

УДК 536.46

А. Г. Князева

ВОСПЛАМЕНЕНИЕ П-ОБРАЗНОГО ОЧАГА РАЗОГРЕВА В ДЕФОРМИРУЕМОЙ СРЕДЕ

Предложена модель воспламенения очага разогрева с учетом связности полей деформации и температуры и зависимости скорости химической реакции от работы сил деформации. Задача рассмотрена в рамках теории термоупругости. Решение проведено методом сращиваемых асимптотических разложений в различных частных случаях. Определены поля температуры, перемещений, деформации и напряжений, радиус очага, разделяющий режимы воспламенения и потухания, и время воспламенения в критических условиях.

1. Задачи очагового теплового воспламенения возникают при рассмотрении проблем чувствительности взрывчатых веществ (ВВ) к действию удара или трения (например, [1, 2]), возбуждения реакции в химически активной среде накаливаемыми частицами или разогретыми газовыми включениями [3, 4], инициирования веществ, содержащих поглощающие примеси, действия лазерного излучения [5, 6] и т. п. В любом случае очаг — это локальная область в объеме или на поверхности вещества, начальная температура T_0 которой больше температуры окружающей среды T_n . Если он способен к химическому превращению, то один из основных этапов воспламенения вещества — воспламенение самого очага разогрева.

В подобных задачах обычно устанавливают связь между температурой очага, его размерами и кинетическими параметрами в критических условиях, разделяющих режимы воспламенения и потухания. Именно такой случай и будет предметом рассмотрения в настоящей работе. Обзор основных работ, посвященных теоретическим исследованиям воспламенения очага, выполнен в [7].

Известно [8], что в теле, равномерно нагретом до T_0 и содержащем включение, отличающееся от тела только коэффициентом теплового расширения α_t (например, сгоревший очаг), возникают термические напряжения, величина которых пропорциональна разности $\alpha_{t1} - \alpha_{t2}$ (индекс 1 относится к включению или очагу, 2 — к окружающей среде). Аналогичное напряженное состояние получается, если включение нагрето до T_0 , а остальное тело сохраняет температуру T_n ($\alpha_{t1} = \alpha_{t2}$). Следовательно, в П-образном очаге уже в начальный момент времени $t = 0$ существуют термические напряжения, величина которых пропорциональна $(T_0 - T_n) \times \alpha_t (3\lambda + 2\mu)$, где λ, μ — коэффициенты Ламэ (сам очаг может быть результатом релаксации механических напряжений вследствие внешних воздействий). Из [7] следует, что существующая в конденсированном веществе обратная связь между полями температур, напряжений и деформаций и самим фактом химического превращения в многочисленных теоретических исследованиях этой задачи до сих пор не принималась во внимание.

2. Рассмотрим задачу о воспламенении очага (или включения с теми же свойствами), учитывая связность полей деформации и температуры. Полагаем, что перепады температур в очаге и в окружающей его среде позволяют не выходить за рамки термоупругости. Тогда при условии

постоянства теплофизических и упругих свойств (их независимости от температуры, степени превращения и т. п.) температурные изменения в очаге и окружающей его среде опишем связанной задачей термоупругости с центральной симметрией

$$c_e \rho \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_T \frac{1}{x^m} \frac{\partial}{\partial x} x^m \frac{\partial T}{\partial x} + k_0 \rho Q \exp \left[-\frac{E}{RT} \right] - \\ - \alpha_T (3\lambda + 2\mu) T \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{x^m} \frac{\partial (u x^m)}{\partial x} \right], \quad x > 0, \quad (1) \\ x = 0: \frac{\partial T}{\partial x} = 0; \quad x \rightarrow \infty: \frac{\partial T}{\partial x} = 0,$$

где m — показатель симметрии очага; c_e — теплоемкость при постоянной деформации. Перемещения найдем из уравнения движения, записанного в виде

$$(\lambda + 2\mu) \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{x^m} \frac{\partial (u x^m)}{\partial x} \right] - (3\lambda + 2\mu) \alpha_T \frac{\partial T}{\partial x} = \rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}, \quad x > 0. \quad (2)$$

Напряжения σ_{ik} и деформации ε_{ik} связаны законом Гука. Выражения для σ_{ik} , ε_{ik} различны для разных m . Так, в случае плоской симметрии ($m=0$) от нуля отлична только одна компонента деформаций $\varepsilon_{xx} = \partial u / \partial x$; для цилиндрического очага имеем две ненулевые компоненты:

$$\varepsilon_{xx} = \partial u / \partial x, \quad \varepsilon_{\varphi\varphi} = u/x.$$

В сферически симметричном очаге ($m=2$)

$$\varepsilon_{xx} = \partial u / \partial x, \quad \varepsilon_{\varphi\varphi} = \varepsilon_{\Lambda\Lambda} = u/x.$$

Остальные компоненты тензора деформаций равны нулю. Напряжения, направленные по нормали к поверхности раздела очага (включения) и окружающей среды, найдем из соотношения

$$\sigma_{xx} = (\lambda + 2\mu) \left[\frac{\partial u}{\partial x} \right] + \lambda m \frac{u}{x} - \sigma_T,$$

где $\sigma_T = (3\lambda + 2\mu) \alpha_T (T - T_n)$. Для других компонент напряжений справедливо

$$\sigma_{yy} = \sigma_{zz} = \lambda \varepsilon_{xx} - \sigma_T, \quad \sigma_{xy} = \sigma_{xz} = \sigma_{yz} = 0, \quad m = 0;$$

$$\sigma_{zz} = \lambda \left[\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{u}{x} \right] - \sigma_T, \quad \sigma_{\varphi\varphi} = \sigma_{zz} + 2\mu \frac{u}{x},$$

$$\sigma_{z\varphi} = \sigma_{x\varphi} = \sigma_{xz} = 0, \quad m = 1;$$

$$\sigma_{\varphi\varphi} = \sigma_{\Lambda\Lambda} = \lambda \left[\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{2}{x} u \right] - 2\mu \frac{u}{x} - \sigma_T,$$

$$\sigma_{x\varphi} = \sigma_{x\Lambda} = \sigma_{\varphi\Lambda} = 0, \quad m = 2.$$

В силу симметрии в центре имеем $u = 0$, $x = 0$. В бесконечном удалении от очага перемещения конечны (напряжения нулевые).

Полагаем, что в начальный момент времени $t = 0$ задано распределение температуры

$$|x| \leq r, \quad T = T_0; \quad |x| > r, \quad T = T_n.$$

Начальное напряженное состояние можем определить из решения статической задачи, зная распределение T :

$$(\lambda + 2\mu) \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{x^m} \frac{\partial (u_j x^m)}{\partial x} \right] = (3\lambda + 2\mu) \alpha_T \frac{\partial T_j}{\partial x},$$

$$x = 0: u_j = 0; \quad x = r: u_1 = u_2.$$

При переходе через поверхность $x = r$ в статической задаче оставляем непрерывными компоненты напряжений, нормальные к поверхности [8],

следовательно, в начальный момент времени разрыв терпят деформации

$$t = 0: (\varepsilon_{xx_1} - \varepsilon_{xx_2})_{x=r} = \sigma_{T_0}/(\lambda + 2\mu),$$

$$\sigma_{T_0} = \alpha_T(T_0 - T_n)(3\lambda + 2\mu).$$

Вводим начальный термоупругий потенциал перемещений Φ_0 так, что $u_j = \frac{\partial \Phi_0}{\partial x_j}$, следовательно,

$$\Delta \Phi_0 = \frac{1}{x^m} \frac{\partial}{\partial x} x^m \frac{\partial \Phi_0}{\partial x} = \begin{cases} \sigma_{T_0}/(\lambda + 2\mu), & |x| \leq r, \\ 0, & |x| > r. \end{cases}$$

Интегрируя и используя граничные условия, получим

$$u_{01}(0, x) = \frac{\sigma_{T_0}}{\lambda + 2\mu} \frac{x}{m+1}, \quad u_{02}(0, x) = \frac{\sigma_{T_0}}{\lambda + 2\mu} \frac{r^{m+1}}{x^m} \frac{1}{m+1},$$

откуда на основе приведенных выше соотношений легко определить компоненты напряжений и деформаций для $t = 0$, величины которых зависят от разности температур $T_0 - T_n$.

Второе начальное условие для перемещений $-\partial u/\partial t = 0$. В задаче требуется найти время воспламенения и критический радиус очага, разделяющий режимы воспламенения и потухания.

3. Как показывают многочисленные экспериментальные исследования, скорость твердофазных химических превращений зависит от напряжений и деформаций, существующих в системе или возникающих в ходе реакции [10—15]. Так, согласно экспериментальным данным [12], термоокислительные реакции в полимерах идут с большей интенсивностью под действием сдвиговых напряжений, и накопление механической энергии приводит к значительному снижению температуры, необходимой для протекания этих реакций. Например, в [16, 17] говорится о том, что механическое разрушение макромолекул можно рассматривать как термическую деструкцию, активированную напряжением, причем скорость выхода летучих при механодеструкции экспоненциально зависит от σ , а из работ А. В. Берлина (см. [12]) следует, что под действием напряжений возможно развитие любого из трех принципиально различных типов реакций (радикальных, ионных или ионрадикальных).

В твердых веществах под действием напряжений интенсифицируются все процессы переноса и скорости твердофазных реакций [10—12, 15—19]. Каждый радикал, образующийся при механодеструкции, способен инициировать цепную радикальную реакцию, приводящую к разрыву 10^4 полимерных цепей [12]. Экспериментальные данные (например, [18, 19]) свидетельствуют о том, что в условиях высоких давлений и деформаций сдвига приблизительно 20 типов реакций протекают с высокими скоростями (характерное время 10^{-5} с). К этому же классу процессов, где превращение вещества нельзя сводить к чисто тепловому механизму, относятся, по-видимому, и реакции во взрывчатых веществах при механических воздействиях [4, 2].

Существуют разнообразные примеры того, что фронт химического превращения сопровождается разрушением. Зарождение и распространение трещин в волне химической реакции характерно для процессов горения [20], дегидратации кристаллогидратов [21], низкотемпературных радикальных реакций в стеклообразных и поликристаллических матрицах [13, 14] и др. Развитая авторами [13, 14] феноменологическая модель низкотемпературного воспламенения объяснила экспериментальные результаты на основе предположения об уменьшении энергии активации реакции

$$E = E_0 - \alpha g(\sigma_{ik}), \quad (3)$$

где $g(\sigma_{ik})$ — избыточная свободная энергия; α — коэффициент, близкий к единице. Такая запись согласуется и с другими данными и включает два механизма возбуждения реакции — тепловой и деформационный, когда активирование реакции возможно без существенного изменения температуры или практически изотермически.

Вспользуемся представлениями [12—21] для дальнейшего построения модели. При изотермических процессах [22] работа совершается не за счет убыли внутренней энергии U (как это имеет место при адиабатических процессах, например при разрыве отдельной связи в молекуле $dU = E_0$), а за счет убыли свободной энергии F : $dF = -pdV$, где p — давление; dV — изменение объема системы. Величина dF представляет собой работу расширенной системы (в нашем случае — деформированной) или то, что авторы [13, 14] называют избыточной свободной энергией или структурной неравновесностью. В явном виде в плоской системе координат для единицы объема

$$g = -(\sigma_{xx}\epsilon_{xx} + \sigma_{yy}\epsilon_{yy} + \sigma_{zz}\epsilon_{zz} + \sigma_{xy}\epsilon_{xy} + \sigma_{yz}\epsilon_{yz} + \sigma_{xz}\epsilon_{xz}). \quad (4)$$

Здесь σ_{ik} — компоненты напряжений; ϵ_{ik} — деформации. Коэффициент α из размерных соображений примем, как и в [23], в виде $\alpha = k\mu_m/\rho$, μ_m — молярная масса вещества; ρ — плотность; k имеет смысл коэффициента структурной чувствительности или показывает, какая часть энергии деформации тратится на активирование реакции. Так как разрушение само по себе экзотермический процесс, то (3), (4) не могут в полном объеме отражать связь разрушения с распространением фронта химической реакции. В такой постановке правильнее говорить о реакции в деформируемой среде (в частности, в носике отдельной трещины) до разрушения.

В настоящей работе пренебрегаем выгоранием вещества, диффузией в твердом теле, что на стадии воспламенения может быть оправданно [7, 25].

4. В безразмерных переменных (обозначения для перемещений и деформаций не меняем)

$$\Theta = \frac{T_0 - T}{RT_0^2} E_0, \quad \tau = \frac{t}{t_*}, \quad \xi = \frac{x}{r}, \quad S_{ik} = \frac{\sigma_{ik}}{\sigma_0},$$

$$\epsilon_{ik} = \epsilon_{ik} \frac{\lambda + 2\mu}{\sigma_0}, \quad u = u \frac{\lambda + 2\mu}{\sigma_0 r},$$

где $\sigma_0 = \alpha_\tau (3\lambda + 2\mu) \frac{RT_0^2}{E_0}$; $t_* = \frac{c_\epsilon RT_0^2}{EQk_0} \exp \left[\frac{E_0}{RT_0} \right]$, система уравнений примет вид

$$\frac{\partial \Theta}{\partial \tau} = \delta^{-1} \frac{1}{\xi^m} \frac{\partial}{\partial \xi} \xi^m \frac{\partial \Theta}{\partial \xi} + \omega (1 - \beta \Theta) \frac{\partial}{\partial \tau} \left[\frac{1}{\xi^m} \frac{\partial (u \xi^m)}{\partial \xi} \right] - \exp \left[-\frac{\Theta + \Psi \Pi}{1 - \beta \Theta} \right], \quad (5)$$

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \left[\frac{1}{\xi^m} \frac{\partial (u \xi^m)}{\partial \xi} \right] + \frac{\partial \Theta}{\partial \xi} = v_\infty \frac{\partial^2 u}{\partial \tau^2}, \quad (6)$$

$$\left. \begin{aligned} \epsilon_{\xi\xi} &= \frac{\partial u}{\partial \xi}, \quad S_{\xi\xi} = \frac{\partial u}{\partial \xi} + \gamma_1 m \frac{u}{\xi} - S_\Theta, \\ S_\Theta &= \Theta_\tau - \Theta, \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

$$S_{\tau\tau} = S_{\xi\xi} = \gamma_1 \frac{\partial u}{\partial \xi} - S_\Theta, \quad m = 0, \quad (8)$$

$$S_{\eta\eta} = \gamma_1 \left[\frac{\partial u}{\partial \xi} + \frac{u}{\xi} \right] - S_\Theta, \quad (9)$$

$$S_{\varphi\varphi} = S_{\eta\eta} + \gamma_2 \frac{u}{\xi}, \quad \epsilon_{\varphi\varphi} = \frac{u}{\xi}, \quad m = 1, \quad \left. \vphantom{S_{\varphi\varphi}} \right\}$$

$$\left. \begin{aligned} S_{\varphi\varphi} &= S_{\Lambda\Lambda} = \gamma_1 \left[\frac{\partial u}{\partial \xi} + \frac{2u}{\xi} \right] - \gamma_2 \frac{u}{\xi} - S_\Theta, \\ \epsilon_{\varphi\varphi} &= \epsilon_{\Lambda\Lambda} = \frac{u}{\xi}, \quad m = 2. \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

Остальные компоненты — нулевые.

Граничные и начальные условия

$$\xi = 0: u = 0, \quad \frac{\partial \Theta}{\partial \xi} = 0, \quad (11)$$

$$\xi \rightarrow \infty: S_{\xi\xi} = 0, \quad \frac{\partial \Theta}{\partial \xi} = 0, \quad (12)$$

$$\tau = 0: \Theta = 0, \quad |\xi| \leq 1; \quad \Theta = \Theta_0, \quad |\xi| > 1, \quad (13)$$

$$\partial u / \partial \tau = 0,$$

$$\left. \begin{aligned} u &= \Theta_0 \xi / (m + 1) = u_{01}, \quad |\xi| \leq 1, \\ u &= \Theta_0 / (m + 1) / \xi^m = u_{02}, \quad |\xi| > 1, \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

где $\Theta_0 = (T_0 - T_H) E_0 / R T_0^2$; $\delta = r^2 / \kappa t_*$; $\kappa = \lambda_T / c_E \rho$;

$$\omega = \alpha_1^2 \frac{(3\lambda + 2\mu)^2}{(\lambda + 2\mu)} \frac{T_0}{c_E \rho}; \quad \beta = \frac{R T_0}{E_0} = \frac{T_0 - T_H}{T_0} \Theta_0^{-1};$$

$$v_x = \delta \left(\frac{v_T}{v_c} \right)^2 \left(v_T = \sqrt{\kappa / t_*} - \text{скорость тепловых волн}; \quad v_c = \sqrt{\frac{\lambda + 2\mu}{\rho}} - \right.$$

скорость поперечных упругих волн); $\gamma_1 = \lambda / (\lambda + 2\mu)$; $\gamma_2 = 2\mu / (\lambda + 2\mu)$;

$$\Pi = -\Sigma(\sigma_{ik} \varepsilon_{ik}); \quad \Psi = \Psi_0 \frac{\omega \beta}{1 - \beta \Theta_0}, \quad \Psi_0 = k \frac{\mu c_E}{E_0} T_0.$$

Начальное условие для перемещений может быть задано нулевым ($u = 0$). В этом случае в начальный момент времени на границе очага и окружающей среды разрыв терпит напряжения

$$S_{ii} = -\Theta_0, \quad |\xi| < 1; \quad S_{ii} = 0, \quad |\xi| > 1, \quad \varepsilon_{ii} = 0. \quad (15)$$

Очевидно, $\gamma_1 < 1$, $\gamma_2 < 1$, $\beta \ll 1$. Оценим области изменения новых для очагового воспламенения параметров ω и v_x . Например, полагая $T_0 = 2T_H$ и используя данные [24], получим для стали, алюминия, свинца и поливинилбутирала $\omega \approx 0,0224$; $0,075$; $0,125$ и $0,86$ соответственно. Для этих же материалов имеем $v_c = 5,714 \cdot 10^3$, $6,005 \cdot 10^3$, $2,347 \cdot 10^3$, $2,138 \cdot 10^3$ м/с. Представим параметр v_x в виде $v_x = \left[\frac{r}{v_c} t_*^{-1} \right]^2$. Тогда,

зная характерные размеры очага $r = 10^{-5} \div 10^{-3}$ м и характерное время химического превращения в очаге $t_* = 10^{-5} \div 1$, найдем, что v_x меняется в пределах $[0; 0,25]$. Наиболее реальные значения параметра $v_x \approx 10^{-4} \div 10^{-2}$. Следовательно, в большинстве случаев можно ограничиться квазистатической задачей. Значение параметра Ψ оценить довольно сложно, так как смысл входящего в него коэффициента k не очевиден, не очевидна и сама запись (3) и требует специального обоснования. Полагая, как и в [13, 14], что $\alpha = k \mu_m / \rho \sim 1$, найдем $\Psi \leq 1$.

5. Решение задачи проведем методом срачиваемых асимптотических разложений при условии $\Theta_0 \gg 1$, $\delta \gg 1$ по схеме, развитой в [25].

Перейдем в (5) — (14) к новым зависимым переменным $\Theta_{in} = \Theta - \Theta_r$, $u_{in} = u - u_r$, $\varepsilon_{in} = \varepsilon - \varepsilon_r$, $S_{in} = S - S_r$, где Θ_r , u_r , ε_r , S_r являются решением инертной задачи (5) — (14) без химических источников, а Θ_r , u_r , ε_r , S_r находятся из решения задачи с нулевыми условиями

$$\frac{\partial \Theta_r}{\partial \tau} = \delta^{-1} \frac{1}{\xi^m} \frac{\partial}{\partial \xi} \xi^m \frac{\partial \Theta_r}{\partial \xi} + \omega \frac{\partial}{\partial \tau} \left[\xi^{-m} \frac{\partial (u_r \xi^m)}{\partial \xi} \right] [1 - \beta (\Theta_r + \Theta_{in})] -$$

$$- \exp \left[- \frac{\Theta_r + \Theta_{in} + \Psi \Pi}{1 - \beta (\Theta_r + \Theta_{in})} \right], \quad (16)$$

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \left[\xi^{-m} \frac{\partial u_r \xi^m}{\partial \xi} \right] + \frac{\partial \Theta_r}{\partial \xi} = v_x \frac{\partial^2 u_r}{\partial \tau^2} = O(v_x), \quad (17)$$

$$\varepsilon_{r\xi\xi} = \frac{\partial u_r}{\partial \xi}, \quad S_{r\xi\xi} = \frac{\partial u_r}{\partial \xi} + \gamma_1 m \frac{u_r}{\xi} + \Theta_r, \quad (18)$$

$$\left. \begin{aligned} S_{r\eta\eta} &= S_{r\xi\xi} = \gamma_1 \frac{\partial u_r}{\partial \xi} + \Theta_r, \quad m = 0, \\ S_{r\eta\eta} &= \gamma_1 \left[\frac{\partial u_r}{\partial \xi} + \frac{u_r}{\xi} \right] + \Theta_r, \quad S_{r\varphi\varphi} = S_{r\eta\eta} + \gamma_2 \frac{u_r}{\xi}, \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

$$\varepsilon_{r\varphi\varphi} = \frac{u_r}{\xi}, \quad m = 1, \quad (20)$$

$$S_{r\varphi\varphi} = S_{r\Lambda\Lambda} = \gamma_1 \left[\frac{\partial u_r}{\partial \xi} + \frac{2u_r}{\xi} \right] - \gamma_2 \left[\frac{u_r}{\xi} + \Theta_r \right], \quad (21)$$

$$\varepsilon_{r\varphi\varphi} = \varepsilon_{r\Lambda\Lambda} = \frac{u_r}{\xi}, \quad m = 2, \quad (22)$$

$$\xi = 0: u_r = 0, \quad \partial\Theta_r/\partial\xi = 0, \quad (23)$$

$$\xi \rightarrow \infty: S_{r\xi\xi} = 0, \quad \partial\Theta_r/\partial\xi = 0, \quad (24)$$

$$\tau = 0: \Theta_r = u_r = \partial u_r/\partial\tau = 0. \quad (25)$$

При условиях $\Theta_0 \gg 1$, $\delta \gg 1$ ($\beta = \sigma/\Theta_0 \ll 1$, $\sigma = \frac{T_0 - T_{\text{н}}}{T_0}$) уравнение (17) для температуры в очаге примет вид

$$\frac{\partial\Theta_r}{\partial\tau} = \omega \frac{\partial}{\partial\xi} \left[\xi^{-m} \frac{\partial u_{\xi}^m}{\partial\xi} \right] - \exp[-(\Theta_r + \Theta_{in} + \Psi\Pi)], \quad (26)$$

где
$$\Pi = \sum_i (S_{r_{ii}} + S_{in_{ii}})(\varepsilon_{r_{ii}} + \varepsilon_{in_{ii}}). \quad (27)$$

Из-за громоздкости задачи дальнейшее решение проведем для различных частных случаев.

1) Пренебрежем в уравнении движения силами инерции, что возможно, если $v_x \ll 1$ или $\delta(v_r/v_c)^2 \ll 1$. Тогда сразу запишем первый интеграл (5) — (14)

$$\frac{1}{\xi^m} \frac{\partial(u_{\xi}^m)}{\partial\xi} = -\Theta + c. \quad (28)$$

Для решения квазистатической задачи — нахождения частного решения уравнения (18) при $v_x = 0$, как и статической, используем понятие о термоупругом потенциале Φ , связанном с перемещениями $u = \partial\Phi/\partial\xi$, оставляя обозначение такое же, как и в размерном виде. В качестве масштаба взят $\Phi_* = u_* r$.

Если напряжения не влияют на скорость химической реакции, то для задачи об очаговом тепловом воспламенении результат тривиален. Учет связности в этом случае эквивалентен замене переменной $\tau' = \tau/(1 + \omega)$. Решение для температуры в новых переменных не отличается от [25] для любого типа симметрии, и искомыми характеристиками воспламенения будут

$$\delta_{*1} = \delta_{*0}, \quad \tau_{b1} = \tau_{b0}(1 + \omega), \quad (29)$$

где δ_{*0} , τ_{b0} — соответствующее решение без учета термонапряжений. Иначе, согласно обезразмериванию, учет связности полей деформации и температуры эквивалентен увеличению теплоемкости вещества в $(1 + \omega)$ раз при условии равенства $c_p = c_e$, где c_p — теплоемкость при постоянном давлении.

Кроме поля температур $\Theta(\xi, \tau)$ и величин δ_{*1} , τ_{b1} , требуется найти перемещения, напряжения и деформации. Например, в случае плоской симметрии ($m = 0$), используя понятие о термоупругом потенциале и операционный метод, из решения инертной задачи имеем

$$\begin{aligned} \varepsilon_{in} &= \varepsilon_{01} - \frac{\Theta_0}{2} \left[\operatorname{erfc} \frac{\sqrt{(1+\omega)\delta}}{2\sqrt{\tau}} (1 + \xi) + \operatorname{erfc} \frac{\sqrt{(1+\omega)\delta}}{2\sqrt{\tau}} (1 - \xi) \right] = \\ &= \varepsilon_{01} - \Theta_{in}, \quad S_{in\xi\xi} = \varepsilon_{01} - \Theta_0, \quad |\xi| \leq 1, \\ \varepsilon_{in} &= \varepsilon_{02} - \frac{\Theta_0}{2} \left[\operatorname{erfc} \frac{\sqrt{(1+\omega)\delta}}{2\sqrt{\tau}} (1 + \xi) - \operatorname{erfc} \frac{\sqrt{(1+\omega)\delta}}{2\sqrt{\tau}} (\xi - 1) \right] = \\ &= \varepsilon_{02} - \Theta_{in} - \Theta_0, \quad S_{in\xi\xi} = \varepsilon_{02}, \quad |\xi| > 1, \end{aligned} \quad (30)$$

где ε_{01} , ε_{02} — величины деформаций в начальный момент времени (ос- тальные характеристики не приведены, чтобы не загромождать текст).

Поле температур внутри очага до воспламенения определяется выражением

$$\Theta_r = \ln \left\{ 1 - \frac{1}{1+\omega} \int_0^\tau \exp[-\Theta_{in}(y, \xi)] dy \right\}, \quad (31)$$

где $\Theta_{in}(y, \xi)$ — решение инертной задачи. Для деформации $\varepsilon_{r\xi\xi}$ в очаге имеем

$$\varepsilon_{r\xi\xi} = -\Theta_r = \frac{\partial^2 \Phi_r}{\partial \xi^2}, \quad (32)$$

где Φ_r — соответствующий потенциал. Соотношение (32) справедливо в квазистатической задаче с плоской симметрией для любой кинетической функции и следует из (28). Перемещения найдем из выражения

$$u_{r\xi\xi}(\xi, \tau) = - \int_0^\xi \Theta_r(\tau, z) dz, \quad (33)$$

а напряжения — из закона Гука: $S_{r\xi\xi} = 0$, $\tau < \tau_b$.

Для построения решения вне очага ($|\xi| > 1$) перейдем к перемен- ным $\varphi = \Theta_r/\Theta_0$, $\xi_1 = (\xi - 1)\sqrt{\delta}$, $u_1 = u_r$. С точностью до экспоненциально малых величин (17), (18) примут вид

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \xi_1^2} + \frac{\omega \sqrt{\delta}}{\Theta_0} \frac{\partial^2 u_1}{\partial \xi_1 \partial \tau}, \quad \frac{\partial^2 u_1}{\partial \xi_1^2} + \frac{\Theta_0}{\sqrt{\delta}} \frac{\partial \varphi}{\partial \xi_1} = 0. \quad (34)$$

Начальное условие и условие в бесконечности:

$$\varphi(\xi, 0) = u_1(\xi, 0) = 0, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial \xi}(\infty, \tau) = 0. \quad (35)$$

Вторым граничным условием будет условие сращивания с решением внутри очага

$$\begin{aligned} \Theta_0^{-1} \Theta_r(\xi \rightarrow 1, \tau) &= \varphi(\xi_1 \rightarrow -\sqrt{\delta}, \tau), \\ u(\xi \rightarrow 1, \tau) &= u_1(\xi_1 \rightarrow -\sqrt{\delta}, \tau), \end{aligned} \quad (36)$$

где Θ_r , u_r — решение внутренней задачи для температуры и перемеще- ний на границе очага.

Решение (34) — (36) имеет вид

$$\begin{aligned} u_1 &= \int_0^\tau \frac{\Theta_r(q, 1)}{\Theta_0 \sqrt{\pi(\tau-q)}} \left\{ \exp \left[-\frac{(1+\omega)(\xi_1 + \sqrt{\delta})^2}{4(\tau-q)} \right] - 1 \right\} dq + \frac{u_r(\tau, 1)}{\Theta_0}, \\ \varphi &= \frac{\sqrt{1+\omega}}{2\sqrt{\pi}\Theta_0} \int_0^\tau \frac{(\xi_1 + \sqrt{\delta}) \Theta_r(q, 1)}{(\tau-q)^{3/2}} \exp \left[-\frac{(1+\omega)(\xi_1 + \sqrt{\delta})^2}{4(\tau-q)} \right] dq, \end{aligned} \quad (37)$$

$$\varepsilon = -\varphi, \quad S_{\xi\xi} = 0.$$

Таким образом, поля температур, перемещений, деформаций и напряже- ний в частном случае $m=0$ и $v_x=0$ найдены. Определяя асимптотиче- ское время разрушения τ_r как условие $\varepsilon_r \rightarrow \infty$, найдем $\tau_r = \tau_b$.

2) Если энергия активации реакции меняется под действием напря- жений, но $v_x=0$, то поле температур внутри очага ($|\xi| < 1$) также най- дем из уравнения (26). При выполнении условия (14) имеем

$$\Pi = \Theta_0(\Theta_{in} + \Theta_r), \quad (38)$$

где Θ_{in} — решение инертной задачи, естественно совпадающее с преды- дущим. (При условии (15) и $v_x=0$ деформации и напряжения не ска-

зываются непосредственно на скорости химического тепловыделения: $\Pi = 0$.)

Из (37), (32), (28) получим дифференциальное уравнение для температуры в очаге до воспламенения, решение которого при условии $\Theta_r(0, \xi) = 0$ есть

$$\Theta_r = \frac{1}{1 + \Psi\Theta_0} \ln \left\{ 1 - \frac{1 + \Psi\Theta_0}{1 + \omega} \int_0^\tau \exp [-(1 + \Psi\Theta_0) \Theta_{in}(y, \xi)] dy \right\}. \quad (39)$$

Деформации и перемещения в очаге определяются, как и в предыдущей задаче. Решение вне очага аналогично (37).

Условием воспламенения очага считаем неограниченный рост температуры в центре $\Theta_r(0, \tau \rightarrow \tau_b) \rightarrow -\infty$, что с точностью $O\left(\frac{\Theta_0}{\delta\sqrt{\delta}} e^{-\delta(1+\omega)/4\tau}, \frac{\Theta_0^2}{\delta} e^{-\delta(1+\omega)/2\tau}\right)$ приводит к трансцендентному уравнению

$$\frac{1 + \omega}{1 + \Psi\Theta_0} = \tau_b - \frac{8\Theta_0\tau_b^{5/2}}{\sqrt{\pi}\delta^{3/2}(1 + \omega)^{3/2}} \exp\left[-\frac{\delta(1 + \omega)}{4\tau_b}\right] (1 + \Psi\Theta_0). \quad (40)$$

Последнее равенство при $\Psi = 0$ и замене $\tau_b' = \tau_b(1 + \omega)^{-1}$ совпадает с решением [25]. Время воспламенения дает меньший корень уравнения (40), а критические условия найдем, приравняв производные его правой и левой частей:

$$\delta_{*2} = \frac{4}{1 + \Psi\Theta_0} \ln \left[\frac{2e\Theta_0\sqrt{(1 + \Psi\Theta_0)}}{\sqrt{\pi}\delta_{*2}} \left(1 + \frac{6}{\delta_{*2}(1 + \Psi\Theta_0)} \right) \right], \quad (41)$$

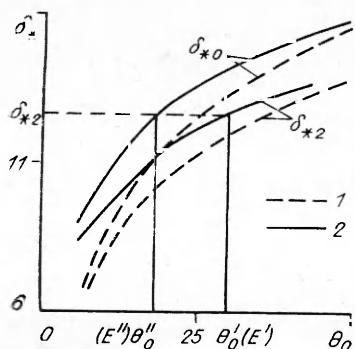
$$\tau_{*2} = \frac{1 + \omega}{1 + \Psi\Theta_0} \left[1 + \frac{4}{\delta_{*2}(1 + \Psi\Theta_0)} \right].$$

Анализ полученных формул (41) в сравнении с численным счетом задачи (5) — (14) без учета сил инерции показывает (см. рисунок), что решение имеет асимптотический характер; разница между аналитическим решением (кривая 1) и расчетом (2) на ЭВМ уменьшается с ростом Θ_0 . Отличие критических характеристик δ_{*2} с учетом связности полей деформации и температуры и работы сил деформации от δ_{*0} усиливается с увеличением Θ_0 , что следует из зависимости $\Pi(\Theta_0)$.

К сожалению, асимптотическая теория не дает возможности оценить работу сил деформации непосредственно перед воспламенением, так как условием воспламенения здесь является бесконечный рост температуры в центре, и, согласно (38), $\Pi(\tau \rightarrow \tau_b) \rightarrow \infty$. Поэтому для оценки изменения энергии активации используем иные соображения. Так, при $\Psi = 0,5$, $\Theta_0 = 30$ $\delta_{*2} \simeq 12,6$ (см. рисунок). Если не учитывать в задаче напряжений и деформации, то те же значения δ_{*2} получаются при $\Theta_0 \simeq 18$, что соответствует меньшей энергии активации E'' . Принимая $T_0 = 600$ К, $T_n = 300$ К, находим $E' \simeq 299\,160$ Дж/моль, $E'' \simeq 179\,496$ Дж/моль, т. е. влияние напряжений и деформаций в данном случае эквивалентно изменению энергии активации химической реакции приблизительно на 67%. Такая оценка согласуется с представлениями [10—15].

Заметим, что параметр связности ω не влияет на критический радиус очага, что следует из самого смысла этого параметра.

3) В сферически-симметричном очаге отличны от нуля три компоненты тензора деформаций: $\epsilon_{\xi\xi}$, $\epsilon_{\varphi\varphi}$, $\epsilon_{\lambda\lambda}$. Первый интеграл системы (5) — (14) по-прежнему имеет вид



(28), а решение инертной задачи легко находится операционным методом. Так, в точке $\xi = 0$

$$\Theta_{in}(0, \tau) = \Theta_0 \left\{ \sqrt{\frac{\delta(1+\omega)}{\pi\tau}} \exp\left(-\frac{\delta(1+\omega)}{4\tau}\right) + \operatorname{erfc}\left(\frac{\sqrt{\delta(1+\omega)}}{2\sqrt{\tau}}\right) \right\}. \quad (42)$$

Для компонент деформаций справедливы выражения

$$\varepsilon_{in\varphi\varphi} = \varepsilon_{in\Lambda\Lambda} = -\frac{1}{\xi^3} \int_0^{\xi} \Theta_{in}(y, \tau) y^2 dy,$$

$$\varepsilon_{in\xi\xi} = -2\varepsilon_{in\varphi\varphi} - \Theta_{in}(\xi, \tau),$$

откуда следует, что при $\xi = 0$

$$\varepsilon_{in\xi\xi} = \varepsilon_{in\varphi\varphi} = \varepsilon_{in\Lambda\Lambda} = -\frac{\Theta_{in}(0, \tau)}{3}. \quad (43)$$

Такие же соотношения справедливы для деформаций и температуры в реагирующем очаге. Используя закон Гука и (43), аналогично предыдущему, найдем для температуры в очаге до воспламенения уравнение, решение которого с точностью до главных порядков имеет вид

$$(1+\omega) \sqrt{\frac{\pi}{b}} e^{a/b} \left[\operatorname{erfc} \sqrt{\left(\frac{a}{b} + f(\Theta_r)\right)} - \operatorname{erfc} \sqrt{\frac{a}{b}} \right] =$$

$$= -\int_0^{\tau} \exp[-\Theta_{in}(y, \xi)(1 + \Psi\Theta_0)] dy, \quad (44)$$

где $a = (1 + \Psi\Theta_0)^2$; $b = 4\Psi\alpha$; $f(\Theta_r) = \Psi\alpha\Theta_r^2 - \Theta_r(1 + \Psi\Theta_0)$; $\alpha = \frac{2}{9}\gamma_2 + \frac{8}{9}(1 - \gamma_1)$.

Дальнейшие выкладки практически не отличаются от плоского случая. Приведем окончательное выражение для времени воспламенения, определяемого по условию неограниченного роста температуры в центре очага:

$$\frac{\tau_b}{1+\omega} \left[1 - 4\Theta_0(1 + \Psi\Theta_0) \sqrt{\frac{\tau_b}{1+\omega}} \frac{1}{\sqrt{\pi\delta}} \exp\left[-\frac{\delta(1+\omega)}{4\tau_b}\right] \right] = F,$$

$$F = \sqrt{\frac{\pi}{b}} \exp\left(\frac{a}{b}\right) \operatorname{erfc} \sqrt{\frac{a}{b}}.$$

Время воспламенения в критических условиях и критический радиус очага, разделяющий воспламенение и потухание, найдем по формулам

$$\tau_{b,*3} = F(1 + 4F/\delta_{*3})(1 + \omega),$$

$$\delta_{*3} = 4F \ln \left[e^{\Theta_0} \sqrt{\frac{\delta_{*3}}{\pi}} (1 + \Psi\Theta_0) \left(1 + \frac{2F}{\delta_{*2}}\right) \right]. \quad (45)$$

Если напряжения не влияют непосредственно на скорость химической реакции ($\Psi = 0$ дает $F = 1$), то δ_{*3} совпадает с решением [25] для случая сферической симметрии, время же воспламенения возрастает в $(1 + \omega)$ раз. Используя те же значения параметров, что и в плоской задаче ($\Psi = 0,5$, $\omega = 0,31$), и задавая $\lambda = 5\mu$, найдем, что в этом частном случае с хорошей точностью выполняется условие $\alpha \ll 1$, $F \simeq (1 + \Psi\Theta_0)^{-1}$, следовательно, характер влияния работы сил деформации на критический радиус очага здесь аналогичен плоской задаче.

4) В задаче с учетом сил инерции ограничимся простыми рассуждениями. Так, в случае $\omega = 0$, $m = 0$, Ψ — малый параметр решение инертной задачи термоупругости приводит к соотношению

$$\varepsilon_{in}(\tau, 0) = -\Theta_{in}(\tau, 0) + F_1(\tau/\sqrt{v_x}), \quad (46)$$

где функция $F_1 = 0$ для $\tau > \sqrt{v_x}$, т. е. упругие возмущения в точке $\varepsilon = 0$

затухают при временах $\tau > \sqrt{v_x}$, и решение (46) приближается к решению квазистатической задачи. Так как малый параметр v_x стоит при старшей производной, то, очевидно, особенность в решении следует ожидать при $\tau \ll 1$.

Формально, переходя к новой переменной $\tau_1 = \tau/\sqrt{v_x}$, для температуры в центре очага до воспламенения получим

$$\partial\Theta_r/\partial\tau_1 = -\exp[-(\Theta_r + \Theta_{in} + \Psi\Pi) + \ln \sqrt{v_x}].$$

Далее, пользуясь малостью τ , для расчета работы сил деформации запишем $\Pi = -\varepsilon_{in}S_{in}$. Аналогично предыдущему, для времени воспламенения $\tau_b < 1$ найдем

$$\frac{1}{\sqrt{v_x}} = \int_0^{\tau_b-1} \exp[-\Theta_{in}(1 + \Psi\Theta_0(\exp(\delta_1 y) - 1)) + \Psi\Theta_0^2 \exp \delta_1 y (\exp \delta_1 y - 1)] dy,$$

где $\delta_1 = \delta/\sqrt{v_x}$. Но так как в точках $|\xi| > 0$ затухание возмущений происходит позже, чем при $\xi = 0$ (а скорость химической реакции зависит от работы сил деформации во всех точках), то разделение процесса на стадии и критерий воспламенения $\Theta_r(0, \tau_b) \rightarrow -\infty$, вообще говоря, в этом случае не имеют места.

В заключение отметим, что предложенная модель с некоторыми дополнениями позволяет определить условия разрушения в очаге на основе известных критериев, а также учесть напряжения и деформации вследствие различия свойств реагента и продукта. Например, в линейном приближении $\alpha_\tau = \alpha_\tau(y) = \alpha_{\tau 0}(1 - y) - \alpha_{\tau 1}y$, где y — выгорание вещества.

ЛИТЕРАТУРА

1. Боуден Ф. П., Иоффе А. Д. Возбуждение и развитие взрыва в твердых и жидких веществах.— М.: ИЛ, 1955.— 120 с.
2. Афанасьев Г. Т., Боболев В. К. Иницирование твердых ВВ ударом.— М.: Наука, 1968.— 140 с.
3. Берман В. С., Рязанцев Ю. С. О поджигании гомогенной реагирующей среды тепловым источником с конечным запасом тепла // ПММ.— 1976.— 40.— С. 6.
4. Гольдшлегер У. И., Барзыкин В. В., Ивлева Т. П. Зажигание конденсированного ВВ пакаленной сферической частицей // ФГВ.— 1973.— 9, № 5.
5. Страковский Л. Г. Об очаговом механизме зажигания некоторых вторичных ВВ монохроматическим световым импульсом // Там же.— 1985.— 21, № 1.— С. 41, 245.
6. Александров Е. И., Вознюк А. П. Влияние статистики поглощающих неоднородностей на лазерное иницирование взрывчатого разложения // Там же.— 1988.— 24, № 6.— С. 98—100.
7. Буркина Р. С., Князева А. Г. Об исследованиях очагового теплового воспламенения и режиме его вырождения // Там же.— 1992.— 28, № 3.
8. Мелан Э., Паркус Г. Термоупругие напряжения, вызываемые стационарными температурными полями.— М., 1958.— 167 с.
9. Подстригач Я. С., Коляно Ю. М. Обобщенная термомеханика.— Киев: Наук. думка, 1976.— 310 с.
10. Чунахин А. П., Сидельников А. А., Болдырев В. В. Влияние возникающих при твердофазных химических превращениях механических напряжений на их кинетику. Общий подход // Изв. АН СССР. Сер. хим. науки.— 1985.— 6.— С. 31—38.
11. Браун М., Доллимор Д., Галвей А. Реакции твердых тел.— М.: Мир, 1983.— 360 с.
12. Казале А., Портер. Реакции полимеров под действием напряжений.— М.: Химия, 1983.— 440 с.
13. Бендерский В. А., Филиппов П. Г., Овчинников М. А. Соотношение теплового и деформационного воспламенения в низкотемпературных твердофазных реакциях // Докл. АН СССР.— 1989.— 308, № 2.— С. 401—405.
14. Бендерский В. А., Титов В. А., Филиппов П. Г. Влияние структурной релаксации на кинетику низкотемпературной реакции фотохлорирования метана // Хим. физика.— 1988.— 7, № 3.— С. 327—334.
15. Болдырев В. В. Механохимия и механическая активация твердых веществ // Изв. АН СССР. Сер. хим. наук.— 1990.— № 10.— С. 2228—2245.
16. Регель В. Р., Муинов Т. М. Применение метода масс-спектрометрии для изучения кинетики выделения летучих продуктов из полимеров, находящихся под нагрузкой // Высокомолекулярные соединения.— 1966.— 8.— С. 841—845.
17. Регель В. Р., Муинов Т. М., Поздняков О. Ф. Применение метода масс-спектромет-

$$T_{p3} = T_{p3}^* - \Delta T.$$

*

—*

$$T_{p3}^* = T_B + \frac{1}{1 + \Pi_r} \left(T_r - T_B + \frac{\Delta H_r}{c_{p3}} \right),$$