Физика горения и взрыва, 1997, т. 33, № 5

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СКОРОСТИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ВОЛНЫ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ

УДК 536.46

Ю. И. Бабенко, А. И. Мошинский

РНЦ «Прикладная химия», 197198 Санкт-Петербург

Рассмотрена задача, описывающая процесс распространения плоской волны полимеризации в бесконечном массиве, в предположении, что зависимость скорости реакции от температуры задается функцией типа $\exp\Theta - 1$. *Определены условия возможности существования установившегося режима. Обнаружено специфическое явление: при непрерывном законе тепловыделения выражение для минимально возможной скорости распространения волны дается двумя различными аналитическими зависимостями, переходящими друг в друга непрерывным образом при некотором критическом значении безразмерной адиабатической температуры. Получено приближенное аналитическое выражение для температурного профиля волны.*

ВВЕДЕНИЕ

Вопрос о распространении нелинейных волн в активных средах представляет интерес для самых разнообразных отраслей науки таких, как теория горения, биология, лазерная техника, экология и т. д. [1–5].

В настоящей работе речь идет о распространении волны полимеризации для реакции первого порядка. Задачи данного класса, связанные с бесконечной по пространственной координате в оба направления областью, впервые рассмотрены в [6, 7] и достаточно полно отражены, например, в монографиях [2, 3, 5].

Математическая теория задач указанного типа получила дальнейшее развитие в работах [8–12]. Разработаны также приближенные методы (например, метод полубесконечной зоны реакции [13, 14]) и численные алгоритмы.

В подавляющем большинстве исследований по теории горения использовались «обрезанные» законы тепловыделения. Значительно реже рассматривались задачи с непрерывной функцией тепловыделения (например, [8, 15–17]). Однако приближенные аналитические методы не позволили выявить некоторые эффекты, обнаруженные в предлагаемой работе с привлечением численных методов на этапе качественного исследования задачи.

Основная особенность настоящей работы состоит в том, что задается непрерывная функция тепловыделения, зависящая также от концентрации, которая, будучи равной нулю при $T = T_0$, изменяется непрерывным образом в зависимости от $T - T_0$. Показано, что и для такого «обобщенно-логистического» закона тепловыделения возможно существование бегущей волны неизменной формы. Вопросы выхода решения на установившийся волновой режим и его устойчивости здесь не рассматриваются.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В системе координат, связанной с плоским фронтом реакции, движущимся в бесконечной среде с постоянной скоростью U в направлении, обратном оси x, система уравнений, описывающих поля температуры T и относительной концентрации C исходного компонента, обычно записывается следующим образом:

$$a\frac{d^2T}{dx^2} - U\frac{dT}{dx} + T_{ad}k(1-C)\exp\left[-\frac{E}{RT}\right] = 0, \tag{1}$$

$$-U\frac{dC}{dx} + k(1-C)\exp\left[-\frac{E}{RT}\right] = 0; \tag{2}$$

$$\begin{gathered} T = T(x), \quad C = C(x), \quad x \in (-\infty, \infty); \\ T(-\infty) = T_0, \quad T(\infty) = T_0 + T_{ad}, \quad C(-\infty) = 0, \quad C(\infty) = 1. \end{gathered} \tag{3}$$

Здесь a — температуропроводность, E — энергия активации реакции полимеризации, R — универсальная газовая постоянная, k — предэкспоненциальный множитель, $T_{ad} = Q/c\rho$ — адиабатическая температура, однозначно определяемая тепловым эффектом экзотермической реакции Q, а также теплоемкостью c и плотностью ρ среды.

Рассматривается случай, когда реакция полимеризации имеет первый порядок, что отражено множителем $1 - C$ в кинетическом законе. Полагаем, что относительное изменение температуры невелико, поэтому аррениусовскую зависимость можно заменить приближением Франк-Каменецкого [4]:

$$\exp\left[-\frac{E}{RT}\right] \to \exp\left[-\frac{E}{RT_0}\right]\cdot\exp\left[\frac{E(T-T_0)}{RT_0^2}\right]. \tag{4}$$

Введем в рассмотрение следующие комплексы:

$$\Theta = \frac{E(T-T_0)}{RT_0^2}, \quad \xi = \frac{Ux}{a}, \quad \Theta_{ad} = \frac{ET_{ad}}{RT_0^2}, \quad \omega^2 = \frac{U^2}{\{ak\exp\left[-E/RT_0\right]\}}. \tag{5}$$

Здесь две безразмерные переменные: Θ — относительная температура и ξ — координата, а также два безразмерных параметра — тепловой эффект Θ_{ad} (или адиабатическая температура) и скорость распространения фронта ω. Используя формулы (4) и (5), перепишем систему (1)–(3) следующим образом:

$$\frac{d^2\Theta}{d\xi^2} - \frac{d\Theta}{d\xi} + \frac{\Theta_{ad}}{\omega^2}(1-C)[\exp\Theta - 1] = 0, \tag{6}$$

$$-\frac{dC}{d\xi} + \frac{1}{\omega^2}(1-C)[\exp\Theta - 1] = 0, \tag{7}$$

$$\begin{gathered} \Theta = \Theta(\xi), \quad C = C(\xi), \quad \xi \in (-\infty, \infty); \\ \Theta(-\infty) = 0, \quad \Theta(\infty) = \Theta_{ad}, \quad C(-\infty) = 0, \quad C(\infty) = 1. \end{gathered} \tag{8}$$

Определение собственного значения величины ω^2 для системы (6), (7) при граничных условиях (8) представляет основную цель настоящей работы.

При переходе к системе (6)–(8) использована замена $\exp\Theta \to \exp\Theta - 1$, общепринятая в теории зажигания [18, 19]. Эта запись необходима для математической корректности задачи [18]. Сделанное при этом физическое допущение предполагает отсутствие тепловыделения при $T = T_0$. Указанная замена или какая-нибудь другая коррекция поведения функции тепловыделения при $x \to -\infty$ ($T \to T_0$) (см., например, [1, 15–17]) необходима для существования решения в виде бегущей волны в бесконечном интервале. Без нее (см., например, уравнения (1), (2)) при естественных физических условиях положительности C и ограниченности T из уравнения (2) после его интегрирования в бесконечных пределах следует (в силу расходимости интеграла в правой части), что скорость волны — бесконечная величина. Система (6), (7) лишена этого недостатка.

Игнорирование указанного обстоятельства делает некорректным представленное в [14] доказательство существования волны, бегущей с конечной скоростью. Однако численные результаты, полученные в [14], имеют практическое значение, поскольку при численном счете фактически всегда используется конечный интервал $x \in (-L, L)$. При этом по мере увеличения L величина U (для типичных значений физических параметров), начиная с некоторого L_*, возрастает настолько медленно, что практически обнаружить расходимость ($U \to \infty$) очень трудно. Поэтому данное, «почти постоянное» значение скорости принимается за истинное и, по-видимому, близко к таковому, так как фактически при использовании численных методов, как правило, проводится «нефизическое зануление» функции тепловыделения вне рассматриваемого конечного интервала. Однако в задачах данного класса следует соблюдать осторожность при замене бесконечного интервала конечным. В ряде случаев, например при анализе устойчивости решений [2, 5], результаты для конечного и бесконечного интервалов могут качественно различаться. В настоящей работе, в частности, обнаружен специфический эффект — изменение формы аналитической зависимости скорости распространения волны от адиабатической температуры при некотором критическом значении последней.

Следует отметить, что некоторые результаты, полученные в ряде цитированных работ для случаев «ступенчатых» функций тепловыделения, не могут быть непосредственно перенесены на данную задачу.

2. ПРИВЕДЕНИЕ ЗАДАЧИ К ФОРМЕ, УДОБНОЙ ДЛЯ АНАЛИЗА

Решение задачи (6)–(8) упрощается после умножения уравнения (7) на Θ_{ad} и вычитания уравнений. Имеем

$$\frac{d^2\Theta}{d\xi^2} - \frac{d\Theta}{d\xi} + \Theta_{ad}\frac{dC}{d\xi} = 0. \tag{9}$$

Интегрируя (9) с учетом условий (8), получаем

$$\frac{d\Theta}{d\xi} - \Theta + \Theta_{ad}C = 0. \tag{10}$$

Задачу (6)–(8) можно свести к рассмотрению одного уравнения двумя способами.

Исключая переменную C из (6) с помощью (10), получаем

$$\frac{d^2\Theta}{d\xi^2} - \frac{d\Theta}{d\xi} + \frac{1}{\omega^2}\left(\Theta_{ad} - \Theta + \frac{d\Theta}{d\xi}\right)[\exp\Theta - 1] = 0, \tag{11}$$

$$\Theta = \Theta(\xi), \quad \xi \in (-\infty, \infty); \quad \Theta(-\infty) = 0, \quad \Theta(\infty) = \Theta_{ad}.$$

С другой стороны, исключая делением из (7) и (10) дифференциал $d\xi$, приходим к уравнению, не содержащему координаты ξ:

$$\omega^2 \frac{dC}{d\Theta} = \frac{(1-C)[\exp\Theta - 1]}{\Theta - \Theta_{ad}C}, \tag{12}$$

$$C = C(\Theta), \quad \Theta \in (0, \Theta_{ad}); \quad C(0) = 0, \quad C(\Theta_{ad}) = 1.$$

Введя обозначения

$$C = u, \qquad \Theta = \Theta_{ad} v, \tag{13}$$

вместо (11) и (12) получаем уравнения

$$\frac{d^2v}{d\xi^2} - \frac{dv}{d\xi} + \lambda\left(1 - v + \frac{dv}{d\xi}\right) \cdot \Omega\,(v, \Theta_{ad}) = 0, \tag{14}$$

$$v = v(\xi), \quad \xi \in (-\infty, \infty); \quad v(-\infty) = 0, \quad u(\infty) = 1, \quad \lambda = \Theta_{ad}/\omega^2, \tag{15}$$

где $\Omega(v, \Theta_{ad}) = [\exp\Theta_{ad}v - 1]/\Theta_{ad}$. Поскольку уравнение (14) не содержит явно переменной ξ, его порядок может быть понижен известной подстановкой

$$P = \frac{dv}{d\xi} \tag{16}$$

(переход к «фазовой плоскости»). В результате имеем

$$P\frac{dP}{dv} - P + \frac{\lambda}{\Theta_{ad}}(1 - v + P)[\exp\Theta_{ad}v - 1] = 0, \tag{17}$$

$$P = P(v), \quad v \in (0,1), \quad P \in (0, \infty); \quad P(0) = 0, \quad P(1) = 0. \tag{18}$$

Учитывая соотношения (13), уравнение (12) преобразуем к виду

$$\frac{du}{dv} = \frac{\lambda}{\Theta_{ad}}\,\frac{(1-u)[\exp\Theta_{ad}v - 1]}{v - u}, \tag{19}$$

$$u = u(v), \quad v \in (0,1), \quad u \in (0,1); \quad u(0) = 0, \quad u(1) = 1.$$

3. СЛУЧАЙ МАЛОГО НАГРЕВА

Для случая малого теплового эффекта ($\Theta_{ad} \ll 1$) уравнения (15), (17) и (19) перепишем следующим образом:

$$\frac{d^2v}{d\xi^2} - \frac{dv}{d\xi} + \lambda v\left(1 - v + \frac{dv}{d\xi}\right) = 0, \tag{20}$$

$$P\frac{dP}{dv} - P + \lambda v(1 - v + P) = 0, \tag{21}$$

$$\frac{du}{dv} = \lambda\,\frac{(1-u)v}{v - u}. \tag{22}$$

Основной анализ по определению допустимых скоростей волны (спектра нелинейной задачи на собственные значения) выполнен с помощью уравнений (19) и (22) для переменных v («температура») и u («концентрация»).

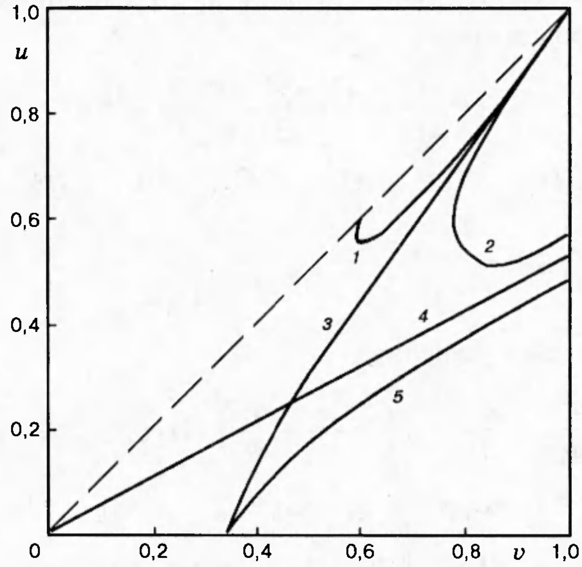

Рис. 1. Варианты интегральных кривых уравнения (22)

Уравнение (22) имеет две особые точки: ($v = 0$, $u = 0$) и ($v = 1$, $u = 1$). Тип особенности в начале координат (0,0) плоскости (v, u) определяется значением параметра λ. Согласно общей теории [4, 20] при $0 < \lambda \leqslant 1/4$ особая точка (0,0) будет узлом, а при $\lambda > 1/4$ — фокусом. В последнем случае переменные v и u принимают отрицательные значения, что не имеет физического смысла.

В окрестности второй особой точки (1,1) в физически значимом случае $\lambda > 0$ особенность имеет тип «седло». Таким образом, приемлемыми значениями для параметра скорости волны в случае уравнения (22) будет непрерывный спектр, определяемый неравенством

$$0 < \lambda \leqslant 1/4, \qquad \lambda = \Theta_{ad}/\omega^2, \tag{23}$$

при условии, что существуют интегральные кривые уравнения (22), соединяющие особые точки (0,0) и (1,1), и, кроме того, $u \in [0, 1]$, $u \leqslant v$.

Покажем, что при $0 < \lambda \leqslant 1/4$ интегральная кривая уравнения (22), выходящая из седловой точки (1,1) вдоль сепаратрисы с угловым коэффициентом $\lambda + 1$, обязательно попадет в начало координат (0,0). Ясно, что она не может закончиться внутри треугольной области $0 < v < 1$, $v > u$, поскольку там нет особых точек, и поэтому возможно дальнейшее «продвижение» из любой точки. Остаются три варианта интегральной кривой, начинающейся в точке (1,1) и не попадающей в точку (0,0) (рис. 1). Предположим, что кривая *1* пересекает линию $u = v$ и имеет на ней вертикальную касательную. В таком случае при $0 < v < 1$ и $v > u$ в силу гладкости интегральной кривой должна существовать точка, в которой $du/dv = 0$. Это возможно только при $v = 0$ и (или) $u = 1$ (см. уравнение (22)). Значит, кривая типа *1* реализоваться не может. Кривая типа *2* также не может реализоваться, так как в той же области должна существовать точка, где $dv/du = 0$, а это возможно только на линии $u = v$. Несколько сложнее доказать, что не может быть и кривой типа *3*. Действительно, построим линию, выходящую из точки $v = v_0 > 0$, $u = 0$

и определяемую уравнением

$$\frac{du}{dv} = \frac{\lambda v}{v-u}, \qquad u(v_0) = 0, \tag{24}$$

отличающимся от (22) отсутствием множителя $1-u$. Пусть $\alpha \leqslant 1/2$ — один из корней уравнения $\lambda = \alpha(1-\alpha)$. Ясно, что при $0 < \lambda \leqslant 1/4$ без ограничения общности можно считать, что $\alpha \leqslant 1/2$ (в противном случае выберем другой корень $(1-\alpha)$). При этом зависимость 5 на рис. 1, определяемая уравнением

$$\ln\frac{v}{v_0} = \frac{1-\alpha}{1-2\alpha}\ln\frac{\alpha}{\alpha - u/v} - \frac{\alpha}{1-2\alpha}\ln\frac{1-\alpha}{1-\alpha-u/v}, \quad \alpha < \frac{1}{2}, \tag{25}$$

будет всегда находиться под своей асимптотой $u = \alpha v$ (кривая *4* на рис. 1), т. е. она может пересечь линию $v = 1$ только ниже точки (1,1). То же самое можно показать и для случая $\alpha = 1/2$. Наклон интегральных кривых для уравнения (22) меньше, чем для (24) в тех же точках. Поэтому интегральная кривая уравнения (22) тем более не может попасть в точку (1,1). В силу вышесказанного остается единственная возможность — «попадание» интегральной кривой, начинающейся в точке (1,1), в точку (0,0).

Уравнение (20) в качественном отношении подобно уравнению Фишера [7]:

$$\frac{d^2v}{d\xi^2} - \frac{dv}{d\xi} + \lambda v(1-v) = 0. \tag{26}$$

Данное, а также более общее уравнение $d^2v/d\xi^2 - \lambda(dv/d\xi) + F(v) = 0$, где $F(v)$ — дифференцируемая функция со свойствами $F(0) = F(1) = 0$, $F'(0) = \gamma > 0$, $F(v) > 0$ и $F'(v) < \gamma$ при $v \in (0,1)$, достаточно интенсивно исследовались. Установлено [2, 21], что нестационарная задача с начальным условием при стремлении времени к бесконечности «выходит» на решение в виде бегущей волны. Однако величина скорости волны зависит от вида начальной функции, главным образом, от ее поведения при $\xi \to -\infty$. Для начальных профилей в виде ступеньки единичной высоты и аналогичных им функций, начиная с некоторых значений ξ, принимающих значения $v = 0$ и $v = 1$ тождественно, показано, что скорость волны имеет минимальное значение [2, 3, 5–7], тогда как при недостаточно быстром убывании начальной функции при $\xi \to -\infty$ возможны и другие значения скорости волны ($U > U_{\min}$) из установленного спектра [2, 21]. При $\xi \to -\infty$ в практически важных случаях уравнение (20) асимптотически близко к уравнению (26) (дополнительное слагаемое в (20) $\lambda v(dv/d\xi)$ стремится к нулю при $\xi \to \pm\infty$). Поэтому естественно ожидать подобных свойств и от уравнения (20). Отметим также, что (20) сводится к частному случаю уравнения, описывающего распространение волны при наличии нелинейного конвективного слагаемого [5, с. 238]. В монографии [5] представлены некоторые численные результаты исследования нестационарного уравнения и утверждается, что получено (вместе с Р. Г. Гиббсом) нетривиальное доказательство существования волновых решений (само доказательство в [5] не приведено). Представленное здесь доказательство достаточно элементарно, и его идея может служить также для получения некоторых оценок характерных параметров задачи.

Выше было получено неравенство (23). Минимальной скорости распространения волны полимеризации при малых нагревах соответствует значение

$$\omega^2 = 4\Theta_{ad} \quad \text{или} \quad U^2 = \frac{4aET_{ad}}{RT_0^2}\, k\exp\left(-\frac{E}{RT_0}\right), \quad T_{ad} = \frac{Q}{c\rho}. \tag{27}$$

4. ОБЩИЙ СЛУЧАЙ

Рассмотрим общий случай, не предполагающий малости нагрева Θ_{ad}. Вблизи точки (0,0) уравнение (19) имеет локально ту же форму, что и вытекающее из (22) уравнение (24). Значит, при $0 < \lambda \leqslant 1/4$ данная точка сохраняет свой «узел». Сохраняет свой тип и вторая особая точка (1,1), однако для последней как бы возрастает параметр λ. Его роль будет выполнять величина $\bar{\lambda} = \lambda[\exp\Theta_{ad} - 1]/\Theta_{ad}$. Это приводит к увеличению углового коэффициента наклона сепаратрисы: $1 + \bar{\lambda}$. Отсюда следует, что не при всех Θ_{ad} при фиксированном $\lambda \leqslant 1/4$ существует интегральная кривая ($u > 0$), соединяющая особые точки (0,0) и (1,1)*). Аналитическое доказательство этого факта основывается на неравенстве

$$\frac{d\bar{u}}{dv} = \lambda\cdot\Omega(v,\Theta_{ad}) < \frac{du}{dv}, \qquad \Omega(v,\Theta_{ad}) = \frac{\exp\Theta_{ad}v - 1}{\Theta_{ad}}, \tag{28}$$

справедливом в области $v > 0$, $u > 0$, $v > u$. Соотношение (28) получено уменьшением тангенса угла наклона (du/dv) изоклин после подстановки в знаменатель уравнения (19) предельного для данной области значения $v = 1$. «Мажорантная» кривая $\bar{u}(v)$ в точке (1,1) имеет наклон $\bar{\lambda}$, а «исходная» — $\bar{\lambda} + 1 > \bar{\lambda}$. При движении назад к точке (0,0) выполняется неравенство $\bar{u}(v) > u(v)$. Если кривая $\bar{u}(v)$ не сможет попасть в точку (0,0), то тем более этого не произойдет и с интегральной кривой $u(v)$ уравнения (19). В этой связи представляет интерес соотношение, связывающее параметры λ и Θ_{ad} и разделяющее область $0 < \lambda \leqslant 1/4$ на две части. В одной из них ($\lambda > \bar{\lambda}$) заведомо не существует требуемой интегральной кривой, соединяющей точки (0,0) и (1,1). Искомая «мажорантная» кривая находится после элементарного интегрирования (28):

$$\lambda_* = \Theta_*^2\,/\,[\exp\Theta_* - 1 - \Theta_*], \tag{29}$$

где λ_* и Θ_* — критические значения параметров λ и Θ_{ad}.

Легко видеть, что если параметр λ в уравнении (28) превосходит величину λ_*, определяемую формулой (29), то интегральная кривая $u(v)$ не может попасть из точки (1,1) в точку (0,0) (она попадает в точку $(v_0, 0)$ при некотором $v_0 > 0$), а значит, и кривая $u(v)$ не может удовлетворять этим условиям. Например, в случае границы области существования волны с необходимыми свойствами ($\lambda = 1/4$) $\Theta_* = 4{,}42996$, как следует из уравнения (29). При $\Theta_{ad} > \Theta_*$ нужной нам интегральной кривой не существует. График функции (29) представлен на рис. 2 (кривая *3*).

На рис. 2 приведен также график для определения критического значения Θ_* в зависимости от параметра λ_* (однозначно определяющего скорость волны), построенный при помощи численного алгоритма для исходного уравнения (19) (кривая *2*). Вне области под графиком интегральные кривые уравнения (19), выходящие из точки (1,1), пересекают ось u, как видно из рис. 3 и 4. На них представлены некоторые типичные интегральные кривые уравнения (19), построенные численным методом Рунге — Кутта — Мерсона при дополнительном условии $u(1) = 1$ для фиксированных $\Theta_{ad} = 4{,}1$ или $\lambda = 0{,}25$ и соответственно при варьировании другого параметра.

Как показывает численный анализ, $\Theta_* \approx 2{,}5$ для $\lambda = 1/4$, что существенно отличается от «мажорантной» величины $\Theta_* = 4{,}42996$.

---

*) Требование для особой точки (0,0) быть «узлом» (а не «фокусом»), вытекающее из неравенств $u > 0$, $v > 0$, является необходимым, но не достаточным условием существования волны с заданными свойствами.

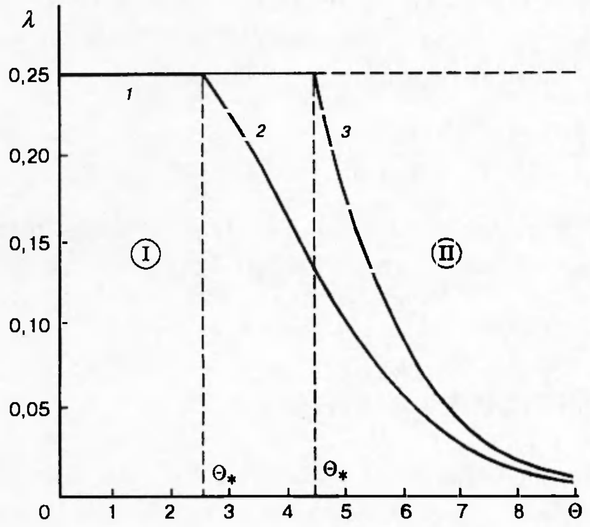

Рис. 2. Линии, выделяющие область существования монотонной волны:
I: *1* — линия $\lambda = 1/4$, *2* — численный результат, *3* — приближенная формула (29); II — область отсутствия волны

Из сказанного следует, что область существования решения в виде бегущей волны в плоскости $(\Theta,\ \lambda)$ (см. рис. 2) ограничена четырьмя линиями: *1*, *2*, $\Theta = 0$, $\lambda = 0$.

Таким образом, если $\Theta_{ad} < \Theta_*$, минимальная скорость распространения волны полимеризации по-прежнему определяется формулой (27), а если $\Theta_{ad} \geqslant \Theta_*$, имеет место другая зависимость, представленная численным решением (кривая *2* на рис. 2). Подобный же эффект описан в [5], где анализировалось уравнение типа уравнения Фишера с добавлением нелинейного конвективного слагаемого

$$\frac{d^2v}{d\xi^2} + kv\,\frac{dv}{d\xi} - \frac{dv}{d\xi} + \lambda v(1-v) = 0.$$

Отметим, что приближенные методы решения задач рассматриваемого типа «не замечают» этого явления [13, 14].

Для $\Theta_{ad} \to \infty$ можно получить асимптотическое решение уравнения (19) (например, путем построения ряда Тейлора вблизи точки (1,1)):

$$u = 1 - (\lambda/\Theta_{ad})[\exp\Theta_{ad} - \exp\Theta_{ad}v],$$

удовлетворяющее граничному условию в точке (1,1). Чтобы выполнить нулевое условие в точке (0,0), необходимо положить

$$\lambda \cong \Theta_{ad}^2 \exp(-\Theta_{ad}), \qquad \Theta_{ad} \to \infty. \tag{30}$$

Соотношение (30) при $\Theta_{ad} \to \infty$ согласуется с численным решением, а также с формулой (29).

С учетом (30), а также значения $\Theta_* = 2{,}5$ интерполяционная зависимость при $\Theta_{ad} \geqslant \Theta_*$ для кривой *2* на рис. 2 имеет вид

$$\lambda = (3{,}133 - 2{,}533\Theta_{ad} + \Theta_{ad}^2)\exp(-\Theta_{ad}). \tag{31}$$

Из (31) находим искомое приближенное выражение для безразмерной скорости распространения волны :

$$\omega^2 = \Theta_{ad}\exp\Theta_{ad}/(3{,}133 - 2{,}533\Theta_{ad} + \Theta_{ad}^2), \qquad \Theta_{ad} \geqslant \Theta_* \cong 2{,}5, \tag{32}$$

которое переходит в точное при $\Theta_{ad} \to \infty$.

Следует отметить, что при больших значениях Θ_{ad}, когда применима асимптотическая формула (30), используя равенство $1 - T_{ad}/T_0 \cong T_0/(T_0 + T_{ad})$, справедливое в рамках аппроксимации Франк-Каменецкого (4), получаем выражение

$$U^2 = \frac{aRT_0^2}{ET_{ad}}\, k \exp\left(-\frac{E}{R(T_0 + T_{ad})}\right).$$

Оно почти совпадает с соответствующей формулой работ [22, 23], полученной методом узкой зоны реакции, где в предэкспоненциальный множитель вместо T_0^2 входит величина $(T_0 + T_{ad})^2$.

5. ПОСТРОЕНИЕ ПРОФИЛЯ ВОЛНЫ

Поскольку во всех рассмотренных решениях содержится «достаточно малый» параметр $\lambda = \Theta_{ad}/\omega^2 \leqslant 1/4$, следуя [5], можно воспользоваться методом возмущений по этому параметру [24, 25]. Для получения приближенных характеристик процесса перепишем задачу (20), изменив масштаб независимой переменной $\zeta = \lambda\xi$:

$$\lambda \frac{d^2 v}{d\zeta^2} - [1 - \lambda \cdot \Omega(v, \Theta_{ad})]\frac{dv}{d\zeta} + (1 - v) \cdot \Omega(v, \Theta_{ad}) = 0, \tag{33}$$

$$v(-\infty) = 0, \qquad v(\infty) = 1. \tag{34}$$

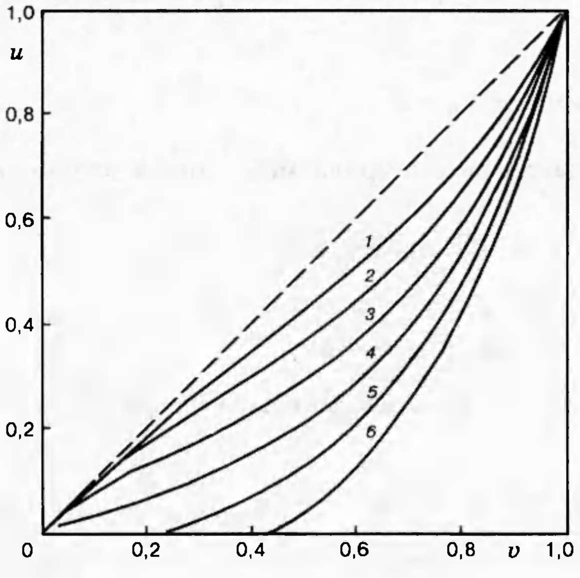

Рис. 3

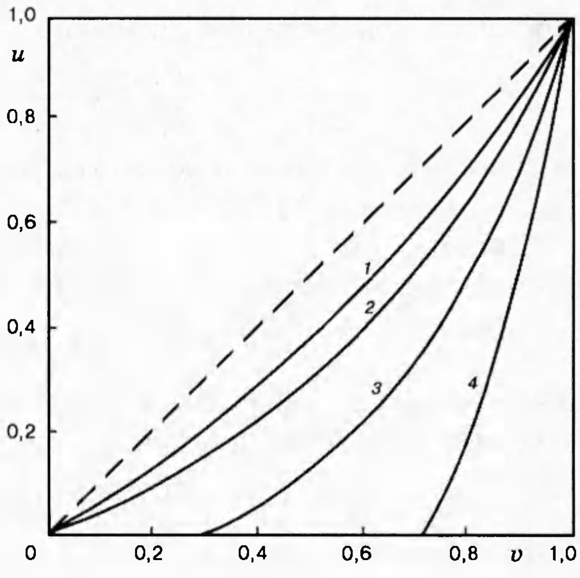

Рис. 4

Рис. 3. Типичные интегральные кривые уравнения (19) при $\Theta_{ad} = 4{,}1$: $\lambda = 0{,}06$ (*1*); 0,09 (*2*); 0,12 (*3*); 0,15 (*4*); 0,18 (*5*); 0,21 (*6*)

Рис. 4. Интегральные кривые уравнения (19) при $\lambda = 0{,}25$: $\Theta_{ad} = 1{,}5$ (*1*); 2,5 (*2*); 3,5 (*3*); 4,5 (*4*)

В фазовой плоскости ($P = dv/d\zeta$, v) уравнение (33) имеет вид

$$\lambda P \frac{dP}{dv} = [1 - \lambda \cdot \Omega(v, \Theta_{ad})]\, P + (1 - v) \cdot \Omega(v, \Theta_{ad}). \tag{35}$$

Граничные условия $P(0) = P(1) = 0$ при $\lambda \leqslant 1/4$ в силу анализа, проведенного в пп. 3, 4, выполняются всегда. Решение уравнения (35) будем искать в виде ряда метода возмущений:

$$P(v) = P_0(v) + \lambda \cdot P_1(v) + \lambda^2 \cdot P_2(v) + \ldots, \quad \lambda \to 0, \quad \Theta_{ad} = O(1). \tag{36}$$

Подставляя разложение (36) в уравнение (35), группируя слагаемые одного порядка по λ и ограничиваясь тремя первыми членами в (36), последовательно находим:

$$P_0(v) = (1 - v) \cdot \Omega(v, \Theta_{ad}), \tag{37}$$

$$P_0 \frac{dP_0}{dv} = P_1(v) - P_0(v) \cdot \Omega(v, \Theta_{ad}), \tag{38}$$

$$P_0 \frac{dP_1}{dv} + P_1 \frac{dP_0}{dv} = P_2(v) - P_1(v) \cdot \Omega(v, \Theta_{ad}). \tag{39}$$

Используя равенство $\partial\Omega/\partial v = 1 + \Theta_{ad} \cdot \Omega(v, \Theta_{ad})$, из (38) и (39) получаем выражения

$$P_1(v) = (1 - v)^2 \cdot \Omega(v, \Theta_{ad})[1 + \Theta_{ad} \cdot \Omega(v, \Theta_{ad})], \tag{40}$$

$$P_2(v) = (1 - v)^2 \cdot \Omega(v, \Theta_{ad}) \cdot [1 + \Theta_{ad} \cdot \Omega(v, \Theta_{ad})]\{2[1 - v - \Omega(v, \Theta_{ad})] + \\ + 3(1 - v)\Theta_{ad} \cdot \Omega(v, \Theta_{ad})\}. \tag{41}$$

Легко видеть, что $P_j(0) = P_j(1) = 0$ при $j = 0, 1, 2$. Отметим, что выписанные выражения не обнаруживают сингулярного поведения при $\lambda \to 0$, $v \in [0, 1]$.

Приближенное решение задачи (36), (37), (40), (41) сравнивалось с численным решением уравнения (35), которое интегрировалось от конечной точки $v = 1$ методом Рунге — Кутта — Мерсона. При $\Theta_{ad} = 1$, $\lambda = 0{,}1$ максимальное относительное рассогласование между решениями не превышало 0,623 %, при $\Theta_{ad} = 3$, $\lambda = 0{,}1$ различие достигало 4,86 %. В самом неблагоприятном случае ($\lambda = 0{,}25$ при $\Theta_{ad} = 1$ в диапазоне $v \in (0{,}165,\ 1{,}0)$) максимальное относительное рассогласование не превышало 5 %. Для $v \in (0{,}078,\ 0{,}165)$ погрешность меньше 10 %, а для $v \in (0{,}004,\ 0{,}078)$ — менее 20 %. При меньших v различие достигало 25 %. Таким образом, фактически во всем диапазоне v аналитическое решение (36) вполне пригодно для практических вычислений. Наибольшая погрешность наблюдается при $v \to 0$. Это и понятно, поскольку в окрестности нуля функция (37) ведет себя линейно по v, тогда как точное решение имеет степенную асимптотику, т. е. при очень малых значения v (где по численным алгоритмам следует считать с очень малым шагом) погрешность, в принципе, может быть и значительно больше указанной.

Рассмотрим подробнее случай $\Theta_{ad} \ll 1$, соответствующий рассмотренному в п. 3. При этом в формулы (37), (40) и (41) следует подставить $\Theta_{ad} = 0$, $\Omega(v, \Theta_{ad}) = v$. Большой интерес для приложений представляет определение крутизны волны. Мерой физической крутизны волны может служить величина S наклона профиля в точке перегиба. Точке перегиба в физической плоскости (v, ζ) соответствует максимум фазовой траектории, проходящей через точки (0,0) и (1,0). Таким образом, следует определить корень $\dot{v}_0$ уравнения $\partial P/\partial v = 0$. Из зависимостей (34)-(38), (40), (41) находим

$$\dot{v}_0 = 1/2 - \lambda/8 - \lambda^2/16 + O(\lambda^3). \tag{42}$$

Соответственно для крутизны волны имеем разложение

$$S = \frac{dv}{d\xi}\bigg|_{v=\hat{v}_0} = \frac{\lambda}{4} + \frac{\lambda^2}{8} + \frac{\lambda^3}{64} + O(\lambda^4). \tag{43}$$

Поскольку $\lambda = \Theta_{ad}/\omega^2$, с ростом скорости волны ее крутизна уменьшается. Крутизна может также служить характеристикой «толщины» волны ($l = 1/S$), т. е. зависимость (43) позволяет судить и о порядке величины переходного слоя от $v = 0$ до $v = 1$.

Для получения асимптотического при $\lambda \to 0$ профиля волны удобно опираться на уравнение (33), выполнив замену $\Omega(v, \Theta_{ad}) \to v$ для малых значений Θ_{ad}. Решение задачи (33), (34) будем искать в виде ряда метода возмущений:

$$v = v_0(\zeta) + \lambda \cdot v_1(\zeta) + \lambda^2 \cdot v_2(\zeta) + \ldots. \tag{44}$$

Это решение в некотором смысле родственно (36), поскольку сразу же, несмотря на малый параметр при старшей производной, приводит к удовлетворению граничных условий. В силу того, что задача (33), (34) инвариантна относительно переноса начала координат вдоль линии ζ, для обеспечения единственности решения потребуем выполнения дополнительного условия

$$v(0) = 1/2. \tag{45}$$

Подставляя разложение (44) в уравнение (33) и группируя слагаемые одинакового порядка по λ, получаем следующие уравнения для первых двух функций $v_0(\zeta)$ и $v_1(\zeta)$:

$$\frac{dv_0}{d\zeta} = v_0(1 - v_0), \qquad \frac{dv_1}{d\zeta} - v_1(1 - 2v_0) = \frac{d^2v_0}{d\zeta^2} + v_0\,\frac{dv_0}{d\zeta}. \tag{46}$$

При этом $v_0(\zeta)$ удовлетворяет условию (45), а $v_1(\zeta)$ — условию $v_1(0) = 0$. Интегрирование уравнений (46) при указанных условиях дает соотношения

$$v_0 = \frac{1}{1 + \exp(-\zeta)}, \qquad v_1 = \frac{\exp(-\zeta)}{[1 + \exp(-\zeta)]^2} \cdot \ln\frac{2}{1 + \exp(-\zeta)}. \tag{47}$$

Отметим, что функция $v_1(\zeta)$ имеет следующие асимптотические выражения: $v_1 \cong \ln(2) \cdot \exp(-\zeta)$ при $\zeta \to \infty$ и $v_1 \cong \zeta \exp\zeta$ при $\zeta \to -\infty$, т. е. разложение (44) неравномерно при $\zeta \to -\infty$ и пригодно только для $\zeta \leqslant O(1/\lambda)$. Подобная ситуация часто встречается при анализе слабонелинейных колебаний [24, 25]. Для «исправления» выражения (44) проведем разложение координаты ζ по степеням λ и подберем параметры разложения так, чтобы исчезли «секулярные» слагаемые типа $\zeta \cdot \exp\zeta$. Например, если вместо ζ использовать координату $\zeta(1 + \lambda)$, то вместо (47) получим выражения

$$v_0 = \frac{1}{1 + \exp[-\zeta(1 + \lambda)]}, \quad v_1 = \frac{\exp(-\zeta)}{[1 + \exp(-\zeta)]^2}\left[\ln\frac{2}{1 + \exp(-\zeta)} - \zeta\right], \tag{48}$$

имеющие «хорошую» асимптотику при $\zeta \to -\infty$, но неравномерную при $\zeta \to \infty$, правда во втором порядке по λ. Поскольку в окрестности $\zeta = 0$ разложения (44) с функциями (47) и (48) достаточно близки (например, оба разложения для крутизны дают одинаковые выражения в пределах рассматриваемой точности $O(\lambda^2)$, согласованные с (21)), можно рекомендовать пользоваться формулой (47) при $\zeta \geqslant 0$ и (48) при $\zeta < 0$.

6. ЗАКЛЮЧИТЕЛЬНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ

Выше показано, что волна полимеризации, распространяющаяся без изменения формы с постоянной скоростью в бесконечном пространстве, существует только при значениях скорости, превышающих минимальное. Эти значения задаются функцией, представленной различными аналитическими зависимостями для $\Theta_{ad} \leqslant \Theta_*$ и $\Theta_{ad} \geqslant \Theta_*$. Подобный эффект ранее обнаружен для более простой задачи [5, с. 238].

Представляет интерес, какое именно значение скорости из области допустимых значений реализуется. По аналогии с результатами, представленными в [2, 21], можно предположить, что если начальное температурное возмущение (приводящее к развитию процесса и выходу на установившийся режим) представлено функцией, убывающей на бесконечности быстрее, чем экспоненциальная (например, $T_0(x) \cong \exp(-x^2)$), то величина $\omega(t)$ (t — время) будет стремиться к значению ω, определенному выше как минимально возможное. Если же начальное температурное возмущение убывает как «медленная экспонента» ($T_0(x) \cong \exp(-\alpha|x|)$, $0 < \alpha < \alpha_{\min}$), возможен выход на режим с большими значениями ω [2, 21].

Анализ устойчивости нестационарного аналога системы (6)–(8) по отношению к малым возмущениям достаточно сложен и громоздок. В этом случае необходимо исследование спектральной задачи для обыкновенного дифференциального уравнения третьего порядка с переменными коэффициентами, теория которой еще недостаточно разработана [26]. Приведем без вывода один частный результат, полученный нами: при возмущении формы волны, локализованном в конечном промежутке $x \in (-L, L)$, имеется область устойчивости, по крайней мере, в некоторой части плоскости (λ, Θ_{ad}).

В свете проведенных исследований наиболее вероятным представляется, что устойчивость процесса распространения волны зависит от поведения возмущения на бесконечности. Следует ожидать, что для возмущений, достаточно быстро убывающих при $x \to \pm\infty$, найденные выше режимы с минимально возможной скоростью являются устойчивыми.

ВЫВОДЫ

1. Показано, что для непрерывной функции тепловыделения существует устойчивое решение типа бегущей волны, если при начальной температуре скорость тепловыделения равна нулю.

2. Найдены выражения для скорости распространения волны в зависимости от теплофизических параметров и кинетического фактора. Оказывается, минимально возможная скорость распространения волны дается аналитическими зависимостями (27) и (32), сменяющими друг друга непрерывным образом при переходе через критическое значение безразмерной адиабатической температуры $\Theta_{ad} = ET_{ad}/RT_0^2 \approx 2{,}5$. Иначе говоря, показано, что решение в виде волны неизменной формы может существовать только в определенной области безразмерных параметров $\Theta_{ad} = ET_{ad}/RT_0^2$ и $\lambda = (ak/U^2)[ET_{ad}/RT_0^2]\exp[-E/RT_0]$.

3. Высказано предположение, что в реальных условиях найденные минимально возможные скорости распространения волны действительно реализуются. В частности, показано, что в предельном случае $\Theta_{ad} \gg 1$ формула (32) согласуется с известной зависимостью теории горения [22, 23].

4. Получено приближенное выражение для формы температурной волны при малых Θ_{ad}. Установлено, что при возрастании скорости распространения волны ее профиль становится более пологим.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Зельдович Я. Б., Баренблатт Г. И., Либрович В. Б., Махвиладзе Г. М.** Математическая теория горения и взрыва. М.: Наука, 1980.
2. **Свирежев Ю. М.** Нелинейные волны, диссипативные структуры и катастрофы в экологии. М.: Наука, 1987.
3. **Маслов В. П., Данилов В. Г., Волосов К. А.** Математическое моделирование процессов тепломассопереноса. Эволюция диссипативных структур. М.: Наука, 1987.
4. **Франк-Каменецкий Д. А.** Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М.: Наука, 1967.
5. **Марри Дж.** Нелинейные дифференциальные уравнения в биологии. Лекции о моделях. М.: Мир, 1983.
6. **Колмогоров А. Н., Петровский И. Г., Пискунов Н. С.** Исследование уравнений диффузии, соединенной с возрастанием количества вещества, и его применение к одной биологической проблеме // Бюл. МГУ. Сер. А. Математика и механика. Т. 1, вып. 6. С. 1–25.
7. **Fisher R. A.** The wave of advance of advantageous genes // Ann. Eugenics. 1937. V. 7. P. 355–369.
8. **Ваганов Д. А., Худяев С. И.** Об одной стационарной задаче теории горения // Физика горения и взрыва. 1969. Т. 5, № 2. С. 167–172.
9. **Худяев С. И.** К асимптотической теории стационарной волны горения // Хим. физика. 1987. Т. 6, № 5. С. 681–691.
10. **Вольперт А. И., Вольперт В. А.** Оценки операторов, описывающих бегущие волны, и их применение к построению вращения векторных полей. Черноголовка, 1985. (Препр. / АН СССР. ОИХФ).
11. **Вольперт В. А., Вольперт А. И.** Существование и устойчивость бегущих волн в химической кинетике // Динамика химических и биологических систем / Под ред. В. И. Быкова. Новосибирск: Наука, 1989. С. 56–131.
12. **Худяев С. И.** Об одном классе интегрируемых уравнений в задачах горения и гидродинамики // Мат. моделирование. 1995. Т. 7, № 1. С. 35–60.
13. **Жижин Г. В.** Макрокинетика в реакторах фронтальной полимеризации. СПб.: Политехника, 1992.
14. **Жижин Г. В., Порицкая И. Я.** Саморегулируемые волны экзотермических химических реакций n-го порядка в конденсированных средах // Физика горения и взрыва. 1994. Т. 30, № 6. С. 61–68.
15. **Баренблатт Г. И.** Подобие, автомодельность, промежуточная асимптотика. Л.: Гидрометеоиздат, 1982.
16. **Алдушин А. П., Зельдович Я. Б., Худяев С. И.** Распространение пламени по реагирующей газовой смеси. Черноголовка, 1979. (Препр. / АН СССР. ОИХФ).
17. **Зельдович Я. Б.** Горение: нелинейная температурная волна в веществе, выделяющем тепло // Нелинейные волны. Распространение и взаимодействие. М.: Наука, 1981. С. 30–41.

18. **Merzhanov A. G., Averson A. E.** The present state of thermal ignition theory // Combust. Flame. 1971. V. 16. P. 89–124.
19. **Бабенко Ю. И.** Определение времени зажигания при больших нагревах поверхности // Физика горения и взрыва. 1980. Т. 16, № 4. С. 3–7.
20. **Трикоми Ф.** Дифференциальные уравнения. М.: Изд-во иностр. лит., 1962.
21. **Bramson M.** Convergence of solutions of the Kolmogorov equation to traveling waves // Mem. Amer. Math. Soc. 1983. № 285. P. 190–208.
22. **Новожилов Б. В.** Скорость распространения фронта в конденсированной фазе // Докл. АН СССР. 1961. Т. 141, № 1. С. 151–153.
23. **Новожилов Б. В.** Нестационарное горение твердых ракетных топлив. М.: Наука, 1973.
24. **Найфэ А.** Методы возмущений. М.: Мир, 1976.
25. **Коул Дж.** Методы возмущений в прикладной математике. М.: Мир, 1972.
26. **Левитан Б. М., Саргсян И. С.** Введение в спектральную теорию (Самосопряженные обыкновенные дифференциальные операторы). М.: Наука, 1970.

Поступила в редакцию 22/IV 1996 г.,
в окончательном варианте — 30/IX 1996 г.