第2卷 第4期
1994年12月

含 能 材 料
ENERGETIC MATERIALS

Vol. 2, No. 4
December, 1994

# 圆柱形药柱热爆炸临界参数的估算

秦承森
(北京应用物理与计算数学研究所)

**摘要** 本文应用变分原理给出了有限长圆柱体热爆炸临界参数的解析近似公式，并与数值解做了比较，经改进后，该公式给出了较好的临界参数估计值，误差约为1%。

**关键词** 炸药 热爆炸 临界参数

## 1 引 言

当含能材料的反应自热系统的能量积累速率超过散热速率时，系统温度将上升；当能量积累速率增长比热散失速率的增长快时，系统温度的上升速率将加快，出现热点火或热爆炸。

对一维系统(无限大平板、无限长圆柱、球形)的热爆炸研究比较深入，也有较多的解析分析结果。这是因为一维热爆炸方程是常微分方程，易于做近似处理。但是对二维形状的反应系统，热爆炸理论研究的工作还做得很少。1940年，Harris 用加权平均的方法估计了球帽圆柱的热爆炸临界 F-K 值；1961年，Wake 和 Walker 用等当量球方法，给出了等高圆柱，八面棱柱和正方体的热爆炸临界值；1972年，Hardee 等使用假设的温度分布，估计了正方体、圆柱和圆锥的热爆炸临界 F-K 值；1980年，Zaturska 提出阶梯函数反应速率近似法估计了无限长方形杆、圆柱和长方体的热爆炸临界参数。

上面的研究大多是处于常温环境的系统。近十年对于较复杂的边界条件，开展了研究，并有些进展，这方面的工作有 Wake[1]，Alder[2]，Herbert[3]，Greenway 和 Spence[4]，Zaturska 和 Banks[5]等人的工作，这些工作大多限于指数近似，或者常温边界与绝热边界混合情况。

实际工作中，最常见的有限长圆柱反应系统各个侧面的热散失条件十分不同，而热化学反应的活化能也不是十分大，不能使用指数近似。这种最具实用价值的情况，分析难度大，尚无解析研究结果。最近杜霞[6]对这种系统做了数值分析，并给出了计算结果。本文应用热爆炸的变分原理给出了 F-K 临界参数 $\lambda_c$和临界温度 $\theta_c$ 的解析公式，与杜霞的数值结果比较表明，近似公式的误差小于9%，作拟合修正后，可以给出误差约1%的近似公式。

## 2 热爆炸临界状态的变分原理

略去反应物的消耗，热爆炸定态方程可写为：

1994年10月14日收稿

$$\begin{cases} \bar{\nabla}^2\theta + \lambda f(\theta) = 0 & (\vec{r} \in \Omega) \\ \dfrac{\partial\theta}{\partial n} + \beta\theta = 0 & (\vec{r} \in \partial\Omega) \end{cases} \tag{1}$$

式中：无量纲温度 $\theta=E(T-T_0)/RT_0^2$，$T$ 为温度，$T_0$ 为参考温度，$E$ 为活化能，R 为气体常数；$f(\theta)=\exp[\theta/(1+\varepsilon\theta)]$为 Arrhenius 反应项，无量纲活化能的倒数 $\varepsilon=RT_0/E$；F-K 参数 $\lambda=QAa^2E\exp(-E/RT_0)/(kRT_0^2)$，$Q$ 为化学反应热，$A$ 为指前因子，$a$ 为系统特征长度，$k$ 为反应物的导热系数；Biot 数 $\beta=(\alpha/k)a$，$\alpha$ 为环境导热系数；$\Omega$ 为反应系统所占据的空间区域，$\partial\Omega$ 为其边界；$\vec{r}$ 为无量纲空间坐标；$\partial/\partial n$ 为边界法向导数，边界散热遵循牛顿冷却定律；$\beta>0$，对于不同的散热面取不同的值。

定义泛函

$$J[\varphi,\psi] = \frac{\int_\Omega \psi\bar{\nabla}^2\varphi \mathrm{d}v}{\int_\Omega \psi f(\varphi)\mathrm{d}v} \tag{2}$$

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

$$\begin{cases} \dfrac{\partial\varphi}{\partial n} + \beta\varphi = 0 \\ \dfrac{\partial\psi}{\partial n} + \beta\psi = 0 \end{cases} \tag{3}$$

文献[7]已经证明，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 $\delta J=0,\delta^2J<0$，点火临界系统的 F-K 参数 $\lambda_i=J_{max}$；熄火条件满足 $\delta J=0,\delta^2J>0$，熄火临界 F-K 参数 $\lambda_e=J_{min}$；转点条件，即系统不可能出现热爆炸临界状态的条件为 $\delta J=0,\delta^2J=0$，满足该条件的泛函值 $J_{tr}$为转点 F-K 参数 $\lambda_{tr}$，即 $\lambda_{tr}=J_{tr}$。

## 3 有限长圆柱体系统的临界参数

应用上述变分原理，选可取函数为下述特征值方程

$$\begin{cases} \bar{\nabla}^2\Phi + \mu\Phi = 0 \\ \dfrac{\partial\Phi}{\partial n} + \beta\Phi = 0 \end{cases} \tag{4}$$

对应于最小特征值 $\mu_0$ 的特征函数 $\Phi$，我们给出了临界 F-K 参数 $\lambda_c$和点火温度 $\theta_c$ 的近似公式的一般表达形式[8]：

$$\lambda_c = \frac{\mu_0}{f'(\theta_{0c})} \tag{5}$$

其中 $\theta_{0c}=(1-2\varepsilon-\sqrt{1-4\varepsilon})/2\varepsilon^2$

$$\theta_c = \theta_{0c}(1-\omega) \tag{6}$$

$$\omega = \frac{1}{2}\,\frac{\int_\Omega \Phi\left\{\left(\Delta X_i\dfrac{\partial}{\partial X_i}\right)^2\Phi\right\}_0 \mathrm{d}v}{\int_\Omega \Phi\mathrm{d}v} \tag{7}$$

其中 $\Delta X_i=X_i-X_{i0}$，$X_i$ 为 $i$ 方向坐标，$\Delta X_{i0}$为温度最大值点坐标，$\left(\Delta X_i \frac{\partial}{\partial X_i}\right)^2 = \sum_{i=1}^{3}(X_i - X_{i0})^2 \frac{\partial^2}{\partial X_i^2}$，下标"0"表示取温度最大点的值，$\mu_0$ 为方程(4)的最小特征值。

对于有限长圆柱体，选圆柱体的几何中心为坐标原点，采用柱坐标系，方程(4)可写为：

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial \Phi}{\partial r} + \frac{1}{h^2}\frac{\partial^2 \Phi}{\partial Z^2} + \mu\Phi = 0 \\ \frac{\partial \Phi}{\partial r} + \beta_1 \Phi = 0 \qquad (r = 1) \\ \frac{\partial \Phi}{\partial z} + h\beta_2 \Phi = 0 \qquad (z = \pm 1) \end{cases} \tag{8}$$

其中：坐标 $r$ 以柱半径 $R$ 无量纲化，$z$ 以柱半高度 $hR$ 无量纲化，$h$ 为以 $R$ 无量纲化的半高度，$\beta_1$ 为柱面的 Biot 数，$\beta_2$ 为柱上下底的 Biot 数，在方程(1)中，$\lambda,\beta$ 中的特征长度 $a$ 选为圆柱半径 $R$。

应用分离变量法，令 $\Phi=\Phi_r(r)\Phi_z(z)$，可求出：$\Phi_r = J_0(\sqrt{\mu_1}r)$，$\Phi_z = \cos(\sqrt{\mu_2}z)$

其中特征值满足：$\mu_0 = \mu_1 + \frac{\mu_2}{h^2}$ (9)

$$\frac{J_0(\sqrt{\mu_1})}{J_1(\sqrt{\mu_1})} = \frac{\sqrt{\mu_1}}{\beta_1} \tag{10}$$

$$\operatorname{ctg}\sqrt{\mu_2} = \mu_2/\beta'_2 \tag{11}$$

其中：$\beta'_2 \equiv h\beta_2$。解出(9)～(11)，给出 $\mu_0$，即可由公式(5)得到 $\lambda_c$。超越方程(10)、(11)的数值很容易得到，并且在一些工具书中可以查到。

由公式(7)可求出 $\omega$ 的表达式为：

$$\omega = -\frac{1}{2}\left\{\left[\frac{1}{2}\left(1 + \frac{2}{\beta_1}\right)\mu_1 - 2\right] + \left[1 + \frac{2}{h\beta_2}\right]\mu_2 - 2\right\} \tag{12}$$

于是由(6)式亦可给出圆柱体的临界温度 $\theta_c$。

## 4　与数值解比较及改进公式

使用上节得到的 F-K 临界参数公式，在 $h=1,\varepsilon=0$ 条件下，对于不同 $\beta_1,\beta_2$ 值计算得到的临界参数 $\lambda_c$与杜霞的数值计算结果列于表 1。

从表 1 数据对比中，可以看到，在 $\beta_1\leqslant1$；$\beta_2\leqslant1$ 的区间，近似公式与数值结果十分一致，误差小于 1%；在 $\beta_1\to\infty,\beta_2\to\infty$处，误差最大，接近 10%；在 $\beta_2\to\infty$，$\beta_1\to0$ 处，误差为 3%左右；在 $\beta_1\to\infty$，$\beta_2\to0$ 处，误差约为 6%。

根据以上误差分布，我们给出以下改进公式：

$$\lambda_c = \frac{\mu_0}{f'(\theta_{0m})}\left[1 - 0.006\exp\left(-\frac{1.4}{\beta_1}\right) - \frac{0.03}{h}\exp\left(-\frac{1.4}{\beta_2}\right)\right] \tag{13}$$

改进公式计算结果与数值解的比较见表 2。

**表1 近似公式与数值解的比较**

**Table 1 Comparison of the approximate formula with the numerical solution**

**($\varepsilon=0$, $h=1$)**

| $\lambda$ \ $\beta_2$ / $\beta_1$ | | ∞ | 10 | 1 | 0.1 | 0 |
|---|---|---|---|---|---|---|
| ∞ | △ | 3.035 | 2.879 | 2.400 | 2.163 | 2.128 |
| | * | 2.764 | 2.629 | 2.244 | 2.037 | 2.000 |
| 10 | △ | 2.655 | 2.499 | 2.020 | 1.783 | 1.748 |
| | * | 2.435 | 2.289 | 1.899 | 1.688 | 1.654 |
| 1 | △ | 1.488 | 1.331 | 0.852 | 0.616 | 0.580 |
| | * | 1.423 | 1.283 | 0.841 | 0.611 | 0.577 |
| 0.1 | △ | 0.979 | 0.823 | 0.344 | 0.107 | 0.072 |
| | * | 0.951 | 0.800 | 0.342 | 0.107 | 0.072 |
| 0 | △ | 0.910 | 0.751 | 0.272 | 0.036 | 0.001 |
| | * | 0.880 | 0.729 | 0.271 | 0.036 | 0.001 |

注：* 为杜霞的数值解[6]；△为本文公式结果；$\beta=10000$，视为∞；$\beta=0.001$，视为0；下同。

**表2 公式(13)与数值解的比较**

**Table 2 Comparison of the formula (13) with the numerical solution**

**($\varepsilon=0$, $h=1$)**

| $\lambda$ \ $\beta_2$ / $\beta_1$ | | ∞ | 10 | 1 | 0.1 | 0 |
|---|---|---|---|---|---|---|
| ∞ | △ | 2.762 | 2.631 | 2.238 | 2.033 | 2.000 |
| | * | 2.764 | 2.629 | 2.244 | 2.037 | 2.000 |
| 10 | △ | 2.437 | 2.303 | 1.899 | 1.690 | 1.657 |
| | * | 2.435 | 2.289 | 1.899 | 1.688 | 1.654 |
| 1 | △ | 1.421 | 1.277 | 0.833 | 0.607 | 0.571 |
| | * | 1.423 | 1.283 | 0.841 | 0.611 | 0.577 |
| 0.1 | △ | 0.950 | 0.802 | 0.341 | 0.107 | 0.072 |
| | * | 0.951 | 0.800 | 0.342 | 0.107 | 0.072 |
| 0 | △ | 0.883 | 0.731 | 0.270 | 0.036 | 0.001 |
| | * | 0.880 | 0.729 | 0.271 | 0.036 | 0.001 |

**($\varepsilon=0$, $1\leqslant h\leqslant 5$, $\beta_1=\beta_2=\beta$)**

| $\lambda$ \ $\beta$ / $h$ | | 0.1 | 1 | 10 | 100 | ∞ |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | △ | 0.107 | 0.833 | 2.31 | 2.72 | 2.72 |
| | * | 0.107 | 0.841 | 2.30 | 2.71 | 2.76 |
| 2 | △ | 0.089 | 0.676 | 1.83 | 2.14 | 2.17 |
| | * | 0.089 | 0.673 | 1.80 | 2.12 | 2.16 |
| 3 | △ | 0.083 | 0.629 | 1.73 | 2.03 | 2.07 |
| | * | 0.083 | 0.624 | 1.71 | 2.02 | 2.05 |
| 5 | △ | 0.078 | 0.597 | 1.68 | 1.98 | 2.02 |
| | * | 0.078 | 0.592 | 1.67 | 1.97 | 2.01 |

($\varepsilon=0.05$, $1\leqslant h\leqslant 5$, $\beta_1=\beta_2=\beta$)

| $h$ \ $\lambda$ \ $\beta$ | | 0.1 | 1 | 10 | 100 | $\infty$ |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | △ | 0.113 | 0.878 | 2.44 | 2.87 | 2.92 |
| | * | 0.113 | 0.878 | 2.44 | 2.88 | 2.94 |
| 2 | △ | 0.094 | 0.713 | 1.93 | 2.26 | 2.29 |
| | * | 0.094 | 0.701 | 1.91 | 2.24 | 2.28 |
| 5 | △ | 0.082 | 0.629 | 1.77 | 2.09 | 2.13 |
| | * | 0.082 | 0.625 | 1.77 | 2.09 | 2.13 |

可见，对于 $\varepsilon=0$ 情况，修正公式(13)的误差大部分在 1%之内。对于 $\varepsilon=0.05$，除个别点外，误差均小于 1%。因此，在区间$\{0\leqslant\varepsilon\leqslant 0.05, 0\leqslant\beta_1<\infty, 0\leqslant\beta_2<\infty, 1\leqslant h\leqslant 5\}$内，公式(13)计算的 $\lambda_c$ 值可准确到 1%左右。

临界温度 $\theta_c$ 的近似公式计算结果与数值解的对比表明，在 $\beta\leqslant 0.1$ 区间，公式精度较高，误差小于 0.7%，可不做修正，在 $\beta>0.1$ 区间，修正公式为：

$$\theta_c = \theta_{0c}[1 + \omega \times (1 + 0.4\varepsilon)] \tag{14}$$

$$\omega = -\frac{1}{2}\left\{\left[\frac{1}{2}\left(1+\frac{2}{\beta_1}\right)\mu_1 - 2\right]\left[1 - 0.06\exp\left(-\frac{1}{\beta_1}\right)\right] + \left[\left(1+\frac{2}{h\beta_2}\right)\mu_2 - 1\right]\left[1 - 0.16\exp\left(-\frac{1}{\beta_2}\right)\right]/h^{\alpha}\right\} \tag{15}$$

式中：$\alpha = 0.20h[1 - \exp(-0.3\beta_2)]$。

使用修正公式(14)计算的临界温度与数值计算结果，见表 3。

**表 3　公式(14)与数值解的比较**

**Table 3　Comparison of the formula (14) with the numerical solution**

($\varepsilon=0$, $h=1$)

| $h$ \ $\theta_c$ \ $\beta$ | | 1 | 10 | $\infty$ |
|---|---|---|---|---|
| 1 | △ | 1.282 | 1.594 | 1.615 |
| | * | 1.311 | 1.603 | 1.612 |
| 2 | △ | 1.319 | 1.554 | 1.568 |
| | * | 1.344 | 1.565 | 1.571 |
| 3 | △ | 1.339 | 1.509 | 1.522 |
| | * | 1.339 | 1.519 | 1.522 |
| 5 | △ | 1.308 | 1.446 | 1.458 |
| | * | 1.303 | 1.453 | 1.459 |

表 3 表明：除 $\beta=1, 1\leqslant h\leqslant 2$ 误差大于 1%外，其余区间 $\theta_c$ 的误差均小于 1%，故修正公式(14)在 $1\leqslant\beta<\infty, 1\leqslant h\leqslant 5$ 的大区间内，大部分计算误差小于 1%，可用于估计临界温度 $\theta_c$ 的值。

## 5 讨 论

本文给出的经修正的近似公式，误差约为1%，可用于较准确的计算临界参数。在长细比 $h<1$ 的范围内，由于缺乏数值计算结果，尚难外推出 $h<1$ 区域的误差情况。但对于 $h>5$ 的区间，似乎可以稍加外推，而误差可能不会有很大增加，因为修正公式已经考虑到，当 $h\to\infty$ 时它自动地演变为无限长圆柱系统的修正公式，且其误差仍小于1%，而当 $h\approx7$ 时，临界参数值与无限长圆柱体已经很接近，相对差别仅在2～4%范围。因此，修正公式的误差应比这个相对差别小得多。

由于 $\mu_1,\mu_2$ 与 $\beta$ 的关系已制成表格，故使用本文公式估算 $\lambda_c,\theta_c$，比较方便，可用于一般工程计算。

## 参 考 文 献

1 Wake G C. Combust. Flame, 1971, 17: 171～174
2 Alder J. Combust. Flame, 1983, 50: 1～7
3 Herbert D M, Mech Q J. Appl. Math, 1986, 39: 197～207
4 Greenway P, Spence A. Combust. Flame, 1985, 62: 141～156
5 Zaturska M B, Bank W H H. Combust. Flame, 1990, 79: 220～225
6 杜霞. 二维热爆炸研究(博士论文). 北京理工大学, 1994.
7 秦承森. 爆炸与冲击, 1991, 11(3): 217～223
8 秦承森. 爆炸与冲击, 1992, 12(2): 106～114

# CRITICAL PARAMETER ESTIMATION OF THERMAL EXPLOSION FOR CYLINDRIC CHARGES

Qin Chengsen

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

**ABSTRACT** The variational method was used to derivate an approximate formulae for analyzing the critical parameters of thermal explosion for cylindric charges. The results therefrom were compared with those obtained from numerical computation. It shows that the modified formulae can well estimate the above-said critical parameters with an error of percentile.

**KEY WORDS** explosive, thermal explosion, critical parameter.