

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 накаленными 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 связной задачей термоупругости с центральной симметрией

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

$$x = 0: \frac{\partial T}{\partial x} = 0; \quad x \rightarrow \infty: \frac{\partial T}{\partial x} = 0,$$

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

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

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 $\varepsilon_{rr} = \partial u / \partial x$; 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

$$\begin{aligned} \sigma_{yy} = \sigma_{zz} &= \lambda \varepsilon_{xx} - \sigma_T, \quad \sigma_{xy} = \sigma_{xz} = \sigma_{yz} = 0, \quad m = 0; \\ \sigma_{zz} &= \lambda \left[\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{u}{x} \right] - \sigma_T, \quad \sigma_{\varphi\varphi} = \sigma_{zz} + 2\mu \frac{u}{x}, \\ \sigma_{z\varphi} = \sigma_{\varphi\varphi} &= \sigma_{xz} = 0, \quad m = 1; \\ \sigma_{\varphi\varphi} = \sigma_{\Lambda\Lambda} &= \lambda \left[\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{2}{x} u \right] - 2\mu \frac{u}{x} - \sigma_T, \\ \sigma_{\varphi\varphi} = \sigma_{x\Lambda} &= \sigma_{\varphi\Lambda} = 0, \quad m = 2. \end{aligned}$$

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

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

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

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

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

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

$$t = 0: (\epsilon_{xx_1} - \epsilon_{xx_2})_{x=r} = \sigma_{t0}/(\lambda + 2\mu),$$

$$\sigma_{t0} = \alpha_t (T_0 - T_n) (3\lambda + 2\mu).$$

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

$$\Delta \Phi_0 = \frac{1}{x^m} \frac{\partial}{\partial x} x^m \frac{\partial \Phi_0}{\partial x} = \begin{cases} \sigma_{t0}/(\lambda + 2\mu), & |x| \leq r, \\ 0, & |x| > r. \end{cases}$$

Интегрируя и используя граничные условия, получим

$$u_{01}(0, x) = \frac{\sigma_{t0}}{\lambda + 2\mu} \frac{x}{m+1}, \quad u_{02}(0, x) = \frac{\sigma_{t0}}{\lambda + 2\mu} \frac{r^{m+1}}{x^m} \frac{1}{m+1},$$

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 [1, 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.

Воспользуемся 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

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

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)

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

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

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

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

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

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

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

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

$$S_{\varphi\varphi} = S_{\eta\eta} + \gamma_2 \frac{u}{\xi}, \quad \varepsilon_{\varphi\varphi} = \frac{u}{\xi}, \quad m = 1, \quad \left. \right\} \quad (10)$$

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

$$\varepsilon_{\varphi\varphi} = \varepsilon_{\Lambda\Lambda} = \frac{u}{\xi}, \quad m = 2. \quad \left. \right\}$$

Остальные компоненты — нулевые.

Границные и начальные условия

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

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

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

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} = 0,$$

$$u = \Theta_0 \xi / (m + 1) = u_{01}, \quad |\xi| \leq 1, \quad (14)$$

$$u = \Theta_0 / (m + 1) \xi^m = u_{02}, \quad |\xi| > 1,$$

где $\Theta_0 = (T_0 - T_\infty) E_0 / RT_0^2; \delta = r^2 / \kappa t_*; \kappa = \lambda_\tau / c_v \rho;$

$$\omega = \alpha_\tau^2 \frac{(3\lambda + 2\mu)^2}{(\lambda + 2\mu)} \frac{T_0}{c_v \rho}; \beta = \frac{RT_0}{E_0} = \frac{T_0 - T_\infty}{T_0} \Theta_0^{-1};$$

$$v_x = \delta \left(\frac{v_\tau}{v_c} \right)^2 (v_\tau = \sqrt{\kappa / t_*} — скорость тепловых волн; v_c = \sqrt{\frac{\lambda + 2\mu}{\rho}} — скорость поперечных упругих волн); \gamma_1 = \lambda / (\lambda + 2\mu); \gamma_2 = 2\mu / (\lambda + 2\mu); \Pi = -\Sigma(\sigma_{ik} \epsilon_{ik}); \Psi = \Psi_0 \frac{\omega \beta}{1 - \beta \Theta_0}, \Psi_0 = k \frac{\mu c_v}{E_0} T_0.$$

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

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

Очевидно, $\gamma_1 < 1, \gamma_2 < 1, \beta \ll 1$. Оценим области изменения новых для очагового воспламенения параметров ω и v_x . Например, полагая $T_0 = 2T_\infty$ и используя данные [24], получим для стали, алюминия, свинца и поливинилбутираля $\omega \approx 0,0224; 0,075; 0,125$ 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 $t_* = 10^{-6} \div 1$, 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 сращиваемых асимптотических разложений при условии $\Theta_0 \gg 1, \delta \gg 1$ по схеме, развитой в [25].

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

$$\frac{\partial \Theta_r}{\partial \tau} = \delta^{-1} \frac{1}{\xi^m} \frac{\partial}{\partial \xi} \xi^m \frac{\partial \Theta_r}{\partial \xi} + \omega \frac{\partial}{\partial \tau} \left[\xi^{-m} \frac{\partial (u \xi^m)}{\partial \xi} \right] [1 - \beta (\Theta_r + \Theta_{in})] - \exp \left[- \frac{\Theta_r + \Theta_{in} + \Psi \Pi}{1 - \beta (\Theta_r + \Theta_{in})} \right], \quad (16)$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

При условиях $\Theta_0 \gg 1, \delta \gg 1$ ($\beta = \sigma/\Theta_0 \ll 1, \sigma := \frac{T_0 - T_n}{T_0}$) уравнение

(17) для температуры в очаге примет вид

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

$$\text{где } \Pi = \sum_i (S_{rii} + S_{inii}) (\varepsilon_{rii} + \varepsilon_{inii}). \quad (27)$$

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 термоапрояжений. 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

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

где ε_{01} , ε_{02} — величины деформаций в начальный момент времени (остальные 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 переменным $\varphi = \Theta_r/\Theta_0$, $\xi_1 = (\xi - 1)/\sqrt{\delta}$, $u_1 = u_r$. 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 срашивания 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 перемещений 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 напряжений в частном случае $m = 0$ и $v_x = 0$ найдены. Определяя асимптотическое время разрушения τ_r как условие $\varepsilon_r \rightarrow \infty$, найдем $\tau_p = \tau_b$.

2) Если энергия активации реакции меняется под действием напряжений, но $v_x = 0$, то поле температур внутри очага ($|\xi| < 1$) также найдем 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 предыдущим. (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 $0 \left(\frac{\Theta_0}{\delta \sqrt{\delta}} e^{-\delta(1+\omega)/4\tau}, \frac{\Theta_0^2}{\delta} e^{-\delta(1+\omega)/2\tau} \right)$ 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:

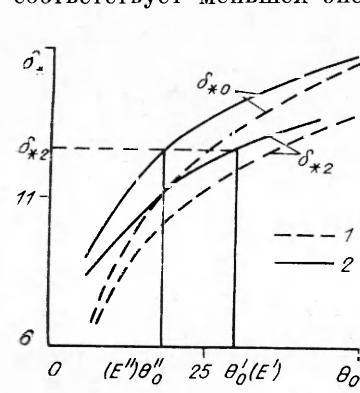
$$\begin{aligned} \delta_{*2} &= \frac{4}{1 + \Psi\Theta_0} \ln \left[\frac{2e\Theta_0 V(1 + \Psi\Theta_0)}{\sqrt{\pi}\delta_{*2}} \left(1 + \frac{6}{\delta_{*2}(1 + \Psi\Theta_0)} \right) \right], \\ \tau_{*2} &= \frac{1 + \omega}{1 + \Psi\Theta_0} \left[1 + \frac{4}{\delta_{*2}(1 + \Psi\Theta_0)} \right]. \end{aligned} \quad (41)$$

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 $\Psi = 0,5$, $\Theta_0 = 30$ $\delta_{*2} \approx 12,6$ (см. рисунок). Если не учитывать в задаче напряжения и деформации, то те же значения δ_{*2} получаются при $\Theta_0 \approx 18$, что соответствует меньшей энергии активации E'' . Принимая $T_0 = 600$ К, $T_n = 300$ К, находим $E' \approx 299\,160$ Дж/моль, $E'' \approx 179\,496$ 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

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

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

$$\begin{aligned} (1+\omega) \sqrt{\frac{\pi}{b}} e^{a/b} \left[\operatorname{erfc} \sqrt{\left(\frac{a}{b} + f(\Theta_r)\right)} - \operatorname{erfc} \sqrt{\frac{a}{b}} \right] &= \\ = - \int_0^\tau \exp[-\Theta_{in}(y, \xi)(1 + \Psi\Theta_0)] dy, \end{aligned} \quad (44)$$

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:

$$\begin{aligned} \frac{\tau_b}{1+\omega} \left[1 - 4\Theta_0(1 + \Psi\Theta_0) \sqrt{\frac{\tau_b}{1+\omega}} \frac{1}{\sqrt{\pi\delta}} \exp\left[-\frac{\delta(1+\omega)}{4\tau_b}\right] \right] &= F, \\ F &= \sqrt{\frac{\pi}{b}} \exp\left(\frac{a}{b}\right) \operatorname{erfc} \sqrt{\frac{a}{b}}. \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} \tau_{b,*3} &= F(1 + 4F/\delta_{*3})(1 + \omega), \\ \delta_{*3} &= 4F \ln \left[e\Theta_0 \sqrt{\frac{\delta_{*3}}{\pi}} (1 + \Psi\Theta_0) \left(1 + \frac{2F}{\delta_{*2}}\right) \right]. \end{aligned} \quad (45)$$

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

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

Далее, пользуясь малостью τ , для расчета работы сил деформации запишем $\Pi = -\epsilon_{in}S_{in}$. Аналогично предыдущему, для времени воспламенения $\tau_{b1} < 1$ найдем

$$\frac{1}{\sqrt{v_x}} = \int_0^{\tau_{b1}} \exp[-\Theta_{in}(1 + \Psi\Theta_0(\exp(\delta_1 y) - 1)) + \Psi\Theta_0^2 \exp \delta_1 y (\exp \delta_1 y - 1)] dy,$$

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 $\alpha_r = \alpha_r(y) = \alpha_{r0}(1 - y) - \alpha_{ry}y$, где y — выгорание вещества.

ЛИТЕРАТУРА

- Боуден Ф. П., Иоффе А. Д. Воздушение и развитие взрыва в твердых и жидкых веществах. — М.: ИЛ, 1955. — 120 с.
- Афанасьев Г. Т., Боболов В. К. Инициирование твердых ВВ ударом. — М.: Наука, 1968. — 140 с.
- Берман В. С., Рязанцев Ю. С. О поджигании гомогенной реагирующей среды тепловым источником с конечным запасом тепла // ПММ. — 1976. — 40. — С. 6.
- Гольдшлегер У. И., Барзыкин В. В., Ивлева Т. П. Зажигание конденсированного ВВ пакаленной сферической частицей // ФГВ. — 1973. — 9, № 5.
- Страковский Л. Г. Об очаговом механизме зажигания некоторых вторичных ВВ монохроматическим световым импульсом // Там же. — 1985. — 21, № 1. — С. 41, 245.
- Александров Е. И., Вознюк А. П. Влияние статистики поглощающих неоднородностей на лазерное инициирование взрывчатого разложения // Там же. — 1988. — 24, № 6. — С. 98—100.
- Буркина Р. С., Князева А. Г. Об исследованиях очагового теплового воспламенения и режиме его вырождения // Там же. — 1992. — 28, № 3.
- Мелан Э., Паркус Г. Термоупругие напряжения, вызываемые стационарными температурными полями. — М., 1958. — 167 с.
- Подстригач Я. С., Коляно Ю. М. Обобщенная термомеханика. — Киев: Наук. думка, 1976. — 310 с.
- Чупахин 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.
- Браун М., Доллимор Д., Галвей А. Реакции твердых тел. — М.: Мир, 1983. — 360 с.
- Казале А., Порттер. Реакции полимеров под действием напряжений. — М.: Химия, 1983. — 440 с.
- 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.
- 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.
- Болдырев В. В. Механохимия и механическая активация твердых веществ // Изв. АН СССР. Сер. хим. наук. — 1990. — № 10. — С. 2228—2245.
- 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.
- Регель В. Р., Муинов Т. М., Поздняков О. Ф. Применение метода масс-спектрометрии

- рии для исследования механического разрушения полимеров // ФТТ.— 1962.— 4, № 9.— С. 2468.
18. Ениколопян Н. С., Вольева В. Б., Хазарджян А. А. и др. Взрывные химические реакции в твердых телах // Докл. АН СССР.— 1987.— 292, № 5.— С. 1165—1169.
 19. Ениколопян Н. С. Сверхбыстрые химические реакции в твердых телах // ЖФХ.— 1989.— 63, № 9.— С. 2283—2298.
 20. Kuo K. K., Moreci J. A. Crack propagation and branching in burning solid propellants/21st Int. Symp. Combust., Munich, Aug. 3—8, 1986, Abstr. Symp. Pap. and Abstr. Poster. Sess. Present. Pittsburg. Pa. JA. 230.
 21. Коваленко Ю. А. Теория стационарного фронта термического разложения, сопровождающегося разрушением твердого тела // Изв. СО АН СССР. Сер. технич. наук.— 1989.— 4.— С. 25—28.
 22. Базаров И. П. Термодинамика.— М., 1961.— 292 с.
 23. Князева А. Г. Зажигание колденсированного вещества горячей пластиной с учетом термоапряжений // ФГВ.— 1992.— 28, № 1.— С. 13—18.
 24. Грибанов В. Ф., Паничкин Н. Г. Связанные и динамические задачи термоупругости.— М.: Машиностроение, 1984.— 182 с.
 25. Буркина Р. С., Вилюнов В. Н. Асимптотика задач теории горения.— Томск: Издво Том. ун-та, 1982.— 100 с.

г. Томск

Поступила в редакцию 17/XII 1992

УДК 536.462

O. A. Алексеев

ВЛИЯНИЕ ТЕПЛООБМЕНА ИЗЛУЧЕНИЕМ НА ТЕМПЕРАТУРУ РЕАКЦИОННОЙ ЗОНЫ ДИФФУЗИОННОГО ПЛАМЕНИ

Получено выражение для погрешности расчета температуры реакционной зоны оптически тонкого диффузионного пламени, обусловленной неучетом теплообмена излучением. Показано, что значение этой погрешности максимально для пиротехнических и углеводородных пламен с высокой концентрацией сажи и может достигать нескольких сотен градусов.

Междуд пламенем и окружающей средой происходит теплообмен излучением. Пламя, излучая фотоны, передает окружающей среде часть своей энергии. Поглощая фотоны, излученные окружающей средой, оно одновременно приобретает энергию.

Отражающее этот факт выражение для температуры наиболее горячей части пламени, его реакционной зоны (РЗ), можно записать в виде

$$T_{\text{pz}} = T_{\text{pz}}^* - \Delta T,$$

Здесь T_{pz}^* — значение, определяемое расчетом без учета теплообмена излучением; $\Delta T = T_{\text{и}} - T_{\text{п}}$; $T_{\text{и}} = \Phi_{\text{и}} t_{\text{pz}} / c_{\text{pz}} m_{\text{pz}}$ — температурный эквивалент энергии фотонов, излучаемых РЗ пламени; $T_{\text{п}} = \Phi_{\text{п}} t_{\text{pz}} / c_{\text{п}} m_{\text{п}}$ — температурный эквивалент энергии фотонов, излучаемых окружающей средой и поглощаемых РЗ пламени; $\Phi_{\text{и}}, \Phi_{\text{п}}$ — мощность потока фотонов, излучаемых РЗ пламени и окружающей средой и поглощаемых РЗ пламени соответственно; m_{pz} — масса РЗ; t_{pz} — длительность пребывания в РЗ оптически активных компонентов (излучающих и поглощающих).

Формула для расчета T_{pz}^* приведена в [1, 2]:

$$T_{\text{pz}}^* = T_{\text{в}} + \frac{1}{1 + \Pi_{\text{г}}} \left(T_{\text{г}} - T_{\text{в}} + \frac{\Delta H_{\text{г}}}{c_{\text{pz}}} \right),$$

где $T_{\text{в}}, T_{\text{г}}$ — температура воздуха и горючего соответственно; $\Pi_{\text{г}}$ — стехиометрический коэффициент сгорания горючего в воздухе; $\Delta H_{\text{г}}$ — удельная энергия сгорания горючего в воздухе; c_{pz} — удельная изобарная теплоемкость РЗ.