МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИТИЧЕСКИХ УСЛОВИЙ САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ ДЛЯ ЦИЛИНДРИЧЕСКОГО И СФЕРИЧЕСКОГО РЕАКТОРОВ

И.А. Андреев[1]

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.

1 Введение

Случай плоскопараллельного реактора был рассмотрен в работе [1], поэтому ограничимся рассмотрением только цилиндрического и сферического реактора.

Асимптотические методы для изучения медленных режимов горения с учетом диффузии и теплопередачи применялись в работах [3,4,5]. Для плоскопараллельного реактора построена асимптотика и доказана теорема об оценке остаточного члена ряда и проанализировано безвзрывное течение реакции.

Рассмотрим систему уравнений:

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

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 $\dot{y} = g(h(y,t,\varepsilon),y,t,\varepsilon)$ [6].

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

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

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.

[1]Андреев Илья Александрович. Кафедра дифференциальных уравнений и автоматического управления Самарского государственного университета

Определение . Траектории системы (2), проходящие бесконечно близко к медленной кривой, сначала вдоль устойчивой части, потом вдоль неустойчивой, называют траекториями - утками [7].

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 $\varepsilon \to 0$ [7].

После оригинального открытия феномена в уравнении Ван Дер Поля, сделанного Бенуа, траектории-утки были зафиксированы в ряде систем. Например, модель Крейцера [10], уравнения Фиц Хак Нагамо [11], двумерный Oregonator[12] и Autocatalator [13].

Рассмотрим задачу о нахождении критических условий теплового взрыва для автокаталитической реакции горения. Если учитывать теплопередачу по объему реакционного сосуда и диффузию реагирующего вещества, то придем к системе типа "реакция-диффузия" в форме [2]:

$$\begin{array}{rcl} \varepsilon\frac{\partial\theta}{\partial\tau} & = & \varphi(\eta)\exp\left(\frac{\theta}{1+\beta\theta}\right) + \frac{1}{\delta}\Delta\theta \\ \frac{\partial\eta}{\partial\tau} & = & \varphi(\eta)\exp\left(\frac{\theta}{1+\beta\theta}\right) + \frac{1}{\mu\varepsilon}\Delta\eta\ . \end{array} \tag{3}$$

Здесь $\eta = 1 - C/C_0$; $\theta = E(T - T_0)/(RT_0^2)$; $\tau = tQEK_0\exp\left(-\frac{E}{RT_0}\right)/(C\rho RT_0)$; $\varepsilon = \rho CRT_0^2/(QE)$; $\beta = RT_0/E$; $\mu = \lambda/(\rho CD)$.

$\delta = QEr^2K_0\exp\left(-\frac{E}{RT_0}\right)/(\lambda RT_0^2)$ – критерий Франк-Каменецкого, r – характерный размер области (радиус сосуда), $\varphi(\eta) = \eta^n$ – для реакции n-го поядка, $\varphi(\eta) = \eta(1 - \eta)$ – для автокаталитической реакции.

Ограничиваясь рассмотрением симметричных реакционных сосудов, будем считать, что функции θ и η зависят только от одной постранственной переменной x. Используя безразмерную переменную $\xi = x/r$, запишем уравнения (3) в виде

$$\begin{array}{rcl} \varepsilon\frac{\partial\theta}{\partial\tau} & = & \varphi(\eta)\exp\left(\frac{\theta}{1+\beta\theta}\right) + \frac{1}{\delta}\left(\frac{\partial^2\theta}{\partial\xi^2} + \frac{n}{\xi}\frac{\partial\theta}{\partial\xi}\right)\ , \\ \frac{\partial\eta}{\partial\tau} & = & \varphi(\eta)\exp\left(\frac{\theta}{1+\beta\theta}\right) + \frac{1}{\mu\varepsilon}\left(\frac{\partial^2\eta}{\partial\xi^2} + \frac{n}{\xi}\frac{\partial\eta}{\partial\xi}\right)\ , \end{array} \tag{4}$$

где $n = 0$ соответствует плоскопараллельному реактору, $n = 1$ – цилиндрическому, а $n = 2$ – сферическому.

Для невырожденных режимов горения параметры β и ε, характеризующие соответственно температурную чувствительность и экзотермичность химической реакции, естественно считать малыми. Поскольку правые части уравнений (4) содержат параметр β регулярным образом, будем полагать ниже $\beta = 0$. Это мало скажется на характеристиках процесса горения, но позволит существенно упростить анализ задачи.

Пусть $B_i = \sigma r/\lambda$ – критерий Био, характеризующий отношение скорости поступления тепла через граничную поверхность реакционного сосуда к скорости распространения тепла в реагирующем веществе. Исходя из симметрии рекционного сосуда, граничные условия для θ могут быть представлены в виде

$$\left.\frac{\partial\theta}{\partial\xi}\right|_{\xi=0} = 0\ ,\ \ \left.\frac{\partial\theta}{\partial\xi}\right|_{\xi=1} = -\left. B_i\theta\right|_{\xi=1}\ . \tag{5}$$

Случай конечного значения B_i соответствует граничным условиям третьего рода, то есть предполагается, что плотность теплового потока через граничную поверхность пропорциональна разности температур реагирующего вещества и окружающей среды.

Граничные условия первого рода получаются при $B_i \to \infty$, когда температура граничной поверхности равна температуре окружающей среды:

$$\left.\theta\right|_{\xi=1} = 0\ . \tag{6}$$

Случай $B_i = 0$ соответствует граничным условиям второго рода, когда граничная поверхность теплоизолирована:

$$\left.\frac{\partial\theta}{\partial\xi}\right|_{\xi=1} = 0\ . \tag{7}$$

Будем считать, что стенки реакционного сосуда непроницаемы для реагирующего вещества, то есть поток вещества через стенки сосуда отсутствует:

$$\left.\frac{\partial\eta}{\partial\xi}\right|_{\xi=0} = 0\ ,\ \ \left.\frac{\partial\eta}{\partial\xi}\right|_{\xi=1} = 0\ . \tag{8}$$

Если T_0 – температура окружающей среды, и в начальный момент времени температура реагирующего вещества совпадает с температурой окружающей среды, то начальные условия можно записать в форме

$$\left.\theta\right|_{\tau=0} = 0\ ,\ \ \left.\eta\right|_{\tau=0} = 0\ . \tag{9}$$

2 Цилиндрический реактор

Анализ критических условий теплового взрыва для цилиндрического реакционного сосуда проведем для случая, когда температура поверхности сосуда равна температуре окружающей среды [8,9]. Систему уравненний получим из (4) при $n = 1$.

Положив, для простоты, $\beta = 0$, для автокаталитической реакции имеем уравнения

$$\begin{aligned} \varepsilon\frac{\partial\theta}{\partial\tau} &= \eta(1-\eta)\exp(\theta) + \frac{1}{\delta}\left(\frac{\partial^2\theta}{\partial\xi^2} + \frac{1}{\xi}\frac{\partial\theta}{\partial\xi}\right)\ , \\ \frac{\partial\eta}{\partial\tau} &= \eta(1-\eta)\exp(\theta) + \frac{1}{\mu\varepsilon}\left(\frac{\partial^2\eta}{\partial\xi^2} + \frac{1}{\xi}\frac{\partial\eta}{\partial\xi}\right)\ , \end{aligned} \tag{10}$$

и краевые условия:

$$\left.\frac{\partial\theta}{\partial\xi}\right|_{\xi=0} = 0\ ,\ \ \left.\theta\right|_{\xi=1} = 0\ ;\ \ \left.\frac{\partial\eta}{\partial\xi}\right|_{\xi=0} = 0\ ,\ \ \left.\frac{\partial\eta}{\partial\xi}\right|_{\xi=1} = 0\ . \tag{11}$$

Построение критического режима сводится к определению одномерного медленного интегрального многообразия, поэтому начальные условия в наших вычисления фигурировать не будут. Это одномерное интегральное многообразие будем искать в виде асимптотических рядов:

$$\begin{array}{c}\theta=\theta(\tau,\xi,\varepsilon)=\theta_0(\tau,\xi)+\varepsilon\theta_1(\tau,\xi)+O(\varepsilon^2)\\ \eta=\eta(\tau,\xi,\varepsilon)=\eta_0(\tau,\xi)+\varepsilon\eta_1(\tau,\xi)+O(\varepsilon^2)\quad.\end{array}\tag{12}$$

Для коэффициента δ также запишем формальное асимптотическое разложение

$$\delta=\delta_0(1+\varepsilon\delta_1)+O(\varepsilon^2)\quad.\tag{13}$$

Порождающая задача имеет вид

$$\frac{\partial^2\theta_0}{\partial\xi^2}+\frac{1}{\xi}\frac{\partial\theta_0}{\partial\xi}+\delta_0\eta_0(1-\eta_0)\exp(\theta_0)=0$$

$$\frac{\partial^2\eta_0}{\partial\xi^2}+\frac{1}{\xi}\frac{\partial\eta_0}{\partial\xi}=0$$

$$\left.\frac{\partial\theta_0}{\partial\xi}\right|_{\xi=0}=0\ ,\ \ \theta_0|_{\xi=1}=0\ ;\ \ \left.\frac{\partial\eta_0}{\partial\xi}\right|_{\xi=0}=0\ ,\ \ \left.\frac{\partial\eta_0}{\partial\xi}\right|_{\xi=1}=0\ .$$

Из краевых условий для η_0 следует, что $\eta_0=\eta_0(\tau)$.

Задача для θ_0 может быть проинтегрирована. В результате имеем следующее выражение

$$\theta_0=2\ln\frac{2\alpha\kappa}{1+\xi^2\kappa^2}\quad.\tag{14}$$

Здесь

$$\kappa=\alpha\pm\sqrt{\alpha^2-1}\quad,\quad\alpha=\sqrt{\frac{2}{\delta_0\eta_0(1-\eta_0)}}\ .$$

В справедливости формулы (14) нетрудно убедиться непосредственной подстановкой этого выражения в соответствующее дифференциальное уравнение и краевые условия. Очевидно, при $\alpha=1$ имеем точку бифуркации. При $\eta_0=1/2$ функция $\alpha(\eta_0)$ имеет минимум.Полагая $\eta_0=1/2$, из условия $\alpha=1$, находим $\delta_0=8$, т.е. нулевое приближение критического значения параметра δ_0 равно 8.

Подставим разложения (12), (13) в уравнения (10). Учитывая, что $\partial\eta_0/\partial\xi=0$, имеем:

$$\begin{aligned}\varepsilon\sum_{k\ge0}\varepsilon^k\frac{\partial\theta_k}{\partial\tau}&=\left(\sum_{k\ge0}\varepsilon^k\eta_k\right)\left(1-\sum_{k\ge0}\varepsilon^k\eta_k\right)\exp\left(\sum_{k\ge0}\varepsilon^k\theta_k\right)+\\&+\frac{1}{\delta_0\left(1+\sum_{k\ge1}\varepsilon_k\delta_k\right)}\sum_{k\ge0}\varepsilon^k\left(\frac{\partial^2\theta_k}{\partial\xi^2}+\frac{1}{\xi}\frac{\partial\theta_k}{\partial\xi}\right)\\ \varepsilon\sum_{k\ge0}\varepsilon^k\frac{\partial\eta_k}{\partial\tau}&=\left(\sum_{k\ge0}\varepsilon^k\eta_k\right)\left(1-\sum_{k\ge0}\varepsilon^k\eta_k\right)\exp\left(\sum_{k\ge0}\varepsilon^k\theta_k\right)+\\&+\frac{1}{\mu}\sum_{k\ge0}\varepsilon^k\left(\frac{\partial^2\eta_k}{\partial\xi^2}+\frac{1}{\xi}\frac{\partial\eta_k}{\partial\xi}\right)\quad.\end{aligned}\tag{15}$$

Приравнивая коэффициенты при первой степени малого параметра ε, получаем:

$$\begin{array}{rcl} \delta_0 \frac{\partial\theta_0}{\partial\tau} & = & \delta_0\eta_1(1-2\eta_0)\exp\theta_0 + \delta_0\delta_1\eta_0(1-\eta_0)\exp\theta_0 + \delta_0\eta_0(1-\eta_0)\exp\theta_0\theta_1 + \\ & + & \frac{\partial^2\theta_1}{\partial\xi^2} + \frac{1}{\xi}\frac{\partial\theta_1}{\partial\xi} \\ \frac{\partial\eta_0}{\partial\tau} & = & \eta_0(1-\eta_0)\exp\theta_0 + \frac{1}{\mu}\left(\frac{\partial^2\eta_1}{\partial\xi^2} + \frac{1}{\xi}\frac{\partial\eta_1}{\partial\xi}\right) \ . \end{array} \tag{16}$$

Умножим последнее равенство на ξ и проинтегрируем по от 0 до 1, учитывая, что η_0 не зависит от ξ.

$$\frac{d\eta_0}{d\tau} = \eta_0(1-\eta_0)\int_0^1 \exp\theta_0(\tau,\xi)\xi d\xi \ . \tag{17}$$

Здесь было использовано тождество

$$\int_0^1 \xi\left(\frac{\partial^2\eta_1}{\partial\xi^2} + \frac{1}{\xi}\frac{\partial\eta_1}{\partial\xi}\right) = \int_0^1 \frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial\eta_1}{\partial\xi}\right)d\xi = 0 \ .$$

Рассмотрим краевую задачу

$$\begin{array}{l} \frac{1}{\delta_0}\left(z'' + \frac{1}{\xi}z' + P(\xi)z\right) = f(\xi) \quad , \quad z'(0) = z(1) = 0 \ , \\ P(\xi) = \delta_0\eta_0(1-\eta_0)\exp\theta_0 \ , \\ f(\xi) = \frac{\partial\theta_0}{\partial\tau} - \eta_1(1-2\eta_0)\exp\theta_0 - \delta_1\eta_0(1-\eta_0)\exp\theta_0 \ . \end{array} \tag{18}$$

Соответствующая однородная краевая задача

$$z'' + \frac{1}{\xi}z' + P(\xi)z = 0 \ ,$$

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

имеет нетривиальное решение при $\eta_0 = 1/2$

$$z^*(\xi) = \frac{1-\xi^2}{1+\xi^2} \ ,$$

и для существования решения краевой задачи (18) необходимо потребовать выполнения условия

$$\int_0^1 f(\xi)z^*(\xi)d\xi = 0 \ .$$

Из (16) следует, что при $\eta = 1/2$, для θ_1 получается краевая задача

$$\begin{array}{l} \frac{1}{\delta_0}\left(\frac{\partial^2\theta_0}{\partial\xi^2} + \frac{1}{\xi}\frac{\partial\theta_0}{\partial\xi} + \frac{\delta_0}{4}\exp(\theta_0)\theta_1\right) = \frac{\partial\theta_0}{\partial\tau} - \frac{\delta_1}{4}\exp(\theta_0) \\ \theta_1\big|_{\xi=1} = \frac{\partial\theta_1}{\partial\xi}\Big|_{\xi=0} = 0 \ . \end{array} \tag{19}$$

Из (14), (17) находим выражение для первого слагаемого

$$\frac{\partial\theta_0}{\partial\tau} = \frac{\partial\theta_0}{\partial\eta_0}\frac{d\eta_0}{d\tau} = \frac{\partial\theta_0}{\partial\eta_0}\eta_0(1-\eta_0)\int_0^1 \xi\exp(\theta_0)d\xi \ .$$

Вычислим функции, входящие в это выражение

$$\frac{1}{2}\theta_0 = \ln(\alpha \pm \sqrt{\alpha^2-1}) - \ln(1+\xi^2(\alpha \pm \sqrt{\alpha^2-1})^2) + \ln 2\alpha \ ,$$

где

$$\alpha = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\eta_0(1-\eta_0)\delta_0}} = \frac{1}{2\sqrt{\eta_0(1-\eta_0)}} \ .$$

Тогда

$$\frac{1}{2}\frac{\partial\theta_0}{\partial\eta_0} = \left(\frac{1}{\alpha} \pm \frac{1}{\sqrt{\alpha^2-1}} \pm \frac{2\xi^2\kappa^2}{(1+\xi^2\kappa^2)\sqrt{\alpha^2-1}}\right)\frac{\partial\alpha}{\partial\eta_0} =$$

$$= \left(\frac{\sqrt{\alpha^2-1}}{\alpha} \pm \frac{1-\xi^2\kappa^2}{1+\xi^2\kappa^2}\right)\frac{2(2\eta_0-1)\alpha^3}{\sqrt{\alpha^2-1}} =$$

$$= \left(\frac{\sqrt{\alpha^2-1}}{\alpha} \pm \frac{1-\xi^2\kappa^2}{1+\xi^2\kappa^2}\right)\frac{2(2\eta_0-1)\alpha^2}{\sqrt{1-\frac{1}{\alpha^2}}} \ .$$

Поскольку значение выражения $\partial\theta_0/\partial\eta_0$ достаточно знать лишь в точке $\eta_0 = 1/2$, найдем значение выражения

$$\left.\frac{2\eta_0-1}{\sqrt{1-4\eta_0(1-\eta_0)}}\right|_{\eta_0=\frac{1}{2}} = \pm 1 \ .$$

Следовательно,

$$\left.\frac{\partial\theta_0}{\partial\eta_0}\right|_{\eta_0=\frac{1}{2}} = \pm\frac{4(1-\xi^2)}{1+\xi^2} \ .$$

Найдем теперь $\left.\frac{d\eta_0}{d\tau}\right|_{\eta_0=\frac{1}{2}}$:

$$\left.\frac{d\eta_0}{d\tau}\right|_{\eta_0=\frac{1}{2}} = \left.\left(\eta_0(1-\eta_0)\int_0^1 \xi\exp(\theta_0)d\xi\right)\right|_{\eta_0=\frac{1}{2}} = \int_0^1 \frac{\xi d\xi}{(1+\xi^2)^2} = \frac{1}{4} \ .$$

Таким образом, для функции $f(\xi)$ получается следующее выражение при $\eta_0 = 1/2$

$$f(\xi) = \pm\frac{1-\xi^2}{1+\xi^2} - \frac{\delta_1}{(1+\xi^2)^2}$$

так как $\exp(\theta_0)|_{\eta_0=1/2} = 4/(1+\xi^2)^2$.

Условие разрешимости неоднородной краевой задачи (18) принимает вид

$$\int_0^1 \left(\pm\frac{1-\xi^2}{1+\xi^2} - \frac{\delta_1}{(1+\xi^2)^2}\right)\frac{1-\xi^2}{1+\xi^2}d\xi = 0 \ .$$

Отсюда

$$\delta_1 = \pm\frac{\int_0^1 \frac{(1-\xi^2)^2}{(1+\xi^2)^2}d\xi}{\int_0^1 \frac{1-\xi^2}{(1+\xi^2)^3}d\xi} = \pm 8\frac{4-\pi}{4+\pi} \ .$$

Таким образом,

$$\delta^* = 8\left(1 + 8\frac{4-\pi}{4+\pi}\varepsilon\right) + O(\varepsilon^2) \tag{20}$$

соответствует траектории-утке. Значение

$$\delta^{**} = 8\left(1 - 8\frac{4-\pi}{4+\pi}\varepsilon\right) + O(\varepsilon^2) \ . \tag{21}$$

называют вторым пределом самовоспламенения.

При $\delta > \delta^*$ траектории системы (10) будут "срываться" на взрывной режим. Параметру $\delta < \delta^{**}$ отвечают медленные режимы протекания реакции. Интервал значений (δ^{**}, δ^*) соответствует переходным режимам, которые не являются ни медленными, ни взрывными.

Пренебрегая членами второго порядка малости относительно ε, находим величину $\delta^* - \delta^{**}$:

$$\delta^* - \delta^{**} = 128\frac{4-\pi}{4+\pi}\varepsilon + O(\varepsilon^2) \ .$$

3 Сферический реактор

Анализ критических условий теплового взрыва для сферического реактора проведем с учетом теплопередачи по объему реакционного сосуда, однако диффузию учитывать не будем. Система уравнений (4) в этом случае примет вид:

$$\begin{array}{rcl} \varepsilon\frac{\partial\theta}{\partial\tau} & = & \eta(1-\eta)\exp(\theta) + \frac{1}{\delta}\left(\frac{\partial^2\theta}{\partial\xi^2} + \frac{2}{\xi}\frac{\partial\theta}{\partial\xi}\right) \\ \frac{\partial\eta}{\partial\tau} & = & \eta(1-\eta)\exp(\theta) \ , \end{array} \tag{22}$$

Предполагая, что температура граничной поверхности равна температуре окружающей среды, и, исходя из симметрии реакционного сосуда, возьмем граничные условия в виде:

$$\left.\frac{\partial\theta}{\partial\xi}\right|_{\xi=0} = 0; \, \theta|_{\xi=1} = 0. \tag{23}$$

Медленное интегральное многообразие для задачи (22),(23) и значений параметра δ будем искать в виде асимптотического разложения по целым степеням малого параметра ε:

$$\begin{array}{r} \theta(\eta,\xi,\varepsilon) = \theta_0 + \theta_1\varepsilon + O(\varepsilon^2) \ , \\ \delta = \delta_0(1+\delta_1\varepsilon) + O(\varepsilon^2) \ . \end{array} \tag{24}$$

Подставляя разложения (24) в (22) , (23) получаем задачи для нулевого и первого приближения медленного интегрального многообразия:

$$\frac{\partial^2\theta_0}{\partial\xi^2} + \frac{2}{\xi}\frac{\partial\theta_0}{\partial\xi} + \delta_0\eta(1-\eta)\exp(\theta_0) = 0 \tag{25}$$

$$\left.\frac{\partial\theta_0}{\partial\xi}\right|_{\xi=0} = 0 \ ; \ \theta_0|_{\xi=1} = 0 \ .$$

$$\frac{\partial^2\theta_1}{\partial\xi^2} + \frac{2}{\xi}\frac{\partial\theta_1}{\partial\xi} + \delta_0\eta(1-\eta)\exp(\theta_0)\theta_1 + \delta_0\eta(1-\eta)\delta_1\exp(\theta_0) = \delta_0\frac{\partial\theta_0}{\partial\tau} \tag{26}$$

$$\left.\frac{\partial\theta_1}{\partial\xi}\right|_{\xi=0} = 0 \ ; \ \theta_1|_{\xi=1} = 0 \ .$$

Перепишем (25) в виде:

$$\theta_0'' + \frac{2}{\xi}\theta_0' + c(\eta)\exp(\theta_0) = 0 \ , \tag{27}$$

$$\theta_0'(0) = \theta_0(1) = 0 \ , \tag{28}$$

где $c(\eta) = \delta_0 \eta(1-\eta)$.

Уравнение (27) не интегрируется в элементарных функциях [2]. Для приближенного нахождения критического значения параметра воспользуемся численным интегрированием, задавая значение температуры $\theta_0(0)$ (θ_0^0) в качестве параметра. Удобно ввести новые переменные:

$$x = \xi\sqrt{c\exp(\theta_0^0)}\ ,\ y = \theta_0^0 - \theta_0\ . \tag{29}$$

При этом уравнение (27) примет вид:

$$y'' + \frac{2}{x}y' = \exp(-y)\ . \tag{30}$$

Интегрирование производится при начальных условиях:

$$y(0) = y'(0) = 0$$

Каждой паре x и y, удовлетворяющих начальным условиям и уравнению (30), соответствуют значения:

$$c = x^2\exp(-y(x))\ ,\ \theta_0^0 = y(x)\ . \tag{31}$$

Задачей расчета является нахождение c как функции θ_0^0. Интегрирование начинаем с помощью рядов:

$$y = \frac{1}{6}x^2 - \frac{1}{120}x^4 + O(x^6)\ .$$

Дальнейшее интегрирование производилось численно с применением кубических сплайнов. В результате получили дважды непрерывно-дифференцируемую функцию y, или параметрически заданную функцию $c(\theta_0^0)$. Эта функция имеет максимум при $c^* = 3.33$. Каждому значению $c < c^*$ отвечают два значения $\theta_{0\,1}^0$ и $\theta_{0\,2}^0$. Таким образом, при $c < c^*$ мы имеем два решения задачи (25):

$$\theta_0 = \theta_{0\,1}^0 - y(\xi\sqrt{c\exp(\theta_{0\,1}^0)})\quad ,\quad \theta_0 = \theta_{0\,2}^0 - y(\xi\sqrt{c\exp(\theta_{0\,2}^0)})\ .$$

Причем устойчиво то, которое соответствует меньшему значению θ_0^0. При $c > c^*$ – решений нет. То есть c^* дает критическое условие воспламенения. Вспомним, что $c = \delta_0\eta(1-\eta)$. Наибольшее значение правой части этого равенства достигается при $\eta = 1/2$, поэтому критическое значение параметра δ_0 равно $4c^* = 13.32$.

В качестве нулевого приближения для медленного интегрального многообразия получаем следующее выражение:

$$\theta_0(\xi,\eta) = \theta_0^0(\eta) - y(\xi\sqrt{c(\eta)\exp(\theta_0^0(\eta))})\ ,$$

где $\theta_0^0(\eta)$ вычислено при $\delta = 4c^*$.

Рассмотрим краевую задачу (26). Для нахождения первого приближения критического значения параметра δ положим $\eta = 1/2$.

$$\theta_1'' + \frac{2}{\xi}\theta_1' + \frac{\delta_0}{4}\exp(\theta_0)\theta_1 = \delta_0\frac{\partial\theta_0}{\partial\tau} + \delta_0\frac{\delta_1}{4}\exp(\theta_0) \tag{32}$$

$$\theta_1'|_{\xi=0} = 0\ ;\ \theta_1|_{\xi=1} = 0\ .$$

Соответствующая однородная краевая задача имеет вид:

$$\theta_1'' + \frac{2}{\xi}\theta_1' + \frac{\delta_0}{4}\exp(\theta_0)\theta_1 = 0 \qquad (33)$$

$$\vartheta_1'|_{\xi=0} = 0 \ ; \ \vartheta_1|_{\xi=1} = 0 \ .$$

Решаем её численно, аналогично задаче (25). Условия разрешимости краевой задачи (32) имеет вид:

$$\int_0^1 \left(\frac{\partial \vartheta_0}{\partial \tau} - \frac{\delta_1}{4}\exp(\vartheta_0) \right) \bar{\vartheta}_1 d'\xi = 0$$

где $\bar{\vartheta}_1$ – решение краевой задачи (33). Откуда находим δ_1. Для сферического реактора $\delta_1 = \pm 0.62$. Таким образом,

$$\delta^* = 13.32(1 + 0.62\varepsilon) + O(\varepsilon^2) \ ,$$

$$\delta^{**} = 13.32(1 - 0.62\varepsilon) + O(\varepsilon^2) \ .$$

Здесь δ^* соответствует решению-утке. При $\delta > \delta^*$ трактории системы (22) будут "срываться" на взрывной режим . Параметру $\delta < \delta^{**}$ отвечают медленные режимы протекания реакции. Интервал значений δ (δ^{**}, δ^*) соответствует переходным режимам.

Литература

[1] Андреев И.А., Соболев В.А. // Вестник СамГУ , специальный выпуск , 1995

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

[3] Бутузов В.Ф. Калачев Л.В. Асимптотика решения задачи горения в случае автокаталитической реакции // Вычислительная математика и математическая физика. 1988. **Т.28**, 5. С. 683 - 694.

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

[5] Васильева А.Б., Бутузов В.Ф. Асимптотические разложения решений сингулярно возмущенных уравнений // М.: Наука, 1973.

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

[7] Арнольд В.И., Афраймович В.С., Ильяшенко Ю.С., Шильников Л.П. Теория бифуркаций // Современные проблемы математики: Фундаментальные направления. М.: ВИНИТИ, 1986. **Т. 5**. С. 5-218.

[8] Gorelov G.N., Sobolev V.A. // Duck-trajectories in a thermal explosion problem // Appl. Math. Lett., 1992. **5**. 3-6.

[9] Gorelov G.N., Sobolev V.A. // Mathematical modeling of critical phenomena in thermal explosion theory // Combust. Flame. 1991. **87**. 203-210.

[10] Brons M. // 1988 Math. Engng Ind. **2**, 51-63.

[11] Brons M. // 1989 IMACS Trans. Sci. Comp. **1.1**. 297-301.

[12] Brons M., Bar-Eli K. // 1981 J.phys.Chem. **95**. 8706-8713.

[13] Scott S.K, Tomlin A.S. // 1990 Phil. Trans. R. Soc. Lond. A**332**. 51-68.

Работа выполнена при поддержке Международной соросовской программы образования в области точных наук, грант a96-2385.

MODELING OF THE CRITICAL CONDITIONS OF SELFIGNITION FOR CYLINDRICAL AND SPHERECAL REACTORS

I.A. Andreev[2]

This paper is devoted to the application of the integral manifolds method and the duck-trajectories techniques for the modeling of critical phenomenae in the singularly perturbed models of chemical kinetics.

[2]Ilya A. Andreev. Differential equation and control theory department of Samara state university