

长方体的热爆炸临界参数估计

秦承森 张同金

(应用物理与计算数学研究所 北京 100088)

摘要 本文给出了各侧面散热条件不同情况下的长方体反应系统临界 F-K 点火参数估计公式,并用已有的研究结果做了比较,表明该公式给出了较好的临界参数估计值。

关键词 热爆炸 临界参数 长方体

一、引言

在反应放热系统中,能量释放与消散速率的不平衡可能导致热爆炸。热爆炸现象是由扩散方程描述的,一般化学反应能源项取 Arrhenius 反应律。热爆炸理论的一个重要课题就是给出爆炸临界 F-K 参数 λ_c ,当系统 $\lambda > \lambda_c$ 时,系统将发生爆炸。

以前的许多研究大都集中于一维反应系统——无限大平板、无限长圆柱、球体、具有牛顿冷却定律的边界条件。对于形状更加复杂的反应系统和具有较复杂的边界条件的反应系统,最近有些较深入的研究。Adler^[1], Herbert^[2], Greenway 和 Spence^[3]研究了部分边界绝热的平板问题。Alder 和 Nhamburo^[4], Zaturka 和 Banks^[5]研究了边界温度变化的平板问题。对于具有复杂边界条件的非一维反应系统, Zaturka 和 Banks^[6]在对 Arrhenius 项做指数近似的条件下,研究了无限长方形杆,半圆形无限长柱体等形状的反应系统处于常温环境,而局部边界是绝热的情况,给出了临界 F-K 参数的上下限估计。本文将文献[7,8]使用变分原理给出的临界参数近似公式,应用于长方体,给出六个边界面具有不同的散热条件(即 Biot 数不同)下的临界 F-K 参数公式。该公式在一对表面绝热时,或者该表面间距趋于无限大时,自然化为无限长方形杆的公式,进一步令另一对表面绝热或间距为无限大,则转化为无限大平板公式。使用该公式于正方体,无限长方形杆,无限大平板,与以前的研究结果相比,临界 F-K 参数近似公式给出了较好的 λ_c 估计。

二、热爆炸临界 F-K 参数的一般表达式

略去反应物的消耗,定态热爆炸方程可写为

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

其中, $f(\theta) = \exp[\theta/(1+\epsilon\theta)]$ 为 Arrhenius 反应项, Ω 为反应系统占据的空间区域, $\partial \Omega$ 为其边界, θ 为无量纲温度 $\theta = E(T - T_0)/RT_0$; 参数 $\epsilon = RT_0/E$; 第 j 个边界上的 Biot 数 $\beta_j = \frac{\alpha_j a_j}{k}$;

F-K 参数 $\lambda = Q A a^2 \text{Exp}(-E/RT_0)/(kRT_0^2)$ 。所使用的符号意义为: T : 温度; T_0 : 参考温度; E : 活化能; R_0 : 气体常数; α_j : 第 j 个界面处环境导热系数; Q : 化学反应热; A : 指前因子; a : 系统的特征长度; \bar{r} : 无量纲空间坐标; $\partial/\partial n$: 边界法向导数。边界散热已取牛顿冷却定律, $\beta_j > 0$, 为常数。

在文献[8]中, 我们给出了热爆炸临界 F-K 参数的表达式为

$$\lambda_c = \mu_0 / f'(\theta_{0m}) \quad (2.2)$$

其中

$$f' = df/d\theta, \quad \theta_{0m} = (1 - 2\epsilon - \sqrt{1 - 4\epsilon})/2\epsilon^2$$

将上式代入(2.2)有

$$\lambda_c = \frac{1 - 2\epsilon - \sqrt{1 - 4\epsilon}}{2\epsilon^2} \mu_0 \exp\left(\frac{\sqrt{1 - 4\epsilon} - 1}{2\epsilon}\right) \quad (2.3)$$

μ_0 为特征值问题

$$\begin{cases} \nabla^2 \Phi + \mu \Phi = 0 & (\bar{r} \in \Omega) \\ \frac{\partial \Phi}{\partial n} + \beta \Phi = 0 & (\bar{r} \in \partial\Omega) \end{cases} \quad (2.4)$$

的最小特征值。因此, 只要给出式(2.4)的特征值 μ_0 , 则系统的临界 F-K 参数 λ_c 就可以得到。

三、长方体系统的特征值 μ 及临界 F-K 参数公式

设长方体的三个方向长度分别为 $2a_1, 2a_2, 2a_3$, 使用分离变量法, 可以将方程(2.4)分成三个方程。

$$\begin{cases} \frac{d^2 \Phi_i}{dx_i^2} + \mu_i \Phi_i = 0 & (x_i \in \Omega) \\ \frac{d\Phi_i}{dx_i} + \beta_i \Phi_i = 0 & (x_i \in \partial\Omega) \end{cases} \quad (3.1)$$

其中

$$\mu_0 = \left(\frac{\mu_1}{a_1^2} + \frac{\mu_2}{a_2^2} + \frac{\mu_3}{a_3^2}\right) a^2 \quad (3.2)$$

$$\beta_i = \alpha_i a_i / k \quad (i = 1, 2, 3) \quad (3.3)$$

并且, 式(2.4)中空间坐标是以 a 无量纲化, 转化为式(3.1)时, 则以 a_i 无量纲化。式(3.1)的特征值问题是一维平板问题, 我们首先给出无限大平板两侧散热条件不同的临界 F-K 参数公式。下面, 我们略去表示不同方向的下标“ i ”, 将式(3.1)写为

$$\begin{cases} \frac{d^2 \Phi}{dx^2} + \mu \Phi = 0 & x \in [-1, +1] \\ \frac{d\Phi}{dx} + \beta^+ \Phi = 0 & x = 1 \\ -\frac{d\Phi}{dx} + \beta^- \Phi = 0 & x = -1 \end{cases} \quad (3.4)$$

坐标选为板的中点, β^+, β^- 分别为两个边界上的 Biot 数。方程(3.4)的解可写为

$$\Phi = A \cos[\sqrt{\mu}(x - x_0)] \quad (3.5)$$

其中 A, x_0 为常数。由边界条件可得 x_0, μ 应满足方程

$$\frac{\operatorname{tg}[\sqrt{\mu}(1 + x_0)]}{\operatorname{tg}[\sqrt{\mu}(1 - x_0)]} = -\frac{\beta^-}{\beta^+} \quad (3.6)$$

$$\sqrt{\mu} = \beta^+ \operatorname{ctg}[\sqrt{\mu}(1 - x_0)] \quad (3.7)$$

或

$$\sqrt{\mu} = \beta^- \operatorname{ctg}[\sqrt{\mu}(1 + x_0)] \quad (3.8)$$

将上式所得的最小 μ 值代替式(2.2)中 μ_0 , 即得无限大平板的临界 F-K 参数。我们做如下简短的讨论:

a) 当 $\beta^- = \beta^+ = \beta$ 时, $x_0 = 0, \mu_0$ 满足 $\sqrt{\mu_0} = \beta \operatorname{ctg} \sqrt{\mu_0}$ 这恰好是文献[8]的结果, 在 $0 \leq \beta < \infty$ 范围内, 近似公式的计算值与准确的数值计算结果相比, 误差小于 3.4%。

b) 当 $\beta^- = \beta^+ \rightarrow \infty$ 时, $x_0 = 0, \mu = \pi^2/4$, 则 $\lambda_1 = 0.9077$, 而精确值 $\lambda_1 = 0.8785^{[9]}$ 。

c) 当 $\beta^- = 0$, (或 $\beta^+ = 0$) 时, $x_0 = -1$ (或 $x_0 = 1$), 有 $\sqrt{\mu_0} = \beta^+ \operatorname{ctg} 2\sqrt{\mu_0}$ [或 $\sqrt{\mu_0} = \beta^- \operatorname{ctg}(2\sqrt{\mu_0})$]。

d) 当 $\beta^- = 0, \beta^+ \rightarrow \infty$ 时, $x_0 = -1, \mu_0 = \pi^2/16$, 临界 F-K 参数近似值 $\lambda_1 = 0.2269$, 恰好是文献[6]估计值的上限。

我们现在研究长方体的临界 F-K 参数 λ_1 与宽度为 $2a_i$ 的无限大平板的临界 F-K 参数 λ_{0i} 的关系。

由式(2.2)及式(3.2), 有

$$\lambda_1 = \frac{1}{f'(\theta_{0m})} \left[\frac{\mu_1}{a_1^2} + \frac{\mu_2}{a_2^2} + \frac{\mu_3}{a_3^2} \right] a^2$$

而 $\lambda_{0i} = \mu_i / f'(\theta_{0m})$, 故有

$$\lambda_1 = \eta_1 \lambda_{01} + \eta_2 \lambda_{02} + \eta_3 \lambda_{03} \quad (3.9)$$

其中

$$\eta_1 = \left(\frac{a}{a_1}\right)^2, \eta_2 = \left(\frac{a}{a_2}\right)^2, \eta_3 = \left(\frac{a}{a_3}\right)^2$$

a 为坐标无量纲化时, 选取的系统特征长度, 在此选取 a_1, a_2, a_3 三个长度中最短的一个。式(3.9)即为长方体的 λ_1 公式。当有一对表面间距(例如 $2a_3$)无限大时, 或者该对表面是绝热的, 即 $\beta_3^+ = \beta_3^- = 0$, 因而 $\mu_3 = 0$, 此时, 长方体转为无限长方形杆, 式(3.9)自然化为

$$\lambda_1 = \eta_1 \lambda_{01} + \eta_2 \lambda_{02} \quad (3.10)$$

此即为无限长方形杆的临界 F-K 参数公式。进一步, 再令 $a_2 \rightarrow \infty$, 或该方向上的一对表面是绝热的, 则式(3.9)自然转化为无限大平板 λ_1 公式。

对于公式(3.9), (3.10)我们做如下简要讨论。

a) 对于正方体, 各表面 $\beta \rightarrow \infty, e = 0$ 的情况, 式(3.9)给出 $\lambda_1 = 2.72$, 而准确值^[9]为 $\lambda = 2.52$ 。

b) 在无限长方形杆中, $\beta_1 \rightarrow \infty, \beta_2 \rightarrow \infty, e = 0$ 时, 由式(3.10)得到的 λ_1 近似值为 1.815, 而精确值 $\lambda_1 = 1.703^{[7]}$ 。

c)在无限长方形柱中有一对相邻表面绝热情况,式(3.10)给出 $\lambda_c = 0.4534$,而精确值 $\lambda_c = 0.426^{[7]}$ 。

d)使用表达式(3.9),我们立即可以得出一个长方体的反应器(例如炸药)处理为无限大平板的近似条件。为了简单起见,我们假设 $\beta_1 = \beta$,即各个表面具有完全相同的散热条件,于是 $\mu_1 = \mu_2 = \mu_3$,设 $2a_1$ 为最短的边长,则式(3.9)可写为

$$\lambda_c = \lambda_0(1 + \eta_2 + \eta_3) \quad (3.11)$$

其中 $\lambda_0 = \mu_1/f(\theta_{0m})$ 是半厚度为 a_1 的无限大平板临界 F-K 参数。

式(3.11)表明,当长方体的长($2a_2$)和宽($2a_3$)是厚度($2a_1$)的 7 倍时,可以处理成厚度为 $2a_1$ 的无限大平板,其临界 F-K 参数误差约为 -4% 。当长方体的两边相差不多,例如 $a_1 \approx a_2$,而第三边较长($a_3 > a_1, a_3 > a_2$),则由式(3.11)可知,当 $a_3 \approx 3.3a_1 \approx 3.3a_2$,将此长方体处理为无限长方形杆时,其临界 F-K 参数的误差为 -5% 。

因此,在临界 F-K 参数的允许误差为 5% 条件下,当长方体最小边长小于其它边长的 $1/7$ 时,可以将其近似为无限大平板,当其最大边是其余边的 3.3 倍,且其余两边相等时,可将其近似处理为无限长方形杆。当长方体各面的散热条件不同时,由式(3.9)亦可得出相应的近似条件,但与 μ_i 的比值有关。

对于 β 值不同, ϵ 不同下的 λ_c 公式(3.9), (3.10)计算结果,绘于图 1—图 5 中。

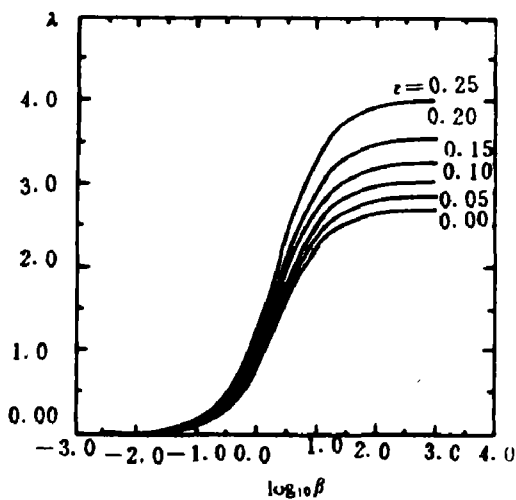


图 1 无绝热表面的立方体点火参数 $\lambda \sim \log_{10} \beta$ 曲线

Fig. 1 Ignition parameter λ versus $\log_{10} \beta$ for the cube without adiabatic surfaces

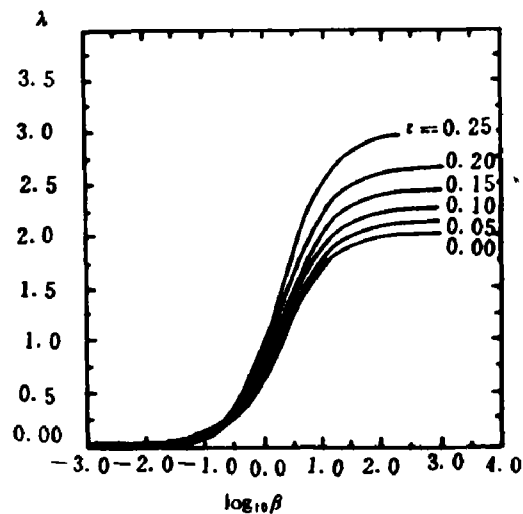


图 2 仅有一个绝热表面的立方体点火参数 $\lambda \sim \log_{10} \beta$ 曲线

Fig. 2 Ignition parameter λ versus $\log_{10} \beta$ for the cube with one adiabatic surface

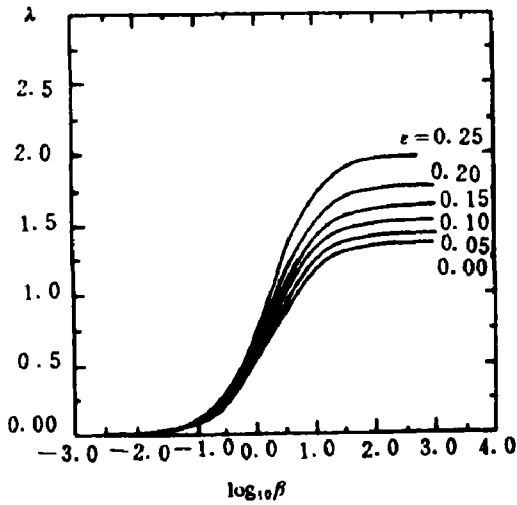


图 3 具有两个相邻绝热表面的立方体点火参数 $\lambda \sim \log_{10}\beta$ 曲线

Fig. 3 Ignition parameter λ versus $\log_{10}\beta$ for the cube with two adjacent adiabatic surfaces

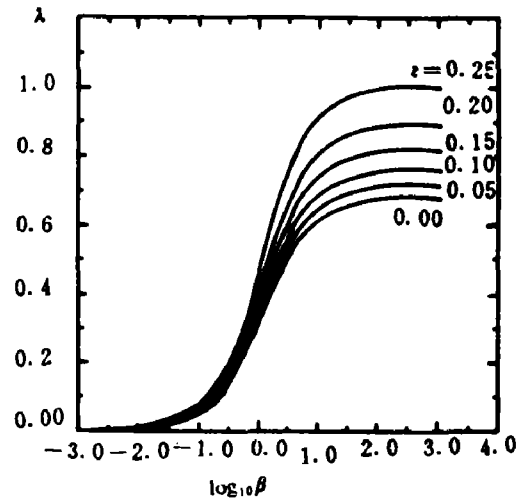


图 4 具有三个相邻绝热表面的立方体点火参数 $\lambda \sim \log_{10}\beta$ 曲线

Fig. 4 Ignition parameter λ versus $\log_{10}\beta$ for the cube with three adjacent adiabatic surfaces

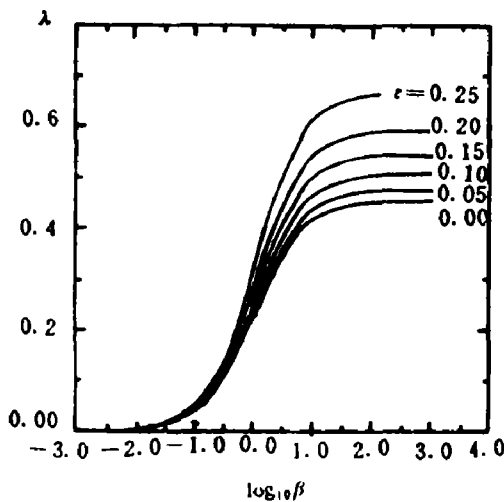


图 5 仅两个相邻表面与外界有热损失的立方体点火参数 $\lambda \sim \log_{10}\beta$ 曲线

Fig. 5 Ignition parameter λ versus $\log_{10}\beta$ for the cube with only two adjacent adiabatic surfaces

四、结 论

通过对长方体临界 F-K 参数的研究,我们得到了一般可变边界条件下的 F-K 参数近似公式,并且与准确值符合较好。由于公式中 ϵ, β 均可变,因此适用范围较广。公式(3.9)也给出了三个方向上宽度变化因素对 λ 的影响,在某一个或两个宽度趋于无限大时,它自然转化为无限长方形杆或无限大平板的公式,因此,式(3.9)实际上是这三种形状的临界 F-K 参数公式的表达式。

对于其它较复杂的几何形状,只要能用分离变量法给出特征值问题式(2.4)的最小特征值,则使用公式(2.2)即可给出临界 F-K 参数的近似表达式。

参 考 文 献

- [1] Adler J. *Combustion & Flame* 1983, 50, 1
- [2] Herbert D M, Q J *Mech. Appl Math*, 1986, 39, 197
- [3] Greenway D, Spence A. *Combust & Flame* 1985, 62, 141
- [4] Adler J, Nhamburo P T. *IMA J Appl Math* 1985, 35, 265
- [5] Zatorska M B, Banks W H H. *Z Angew Math Phys*, 1986, 37, 910
- [6] Zatorska M B, Banks W H H. *Combustion & Flame* 1990, 79, 220
- [7] 秦承森. *爆炸与冲击*, 1991, 11(3), 217—223
- [8] 秦承森, 张同金. *爆炸与冲击*, 1992, 12(2), 106—114
- [9] Bodington T, Gray P, Harvey D I. *Combust & Flame* 1991, 17, 263

CRITICAL PARAMETER ESTIMATIONS OF THE REGULAR HEXAHEDRON FOR THERMAL EXPLOSION

Qin Chengsen Zhang Tongjin

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

ABSTRACT This paper presents the critical parameter formula for the regular hexahedron with several different boundary conditions. Our formula naturally reduces to that of the infinite square rod when a couple of opposite surfaces are adiabatic. Further more, the formula will reduce to that of the slab when two couples of the opposite surfaces are adiabatic. Applying the formula to the cube, the infinite square rod, the slab, we get the better estimations of the critical F-K parameter λ than before.

KEY WORDS thermal explosion, critical parameter, regular hexahedron