

УДК 69:614.8

КРИТИЧЕСКИЕ УСЛОВИЯ САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ В ТОЧКЕ БИФУРКАЦИИ

© 2023 г. А. А. Филиппов^{1,*}, академик РАН А. А. Берлин¹

Поступило 13.10.2022 г.

После доработки 13.10.2022 г.

Принято к публикации 09.12.2022 г.

Обобщены результаты основных исследований в области теории самовоспламенения. Для симметричных сосудов представлены: критические условия самовоспламенения в размерных координатах, распределение температуры в сосуде, предвзрывной разогрев горючего и критический размер сосуда в момент взрыва. Отмечено, что условия самовоспламенения для разных сосудов отличаются только цифровым множителем, что указывает на отсутствие влияния формы сосуда на физико-химические процессы, идущие в горючем в момент взрыва. Каждая особая точка, являясь точкой бифуркации, определяет число, позволяющее из множества решений уравнения теплопроводности найти единственное — критическое условие самовоспламенения. Это условие в координатах своих переменных представляет собой многомерную поверхность, отделяющую зону стационарного существования горючей системы от зоны “невозврата”, где горючая система существовать не может.

Ключевые слова: теория и условия самовоспламенения, точки бифуркации и невозврата

DOI: 10.31857/S2686740023030069, **EDN:** OYKPNT

К 1980 г. теория самовоспламенения была в основном изучена, а идеи и решения изложены в монографиях [1, 2]. В этой статье обобщены результаты исследований [1, 2] и изучены особые точки, возникающие в интегральных решениях стационарного уравнения теплопроводности, или в связанных с ними специальных функциях, в момент взрыва. Это позволило взглянуть на явление самовоспламенения с точки зрения теории катастроф [4, 5] и сделать ряд новых выводов.

Изменение температуры в горючем внутри сосуда описывается нестационарным уравнением теплопроводности:

$$c\rho dT/dt + \lambda \Delta T = -QkW(T), \quad (1)$$

где c , ρ и λ — теплоемкость, плотность и теплопроводность горючего, Δ — оператор Лапласа, k , Q и $W(T)$ — предэкспоненциальный множитель, тепловой эффект и скорость химической реакции.

Решить уравнение (1) не просто, да и не всегда нужно, так как оно дает излишне подробную информацию о распределении температуры в горючем. Но в работах [1, 2, 6] показано, что для изуче-

ния теплового взрыва достаточно найти единственный, предельный стационарный профиль температуры, при котором бесконечно малое изменение любого параметра горючей системы может привести к взрыву. Поэтому будем рассматривать стационарное уравнение теплопроводности, для которого уравнение (1) принимает вид

$$\lambda \Delta T = -QkW(T). \quad (2)$$

Решение уравнения (2) представляет собой множество профилей температуры в горючем, но лишь один из них является предельным, предвзрывным. Этот профиль можно получить, анализируя решения уравнения (2) или вспомогательные функции, связанные с ними, выявляя в них особенности (фокус, седло, точка перегиба и другие). Если при появлении этих особенностей происходит взрыв горючей системы, состоящей из горючего вещества, находящегося внутри замкнутого сосуда, то ее характеристики входят в критические условия теплового взрыва [1, 2, 6].

В работах [1, 2] показано, что при тепловом взрыве скорость химической реакции зависит от температуры по закону Аррениуса

$$W(T) = k \exp(-E/RT).$$

При условиях $E > 30000$ ккал/моль, $RT_s/E \ll 1$ и слабом предвзрывном разогреве $(T_s - T_0)/T_0 \ll 1$ будет справедливо разложение:

¹ Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва, Россия

*E-mail: 7987961@mail.ru

$$\exp(-E/RT) \approx \exp(-E/RT_s) \exp(-E(T - T_s)/RT_s^2), \quad (3)$$

где E — энергия активации химической реакции, T_0 и T_s — температуры накаливаемой внутренней поверхности сосуда и горючего в центре сосуда, в момент взрыва.

В работах [1, 2] показано, что существуют решения уравнения (2) в аналитическом виде только в объемах правильной формы (бесконечный плоскопараллельный сосуд, цилиндр, сфера), при исполнении условия (3), а также при отсутствии выгорания химических реагентов, кондуктивным способом передачи тепла и постоянстве k и λ в горючем. Кроме того, при решении уравнения (2) полагали, что профиль температуры симметричен относительно центра сосуда ($dT/dr = 0$), от которого отсчитывали координату по нормали к плоскости или оси симметрии. Также считали постоянной температуру внутренней стенки сосуда, что в реальных условиях возможно при бесконечной теплоемкости и теплопроводности стенки.

В работе [1], изучая уравнение (2) в плоскопараллельном сосуде, сделали замену переменных: $\theta = (T - T_s)E/RT_s^2$, $\gamma = r/r_s$, где r_s — полуширина сосуда.

В новых переменных уравнение (2) приняло вид

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial \gamma^2} = -\delta \exp \theta. \quad (4)$$

При граничных условиях

$$\theta|_{\gamma=\gamma_s} = 0 \quad \text{и} \quad \frac{\partial \theta}{\partial \sigma}|_{\gamma=0} = 0, \quad (5)$$

где $\delta = kQEr_s^2 \exp(-E/RT_s)/\lambda RT_s$ — безразмерный параметр, зависящий от свойств горючей системы.

Не повторяя все преобразования уравнения (4), приведенные в работе [1], представим конечный результат: решение уравнения (4) дает множество профилей температуры: $\theta = f(\gamma, \delta)$, где параметр δ связан с вспомогательной функцией σ трансцендентным уравнением: $\text{ch} \sigma / \sigma = (\delta/2)^{-0.5}$.

Функция $\sigma(\delta)$ имеет особую точку ($d\sigma/d\delta = \infty$) при $\delta = \delta_s$. При $\delta > \delta_s$ решений нет, а при $\delta < \delta_s$ существуют два решения, из которых устойчиво решение, полученное при меньшем значении σ . При $\delta = \delta_s$ существует единственное решение, для которого любая слабая положительная флуктуация δ приведет к взрыву, т.е. δ_s — критическое значение. В работе [1] были посчитаны значения δ_s при самовоспламенении горючего в бесконечном плоскопараллельном сосуде, цилиндре и сфере, которые, соответственно, равны: 0.88, 2 и 3.32.

В работе [2] при решении уравнения (2) сделали замену переменных:

$$\theta = (T - T_s)E/RT_s^2 \quad \text{и} \quad \sigma = r/\ell, \quad (6)$$

где

$$\ell = \left[\exp\left(\frac{E}{RT_s}\right) 2\lambda RT_s^2 / kQE \right]^{1/2}$$

есть характерный размер.

В новых переменных уравнение (2) принимает вид [2]:

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} = -2 \exp \theta \quad (7)$$

при граничных условиях

$$\theta|_{\xi=\xi_s} = 0 \quad \text{и} \quad \frac{\partial \theta}{\partial \xi}|_{\xi=0} = 0. \quad (8)$$

Сравнивая уравнения (4) и (7), найдем

$$\delta = 2r_s^2/\ell^2. \quad (9)$$

Откуда мы нашли критический размер сосуда:

$$\xi_s = r_s/\ell = (\delta_s/2)^{0.5}. \quad (10)$$

Не повторяя все преобразования уравнения (7), представленные в работе [2], отметим, что при изучении множества решений уравнения (7) обнаружили, что только одно из них касается огибающей кривой этих решений при $\theta = 0$. В этой особой точке происходит самовоспламенение, и критический размер сосуда $\xi_s = 0.66$. Критический размер сосуда разделяет области существования решений уравнения (7) при $\xi \leq \xi_s$ и их отсутствия при $\xi > \xi_s$.

В цилиндрическом сосуде уравнение (2) имеет вид

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial \theta}{\partial \xi} = -2 \exp \theta. \quad (11)$$

Сделаем замену переменных [1, 2, 6]:

$$v = \theta + 2 \ln \xi / \xi_s \quad \text{и} \quad \eta = \xi_s \ln \xi / \xi_s. \quad (12)$$

В новых переменных уравнение (11) и граничные условия (8) примут вид

$$\frac{\partial^2 v}{\partial \eta^2} + 2 \exp v = 0, \quad (13)$$

$$v|_{\eta=0} = 0, \quad -\frac{\partial v}{\partial \eta}|_{\eta=0} = 2/\xi_s. \quad (14)$$

Было вычислено, что при $\xi > 1$ отсутствуют решения уравнения (13), а при $\xi < 1$ существуют два решения с разной температурой в центре сосуда, но из них устойчиво с меньшей температурой, т.е. критический размер $\xi_s = 1$.

В сферическом сосуде невозможно получить решения уравнения (2), но интегральные кривые

решений, имеющие особые точки (седло и фокус), были найдены и исследованы. Обнаружено бесконечное множество огибающих кривых решений, анализируя которые, был вычислен критический размер $\xi_s = 1.29$.

В работе [3] изучали самовоспламенение между двумя параллельными плоскостями одной температуры. Была введена переменная: $z = \frac{\partial \theta}{\partial \xi}$, при которой уравнение (7) приняло вид:

$$z \frac{\partial z}{\partial \theta} = -2 \exp \theta. \quad (15)$$

Полагая, что при $\xi = 0$, $\theta = 0$ и $\frac{\partial \theta}{\partial \xi} = 0$, из уравнения (15) получили распределение температуры внутри плоскопараллельного сосуда:

$$\theta = -2 \ln \operatorname{ch} \xi. \quad (16)$$

В цилиндрическом сосуда уравнение теплопроводности (2) имеет вид (11), которое с помощью замены переменных (12) принимает вид (13) с граничными условиями (14). Найдем распределение температуры в цилиндрическом сосуда, используя выражения (12) и (16):

$$\theta = -2 \ln(\xi/\xi_s \operatorname{ch} \xi). \quad (17)$$

В работах [1, 2] самовоспламенение изучалось разными способами и в разных безразмерных координатах, но если в работе [1] для всех симметричных сосудов не был высчитан критический размер сосуда ξ_s , то в работе [2] не был дан предвзрывной разогрев: $T_s - T_0$. Кроме того, в работах [1, 2] не представлены критические условия самовоспламенения в размерном виде, что также затрудняет понимание явления самовоспламенения. Поэтому мы обобщили результаты, представленные в монографиях [1, 2], и выяснили, что они совпадают. Объединенные результаты работ [1, 2] и добавленные к ним профили температур в сосудах [3] представлены ниже.

Для плоскопараллельного сосуда:

$$T_s - T_0 = 1.2 RT_0^2/E, \quad \xi_s = 0.66, \\ Q = -2 \ln \operatorname{ch} \xi,$$

условие самовоспламенения имеет вид

$$0.88 \lambda RT_0^2/Er^2 = Qk \exp(-E/RT_s). \quad (18)$$

Для цилиндрического сосуда:

$$T_s - T_0 = 1.37 RT_0^2/E, \quad \xi_s = 1, \\ Q = -2 \ln(\xi/\xi_s \operatorname{ch} \xi),$$

условие самовоспламенения имеет вид

$$2 \lambda RT_0^2/Er^2 = Qk \exp(-E/RT_s). \quad (19)$$

Для сферического сосуда:

$$T_s - T_0 = 1.6 RT_0^2/E, \quad \xi_s = 1.29,$$

условие самовоспламенения имеет вид

$$3.32 \lambda RT_0^2/Er^2 = Qk \exp(-E/RT_s). \quad (20)$$

В уравнениях (18)–(20) под r принимается половина ширины плоскопараллельного сосуда, радиус цилиндра и сферы соответственно.

Критические условия самовоспламенения (18)–(20) для разных симметричных сосудов включают все параметры горючей системы (размер и геометрию сосуда, температуру внутренней поверхности сосуда, температуру самовоспламенения и свойства химической реакции), но отличаются цифровым множителем, что указывает на отсутствие влияния формы сосуда на физико-химические процессы, идущие в горючем в момент взрыва.

Во всех симметричных сосудах профили температуры имеют одну общую особенность — равенство нулю градиента температуры в центре со-

суда $\left(\frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right)_{\xi=0} = 0$, что является необходимым, но

не достаточным условием взрыва, для осуществления которого необходимо возникновение особой точки в температурных профилях или связанных с ними вспомогательных функциях. В работах [1, 2] приведены разные решения уравнений (2) и получены одинаковые результаты, но в одной геометрии были обнаружены разные особые точки, т.е. тип особой точки зависит от вида сосуда и методов решений уравнения (2). Таким образом, для развития теплового взрыва не важен тип особой точки, главное, чтобы она существовала.

Особая точка определяет число, используя которое, из множества решений уравнения теплопроводности (2) находят предельное решение — критическое условие самовоспламенения. Особые точки являются точками бифуркации и имеют ясный физический и математический смысл [4, 5]. В них заложена сама суть взрыва — они определяют условия самовоспламенения, каждое из которых, в координатах своих переменных, представляет собой многомерную поверхность, “границу”, отделяющую зону стабильного существования горючей системы от зоны “невозврата”, где она существовать не может. Дело в том, что горючая система, перейдя “границу” в зону “невозврата”, выгорает в результате взрыва — возврат назад невозможен. То есть, находясь в точке бифуркации, у горючей системы в результате флуктуации существует два пути: вернуться назад к стабильному состоянию или “погибнуть”.

Таким образом, в случае теплового взрыва особые точки являются не только точками “бифуркации”, но и точками “невозврата”, а критическое условие самовоспламенения — граница меж-

ду зонами “жизни” и “смерти” горючей системы. Отметим, что используемый в различных областях гуманитарных наук неопределенный термин “точка невозврата” в теории теплового взрыва имеет ясный и точный математический и физический смысл.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. 2-е изд. пер. и доп. М.: Наука, 1967.
2. Зельдович Я.Б., Баренблатт Г.И., Либрович В.Б., Махвиладзе Г.М. Математическая теория горения и взрыва. М.: Наука, 1980.
3. Гельфанд И.М. Задачи теории квазилинейных уравнений // УМН. 1959. Т. 154. № 4, параграф 15 (Баренблатт Г.И.). С. 787–790.
4. Фомичев А.В. Элементы теории бифуркации и динамических систем. М.: МФТИ, 2019. Ч. 1.
5. Арнольд В.И. Теория катастроф. М.: Наука, 1990.
6. Филиппов А.А., Берлин А.А. Математическая теория зажигания накаливаемой поверхностью // Доклады РАН. Физика, технические науки. 2022. Т. 503. С. 24–30.

CRITICAL CONDITIONS OF SELF-IGNITION AT BIFURCATION POINTS

A. A. Philippov^a and Academician of the RAS A. A. Berlin^a

^a*N.N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

The article summarizes the results of the main research in the field of self-ignition theory. For symmetrical vessels, the following are presented: critical conditions of spontaneous ignition in dimensional coordinates, temperature distribution in the vessel, pre-explosive heating of fuel and the critical size of the vessel at the time of explosion. It is noted that the self-ignition conditions for different vessels differ only by a digital multiplier, which indicates that the shape of the vessel does not affect the physico-chemical processes going on in the fuel at the time of the explosion. Each singular point, being a bifurcation point, determines a number that allows finding a single critical condition of self-ignition from the set of solutions to the heat equation. This condition, in the coordinates of its variables, represents a multidimensional surface separating the zone of stationary existence of a combustible system from the zone of “no return”, where a combustible system cannot exist.

Keywords: theory and conditions of self-ignition, points of bifurcation and non-return