ОБ УСТОЙЧИВОСТИ РЕШЕНИЙ В СТАЦИОНАРНОЙ ТЕОРИИ ТЕПЛОВОГО ВЗРЫВА

А. Г. Истратов, В. Б. Либрович

(Москва)

Теория теплового взрыва в сосуде с экзотермическими химическими реакциями развита в работах [1–3]. Н. Н. Семенов [1] для описания теплового взрыва использовал средние по сосуду значения температуры и теплоотдачи. Им установлено, что при размерах сосуда, меньших некоторого критического, возможны два режима протекания химической реакции. При критическом размере сосуда эти решения вырождаются в одно, а при размерах, больших критического, стационарных решений не существует — происходит тепловой взрыв.

Качественное исследование двух режимов химической реакции при малых размерах сосуда, проведенное Н. Н. Семеновым, показало, что из них устойчивым является лишь один, соответствующий меньшей температуре реагирующей смеси в сосуде.

Д. А. Франк-Каменецкий [2,3] в стационарной теории теплового взрыва точно решил задачу о распределении температуры в сосуде и критическом условии теплового взрыва. (Наиболее полно в смысле математического обоснования стационарная теория теплового взрыва изложена Г. И. Баренблаттом в обзорной статье [4].) В этой теории, так же как и в теории Н. Н. Семенова, при размерах сосуда, меньших критического, возможны несколько различных стационарных распределений температуры: для плоского и цилиндрического сосудов — два решения, для сферического — число решений может меняться от одного до бесконечности в зависимости от размера сосуда.

Устойчивость решений стационарной теории теплового взрыва не исследовалась. По аналогии с выводами Н. Н. Семенова [1] в работе [2] высказывалось предположение, что в случае плоского и цилиндрического сосудов распределение температуры, соответствующее меньшей температуре в центре сосуда, является устойчивым, а большей — неустойчивым. Указания на устойчивость решений в этом случае имеются также в работе [4]. Однако проведение аналогии для сферического сосуда с большим набором решений представляет значительные трудности, и поэтому никаких выводов об устойчивости решений в сферическом сосуде не делалось.

Ниже проводится исследование устойчивости решений стационарной теории теплового взрыва для сосудов различной формы. Применяется метод, в некоторых чертах аналогичный методу, примененному Г. И. Баренблаттом и Я. Б. Зельдовичем для выяснения устойчивости распространения ламинарного пламени [5, 6]. Доказывается, что из всех возможных режимов химической реакции устойчивым является лишь режим с наименьшей температурой в центре сосуда.

§ 1. Основные положения стационарной теории теплового взрыва. Воспроизведем сначала вкратце основные сведения из стационарной теории теплового взрыва.

В общих предположениях этой теории [2,3] в случае симметричных сосудов задача сводится к решению стационарного уравнения теплопроводности с функцией тепловыделения

$$\frac{1}{\xi^\nu}\frac{d}{d\xi}\left(\xi^\nu\frac{dU}{d\xi}\right)+2e^U=0$$
$$\left(U=\frac{(T-T_0)\,E}{RT_0^2},\quad \xi=\left[\frac{QZE}{2kRT_0^2}\exp\left(-\frac{E}{RT_0}\right)\right]^{1/2}x\right) \tag{1.1}$$

Здесь U — безразмерная температура, T — температура в сосуде, T_0 — температура стенки, E — энергия активации, R — универсальная постоянная, ξ — безразмерная координата (отсчитываемая от центра сосуда), Q — тепловой эффект реакции, Z — предэкспоненциальный множитель, k — теплопроводность реагирующего вещества, показатель $\nu = 0, 1, 2$ соответственно для плоского, цилиндрического и сферического сосудов. Граничные условия (ξ_0 — безразмерный радиус сосуда):

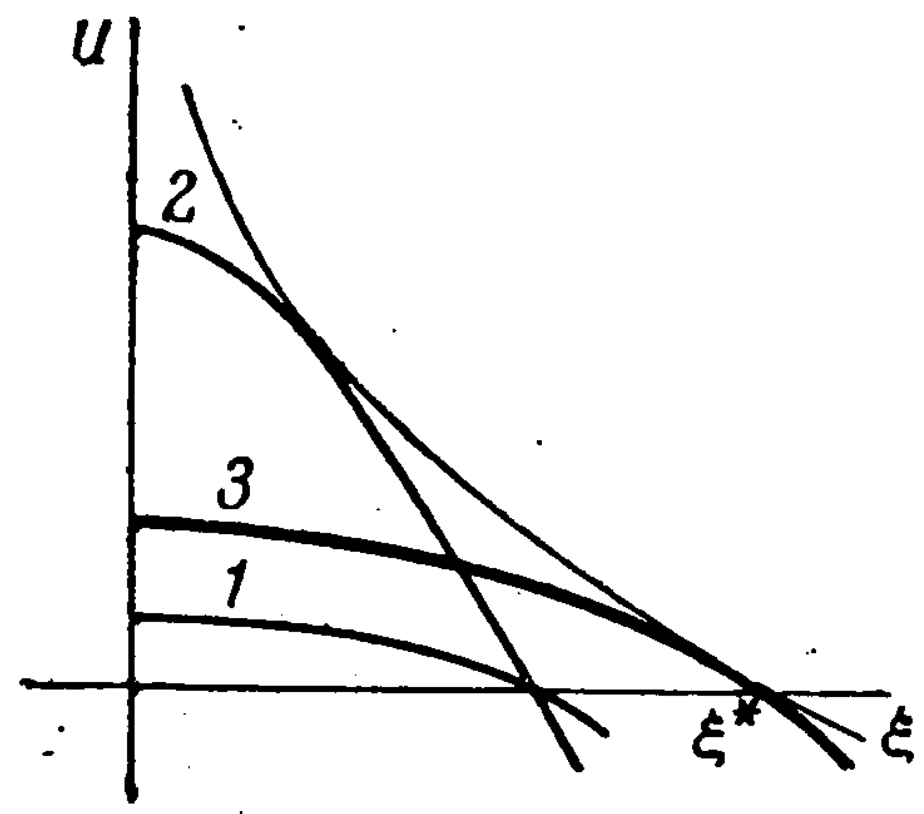
$$\xi=0,\qquad dU\,/\,d\xi=0,\qquad \xi=\xi_0,\qquad U=0 \tag{1.2}$$

Как впервые было показано в работе [7], уравнение (1.1) с первым из граничных условий (1.2) инвариантно относительно группы преобразований

$$U(\xi) = \alpha + U_0(\xi e^{\alpha/2}) \tag{1.3}$$

Здесь $U(\xi)$ — общее решение уравнения (1.1), а $U_0(\xi)$ — частное решение, удовлетворяющее условиям

$$\xi = 0, \qquad U_0 = 0, \qquad dU_0/d\xi = 0 \tag{1.4}$$



Фиг. 1

Параметр α представляет собой значение температуры в центре сосуда.

Пользуясь общим видом решения (1.3), можно найти огибающую решений. Уравнение огибающей в общем случае имеет вид

$$U = 2\ln\frac{s^*}{\xi} + U_0(s^*) \tag{1.5}$$

Здесь s^* — корень уравнения

$$2 + s^*\frac{dU_0(s^*)}{ds} = 0 \tag{1.6}$$

Огибающая (1.5) на плоскости $u\xi$ ($U > 0$, $\xi > 0$) отделяет область, где имеются решения уравнения (1.1), от области, где решений не существует. Пересечение огибающей с осью ξ отсекает отрезок ξ^*, соответствующий максимальному размеру сосуда, при котором еще возможно стационарное распределение температуры

$$\xi^* = s^* \exp\frac{U_0(s^*)}{2} \tag{1.7}$$

При больших размерах сосуда решений не существует: происходит взрыв.

Частное решение $U_0(\xi)$ можно получить в конечном виде [4]:

для плоского сосуда ($\nu = 0$)

$$U_0(\xi) = -2\ln \operatorname{ch}\xi \tag{1.8}$$

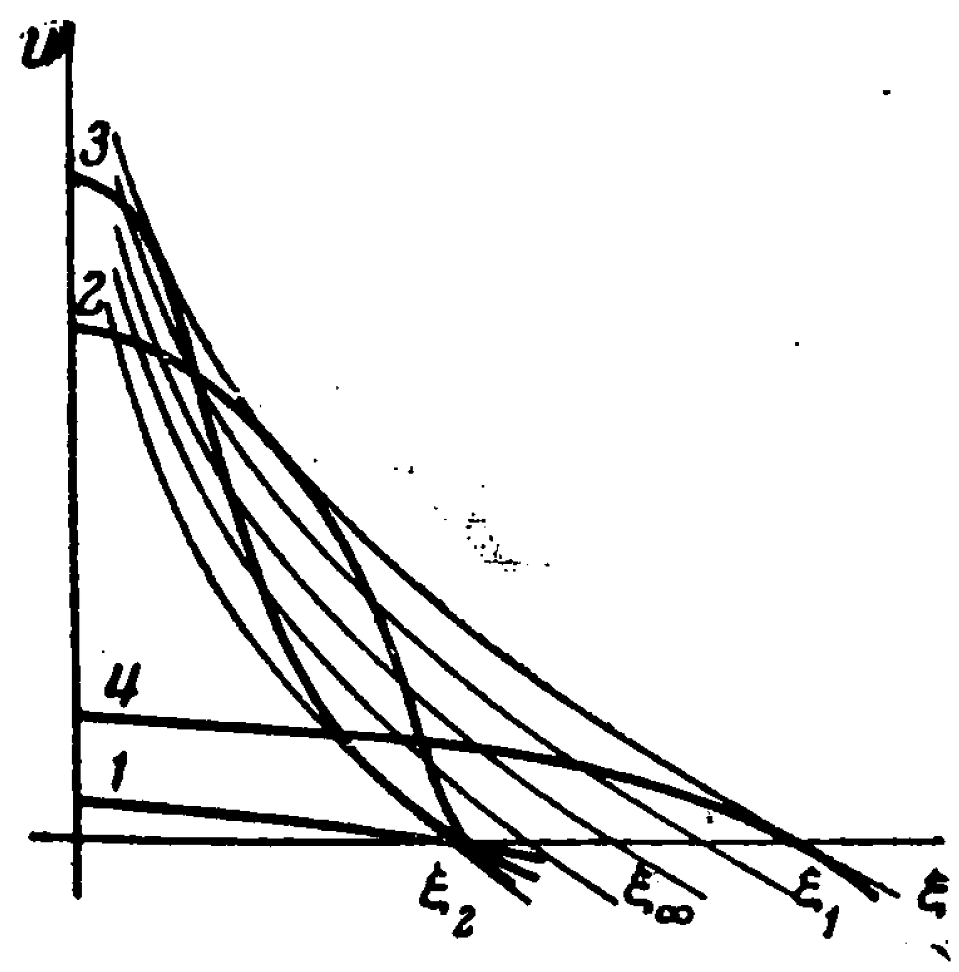
для цилиндрического сосуда ($\nu = 1$)

$$U_0(\xi) = -2\left[\ln\xi + \ln\operatorname{ch}\ln\frac{2}{\xi}\right] \tag{1.9}$$

Уравнения (1.6) и (1.7), определяющие s^* и максимальный размер сосуда ξ^*, для этих случаев принимают вид

$$(\nu = 0) \quad 1 = s^* \operatorname{th} s^*, \quad \xi^* = s^* / \operatorname{ch} s^* \tag{1.10}$$

$$(\nu = 1) \quad s^* = 2, \quad \xi^* = 1 \tag{1.11}$$



Фиг. 2

На фиг. 1 изображены вид огибающей и кривых распределения температуры для плоского и цилиндрического сосудов. При размерах сосудов $\xi < \xi^*$ имеются два возможных решения с различными значениями величины α (кривые *1* и *2*). Значения α определяются в общем случае (ν — любое) решением уравнения

$$\alpha + U_0(s) = 0, \qquad s = \xi e^{\alpha/2} \tag{1.12}$$

При $\xi = \xi^*$ оба решения вырождаются в одно (кривая *3*), для этого решения

$$\alpha^* = -U_0(s^*), \qquad s^* = \xi^* e^{\alpha/2} \tag{1.13}$$

Из вида решений (1.8) и (1.9) и выражения (1.12) для α легко видеть, что $\alpha < \alpha^*$ при $s < s^*$ и $\alpha > \alpha^*$ при $s > s^*$.

Для сферического сосуда ($\nu = 2$) проинтегрировать уравнение (1.1) не удается. Однако исследование поведения решения [4] показывает, что в этом случае уравнение (1.6) имеет бесчисленное множество корней s_i^* и, следовательно, на плоскости $U\xi$ бесчисленное множество огибающих. На фиг. 2 изображено расположение некоторых из этих огибающих (все огибающие располагаются между точками ξ_1 и ξ_2, сгущаясь вблизи точки $\xi_\infty = 1$), а также нанесено несколько распределений температуры. Все решения с ростом ξ вначале касаются правой крайней огибающей, затем крайней левой, затем второй справа, второй слева и т. д. В таком же порядке будем обозначать точки пересечения соответствующих огибающих с осью ξ — точки ξ_1, ξ_2, ξ_3, ξ_4 и т. д. Критический размер сосуда определяется $\xi^* = \xi_1$. Через точку ξ_1 и в области $0 < \xi < \xi_2$ через каждую точку проходит одно решение. При $\xi_2 \leqslant \xi < \xi_1$ возможны несколько решений. Так, при $\xi_3 \leqslant \xi < \xi_1$ их два, при $\xi_2 \leqslant \xi < \xi_4$ — три, при $\xi_5 \leqslant \xi < \xi_3$ — четыре и т. д.; вблизи $\xi_\infty = 1$ решений бесконечно много. Кривые, касающиеся огибающих в точках ξ_1, ξ_2, ξ_3, ..., характеризуются параметрами α_i^*, определяемыми по (1.13) для разных корней s_i^*.

§ 2. **Постановка задачи об устойчивости.** Исследование устойчивости различных решений в стационарной теории теплового взрыва проводится методом малых возмущений. Рассматривается нестационарное уравнение теплопроводности

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} = \frac{1}{\xi^\nu}\frac{\partial}{\partial \xi}\xi^\nu\frac{\partial u}{\partial \xi} + 2e^u \qquad \left(\tau = \frac{\varkappa QZEt}{2RT_0^2k}\exp\left(-\frac{E}{RT_0}\right)\right) \tag{2.1}$$

Здесь $u(\xi, \tau)$ — безразмерная температура, зависящая от времени, τ — безразмерное время, t — время, $\varkappa$ — температуропроводность реагирующего вещества.

Предполагается, что нестационарное решение мало разнится от стационарного (произведено небольшое возмущение стационарного решения)

$$u(\xi, \tau) = U(\xi) + \varphi(\xi, \tau) \tag{2.2}$$

где $\varphi(\xi, \tau)$ — малая добавка, а $U(\xi)$ имеет вид (1.3).

Используя малость $\varphi(\xi, \tau)$, линеаризуем уравнение (2.1)

$$\frac{1}{e^\alpha}\frac{\partial \varphi}{\partial \tau} = \frac{1}{s^\nu}\frac{\partial}{\partial s}s^\nu\frac{\partial \varphi}{\partial s} + 2e^{U_0(s)}\varphi \qquad (s = \xi e^{1/2\,\alpha}). \tag{2.3}$$

Здесь использовано выражение (1.3) для $U(\xi)$.

Граничными условиями для решения уравнения (2.3) служат

$$s = s_0 = e^{\alpha/2}\xi_0, \quad \varphi = 0; \qquad s = 0, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial s} = 0 \tag{2.4}$$

(возмущение предполагается симметричным). Решение (2.3) ищется в виде

$$\varphi(s, \tau) = T(\tau)\,P(s) \tag{2.5}$$

Временная зависимость решения определяется множителями

$$T_n(\tau) = e^{-\lambda_n e^\alpha \tau} \tag{2.6}$$

Здесь λ_n представляют собой собственные значения краевой задачи Штурма — Лиувилля

$$\frac{1}{s^\nu}\frac{d}{ds}s^\nu\frac{dP}{ds} + (2e^{U_0(s)} + \lambda)P = 0 \tag{2.7}$$

с условиями

$$s = 0, \quad \frac{dP}{ds} = 0; \qquad s = s_0, \quad P = 0 \tag{2.8}$$

Если в спектре собственных значений задачи все $\lambda_n > 0$, то исследуемое решение устойчиво, если же найдется хотя бы одно $\lambda_n < 0$, решение неустойчиво. Непосредственное определение всего спектра собственных значений λ_n ($n = 0, 1, 2, \ldots$) представляет значительные трудности. Однако в этом нет необходимости. Для ответа на вопрос об устойчивости нужно лишь знать знак нулевого собственного значения λ_0, так как из теории краевых задач Штурма — Лиувилля [8] известно, что с увеличением номера величина собственного значения возрастает.

Для исследования устойчивости решения можно также использовать метод, примененный Г. И. Баренблаттом и Я. Б. Зельдовичем к задаче об устойчивости распространения одномерного ламинарного пламени [5,6]. Этот метод основан на свойстве собственных функций, заключающемся в том, что число нулей собственной функции равно номеру ее собственного значения. Для ламинарного пламени оказывается, что собственная функция, соответствующая собственному значению $\lambda_n = 0$, не имеет нулей нигде, кроме бесконечности, а поэтому собственное значение $\lambda_n = 0$ является нулевым собственным значением. Так как все остальные собственные значения положительны, распространение пламени устойчиво.

При исследовании устойчивости решений стационарной теории теплового взрыва будем искать общее решение уравнения (2.7), соответствующее $\lambda = 0$. Решение уравнения будет удовлетворять краевым условиям (2.8), т. е. являться собственной функцией для собственного значения $\lambda_n = 0$ лишь при некоторых дискретных значениях $s_{0i} = s_i^*$. Границу устойчивого решения задачи по s_0 дает наименьшее значение $s_{0i} = s_i^*$. Действительно, на отрезке $0 \leqslant s \leqslant s_1^*$ функция нигде более в нуль не обращается, т. е. является нулевой собственной функцией. При уменьшении отрезка $[0, s_0]$ согласно свойству собственных функций [8] нулевое собственное значение λ_0 не убывает и, следовательно, обеспечивает устойчивость решения. При увеличении $[0, s_0]$ собственное значение λ_0 уменьшается: если бы λ_0 при увеличении s_0 возрастало, то это бы противоречило только что упомянутому свойству собственных значений; λ_0 не может также равняться нулю, так как все собственные функции для $\lambda_n = 0$ содержатся в общем решении уравнения (2.7), а все последующие точки, в которых общее решение является собственной функцией, соответствуют ненулевым собственным значениям ($n \neq 0$) — собственные функции, кроме конца отрезка, обращаются в нуль на самом отрезке.

Таким образом, исследование устойчивости заключается в том, чтобы найти общее решение уравнения (2.7) при $\lambda = 0$ и определить минимальный отрезок s_1^*, на котором выполняются граничные условия (2.8).

§ 3. Устойчивость распределений температуры в плоском реакционном сосуде. В плоском случае задача сводится к решению уравнения вида (здесь уже положено $\lambda = 0$)

$$\frac{d^2P}{ds^2} + \frac{2}{\operatorname{ch}^2 s} P = 0 \tag{3.1}$$

с граничными условиями (2.8). Это уравнение приводится к

$$\frac{d}{dy}\left[2\,(1 - e^y)\,\frac{dP}{dy} + e^y P\right] = 0 \qquad \left(e^y = \frac{1}{\operatorname{ch}^2 s}\right) \tag{3.2}$$

с новой переменной y, связанной с s соотношением, указанным в скобках.

Интегрирование (3.2) дает

$$P = C_1 \operatorname{th} s + C_2\,(1 - s \operatorname{th} s) \qquad (C_1, C_2 = \mathrm{const}) \tag{3.3}$$

Первое из условий (2.8) определяет $C_1 = 0$. Таким образом, функция P является собственной функцией для отрезка s^*, для которого

$$1 - s^* \operatorname{th} s^* = 0 \tag{3.4}$$

Это выражение полностью совпадает с уравнением (1.10), определяющим огибающую решений (1.5).

Как уже упоминалось в § 1, $\alpha < \alpha^*$ при $s < s^*$ и, следовательно, устойчивыми решениями являются решения с малыми α. (Напомним, что α — это температура в центре сосуда.) Неустойчивым решениям при $s > s^*$ соответствуют распределения с $\alpha > \alpha^*$ — большим разогревам в центре сосуда.

§ 4. Доказательство устойчивости в общем случае. Полученный в § 3 результат, свидетельствующий, что общим решением уравнения краевой задачи (3.1) является выражение, служащее для определения корня s^*, входящего в уравнение огибающей, наводит на мысль, что это свойство верно в самом общем случае (ν — произвольное).

Этот факт действительно не является случайным, на что указал Я. Б. Зельдович. Так как огибающую можно рассматривать как геометрическое место точек пересечения двух бесконечно близких стационарных решений, то разность этих решений является стационарным возмущением, т. е. возмущением с $\lambda = 0$.

Убедимся в том, что уравнению (2.7) при $\lambda = 0$ удовлетворяет функция

$$P = C\left(s\frac{dU_0(s)}{ds} + 2\right), \qquad \frac{dU_0(s)}{ds} = -\frac{2}{s^\nu}\int_0^s \zeta^\nu e^{U_0(\zeta)}\,d\zeta, \qquad C = \text{const} \tag{4.1}$$

Выражение для dU_0/ds получается прямым интегрированием уравнения (1.1) при условии $dU_0/ds = 0$ для $s = 0$.

Учитывая, что $dP/ds = 0$ при $s = 0$, уравнение (2.7) представим в виде

$$\frac{dP}{ds} = -\frac{2}{s^\nu}\int_0^s \zeta^\nu e^{U_0(\zeta)} P(\zeta)\,d\zeta \tag{4.2}$$

Вычисляя производную dP/ds в левой части и интеграл в правой части уравнения (4.2) с учетом (4.1), убеждаемся, что уравнение (4.2) удовлетворяется.

Таким образом, функция (4.1) является собственной функцией краевой задачи для тех значений s_i^*, которые являются корнями, определяющими огибающие решений. Как уже говорилось, устойчивым решениям соответствуют решения при s_0, меньших минимального корня уравнения (1.6). Но минимальному значению s_1^* соответствует минимальное значение α_1^*, так как s является монотонно возрастающей функцией α. Действительно, продифференцируем соотношение (1.12)

$$\frac{ds}{d\alpha} = -\frac{1}{dU_0/ds} = s^\nu\left(\int_0^s \zeta^\nu e^{U_0(\zeta)}d\zeta\right)^{-1} > 0 \tag{4.3}$$

Критическое значение α_1^* вычисляется по формуле

$$\alpha_1^* = -U_0(s_1^*) \tag{4.4}$$

Проиллюстрируем сказанное на примере сферического сосуда. Распределения температуры и огибающие решений изображены на фиг. 2. Кривая *4*, приходящая в точку пересечения правой крайней огибающей с осью ξ, имеет $\alpha = \alpha_1^*$. Все кривые *1* относятся к кривым с $\alpha < \alpha_1^*$ и поэтому устойчивы. Кривые *2* и *3* с $\alpha > \alpha_1^*$ неустойчивы.

Интересно, что качественно характер устойчивости решений можно оценить из следующих соображений: если возмущаем кривые *1*, то всегда попадаем в область, где имеются стационарные решения. Но если возмущаются кривые *2* и *3* вблизи их точки касания с правой крайней огибающей, то можно попасть в область, где стационарных решений не существует — возникает подозрение о неустойчивости решения.

Авторы благодарят Г. И. Баренблатта за постановку задачи и ее обсуждение.

Поступила 3 XII 1962

ЛИТЕРАТУРА

1. Семенов Н. Н. Цепные реакции. Л., Госхимтехиздат, 1934.
2. Франк-Каменецкий Д. А. Распределение температур в реакционном сосуде и стационарная теория теплового взрыва. ЖФХ, 1939, т. 13, вып. 6.
3. Франк-Каменецкий Д. А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. АН СССР, 1947.
4. Гельфанд И. М. Некоторые задачи теории квазилинейных уравнений. Усп. матем. н., 1959, т. 14, вып. 2.
5. Баренблатт Г. И., Зельдович Я. Б. Об устойчивости распространения пламени. ПММ, 1957, т. 21, вып. 6.
6. Zeldovich Y. B., Barenblatt G. I. Theory of flame propagation. Combustion and Flame, 1959, vol. 3, N 1.
7. Зельдович Я. Б. Теория зажигания накаленной поверхностью. ЖЭТФ, 1939, т. 9, вып. 12.
8. Соболев С. Л. Уравнения математической физики. М., Гостехиздат, 1954.