КРИТИЧЕСКИЕ УСЛОВИЯ ТЕПЛОВОГО ВЗРЫВА ДЛЯ АВТОКАТАЛИТИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ ГОРЕНИЯ С УЧЕТОМ ТЕПЛОПЕРЕДАЧИ

И.А. Андреев, В.А. Соболев

Настоящая работа посвящена применению метода интегральных многообразий и техники траектории-уток для моделирования критических явлений в сингулярно возмущенной дифференциальной системе, возникающей при анализе задачи о тепловом взрыве в случае автокаталитической реакции горения с учетом теплопередачи.

Для широкого круга химических процессов характерно резкое различие скоростей превращения веществ, участвующих в этих процессах, и резкое различие скоростей тепловых и концентрационных изменений. В частности, для систем горения естественной является высокая скорость тепловыделения при сравнительно низкой скорости расходования горящего вещества. Это различие носит настолько резкий характер для газофазных систем, что явление самовоспламенения газовой смеси приобрело название "теплового взрыва". Математическая модель химической системы, в которой существует разделение на быструю и медленную подсистемы, является сингулярно возмущенной дифференциальной системой.

Рассмотрим систему уравнений:

$$\begin{cases} \varepsilon\dot{x} &= f(x,y,t,\varepsilon) \\ y &= g(x,y,t,\varepsilon)\ , \end{cases} \tag{1}$$

где x и y — скалярные переменные, $\varepsilon > 0$ — малый скалярный параметр.

Определение. Медленным интегральным многообразием сингулярно возмущенной системы вида (1) называют гладкую инвариантную поверхность $x = h(y,t,\varepsilon)$, движение по которой описывается уравнением $\dot{y} = g(h(y,t,\varepsilon),y,t,\varepsilon)$ [1].

Чтобы прояснить подход, развиваемый в данной работе для полулинейной сингулярно возмущенной параболической системы, рассмотрим сначала автономную систему второго порядка:

$$\begin{cases} \varepsilon\dot{x} &= f(x,y,a) \\ \dot{y} &= g(x,y,a)\ , \end{cases} \tag{2}$$

где x и y — скалярные переменные, a — скалярный параметр, $\varepsilon > 0$ — малый скалярный параметр.

Кривую $f(x,y,a)=0$ называют медленной кривой, причем часть кривой где $\frac{\partial f}{\partial x}>0$ — неустойчива, а где $\frac{\partial f}{\partial x}<0$ — устойчива.

Определение. Траектории системы (2), проходящие бесконечно близко к медленной кривой, сначала вдоль устойчивой части, потом вдоль неустойчивой, называют траекториями–утками [2].

Заметим, что траектории–утки представляют собой устойчиво–неустойчивые одномерные медленные интегральные многообразия системы (2).

Теорема. *Пусть при $a=a^*$ медленная кривая системы (2) имеет точку самопересечения (x_0,y_0)*

$$\left.\frac{\partial f}{\partial x}\right|_{x_0,y_0,a^*}=0;\ \left.\frac{\partial f}{\partial y}\right|_{x_0,y_0,a^*}=0;\ \left.\frac{\partial f}{\partial a}\right|_{x_0,y_0,a^*}\neq 0\ .$$

Пусть $g(x,y,a)$ нигде не равна нулю. Тогда для каждой утки, проходящей через точку фазовой плоскости $(x_0;y_0)$, существует функция $A(\varepsilon)$, такая что , $A(0)=a^*$ и при $a=A(\varepsilon)$ фазовые кривые системы (2) стремятся к траектории–утке при $\varepsilon\to 0$ [2].

Рассмотрим сосредоточенную модель горения, которая описывается системой уравнений вида (2):

$$\begin{cases}\varepsilon\dfrac{d\vartheta}{d\tau} &= \eta(1-\eta)exp(\dfrac{\vartheta}{1+\beta\vartheta})-\alpha\vartheta\\ \dfrac{d\eta}{d\tau} &= \eta(1-\eta)exp(\dfrac{\vartheta}{1+\beta\vartheta})\ .\end{cases} \tag{3}$$

Это математическая модель задачи о тепловом взрыве в случае автокаталитической реакции. Здесь $\vartheta=\frac{E(T-T_0)}{RT_0^2}$ — безразмерная температура , $\eta=1-\frac{C}{C_0}$ — степень выгорания , $\varepsilon=\frac{\rho CRT_0^2}{QE}$ – параметр, характеризующий экзотермичность реакции, $\beta=\frac{RT_0}{E}$ — температурная чувствительность реакции, α — параметр, характеризующий начальное состояние системы. Поставим перед собой задачу найти такие значения параметра α, которые отделяли бы медленное протекание реакции от быстрого (взрывного).

Начальные условия имеют вид:

$$\vartheta|_{\tau=0}=0;\ \eta|_{\tau=0}=0\ . \tag{4}$$

Параметры β и ε естественно считать малыми. Поскольку β входит в систему (3) регулярным образом, будем полагать ниже $\beta=0$. Такая задача рассматривалась в работах [3,4].

Медленная кривая системы (3) определяется уранением :

$$\eta(1-\eta)exp(\vartheta)-\alpha\vartheta=0\ . \tag{5}$$

При $\alpha=e/4$, точка $(1/2;1)$ на фазовой плоскости (η,ϑ) является точкой самопересечения медленной кривой (5), причем при $\vartheta>1$ имеем неустойчивую часть кривой (5), а при $\vartheta<1$ устойчивую.

Выразим η через ϑ:

$$\eta=\frac{1}{2}(1\pm\sqrt{1-4\alpha\vartheta e^{-\vartheta}})\ . \tag{6}$$

При $\alpha<e/4$ фазовые кривые системы (3), выходя из начальной точки $(0;0)$, движутся до некоторой точки (η^*,ϑ^*), а затем значение ϑ начинает неограниченно возрастать при несущественных изменениях значения η, что соответствует взрывному режиму. При $\alpha>e/4$

фазовые кривые, выходя из начальной точки $(0;0)$, движутся вдоль медленной кривой до точки $(\eta^*;\vartheta^*)$, что соответствует стадии разогрева, а затем химическая система охлаждается вплоть до завершения процесса. Таким образом, значения $\alpha > e/4$ соответствуют медленному режиму.

Траекторию–утку будем искать в виде асимптотического разложения по степеням малого параметра ε:

$$\eta(\vartheta,\varepsilon) = \eta_0(\vartheta) + \varepsilon\eta_1(\vartheta) + O(\varepsilon^2)\ . \tag{7}$$

Аналогично записываем разложение для α:

$$\alpha = \alpha_0 + \alpha_1\varepsilon + O(\varepsilon^2)\ . \tag{8}$$

Подставляя разложения (7) и (8) в систему (3), находим первое приближение критического значения параметра α и отвечающей этому значению траектории системы (3), которую мы назовем критической:

$$\begin{aligned} \alpha^* &= \frac{e}{4}(1 - 2\sqrt{2}\varepsilon + O(\varepsilon^2)),\\ \alpha^{**} &= \frac{e}{4}(1 + 2\sqrt{2}\varepsilon + O(\varepsilon^2)). \end{aligned} \tag{9}$$

$$\eta_0 = \begin{cases} \frac{1}{2}(1 - \sqrt{1-\vartheta exp(1-\vartheta)}), & 0<\vartheta<1\\ \frac{1}{2}(1 + \sqrt{1-\vartheta exp(1-\vartheta)}), & \vartheta>1 \end{cases}$$

$$\eta_1 = \frac{\vartheta(\alpha_0 + \alpha_1\eta_0')}{\eta_0'(1-2\eta_0)\exp\vartheta},\ где \alpha_1 = e\sqrt{2}/2. \tag{10}$$

При $\alpha < \alpha^*$ трактории системы (3) будут "срываться" на взрывной режим в окрестности точки $(1/2;1)$. Таким образом, критическая траектория является траекторией–уткой. Заметим,что параметру $\alpha > \alpha^{**}$ отвечают медленные режимы протекания реакции. Интервал значений $(\alpha^*;\alpha^{**})$ соответствует переходным режимам, которые не являются ни медленными, ни взрывными. Траектории, описывающие переходный режим, являются также траекториями–утками.

Теперь, если учитывать теплопередачу по объему реакционного сосуда, получим систему уравнений вида [5,6]:

$$\begin{cases} \varepsilon\dfrac{\partial\vartheta}{\partial\tau} &= \eta(1-\eta)exp(\dfrac{\vartheta}{1+\beta\vartheta}) + \dfrac{1}{\delta}\left(\dfrac{\partial^2\vartheta}{\partial\xi^2} + \dfrac{n}{\xi}\dfrac{\partial\vartheta}{\partial\xi}\right)\\ \dfrac{\partial\eta}{\partial\tau} &= \eta(1-\eta)exp(\dfrac{\vartheta}{1+\beta\vartheta})\ , \end{cases} \tag{11}$$

где $n=0$ соответствует плоскопараллельному реактору, а $n=1$ — цилиндрическому. Предполагая, что температура граничной поверхности равна температуре окружающей среды, и, исходя из симметрии реакционного сосуда, возьмем граничные условия в виде:

$$\left.\frac{\partial\vartheta}{\partial\xi}\right|_{\xi=0} = 0;\ \vartheta|_{\xi=1} = 0. \tag{12}$$

Рассмотрим сначала задачу для цилиндрического реактора. Так как параметр β входит в систему регулярным образом, положим его равным нулю. Полагая $\varepsilon = 0$, получим задачу для нулевого приближения:

$$\vartheta_0'' + \frac{1}{\xi}\vartheta_0' + \delta\eta(1-\eta)e^{\vartheta_0} = 0,$$

$$\vartheta_0'|_{\xi=0} = 0;\ \vartheta_0|_{\xi=1} = 0. \tag{13}$$

Решением (13) будет:

$$\vartheta_0 = 2ln\frac{2\nu\kappa}{1+\xi^2\kappa^2}\ ,$$

$$\kappa = \nu \pm \sqrt{\nu^2-1},$$

$$\nu = \sqrt{\frac{2}{\delta\eta(1-\eta)}}.$$

Из условия самопересечения медленной кривой в точке $(1/2; 1)$ находим нулевое приближение критического параметра δ: $\delta_0 = 8$.

Записываем формальное асимптотическое разложение для ϑ и δ:

$$\vartheta(\eta,\xi,\varepsilon) = \vartheta_0(\eta,\xi) + \varepsilon\vartheta_1(\eta,\varepsilon) + O(\varepsilon^2),$$

$$\delta = \delta_0(1+\varepsilon\delta_1) + O(\varepsilon^2). \tag{14}$$

Подставляя (14) в (11) и (12) и приравнивая коэффициенты при первой степени ε, получаем задачу для ϑ_1 и δ_1:

$$\begin{aligned} \vartheta_1'' + \frac{1}{\xi}\vartheta_1' + 8\eta(1-\eta)e^{\vartheta_0}\vartheta_1 &= 8\eta(1-\eta)e^{\vartheta_0}(\frac{\partial\vartheta_0}{\partial\eta} - \delta_1)\ , \\ \vartheta_1'|_{\xi=0} &= 0;\ \vartheta_1|_{\xi=1} = 0\ , \end{aligned} \tag{15}$$

где $\vartheta_1 = (1-\xi^2)/(1+\xi^2)$ — решение однородной задачи (15). Тогда условие разрешимости неоднородной краевой задачи (15) имеет вид:

$$\int_0^1 (\frac{\partial\vartheta_0}{\partial\eta} - \delta_1)\frac{1-\xi^2}{(1+\xi^2)^3}d\xi = 0\ .$$

Из последнего равенства находим δ_1. Таким образом,

$$\delta^* = 8(1+\varepsilon\frac{4(8+3\pi)}{3(4+\pi)}) + O(\varepsilon^2)\ ,$$

$$\delta^{**} = 8(1-\varepsilon\frac{4(8+3\pi)}{3(4+\pi)}) + O(\varepsilon^2)\ .$$

Здесь δ^* соответствует решению–утке. При $\delta > \delta^*$ трактории системы (3) будут "срываться" на взрывной режим . Параметру $\delta < \delta^{**}$ отвечают медленные режимы протекания реакции. Интервал значений $\delta \in (\delta^{**}, \delta^*)$ соответствует переходным режимам.

Рассмотрим теперь задачу о тепловом взрыве в случае автокаталитической реакции с учетом теплопередачи по объему реакционного сосуда для плоскопараллельного реактора. Уравнения (11) в этом случае принимают вид:

$$\left\{\begin{aligned} \varepsilon\frac{\partial\vartheta}{\partial\tau} &= \eta(1-\eta)exp\left(\frac{\vartheta}{1+\beta\vartheta}\right) + \frac{1}{\delta}\frac{\partial^2\vartheta}{\partial\xi^2} \\ \frac{\partial\eta}{\partial\tau} &= \eta(1-\eta)exp\left(\frac{\vartheta}{1+\beta\vartheta}\right). \end{aligned}\right. \tag{16}$$

Медленное интегральное многообразие системы (12),(16) и значение параметра δ будем искать в виде асимптотического разложения по целым степеням малого параметра ε:

$$\vartheta(\eta,\xi,\varepsilon)=\vartheta_0+\vartheta_1\varepsilon+O(\varepsilon^2), \tag{17}$$

$$\delta=\delta_0(1+\delta_1\varepsilon)+O(\varepsilon^2),$$
$$\beta=\beta_0\varepsilon+O(\varepsilon^2). \tag{18}$$

Подставляя разложения (17) , (18) в (12) , (16), получаем задачи для нулевого и первого приближения медленного интегрального многообразия:

$$\frac{\partial^2\vartheta_0}{\partial\xi^2}+\delta_0\eta(1-\eta)e^{\vartheta_0}=0 \tag{19}$$

$$\left.\frac{\partial\vartheta}{\partial\xi}\right|_{\xi=0}=0\ ;\ \vartheta|_{\xi=0}=0\ .$$

$$\frac{\partial^2\vartheta_1}{\partial\xi^2}+\delta_0\eta(1-\eta)e^{\vartheta_0}\vartheta_1+\delta_0\eta(1-\eta)(\delta_1-\beta_0\vartheta_0^2)e^{\vartheta_0}=\delta_0\frac{\partial\vartheta_0}{\partial\tau}, \tag{20}$$

$$\left.\frac{\partial\vartheta}{\partial\xi}\right|_{\xi=0}=0\ ;\ \vartheta|_{\xi=0}=0\ .$$

Рассмотрим краевую задачу для нулевого приближения:

$$y''+ae^y=0 \tag{21}$$

$$y'(0)=y(1)=0\ .$$

Решение этой задачи имеет вид:

$$y=2ln(ch(\sigma))-2ln(ch(\sigma\xi))\ ,$$

где σ представляет собой решение трансцендентного уравнения

$$ch\sigma=\sigma\sqrt{\frac{2}{a}}$$

При некотором значении $a=a^*$ последнее уравнение имеет одно решение $\sigma=\sigma^*$, при $a>a^*$ решений нет, а при $a<a^*$ имеется два решения. Приближенные численные значения для a^* и σ^*: $a^*=0.878457$, $\sigma^*=1.19968$. Нетрудно видеть, что краевые задачи (19) и (21), совпадают при $a=\delta_0\eta(1-\eta)$. Наибольшее значение правой части этого равенства равно $\delta/4$ при $\eta=1/2$. Поэтому критическое значение коэффициента δ в нулевом приближении равно $4a^*$, т.е. $\delta_0=3.513828$. Подставляя полученные значения в (20), получим:

$$\frac{1}{\delta_0}\frac{\partial^2\vartheta_1}{\partial\xi^2}+\frac{1}{4}e^{\vartheta_0}\vartheta_1+\frac{1}{4}(\delta_1-\beta_0\vartheta_0^2)e^{\vartheta_0}=\frac{\partial\vartheta_0}{\partial\tau} \tag{22}$$

$$\left.\frac{\partial\vartheta}{\partial\xi}\right|_{\xi=0}=0\ ;\ \vartheta|_{\xi=0}=0\ .$$

Зная ϑ_0, из условия разрешимости краевой задачи (8) находим δ_1. Таким образом

$$\delta_1^*=8.892+2.559\beta_0$$

$$\delta_1^{**} = -8.892 + 2.559\beta_0$$
$$\delta^* = \delta_0(1 + \delta_1^* \varepsilon) + O(\varepsilon^2)$$
$$\delta^{**} = \delta_0(1 + \delta_1^{**} \varepsilon) + O(\varepsilon^2)$$

Здесь δ^* соответствует решению–утке. При $\delta > \delta^*$ тракториии системы (3) будут "срываться" на взрывной режим . Параметру $\delta < \delta^{**}$ отвечают медленные режимы протекания реакции. Интервал значений $\delta \in (\delta^{**}, \delta^*)$ соответствует переходным режимам.

Таким образом, получены критические условия теплового взрыва для автокаталитической реакции горения с учетом теплопередачи, найдены асимптотические разложения критических траекторий.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Фонда фундаментальных исследований, грант 94–01–00175.

Литература

[1] В.В. Стрыгин, В.А. Соболев .. Разделение движений методом интегральных многообразий. М.:Наука, 1988.

[2] В.И. Арнольд, В.С. Афраймович, Ю.С. Ильяшенко, Л.П. Шильников .. Современные проблемы математики: Фундаментальные направления. М.: ВИНИТИ **5** (1986) 5.

[3] G.N. Gorelov, V.A. Sobolev .. Appl. Math. Lett. **5, N 6** (1992) 3.

[4] G.N. Gorelov, V.A. Sobolev .. Combust. Flame **87** (1991) 203.

[5] Д.А. Франк–Каменецкий .. Диффузия и теплоотдача в химической кинетике. М.:Наука, 1967.

[6] А.Б. Васильева, В.Ф. Бутузов .. Асимптотические методы в теории сингулярных возмущений.. М.:Высш. шк., 1990.

Поступила в редакцию

30.10.95.