusion and heat transfer in chemical kinetics. 2nd Ed. New York, Plenum Press, 1969.
- [2] Bazley N W, Wake G C. Combust Flame, 1978, 33: 161
- [3] Takeno T. Combust Flame. 1977, 29: 209
- [4] Gill W, Donaldson A B, Shouman A R. Combust Flame. 1979, 36: 217
- [5] Chou D P, Yip S. Combust Flame, 1984, 58: 239
- [6] Boddington T, Feng Chang-Gen, Gray P. Proc Roy Soc Lond, 1984, A 392: 301
- [7] Wake G C, Walker I K. N Z J Sci, 1961, 7: 227
- [8] Wake G C. Combust Flame, 1971, 17: 171
- [9] Zaturka M B. Combust Sci Technol, 1980, 23: 231
- [10] Alder J. Combust Flame, 1983, 50: 1
- [11] Herbert D M. Q J Mech Appl Math, 1986, 39: 197
- [12] Greenway P, Spence A. Combust Flame, 1985, 62: 141
- [13] Alder J, Nhamburo P T. IMA J Appl Math, 1985, 35: 265.
- [14] Zaturka M B, Banks W H H. Z Angew Math Phys, 1986, 37: 910
- [15] Zaturka M B, Banks W H H. Combust Flame, 1990, 79: 220
- [16] Gray B F, Sherrington M E. Combust Flame, 1972, 19: 435
- [17] Bebernes J W, Kassoy D R. SIAM J Appl Math, 1981, 40(3): 476
- [18] Lacey A A. SIAM J Appl Math, 1983, 42: 1350



- [19] 秦承森, 爆炸与冲击, 1986, 6(2), 108  
[20] Qin Cheng-Sen. Int Symp on Pyrotechnics and Explosives, Beijing China. 1987, 616  
[21] Wake G C. Combust Flame, 1973, 21: 119  
[22] 秦承森. 爆炸与冲击, 1991, 11(3), 217  
[23] Courant R, Hilbert D. Methods of Mathematical Physics. New York, 1953.  
[24] Bodington T, Feng Chang-Gen, Gray P. Proc Roy Soc Lond, 1984, A 392: 301  
[25] Winters K H, Cliffe K A. Combust Flame, 1985, 62: 12  
[26] Bodington T, Gray P, Harvey D I. Combust Flame, 1977, 17: 263

## THERMAL EXPLOSION CRITICAL STATE PARAMETERS ESTIMATED WITH VARIATIONAL METHOD

Qin Chengsen Zhang Tongjin

(*Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088*)

**ABSTRACT** In this paper, adopting variational method, we get the approximate formulae of the F-K critical parameters and critical temperature for the infinite slab, long circular cylindrical, spherical, equicylindrical, infinite square rod and the cubic explosive. Comparing our results with those of exact numerical computation, we find out that our formulae gives good estimations for the ignition critical parameters.

**KEY WORDS** thermal explosion, critical parameter, variational method