НЕКОТОРЫЕ ВАРИАЦИОННЫЕ ЗАДАЧИ ТЕОРИИ ТЕПЛОВОГО ВЗРЫВА

С. И. Анисимов, Э. И. Виткин

(Минск)

Большая часть результатов, полученных в стационарной теории теплового взрыва, относится к симметричным областям, распределение температуры в которых зависит от одной пространственной координаты. Интересные для приложений задачи с двумя или тремя независимыми переменными приводят к нелинейным уравнениям в частных производных, решение которых сопряжено со значительными математическими трудностями. В работе [1] для таких задач был предложен вариационный метод. Однако получение численных результатов при той постановке задачи, которая принята в [1], требует трудоемких вычислений. В результате в работе [1] приведено лишь полученное вариационным методом значение критического параметра для шара, которое на 25% отличается от известного точного решения. Вычислительные трудности, встречающиеся при решении указанных вариационных задач, связаны с видом зависимости тепловыделения от температуры в уравнении теплопроводности и могут быть устранены выбором другой, более удобной аппроксимации аррениусовского закона для температур $T \ll E / R$ (E — энергия активации).

Заметим, что реальное тепловыделение, соответствующее экзотермической химической реакции, будет ограниченной функцией температуры. Отсюда следует, что всегда существует, по крайней мере одно решение соответствующей стационарной задачи теплопроводности. Однако физически интересными в теории теплового взрыва являются только те решения, которые соответствуют низким (в сравнении с E / R) температурам. В этой области температур ограниченность тепловыделения еще никак не сказывается, так что замена ограниченного источника неограниченно возрастающим[1] приводит лишь к тому, что перестает существовать высокотемпературное решение, при больших энергиях активации не представляющее интереса.

По-видимому, наиболее простой и удобной является предложенная в работе [2] аппроксимация функции $\exp(-E / R)$ в области $RT \ll E$ квадратным трехчленом. Приводимая в [2] формула справедлива при $RT / E \sim 10^{-2}$. Можно несколько расширить область применимости такой аппроксимации. Введем соотношение

$$\exp\frac{-E}{RT} \approx \exp\frac{-1}{\alpha}\left[1 + A(\alpha)\theta + B(\alpha)\theta^2\right], \quad \left(\theta = \frac{T - T_0}{\alpha T_0}, \quad \alpha = \frac{RT_0}{E}\right) \tag{1}$$

Здесь T_0 — температура на границе. Коэффициенты A и B должны быть выбраны таким образом, чтобы (1) было наилучшим приближением на отрезке $0 \leqslant \theta \leqslant 2.5$, который лишь и представляет интерес в теории теплового взрыва. Ниже справа (приведены значения $A(\alpha)$ или $B(\alpha)$ для некоторых значений α. В последнем столбце даны также коэффициенты из работы [2], определенные таким образом, что аппроксимация является наилучшей в окрестности точки $\theta = 1$.

α=0.01	0.05	0.10	0
A=0.309	0.650	0.825	0.718
B=1.412	0.988	0.667	1.000

Ошибка аппроксимации (1) не превышает $\sim 3\%$.

Имея в виду описанную аппроксимацию, рассмотрим краевую задачу в области D

$$\Delta\theta + q\,F(\theta) = 0, \quad \theta\,|\,\Gamma = 0 \quad F(\theta) = 1 + A\theta + B\theta^2 \tag{2}$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + a\frac{\partial^2}{\partial\eta^2} + b\frac{\partial^2}{\partial\zeta^2}, \quad \xi = \frac{x}{l_1}, \quad \eta = \frac{y}{l_2}, \quad \zeta = \frac{z}{l_3}$$

$$a = \left(\frac{l_1}{l_2}\right)^2, \quad b = \left(\frac{l_1}{l_3}\right)^2, \qquad q = \frac{l_1^2 Q}{4\lambda T_0 \alpha}\exp\frac{-1}{\alpha}$$

Здесь l_1, l_2, l_3 —наибольшие размеры области D вдоль осей x, y, z соответственно. Вариационный принцип, соответствующий краевой задаче (2), запишем в виде

$$\delta I = \delta\int\limits_{(D)}\left[\theta_\xi^2 + a\theta_\eta^2 + b\theta_\zeta^2 - 2q\left(\theta + \frac{A}{2}\theta^2 + \frac{B}{3}\theta^3\right)\right]dV = 0. \tag{3}$$

Рассмотрим сначала краевую задачу (2) для отрезка $0 \leqslant \xi \leqslant 1$; ее решение понадобится в дальнейшем. Распределение температуры можно записать в виде

$$(1 - \xi)\,q^{1/2} = \left(\frac{2c}{1 + Ac + Bc^2}\right)^{1/2}\int\limits_v^1 \frac{du}{(1 - k_1u^2 + k_2u^4)^{1/2}} \qquad v = (1 - \theta / c)^{1/2} \tag{4}$$

---

[1] Точнее, возрастающим быстрее, чем линейная функция температуры.

Здесь $c = \theta\ (0)$ — постоянная интегрирования, определяемая соотношением

$$q^{1/2} = \left(\frac{2c}{1 + Ac + Bc^2}\right)^{1/2} \int_0^1 \frac{du}{(1 + k_1u^2 + k_2u^4)^{1/2}} \tag{5}$$

$$k_1 = \frac{c\,(^1/_2 A + Bc)}{1 + Ac + Bc^2}, \qquad k_2 = \frac{^1/_3 Bc^2}{1 + Ac + Bc^2}$$

В дальнейшем при получении численных результатов для определенности будут приниматься значения $A = 0.72$ и $B = 1$. Несложными расчетами можно показать, что (5) разрешимо относительно c при $q \leqslant q^* = 0.88$; соответствующее значение $c^* = 1.20$. Эти результаты совпадают с полученными в [4].

Обратимся теперь к функционалу (3). Пользуясь известными теоремами вариационного исчисления [5], можно показать, что функция $\theta\ (\xi)$, определяемая (4), дает минимальное значение функционалу (3). Выбирая простейшую пробную функцию

$$\theta(\xi) = c\ (1 - \xi^2) \tag{6}$$

с параметром c, получаем после подстановки в (3) квадратное уравнение для c, которое имеет действительные корни лишь при $q \leqslant q^* = 0.89$; соответствующее $c^* = 1.21$, что весьма близко к точным значениям. Полученные таким же путем критические значения для шара и цилиндра равны соответственно: $q^* = 3.63$, $c^* = 1.61$ (шар) и $q^* = 2.11$, $c^* = 1.41$ (цилиндр). Эти значения также близки к точным и несколько превышают их. В общем случае не удается доказать, что значения q^*, полученные как условие разрешимости некоторой системы алгебраических уравнений, следующих из (3), всегда будут превышать точные.

Рассмотрим теперь задачу для цилиндра конечной длины. Простейшая функция сравнения $\theta\ (\rho,\ \xi) = c\ (1 - \rho^2)\ (1 - \xi^2)$ дает

$$q^* = 2.14\ b + 0.88 \tag{7}$$

для прямоугольника (с функцией $\theta\ (\xi,\eta) = c\ (1 - \xi^2)\ (1 - \eta^2)$)

$$q^* = 0.87\ (1 + a) \tag{8}$$

для параллелепипеда $(\theta\ (\xi,\eta,\zeta) = c\ (1 - \xi^2)\ (1 - \eta^2)\ (1 - \zeta^2))$ (9)

$$q^* = 0.85\ (1 + a + b)$$

Зависимость q^* от параметров a и b в формулах (7), (8), (9) связана с частным видом функции сравнения. Более точные результаты можно получить, воспользовавшись методом Л. В. Канторовича [3]. В случае прямоугольника положим $\theta\ (\xi,\ \eta) = (1 - \eta^2) \times f\ (\xi)$. Будем считать, что $a = (l_1\ /\ l_2)^2 \leqslant 1$ (в противном случае надо ξ и η поменять местами). Подставляя в (3) и выполняя интегрирование по η, придем к одномерной вариационной задаче с уравнением Эйлера в виде

$$f'' + q\ (1.25 + 0.72 f + 0.71 f^2) - 2.50\ \ af = 0 \tag{10}$$

Это уравнение одномерной задачи (2), которая разрешима, если разрешимо уравнение типа (5) для постоянной интегрирования. Аналогично для цилиндра конечной длины положим $\theta(\rho,\ \xi) = (1 - \rho^2) f\ (\xi)$. Уравнение для $f\ (\xi)$ имеет вид

$$f'' + q\ (1.50 + 0.72\ f + 0.75\ f^2) - 6bf = 0 \qquad (b = l_1\ /\ R) \tag{11}$$

Здесь R — радиус цилиндра.

Справа приведены значения q^* для прямоугольника, вычисленные из решения (8) и (10) при различных значениях a, а также значения q^* для цилиндра, вычисленные согласно (7) и (11), при различных значениях b.

a	$q^*_{(8)}$	$q^*_{(10)}$	b	$q^*_{(7)}$	$q^*_{(11)}$
0.045	0.91	0.89	0.052	0.99	0.95
0.21	1.05	1.03	0.13	1.16	1.12
0.35	1.18	1.16	0.34	1.60	1.54
0.77	1.55	1.55	1.29	3.60	3.49

Поступила 17 V 1965

ЛИТЕРАТУРА

1. Гришин А. М. Некоторые задачи теории воспламенения. ПМТФ, 1962, № 5.
2. Gray P., Harper M. J. The Thermal Theory of Induction Period and Ignition Delays. Seventh Symp. (Internat.) on Combustion Butterworths Sci. Publ., Lnd., 1959, p. 425.
3. Канторович Л. В., Крылов В. И. Приближенные методы высшего анализа. Физматгиз, 1962.
4. Франк-Каменецкий Д. А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. Изд-во АН СССР, 1947.
5. Гельфанд И. М., Фомин С. В. Вариационное исчисление. Физматгиз, 1961.