Математическое моделирование

УДК 544.45; 517.9
doi: 10.38028/ESI.2022.25.1.001

Определение критических условий в задаче о тепловом взрыве с помощью приближенных вариационных формулировок

Донской Игорь Геннадьевич
Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева СО РАН,
Россия, Иркутск, *donskoy.chem@mail.ru*

Аннотация. В работе предлагаются приближенные вариационные принципы для классической задачи теплового взрыва и ее модификаций (в том числе, для случаев, в которых не выполняется приближение высокой энергии активации). Вариационные задачи решаются с использованием однопараметрической тестовой функции и метода Ритца (для полиномиальной аппроксимации решения). Результаты расчетов позволяют определить зависимость критических условий от параметров задачи: интенсивности теплообмена на границе, конвективного переноса, вязкой диссипации.
Ключевые слова: тепловой взрыв, обратная вариационная задача, критические условия, численные методы

Цитирование: Донской И.Г. Определение критических условий в задаче о тепловом взрыве с помощью приближенных вариационных формулировок // Информационные и математические технологии в науке и управлении. – 2022. – № 1 (25). – С. 7-20. – DOI:10.38028/ESI.2022.25.1.001.

Введение. Типичная обратная задача вариационного исчисления – это определение вида функции Лагранжа, для которой интеграл

$$I = \int_0^X L(\xi, y, y', \ldots)\, d\xi \tag{1}$$

имеет экстремальное значение, если функция $y(\xi)$ удовлетворяет нужным условиям (например, некоторому дифференциальному уравнению). Вариационная постановка может быть предпочтительной, например, из соображений простоты численного решения [1], или возможностей подробного анализа взаимосвязей между описываемыми процессами [2].

Уравнение стационарной теории теплового взрыва выглядит следующим образом [3]:

$$\theta'' + Fk \exp\left(\frac{\theta}{1 + Ar\theta}\right) = 0 \tag{2}$$

Здесь θ – это безразмерная температура, Fk – число Франк-Каменецкого (отношение скоростей тепловыделения при химической реакции и теплоотвода путем теплопроводности), Ar – число Аррениуса (величина $\exp(1/Ar)$ это отношение скоростей реакции при максимальной и минимальной температуре). При малых Ar решение этого уравнения существует лишь для ограниченных значений Fk: при достижении его критического значения происходит разрушение решения, которое трактуется как тепловой взрыв. Уравнению (2) и его модификациям посвящена обширная литература (см., например, [4-11]).

Функция Лагранжа для задачи о тепловом взрыве в пределе большой энергии активации ($Ar = 0$) имеет простой вид [12]:

$$L_0 = \frac{1}{2}(\theta')^2 - Fk \exp\theta \tag{3}$$

При Ar порядка 0,23 происходит вырождение теплового взрыва: решение гладко зависит от значения Fk [13, 14]. Однако даже при малых Ar условия стационарности интеграла от функции (3) не удовлетворяют в точности уравнению (2). В настоящей работе предлагаются способы построения приближенных функций Лагранжа, которые позволяют определять условия существования решения для уравнения (2) и его модификаций.

Функция Лагранжа, интеграл от которой будет иметь экстремум для решения уравнения (2), запишется следующим образом:

$$L_{Ar} = \frac{1}{2}(\theta')^2 - Fk\int_0^\theta \exp\left(\frac{y}{1+Ary}\right)dy \tag{4}$$

Интеграл во втором слагаемом не выражается в элементарных функциях, однако может быть приближен, например, подходящим полиномом, или задан таблично. Для цилиндрической и сферической симметрии можно записать функцию Лагранжа в виде:

$$L_{Ar} = \frac{\xi^m}{2}(\theta')^2 - Fk\xi^m\int_0^\theta \exp\left(\frac{y}{1+Ary}\right)dy,$$

где m равно 1 или 2.

Классическая задача о тепловом взрыве исследовалась с помощью вариационных методов в работах [12, 15, 16], в т.ч. для сложной кинетики химических реакций в [17, 18]. Вариационные задачи для определения критических условий теплового взрыва при течении жидкостей с разными вязкостными свойствами исследовались в работах [19, 20]. Вариационный принцип для смешанного лучистого и кондуктивного теплообмена предложен в работе [21]. Вариационные методы применялись для построения аппроксимаций и численного решения уравнений теории теплового взрыва в [22, 23]. При этом обычно принимается приближение высокой энергии активации ($Ar = 0$), а конвективный перенос не учитывается в вариационной постановке.

В настоящей работе рассматриваются приближенные функции Лагранжа для уравнения (2), учитывающие зависимость скорости реакции от параметра Ar, на основе методов возмущений [24, 25]. Предложена вариационная формулировка для уравнения теплопереноса в стационарном одномерном проточном реакторе. Результаты решения вариационных задач сравниваются с результатами численного решения дифференциальных уравнений типа (2), которое проводилось итерационным методом с полунеявной разностной аппроксимацией [26]. Критические значения параметра Fk в разных вариантах находятся методом половинного деления с точностью до 10^{-6}.

1. Влияние скорости реакции при начальной температуре. Учтем зависимость скорости реакции от параметра Ar. В самом грубом приближении рассмотрим функцию Лагранжа:

$$L_A^{(0)} = \frac{1}{2}(\theta')^2 - Fk \exp\left(\frac{\theta}{1+Ar\theta}\right) \tag{5}$$

Условие стационарности приводит к уравнению:

$$\theta'' + \frac{Fk}{(1+Ar\theta)^2}\exp\left(\frac{\theta}{1+Ar\theta}\right) = 0$$

Видно, что при $Ar = 0$ полученное уравнение совпадает с уравнением (2). Для того, чтобы избавиться от знаменателя, умножим второе слагаемое в выражении (5) на $(1+Ar\theta)^2$ и рассмотрим следующее приближение для функции Лагранжа:

$$L_A^{(1)} = \frac{1}{2}(\theta')^2 - Fk(1+Ar\theta)^2 \exp\left(\frac{\theta}{1+Ar\theta}\right) \tag{6}$$

Условия стационарности дают на этот раз уравнение:

$$\theta'' + Fk\left(1+2Ar+2Ar^2\theta\right)\exp\left(\frac{\theta}{1+Ar\theta}\right) = 0$$

Таким образом, в следующем приближении надо поделить второе слагаемое (6) на полученный полином:

$$L_A^{(2)} = \frac{1}{2}(\theta')^2 - \frac{Fk(1+Ar\theta)^2}{1+2Ar(1+Ar\theta)}\exp\left(\frac{\theta}{1+Ar\theta}\right)$$

Следующее уточнение даст:

$$L_A^{(3)} = \frac{1}{2}(\theta')^2 - \frac{Fk(1+Ar\theta)^2}{1+2Ar(1+Ar\theta) - \dfrac{Ar^2(1+Ar\theta)^2}{1+2Ar(1+Ar\theta)}}\exp\left(\frac{\theta}{1+Ar\theta}\right) \tag{7}$$

Другой способ построения приближенных функций Лагранжа – это разложение экспоненциального множителя в ряд по Ar. Показатель экспоненты можно представить в виде суммы геометрической прогрессии:

$$\frac{\theta}{1+Ar\theta} = \theta\left[1 - Ar\theta + (Ar\theta)^2 - (Ar\theta)^3 + \ldots\right]$$

Первые члены ряда дают приближение:

$$\exp\left(\frac{\theta}{1+Ar\theta}\right) \approx \exp\theta\left[1 - Ar\theta^2 + Ar^2\theta^3 + \frac{Ar^2}{2}\theta^4 - Ar^3\theta^4 - Ar^3\theta^5 - \frac{Ar^3}{6}\theta^6 + \ldots\right]$$

Обрывая ряд на какой-либо степени Ar, можно получать приближения разного порядка. Тогда после интегрирования этого выражения можно получить приближенную функцию Лагранжа в виде:

$$L_B = \frac{1}{2}(\theta') - Fk\exp\theta\, p(\theta), \tag{8}$$

где $p(\theta)$ – это полином от температуры:

$$p(\theta) = 1 - Ar\sum_{i=0}^{2}(-1)^i\theta^{2-i} + Ar^2\sum_{i=0}^{3}(-1)^i\theta^{3-i} + \left(\frac{Ar^2}{2} - Ar^3\right)\sum_{i=0}^{4}(-1)^i\theta^{4-i} -$$
$$-Ar^3\sum_{i=0}^{5}(-1)^i\theta^{5-i} - \frac{Ar^3}{6}\sum_{i=0}^{6}(-1)^i\theta^{6-i}$$

Аналогично могут быть получены приближенные функции Лагранжа с полиномом p, зависящим от высших степеней Ar. Эти выкладки, однако, очень громоздки, поэтому здесь не приводятся. Ниже в расчетах применяются приближения для функции Лагранжа (4) в виде (7) и (8).

Если разложить показатель степени до второго члена, можно записать:

$$L_C = \frac{1}{2}(\theta')^2 - Fk\int_0^\theta \exp\left(y - Ary^2\right)dy =$$
$$= \frac{1}{2}(\theta')^2 - \frac{Fk}{2}\sqrt{\frac{\pi}{Ar}}\exp\left(\frac{1}{4Ar}\right)\left[\operatorname{erf}\left(\sqrt{Ar}\theta - \frac{1}{2\sqrt{Ar}}\right) - \operatorname{erf}\left(-\frac{1}{2\sqrt{Ar}}\right)\right] \tag{9}$$

Наконец, путем подбора можно предложить простую аппроксимацию для (4) в виде:

$$L_D = \frac{1}{2}(\theta') - Fk\left(1 + \frac{Ar}{2}\theta^2\right)\left[\exp\left(\frac{\theta}{1 + Ar\theta}\right) - 1\right] \quad (10)$$

Все полученные здесь функции Лагранжа (7-10) являются приближенными: точное уравнение они дают только при $Ar = 0$. Можно, однако, оценить точность определения критического значения Fk с помощью предложенных приближенных вариационных принципов.

Вычисления проводятся для двухпараметрического семейства парабол. На левой границе примем граничное условие второго рода:

$$\theta'(0) = 0$$

На правой границе, в общем случае, можно записать условие третьего рода:

$$\theta'(1) + Bi\theta(1) = 0$$

Здесь Bi – число Био, равное отношению интенсивностей теплообмена с внешней средой и теплопроводности. Тогда условия на коэффициенты полинома второй степени дают уравнение для тестовой функции:

$$\theta = a\left(1 + \frac{2}{Bi} - \xi^2\right) \quad (11)$$

В частном случае, когда $Bi >> 1$, получаем однопараметрическую тестовую функцию, которая использовалась ранее в работах [15-17]:

$$\theta = a\left(1 - \xi^2\right)$$

Для определения критического значения Fk определяется зависимость вариационного функционала от параметра a: тепловому воспламенению соответствует значение Fk, при котором эта зависимость теряет локальный минимум и становится монотонно убывающей. Для более точной локализации определяются нули производной dI/da: в довзрывных условиях существуют два нуля dI/da, которые соответствуют локальному минимуму и локальному максимуму; критическим условиям соответствует точка, в которой $\mathrm{d}^2I/\mathrm{d}a^2 = 0$. По этому условию можно искать критическое значение Fk. На сетке значений a (с шагом 10^{-3}) при постоянном Fk для выбранной функций Лагранжа рассчитываются значения I (методом трапеций). Число Fk считается докритическим, если существует такое значение $I(a_i)$, что выполняется условие:

$$I\left(a_{i-1}\right) \geq I\left(a_i\right) \leq I\left(a_{i+1}\right)$$

Соответствующие значение a_i пропорционально стационарному значению максимальной температуры $\theta(0)$. Алгоритм строится следующим образом: задаются два значения Fk, заведомо докритическое ($Fk = 0$) и заведомо закритическое (произвольное большое число, например, 10). Интервал делится пополам, для нового значения Fk^* проводится проверка на существование стационарного значения I. Если такое значение существует, то Fk^* становится нижней границей диапазона; если значения не существует, то Fk^* становится верхней границей диапазона. Итерации ведутся до тех пор, пока ширина диапазона не становится меньше заданной величины (10^{-6}).

Ограничения на точность определения критического значения Fk связаны с точностью приближения температурного распределения тестовой функцией, а также шагом по переменной ξ (поскольку значения I находятся численным интегрированием). В наших расчетах шаг по переменной ξ и a равен 10^{-3} (максимальные значения 1 и 3, соответственно). В связи с погрешностями вычислений, критическое значение Fk при $Ar = 0$ не совпадает в точности с аналитическим результатом (0,878). Это отличие, однако, невелико. На рис. 1 показана зависимость критического значения Fk от числа Ar: видно, что функция Лагранжа L_A лучше аппроксимирует поведение системы во всем диапазоне. Для сравнения приведены результаты численного решения уравнения (2) и данные работы [27]. Как видно из табл. 1, для L_A также наблюдаются лучшая сходимость с увеличением порядка приближения (здесь Δ – отклонения от значения 0,98976…, полученного при численном решении дифференциального уравнения (2)). Приближение температурного распределения ветвью параболы для всех случаев оказывается достаточно хорошим. Приближение L_C приводит к вырождению теплового взрыва уже при Ar порядка 0,12. Остальные приближения для функции Лагранжа, наоборот, расширяют диапазон существования критических условий за пределы теоретических границ.

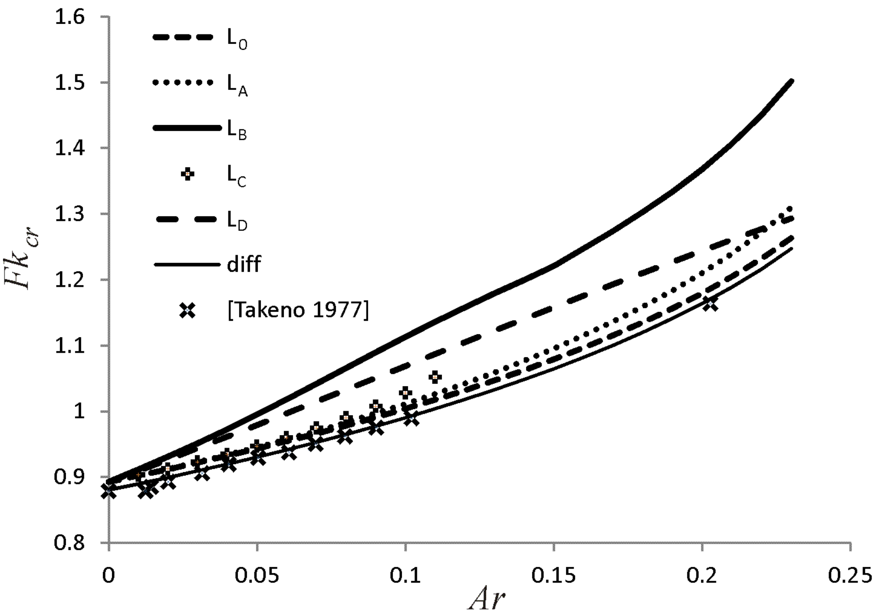

Рис. 1. Зависимость критического значения параметра Fk для задачи (1) от параметра Ar (Bi = 0): L_0 – (4); L_A – (7); L_B – (8); L_C – (9); L_D – (10); *diff* – численное решение дифференциального уравнения (2).

Таблица 1. Критические условия в задаче (4) при использовании приближенных функций Лагранжа для Ar = 0,1.

	L_A (7)		L_B (8)		L_C (9)		L_D (10)	
Номер приближения	Fk_{cr}	ΔFk, %	Fk_{cr}	ΔFk, %	Fk_{cr}	ΔFk, %	Fk_{cr}	ΔFk, %
0	1,334	34,8	0,892	-9,8	-	-	-	-
1	0,819	-17,3	1,458	47,3	1,028	3,83	1,068	7,96
2	1,021	3,1	1,100	11,1	-	-	-	-
3	1,011	2,1	1,167	17,9	-	-	-	-

2. Влияние теплообмена с окружающей средой. При Ar = 0 значение I для тестовой функции (11) можно найти по формуле:

$$I = \frac{2}{3}a^2 - \frac{Fk}{2}\exp(a)\exp\left(\frac{2a}{Bi}\right)\sqrt{\frac{\pi}{a}}erf\left(\sqrt{a}\right) \tag{12}$$

Критическое условие (вырождение экстремумов по параметру a) для этого выражения в пределе больших значений Bi достигается при Fk = 0,89227… (отличие от точного значения менее 2%). Зависимость критического Fk от Bi воспроизводится лишь качественно: видимо, приближение параболы становится неприменимым при уменьшении Bi до величины порядка нескольких десятков. С уменьшением Bi второе слагаемое в правой части (9) становится меньше по величине, поэтому переход к тепловому взрыву происходит при меньших значениях *Fk*. Если считать, что критическое значение безразмерной температуры *a* примерно равно единице, можно оценить критическое значение *Fk* следующим образом:

$$Fk \approx Fk_0 \exp\left(-\frac{2}{Bi}\right) \tag{13}$$

Эта зависимость сравнивается с оценками на основе выражения (12) и результатами численного решения уравнения (2). До значений *Bi* порядка единицы приближение (13) дает лучшее соответствие численному решению, чем поиск стационарных условий для выражения (12). Интересно, что критическое значение *Fk*, полученное при определении точки перегиба для (12), примерно равно квадрату истинного значения.

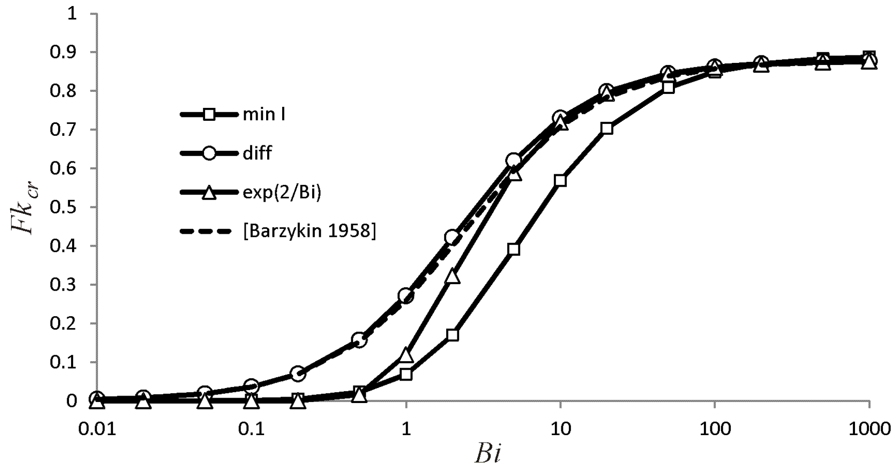

Рис. 2. Зависимости критического значения *Fk* от параметра *Bi*, полученными разными способами: квадраты – минимизация выражения (12); круги – численное решение уравнения (2); треугольники – оценка по формуле (13); пунктир – приближенная формула из работы [28].

3. Влияние конвективного переноса. Рассмотрим уравнение, описывающее докритический стационарный режим теплообмена в одномерном реакторе

$$-Pe\theta' - Bi_w\theta + \theta'' + Fk\exp\left(\frac{\theta}{1+Ar\theta}\right) = 0 \tag{14}$$

Здесь *Pe* – число Пекле (отношение интенсивности конвективного переноса к кондуктивному); Bi_w – число Био для теплообмена реакционной смеси со стенкой реактора. Функция Лагранжа для уравнения (14) запишется в виде:

$$L = \exp\left(-Pe\xi\right)\left[\frac{1}{2}\left(\theta'\right)^2 + \frac{Bi_w}{2}\theta^2 - Fk\int_0^\theta \exp\left(\frac{y}{1+Ary}\right)dy\right] \tag{15}$$

Подобный вид функции Лагранжа (с экспоненциальным множителем) использовался ранее для других задач тепломассообмена в работах [29, 30] и для механических систем в [31]. Примем следующие граничные условия для уравнения (14):

$$\theta(0) = 0,\ \theta'(1) = 0$$

Использование тестовой функции (11) оказывается слишком грубым приближением уже при небольших значениях *Pe*. Наличие конвективного слагаемого в (14) приводит к выполаживанию начального участка зависимости $\theta(\xi)$ и росту градиентов при приближении к $\xi = 1$. Для вычислений используется метод Ритца с полиномиальной аппроксимацией:

$$\theta(\xi) \approx \sum_{i=0}^{N} a_i \xi^i$$

Условия стационарности дают итерационную схему для уточнения коэффициентов полинома:

$$\mathbf{D}\mathbf{a}^q = \mathbf{s}^{q-1} \qquad (16)$$

Здесь q – номер итерации; элементы D и **s** определяются из выражений:

$$D_{ki} = ik\int_0^1 \exp(-Pe\xi)\,\xi^{i+k-2}d\xi + Bi_w\int_0^1 \exp(-Pe\xi)\,\xi^{i+k}d\xi\,,$$

$$s_k = Fk\int_0^1 \exp\left(\frac{\bar{\theta}}{1+Ar\bar{\theta}} - Pe\xi\right)\xi^k d\xi$$

Здесь функция θ в уравнении для s_k считается фиксированной (в данном случае нет необходимости приближений для источника типа (7-10)). Граничные условия кроме очевидного равенства $a_0 = 0$ дают дополнительное соотношение между коэффициентами:

$$\sum_{i=1}^{N} ia_i = 0$$

Итерационный процесс заканчивается, когда выполняется условие:

$$\max\left|\theta^q - \theta^{q-1}\right| < \varepsilon\,,$$

где допустимая погрешность ε принята равной 0,001.

В работе [32] показано, что в задаче с конвективным переносом критическое значение *Fk* асимптотически стремится к *Pe* (т.е. при больших значениях *Pe* максимальное значение безразмерной температуры стремится к $-\ln(1 - Fk/Pe)$). На рис. 3 показаны результаты решения вариационной задачи для полинома степени $N = 6$ ($Ar = 0$): видно, что с увеличением *Pe* аппроксимация становится все хуже, однако при $Pe = 10$ полином шестой степени дает точность оценки критического значения *Fk* около 2,5%.

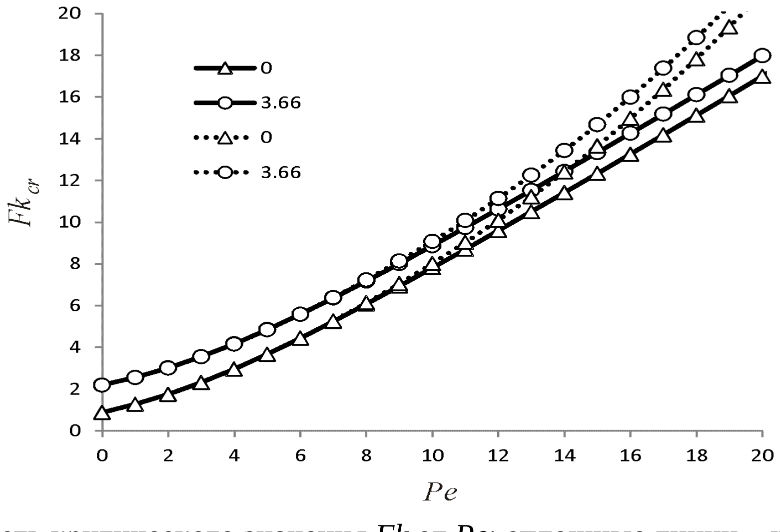

Рис. 3. Зависимость критического значения *Fk* от *Pe*: сплошные линии – численное решение уравнения (14); пунктирные линии – решение вариационной задачи с функцией Лагранжа (15) методом Ритца; треугольники – $Bi = 0$; круги – $Bi = 3{,}66$.

Теплопотери увеличивают критическое значение *Fk*: зависимости для $Bi = 0$ и $Bi = 5$ в выбранном диапазоне отличаются примерно друг от друга примерно постоянным сдвигом (при больших *Bi* для более точной оценки критических условий надо делать поправку на конверсию реагентов [33], в настоящей работе этот эффект не учитывается). Интересно, что с ростом *Pe* усиливаются различия между кривыми для разных *Ar*: можно сказать, что увеличение интенсивности конвективного переноса приводит к росту чувствительности условий зажигания к скорости реакции при начальной температуре.

Рассмотренные в предыдущих разделах постановки естественным образом распространяются на двумерный и трехмерный случай. Наличие конвективного переноса не позволяет совершить такой же простой переход к многомерным обобщениям: зависимость Pe от пространственных переменных приводит к появлению дополнительных ненужных слагаемых в уравнениях, выражающих условия стационарности в вариационной задаче. В некоторых случаях, как показано в [19, 20, 34], можно редуцировать двумерную задачу к одномерной и рассматривать только перенос в направлении, поперечному потоку:

$$\theta'' + \alpha\xi^2 + Fk\exp\left(\frac{\theta}{1+Ar\theta}\right) = 0 \tag{17}$$

Здесь α – это интенсивность вязкой диссипации. Можно записать соответствующую уравнению (17) функцию Лагранжа для вариационной задачи в виде:

$$L = \frac{1}{2}(\theta')^2 - \alpha\theta\xi^2 - Fk\int_0^{\theta}\exp\left(\frac{y}{1+Ary}\right)dy \tag{18}$$

Диссипация приводит к дополнительному тепловыделению, поэтому критическое число Fk должно уменьшаться с ростом параметра α. Автор [34] дает простую формулу для оценки критического значения Fk для уравнения (18) при $Ar = 0$:
$Fk(\alpha)/Fk(0) = \exp(-\alpha/12)$. Расчеты проводились с применением тестовой функции (11) и приближения типа (7) для источникового слагаемого. Сравнение численных результатов с этой формулой показано на рис. 5. Видно, что с ростом Ar и α эта формула становится все менее точной (хотя при $\alpha < 2$ погрешность составляет менее 5%).

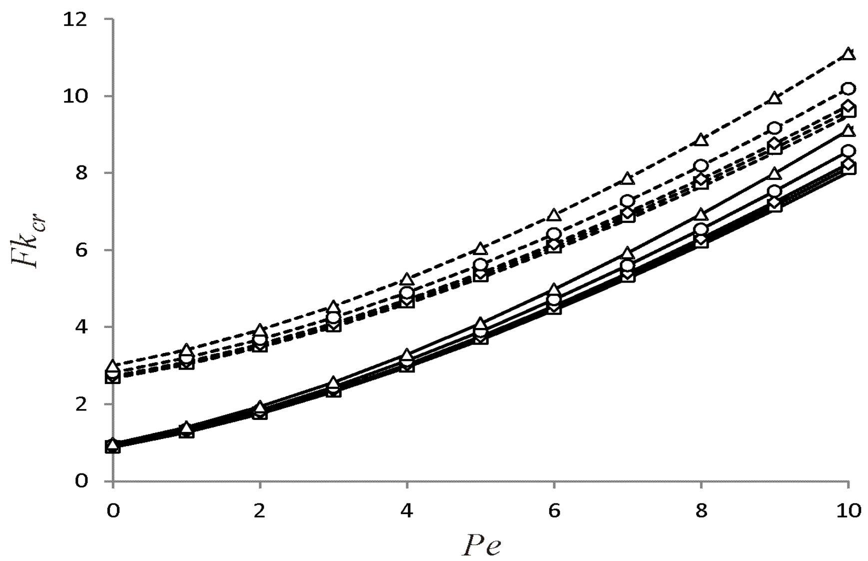

Рис. 4. Зависимость критического значения Fk от Pe при $Bi = 0$ (сплошные линии) и $Bi = 5$ (пунктирные линии); квадраты: $Ar = 0{,}01$; ромбы: $Ar = 0{,}02$; круги: $Ar = 0{,}05$; треугольники: $Ar = 0{,}1$.

Заключение. В статье предложены приближенные функции Лагранжа для вариационной формулировки задачи о тепловом взрыве в одномерном реакторе. С помощью простых тестовых функций сопоставлена точность разных приближений (в первую очередь, приближения высокой энергии активации химической реакции) и определены границы их применимости. Предложена вариационная формулировка задачи о тепловой устойчивости

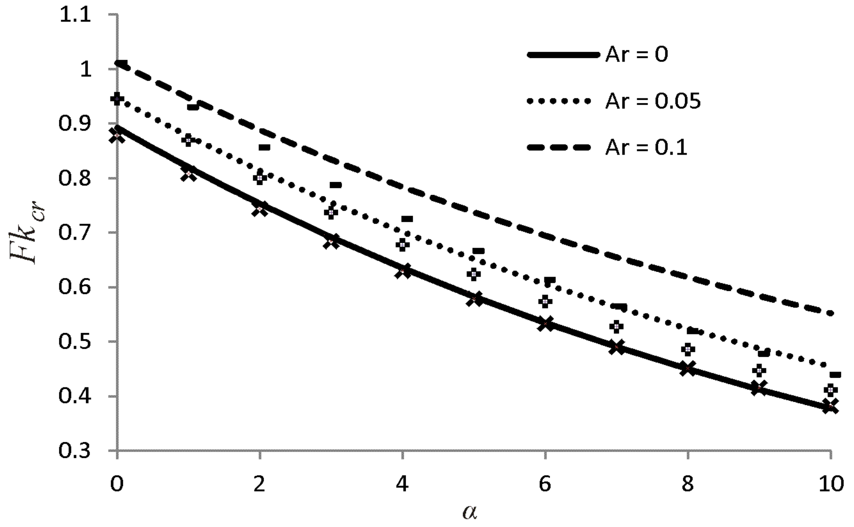

Рис. 5. Зависимость критического значения *Fk* в для уравнения (17) от интенсивности вязкой диссипации: сплошные линии – решение вариационной задачи (18); маркеры – оценка по формуле из работы [34].

проточного химического реактора, с помощью метода Ритца определены критические условия при наличии теплопотерь и конвективного переноса. Упрощенно рассмотрено влияние вязкой диссипации. Полученные результаты могут быть применены для оценки тепловой устойчивости реагирующих сред. Дальнейшая работа будет связана с исследованием вариационных задач, соответствующих квазистационарному распространению волн горения в реагирующих средах.

Благодарности: Работа выполнена в рамках проекта государственного задания (№ FWEU-2021-0005) программы фундаментальных исследований РФ на 2021-2030 гг.

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

1. Шехтер Р. Вариационный метод в инженерных расчетах / Р. Шехтер, – Мир, 1971. – 292 с.
2. Гленсдорф П., Пригожин И. Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций / П. Гленсдорф, И. Пригожин. – М.: Мир, 1973. – 280 с.
3. Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике / Д.А. Франк-Каменецкий. – М.: Наука, 1987. – 502 с.
4. Fradkin L.J., Wake G.C. The Critical Explosion Parameter in the Theory of Thermal Ignition. IMA Journal of Applied Mathematics, 1977, vol. 20, pp. 471–484, DOI: 10.1093/imamat/20.4.471.
5. Wake G.C., Sleeman M., Chen X.D., Jones J.C. Theory and applications of ignition with variable activation energy. Journal of Thermal Science, 1992, vol. 1, pp. 208–212, DOI: 10.1007/BF02663700.
6. Li S., Liao S.-J. An analytic approach to solve multiple solutions of a strongly nonlinear problem. Applied Mathematics and Computation, 2005, vol. 169, pp. 854-865, DOI: 10.1016/j.amc.2004.09.066.
7. Gordon P.V., Ko E., Shivaji R. Multiplicity and uniqueness of positive solutions for elliptic equations with nonlinear boundary conditions arising in a theory of thermal explosion. Nonlinear Analysis: Real World Applications, 2014, vol. 15, pp. 51-57, DOI: 10.1016/j.nonrwa.2013.05.005.

8. Ko E., Prashanth S. Positive solutions for elliptic equations in two dimensions arising in a theory of thermal explosion. Taiwanese Journal of Mathematics, 2015, vol. 19, pp. 1759-1775, DOI: 10.11650/tjm.19.2015.5968.
9. Yu Y., Luo Q., Liang D. Indirect Method of the Critical Parameters of Frank-Kamenetskii Equations in Spontaneous Combustion Theory. Procedia Engineering, 2016, vol. 135, pp. 551-554, DOI: 10.1016/j.proeng.2016.01.099.
10. Roul P. A fast and accurate computational technique for efficient numerical solution of non-linear singular boundary value problems. International Journal of Computer Mathematics, 2019, Vol. 96, pp. 51-72, DOI: 10.1080/00207160.2017.1417588.
11. Yu S.-Y., Yan B. Positive Solutions for a Singular Elliptic Equation Arising in a Theory of Thermal Explosion. Mathematics, 2021, vol. 9, pp. 2173, DOI: 10.3390/math9172173.
12. Гришин А.М. Некоторые задачи теории воспламенения / А.М. Гришин // Прикладная механика и техническая физика, 1962. – № 5. – С. 75-79.
13. Мержанов А.Г., Зеликман Е.Г., Абрамов В.Г. Вырожденные режимы теплового взрыва / А.Г. Мержанов, Е.Г. Зеликман, В.Г. Абрамов // Докл. АН СССР, 1968. – Т. 180. – № 3. – С. 639-642.
14. Boddington T., Gray P., Robinson C. Thermal explosions and the disappearance of criticality at small activation energies: exact results for the slab. Proceedings of the Royal Society A. Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 1979, vol. 368, pp. 441–461, DOI: 10.1098/rspa.1979.0140.
15. Анисимов С.И., Виткин Э.И. Некоторые вариационные задачи теории теплового взрыва / С.И. Анисимов, Э.И. Виткин // Прикладная механика и техническая физика, 1966. – № 4. – С. 150-151.
16. Зарубин В.С., Кувыркин Г.Н., Савельева И.Ю. Вариационная форма модели теплового взрыва в твердом теле с зависящей от температуры теплопроводностью / В.С.Зарубин, Г.Н. Кувыркин, И.Ю. Савельева // Теплофизика высоких температур, 2018. –Т. 56. – № 2. – С. 235-240. DOI: 10.7868/ S0040364418020102.
17. Graham-Eagle J.G., Wake G.C. Theory of thermal explosions with simultaneous parallel reactions. II. The two- and three-dimensional cases and the variational method. Proceedings of the Royal Society A. Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 1985, vol. 401, pp. 195-202, DOI: 10.1098/rspa.1985.0094.
18. Донской И.Г. Численная оценка критических условий в задаче о тепловом взрыве с флуктуациями реакционной способности / И.Г. Донской // Информационные и математические технологии в науке и управлении, 2021. – № 1. – С. 54-65. DOI: 10.38028/ ESI.2021.21.1.005.
19. Ajadi S.O. A note on the thermal stability of a reactive non-Newtonian flow in a cylindrical pipe. International Communications in Heat and Mass Transfer, 2009, vol. 36, pp. 63-68, DOI: 10.1016/j.icheatmasstransfer.2008.09.005.
20. Ajadi S.O. The influence of viscous heating and wall thermal conditions on the thermal ignition of a Poiseuille/Couette reactive flow // Chemical physics, 2010, v. 29, no. 8, p. 47-54.
21. Blouquin R., Joulin G. On a Variational Principle for Reaction/Radiation/Conduction Equilibria. Combustion Science and Technology, 1996, vol. 112, pp. 375-385, DOI: 10.1080/ 00102209608951968.

22. Moise A., Pritchard H.O. Newton-variational solution of the Frank–Kamenetskii thermal explosion problem. Canadian Journal of Chemistry, 1989, vol. 67, p. 442, DOI: 10.1139/v89-069.
23. Wazwaz A.-M. Solving the non-isothermal reaction-diffusion model equations in a spherical catalyst by the variational iteration method. Chemical Physics Letters, 2017, vol. 679, pp. 132-136, DOI: 10.1016/j.cplett.2017.04.077.
24. Байков В.А., Газизов Р.К., Ибрагимов Н.Х. Приближенные симметрии / В.А. Байков, Р.К. Газизов, Н.Х.Ибрагимов // Математический сборник, 1988. – Т. 136(178). – № 4(8). С. 435–450.
25. Gorgone M., Oliveri F. Approximate Noether Symmetries of Perturbed Lagrangians and Approximate Conservation Laws. Mathematics, 2021, vol. 9, pp. 2900, DOI: 10.3390/math9222900.
26. Donskoy I.G. Numerical estimation of thermal ignition conditions for reactive medium with Gaussian distribution of activation energy. Journal of Physics: Conference Series, 2021, vol. 2119, p. 012102, DOI:10.1088/1742-6596/2119/1/012102.
27. Takeno T. Ignition criterion by thermal explosion theory. Combustion and Flame, 1977, vol. 29, pp. 209-211, DOI: 10.1016/0010-2180(77)90108-0.
28. Барзыкин В.В., Мержанов А.Г. Краевая задача в теории теплового взрыва / В.В. Барзыкин, А.Г. Мержанов // Доклад АН СССР, 1958. –Т. 120. – № 6. – С. 1271-1273.
29. Гостинцев Ю.А. Метод приведения к обыкновенным дифференциальным уравнениям в задачах нестационарного горения пороха / Ю.А. Гостинцев // Физика горения и взрыва, 1967. – № 3. – С. 335-361.
30. Sieniutycz S. The variational principles of classical type for non-coupled non-stationary irreversible transport processes with convective motion and relaxation. International Journal of Heat and Mass Transfer, 1977, vol. 20, pp. 1221-1231, DOI: 10.1016/0017-9310(77)90131-4.
31. He J.-H. Variational principles for some nonlinear partial differential equations with variable coefficients. Chaos, Solitons & Fractals, 2004, vol. 19, pp. 847-851, DOI: 10.1016/S0960-0779(03)00265-0.
32. Дик И.Г., Толстых А.В. Воспламенение продуваемого слоя / И.Г. Дик, А.В. Толстых А.В. // Физика горения и взрыва, 1994. –№ 2. – С. 3-7.
33. Boddington T., Gray P., Wake G.C. Criteria for thermal explosions with and without reactant consumption. Proceedings of the Royal Society A. Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 1977, vol. 357, pp. 403–422, DOI: 10.1098/rspa.1977.0176.
34. Adler J. Thermal explosion theory for reactive flow between parallel heated walls. Combustion and Flame, 1975, vol. 24, pp. 151-158, DOI: 10.1016/0010-2180(75)90142-X.

Донской Игорь Геннадьевич, *к.т.н., с.н.с. лаборатории термодинамики, Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева СО РАН, donskoy.chem@mail.ru, Росссия, г. Иркутск, ул. Лермонтова 130*

UDC 544.45; 517.9
doi: 10.38028/ESI.2022.25.1.001

Determining critical conditions in the thermal explosion problem using approximate variational formulations

Igor G. Donskoy
Melentiev Energy Systems Institute Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Russia, Irkutsk, *donskoy.chem@mail.ru*

Abstract. The paper proposes approximate variational principles for the classical thermal explosion problem and its modifications (including cases where the high activation energy approximation does not hold). Variational problems are solved using a one-parameter test function and the Ritz method (for polynomial approximation of the solution). The results of the calculations make it possible to determine the dependence of the critical conditions on the parameters of the problem: the intensity of heat transfer at the inner boundary, forced convection, and viscous dissipation.

Keywords: thermal explosion, inverse variational problem, critical conditions, numerical methods

Acknowlegements: The work was carried out within the framework of the draft state task (No. FWEU-2021-0005) of the program of fundamental research of the Russian Federation for 2021-2030.

REFERENCES

1. Schechter R. Variatsionnyi metod v inzhenernykh raschetakh [Variational method in engineering calculations]. Moscow, Mir, 1971, 292 p.
2. Glansdorff P., Prigogine I.. Termodinamicheskaya teoriya struktury, ustoychivosti i fluktuatsii [Thermodynamic theory of structure, stability and fluctuations]. Moscow, Mir, 1973, 280 p
3. Frank-Kamenetskii D.A. Diffuziya i teploperedacha v khimicheskoi kinetike [Diffusion and Heat Exchange in Chemical Kinetics]. Moscow, Nauka, 1987, 502 p
4. Fradkin L.J., Wake G.C. The Critical Explosion Parameter in the Theory of Thermal Ignition. IMA Journal of Applied Mathematics, 1977, vol. 20, pp. 471–484, DOI: 10.1093/imamat/20.4.471.
5. Wake G.C., Sleeman M., Chen X.D., Jones J.C. Theory and applications of ignition with variable activation energy. Journal of Thermal Science, 1992, vol. 1, pp. 208–212, DOI: 10.1007/BF02663700.
6. Li S., Liao S.-J. An analytic approach to solve multiple solutions of a strongly nonlinear problem. Applied Mathematics and Computation, 2005, vol. 169, pp. 854-865, DOI: 10.1016/j.amc.2004.09.066.
7. Gordon P.V., Ko E., Shivaji R. Multiplicity and uniqueness of positive solutions for elliptic equations with nonlinear boundary conditions arising in a theory of thermal explosion. Nonlinear Analysis: Real World Applications, 2014, vol. 15, pp. 51-57, DOI: 10.1016/j.nonrwa.2013.05.005.
8. Ko E., Prashanth S. Positive solutions for elliptic equations in two dimensions arising in a theory of thermal explosion. Taiwanese Journal of Mathematics, 2015, vol. 19, pp. 1759-1775, DOI: 10.11650/tjm.19.2015.5968.

9. Yu Y., Luo Q., Liang D. Indirect Method of the Critical Parameters of Frank-Kamenetskii Equations in Spontaneous Combustion Theory. Procedia Engineering, 2016, vol. 135, pp. 551-554, DOI: 10.1016/j.proeng.2016.01.099.
10. Roul P. A fast and accurate computational technique for efficient numerical solution of non-linear singular boundary value problems. International Journal of Computer Mathematics, 2019, vol. 96, pp. 51-72, DOI: 10.1080/00207160.2017.1417588.
11. Yu S.-Y., Yan B. Positive Solutions for a Singular Elliptic Equation Arising in a Theory of Thermal Explosion. Mathematics, 2021, vol. 9, pp. 2173, DOI: 10.3390/math9172173.
12. Grishin A.M. Nekotorye zadachi teorii vosplamenenija [Some problems of ignition theory]. Prikladnaja mehanika i tehnicheskaja fizika [Journal of Applied Mechanics and Technical Physics], 1962, no. 5, pp. 75-79.
13. Merzhanov A.G., Zelikman E.G., Abramov V.G. Vyrozhdennye rezhimy teplovogo vzryva [Degenerate modes of thermal explosion]. Doklady AN SSSR [Reports of AN USSR], 1968, vol, 180, no. 3, pp. 639-642.
14. Boddington T., Gray P., Robinson C. Thermal explosions and the disappearance of criticality at small activation energies: exact results for the slab. Proceedings of the Royal Society A. Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 1979, vol. 368, pp. 441–461, DOI: 10.1098/rspa.1979.0140
15. Anisimov S.I., Vitkin E.I. Nekotorye variacionnye zadachi teorii teplovogo vzryva [Some variational problems in thermal explosion theory]. Prikladnaja mehanika i tehnicheskaja fizika [Journal of Applied Mechanics and Technical Physics], 1966, vol. 7, pp. 109–110, DOI: 10.1007/BF00917676
16. Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N., Savel'eva I.Ju. Variacionnaja forma modeli teplovogo vzryva v tverdom tele s zavisjashhej ot temperatury teploprovodnost'ju [The Variational Form of the Mathematical Model of a Thermal Explosion in a Solid Body with Temperature-Dependent Thermal Conductivity]. Teplofizika vysokih temperature [High Temperature], 2018, vol. 56, pp. 223-228, DOI: 10.1134/S0018151X18010212
17. Graham-Eagle J.G., Wake G.C. Theory of thermal explosions with simultaneous parallel reactions. II. The two- and three-dimensional cases and the variational method. Proceedings of the Royal Society A. Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 1985, vol. 401, pp. 195-202, DOI: 10.1098/rspa.1985.0094.
18. Donskoj I.G. Chislennaja ocenka kriticheskih uslovij v zadache o teplovom vzryve s fluktuacijami reakcionnoj sposobnosti [Numerical estimation of critical conditions in thermal explosion problem for a medium with fluctuations of reactivity. Informacionnye i matematicheskie tehnologii v nauke i upravlenii [Information and Mathematical Technologies in Science and Management], 2021, no. 1, pp. 54-65. DOI: 10.38028/ESI.2021.21.1.005
19. Ajadi S.O. A note on the thermal stability of a reactive non-Newtonian flow in a cylindrical pipe. International Communications in Heat and Mass Transfer, 2009, vol. 36, pp. 63-68, DOI: 10.1016/j.icheatmasstransfer.2008.09.005.
20. Ajadi S.O. The influence of viscous heating and wall thermal conditions on the thermal ignition of a Poiseuille/Couette reactive flow // Chemical physics, 2010, v. 29, no. 8, p. 47-54.
21. Blouquin R., Joulin G. On a Variational Principle for Reaction/Radiation/Conduction Equilibria. Combustion Science and Technology, 1996, vol. 112, pp. 375-385, DOI: 10.1080/00102209608951968.
22. Moise A., Pritchard H.O. Newton-variational solution of the Frank–Kamenetskii thermal explosion problem. Canadian Journal of Chemistry, 1989, vol. 67, p. 442, DOI: 10.1139/v89-069.

23. Wazwaz A.-M. Solving the non-isothermal reaction-diffusion model equations in a spherical catalyst by the variational iteration method. Chemical Physics Letters, 2017, vol. 679, pp. 132-136, DOI: 10.1016/j.cplett.2017.04.077.
24. Baikov V.A., Gazizov R.K., Ibragimov N.Kh. Priblizhennye simmetrii [Approximate symmetries]. Matematicheskij sbornik [Mathematics of USSR – Sbornik], 1989, vol. 64, pp. 427–441. DOI: 10.1070/SM1989v064n02ABEH003318.
25. Gorgone M., Oliveri F. Approximate Noether Symmetries of Perturbed Lagrangians and Approximate Conservation Laws. Mathematics, 2021, vol. 9, pp. 2900. DOI: 10.3390/math9222900.
26. Donskoy I.G. Numerical estimation of thermal ignition conditions for reactive medium with Gaussian distribution of activation energy. Journal of Physics: Conference Series, 2021, vol. 2119, p. 012102. DOI:10.1088/1742-6596/2119/1/012102.
27. Takeno T.. Ignition criterion by thermal explosion theory. Combustion and Flame, 1977, vol. 29, pp. 209-211. DOI: 10.1016/0010-2180(77)90108-0.
28. Barzykin V.V., Merzhanov A.G. Kraevaja zadacha v teorii teplovogo vzryva [Boundary value problem in thermal explosion theory]. Doklady AN SSSR [Reports of AN USSR], 1958, vol. 120, pp. 1271-1273.
29. Gostincev Yu.A. Metod privedenija k obyknovennym differencial'nym uravnenijam v zadachah nestacionarnogo gorenija poroha [Method of reduction to ordinary differential equations in problems of the nonstationary burning of solid propellants]. Fizika gorenija i vzryva [Combustion, Explosions and Shock Waves], 1967, vol. 3, pp. 218–220. DOI: 10.1007/BF00791864
30. Sieniutycz S. The variational principles of classical type for non-coupled non-stationary irreversible transport processes with convective motion and relaxation. International Journal of Heat and Mass Transfer, 1977, vol. 20, pp. 1221-1231. DOI: 10.1016/0017-9310(77)90131-4
31. He J.-H. Variational principles for some nonlinear partial differential equations with variable coefficients. Chaos, Solitons & Fractals, 2004, vol. 19, pp. 847-851. DOI: 10.1016/S0960-0779(03)00265-0
32. Dik I.G., Tolstyh A.V. Vosplamenenie produvaemogo sloja [Ignition of a porous layer with a flow of heat carrier]. Fizika gorenija i vzryva [Combustion, Explosions and Shock Wave, 1994, vol. 30, pp. 135–139. DOI: 10.1007/BF00786117
33. Boddington T., Gray P., Wake G.C. Criteria for thermal explosions with and without reactant consumption. Proceedings of the Royal Society A. Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 1977, Vol. 357, pp. 403–422. DOI: 10.1098/rspa.1977.017
34. Adler J. Thermal explosion theory for reactive flow between parallel heated walls. Combustion and Flame, 1975, Vol. 24, pp. 151-158. DOI: 10.1016/0010-2180(75)90142-X

Igor G. Donskoy, *Cand. Sci. (Eng.), Senior Researcher in Laboratory of Thermodynamics, Melentiev Energy Systems Institute Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, donskoy.chem@mail.ru, Irkutsk, Russia, Lermontov Str., 130*

Статья поступила в редакцию 18.02.2022; одобрена после рецензирования 23.03.2022; принята к публикации 25.03.2022.
The article was submitted 02.18.2022; approved after reviewing 03.23.2022; accepted for publication 03.25.2022.