

# КРИТИЧЕСКИЙ РЕЖИМ В МОДЕЛИ АВТОКАТАЛИТИЧЕСКОГО ГОРЕНИЯ

Долгова Е.С.

Самарский национальный исследовательский университет имени академика С. П. Королева,  
Самара, Россия  
dolgova.es@ssau.ru

*Аннотация.* Работа направлена на определение критических условий процесса горения газообразного топлива для автокаталитической реакции с учетом расхода реагента и окислителя. При анализе динамической модели данного процесса было обнаружено, что существуют два основных типа режимов горения — медленное выгорание топлива и режим теплового взрыва. Однако, помимо перечисленных, существует промежуточный режим, называемый критическим. В статье было найдено условие для реализации критического режима в виде асимптотического представления значения управляющего параметра системы. В качестве управляющего рассмотрен параметр, отражающий теплоотвод из реакционной фазы.

*Ключевые слова:* горение, критический режим, сингулярные возмущения, инвариантные многообразия, асимптотические методы.

## Введение

В различных областях, таких как биология, химия, механика и другие, возникает много прикладных задач, которые характеризуются совместным протеканием процессов с сильно отличающимися скоростями. Соответствующие модели описываются сингулярно возмущенными системами. Интерес представляет исследование критических явлений, при которых поведение траекторий системы кардинально изменяется. Например, в горении существует так называемый критический режим, разделяющий медленное горение и тепловой взрыв [1-5]. Его важной особенностью является то, что температура в реакторе достигает более высоких значений, чем при режиме медленного горения, но при этом реакция протекает со скоростью значительно меньшей, чем при режиме теплового взрыва.

## 1. Динамическая модель процесса горения

Рассмотрим модель горения газовой смеси, которая была предложена в [6,7] для случая стехиометрической смеси:

$$\begin{cases} \gamma \frac{d\theta}{d\tau} = \varphi(\eta, \xi) \exp\left(\frac{\theta}{1+\beta\theta}\right) - \alpha(\theta - \theta_r), \\ \frac{d\eta}{d\tau} = -\varphi(\eta, \xi) \exp\left(\frac{\theta}{1+\beta\theta}\right), \\ \frac{d\xi}{d\tau} = -\varphi(\eta, \xi) \exp\left(\frac{\theta}{1+\beta\theta}\right). \end{cases} \quad (1)$$

Здесь первое уравнение отражает изменение безразмерной температуры газа ( $\theta$ ), остальные характеризуют динамику безразмерных концентраций реагента ( $\eta$ ) и окислителя, соответственно ( $\xi$ ). Также в модели присутствуют следующие параметры:  $\theta_r$  - безразмерная температура реактора,  $\alpha$  - параметр, определяющий теплоотвод из реактора.  $\varphi(\eta, \xi)$  — кинетическая функция для безразмерных переменных, которая в случае автокаталитической реакции по реагенту и окислителю принимает вид:

$$\varphi(\eta, \xi) = \eta^{a_1} (1 + \eta_0 - \eta)^{a_2} \xi^{b_1} (1 + \xi_0 - \xi)^{b_2},$$

где  $a_1, a_2, b_1, b_2$  — константы, определяющие порядок реакции [8]. Порядки реакций могут быть любые, в том числе дробные. Основной особенностью этой модели является то, что она позволяет рассмотреть, как случай с автокатализом, так и без него. Более того, в случае с автокатализом катализатором может выступить как реагент, так и окислитель, или же реагент и окислитель одновременно.

Начальные условия для (1) имеют вид

$$\theta(0) = 0, \eta(0) = 1, \xi(0) = 1. \quad (2)$$

Первый интеграл системы (1)  $\xi = \eta$  позволяет свести рассмотрение (1)-(2) к задаче

$$\begin{cases} \gamma \frac{d\theta}{d\tau} = \psi(\eta) \exp\left(\frac{\theta}{1+\beta\theta}\right) - \alpha(\theta - \theta_r) = g(\theta, \eta), \\ \frac{d\eta}{d\tau} = -\psi(\eta) \exp\left(\frac{\theta}{1+\beta\theta}\right) = f(\theta, \eta), \end{cases} \quad (3)$$

где

$$\psi(\eta) = \eta^{a_1+b_1}(1 + \eta_0 - \eta)^{a_2}(\xi_0 - \eta + 1)^{b_2},$$

с начальными условиями:

$$\theta(0) = 0, \eta(0) = 1. \quad (4)$$

Здесь  $\gamma$  и  $\beta$  - малые параметры,  $\theta_r$  положительна, когда начальная температура газовой смеси ниже температуры окружающей среды, в ином случае — отрицательна.

Исследование поведения траекторий системы основано на применении метода инвариантных многообразий [5,9]. Такой подход дает возможность выявить важные особенности динамики решений дифференциальной системы, не решая ее напрямую, а основываясь лишь на исследовании так называемого вырожденного (алгебраического) уравнения. Далее, путем применения асимптотических разложений для инвариантных многообразий, можно определить условия возникновения различных критических явлений. В задачах горения такой подход успешно использовался в ряде работ, например, в работах [1-5, 10, 11].

В данной статье рассмотрен случай  $a_1 = b_1 = b_2 = 1$  и  $a_2 = 2$ , а именно функция  $\psi(\eta)$  в системе (3)-(4) для рассматриваемого случая имеет вид

$$\psi(\eta) = \eta^2(1 + \eta_0 - \eta)^2(\xi_0 - \eta + 1).$$

## 2. Критический режим горения

Уравнение

$$\gamma \frac{d\theta}{d\tau} = \psi(\eta) \exp\left(\frac{\theta}{1 + \beta\theta}\right) - \alpha(\theta - \theta_r),$$

определяет быструю подсистему системы (3)-(4). Положив в нем  $\gamma = 0$ , получим уравнение

$$\psi(\eta) \exp\left(\frac{\theta}{1 + \beta\theta}\right) - \alpha(\theta - \theta_r) = 0,$$

которое определяет так называемую медленную кривую [5] системы (3), (4). Данная кривая является приближением нулевого порядка ( $\gamma = 0$ ) той части траекторий исходной системы, на которых фазовая точка системы имеет скорость порядка  $O(1)$  при  $\gamma \rightarrow 0$ . Заметим, что вдали от медленной кривой температура  $\theta$  меняется со скоростью порядка  $O(\gamma^{-1})$  при  $\gamma \rightarrow 0$ . Это означает, что в  $\gamma$ -окрестности медленной кривой существует медленное инвариантное многообразие системы, которое определяется как инвариантное множество медленных движений [5,9]. Точки срыва разделяют медленную кривую на устойчивые (для них выполняется неравенство  $\partial g / \partial \theta < 0$ ) и неустойчивые ( $\partial g / \partial \theta > 0$ ) участки. Они удовлетворяют следующей системе:

$$\begin{cases} g(\theta, \eta) = 0, \\ \frac{\partial g}{\partial \theta} = 0. \end{cases}$$

Подставив  $g(\theta, \eta)$ , получим

$$\begin{cases} \gamma \frac{d\theta}{d\tau} = \psi(\eta) \exp\left(\frac{\theta}{1+\beta\theta}\right) - \alpha(\theta - \theta_r) = 0, \\ \psi(\eta) \exp\left(\frac{\theta}{1+\beta\theta}\right) (1 + \beta\theta)^{-2} - \alpha = 0. \end{cases} \quad (5)$$

Система (5) дает уравнение

$$\alpha[(\theta - \theta_r) - (1 + \beta\theta)^2] = 0.$$

Откуда следует уравнение

$$\beta^2\theta^2 + (2\beta - 1)\theta + 1 + \theta_r = 0,$$

которое, с учетом малости  $\beta$ , дает координату точки срыва  $\theta = \theta^*$ , где

$$\theta^* = 1 + \theta_r + 2(1 + \theta_r)\beta + O(\beta^2).$$

Устойчивые и неустойчивые части медленной кривой представляют собой нулевое приближение ( $\gamma = 0$ ) устойчивых и неустойчивых медленных инвариантных многообразий системы (3)-(4), соответственно. Участок медленной кривой, для которого  $\theta < \theta^*$ , является устойчивым и притягивает траектории системы, ее неустойчивый участок,  $\theta > \theta^*$ , их отталкивает.

Рисунки 1 и 2 демонстрируют графики медленной кривой системы и ее траекторию, а также графики зависимости  $\theta = \theta(\tau)$  и  $\eta = \eta(\tau)$  для двух основных режимах.

На рисунке 1 (а) изображены медленная кривая и траектории системы (3)-(4) в случае режима медленного выгорания. Параметр теплоотвода в этом случае принимает достаточно большое значение. Траектория, начавшаяся в точке ( $\eta = 1; \theta = 0$ ), притягивается к устойчивой части медленной кривой и идет в ее  $\gamma$ -окрестности до ( $\eta = 0; \theta = \theta_r$ ), причём безразмерная температура не будет превышать значения  $\theta^*$ . На рисунке 1 (б) представлены графики зависимости безразмерной температуры  $\theta$  и безразмерной концентрации топлива  $\eta$  от  $\tau$ . Эти графики демонстрируют изменения  $\theta$ , не сопровождающиеся резким ростом. Это медленный безопасный процесс горения, при котором и температура, и концентрация меняются со скоростями одного порядка. Подчеркнем, что отличительной особенностью этого режима является то, что температура не может принимать относительно высоких значений.

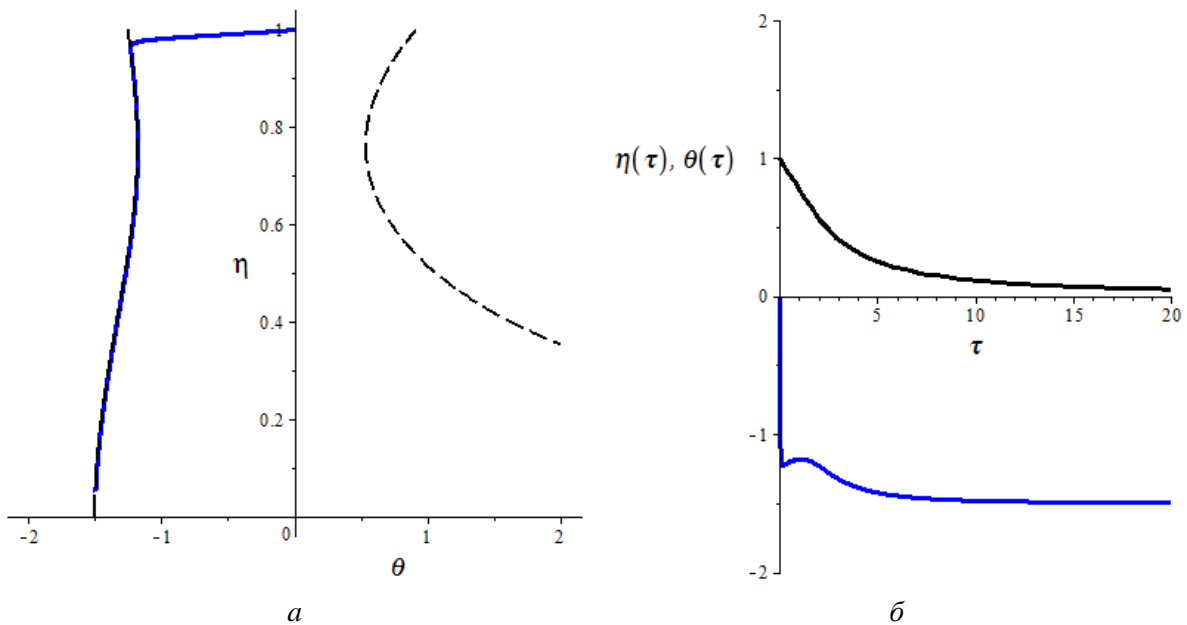


Рис. 1. а - Траектория (сплошная линия) и медленная кривая (пунктирная линия) системы (3)-(4), б – графики зависимости  $\theta = \theta(\tau)$  (синяя линия) и  $\eta = \eta(\tau)$  (черная линия) в случае режима медленного выгорания:  $\alpha = 0,7; \gamma = 0,01; \beta = 0,1; \eta_0 = 0,9; \xi_0 = 0,9; \theta_r = -1,5$

В случае, представленном на рисунке 2 (а), параметр теплоотвода принимает сравнительно небольшое значение, а траектория не попадает в область влияния устойчивой части медленной кривой, а находится в области влияния ее неустойчивого участка. Оттолкнувшись от него, траектория системы стремится вправо. На рисунке 2 (б) видно, что температура топлива растет очень быстро, а значения концентрации реагента почти неизменны, что характеризует тепловой взрыв.

Кроме перечисленных возможен третий вариант, в котором медленная кривая имеет точку самопересечения, а траектория системы движется сначала вдоль устойчивого участка медленной кривой, затем, пройдя точку самопересечения (точку срыва), продолжает свое движение вдоль ее неустойчивого участка. Последний сценарий отвечает критическому режиму [4-6,9-11]. В следующем разделе найдено условие протекания данного режима.

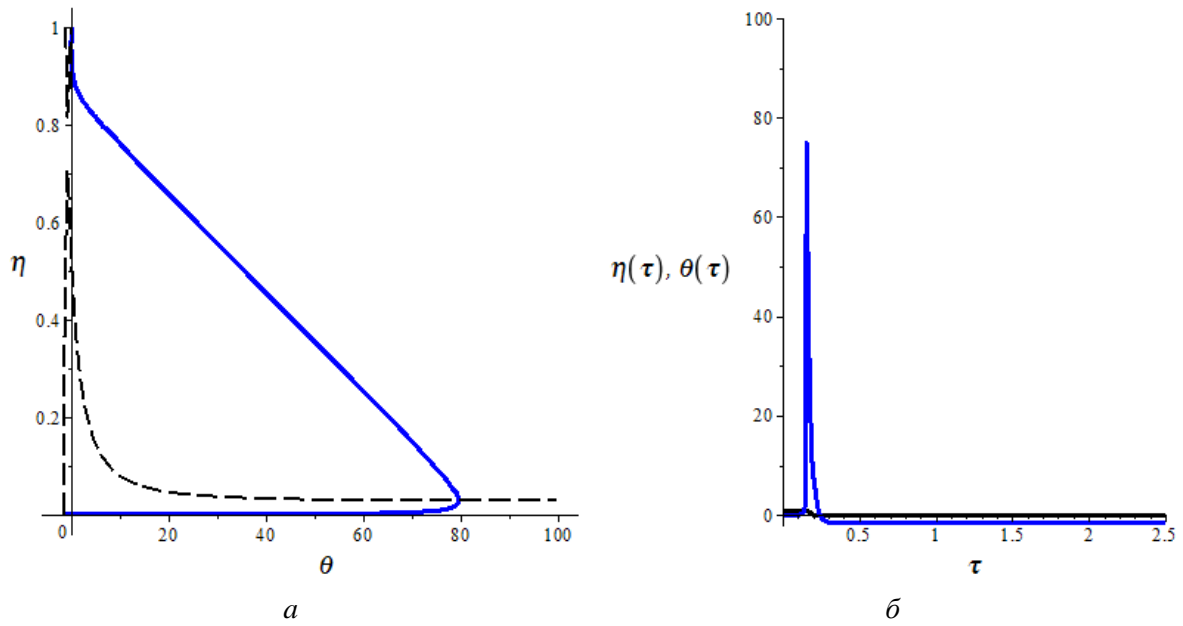


Рис. 2. а - Траектория (сплошная линия) и медленная кривая (пунктирная линия) системы (3)-(4), б - графики зависимости  $\theta = \theta(\tau)$  (синяя линия) и  $\eta = \eta(\tau)$  (черная линия) в случае режима теплового взрыва:  $\alpha = 0,5$ ;  $\gamma = 0,01$ ;  $\beta = 0,1$ ;  $\eta_0 = 0,9$ ;  $\xi_0 = 0,9$ ;  $\theta_r = -1,5$

### 3. Условие реализации критического режима горения

Критический режим моделируется за счет выбора значения управляющего параметра, в качестве которого рассмотрен параметр  $\alpha$ , характеризующим теплоотвод из реакционной фазы. Критическое значение параметра  $\alpha$  определяется так, чтобы обеспечить склеивание устойчивого и неустойчивого инвариантных многообразий в точке самопересечения медленной кривой, которая одновременно является точкой срыва с координатой  $\theta = \theta^*$ . Следуя подходу, изложенному в работах [4-6,9-11], безразмерную концентрацию топлива и критическое значение параметра, характеризующего теплоотвод, будем искать в виде:

$$\eta(\theta, \gamma) = h_0(\theta) + \gamma h_1(\theta) + O(\gamma^2), \quad (6)$$

$$\alpha^*(\gamma) = \alpha_0 + \gamma \alpha_1 + O(\gamma^2). \quad (7)$$

Подставляя разложения (6)-(7) в уравнение инвариантности [9]

$$\eta \left( h'_0(\theta) + \gamma h'_1(\theta) + O(\gamma^2) \right) g(\theta, \eta) = \gamma f(\theta, \eta) \quad (8)$$

и приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях малого параметра, найдем коэффициенты разложения в (6). Коэффициенты разложения (7) будем искать так, чтобы функции  $h_0, h_1$  и т.д. из (6) были непрерывны в точке срыва. В результате реализации этого алгоритма получим:

$$\alpha_0 = 10^{-5} (4\xi_0 + 3\eta_0 + 7 - K)^2 (-4\xi_0 + 7\eta_0 + 3 + K)^2 (6\xi_0 - 3\eta_0 + 3 + K) e^{1+\theta_r} \times \\ \times \left( 1 - (\theta_r + 1)^2 \beta + O(\beta^2) \right), \quad (9)$$

где  $K = \sqrt{16\xi_0^2 + 9\eta_0^2 - 16\xi_0\eta_0 + 16\xi_0 + 2\eta_0 + 9}$ , и

$$\alpha_1 = -e^{1+\theta_r} \left\{ \alpha_0 (4\xi_0 + 3\eta_0 + 7 - K) (-4\xi_0 + 7\eta_0 + 3 + K) [8(6\xi_0 - 3\eta_0 + 3 + K)^2 + \right. \\ \left. + 3(4\xi_0 + 3\eta_0 + 7 - K) (-4\xi_0 + 7\eta_0 + 3 + K)] \right\}^{\frac{1}{2}} [2 \cdot 10^3 (6\xi_0 - 3\eta_0 + 3 + K)]^{-\frac{1}{2}} \times \\ \times \left( 1 + \left[ 3 - \frac{(\theta_r - 1)^2}{2} \right] \beta + O(\beta^2) \right). \quad (10)$$

На рисунке 3 представлены графики для критического режима. Можно заметить, что при критическом режиме безразмерная температура  $\theta$  претерпевает значительный, по сравнению с режимом медленного выгорания, рост, но при этом  $\theta$  достигает своего наибольшего значения со

скоростью значительно меньшей, чем во время теплового взрыва. Этот факт имеет важное прикладное значение.

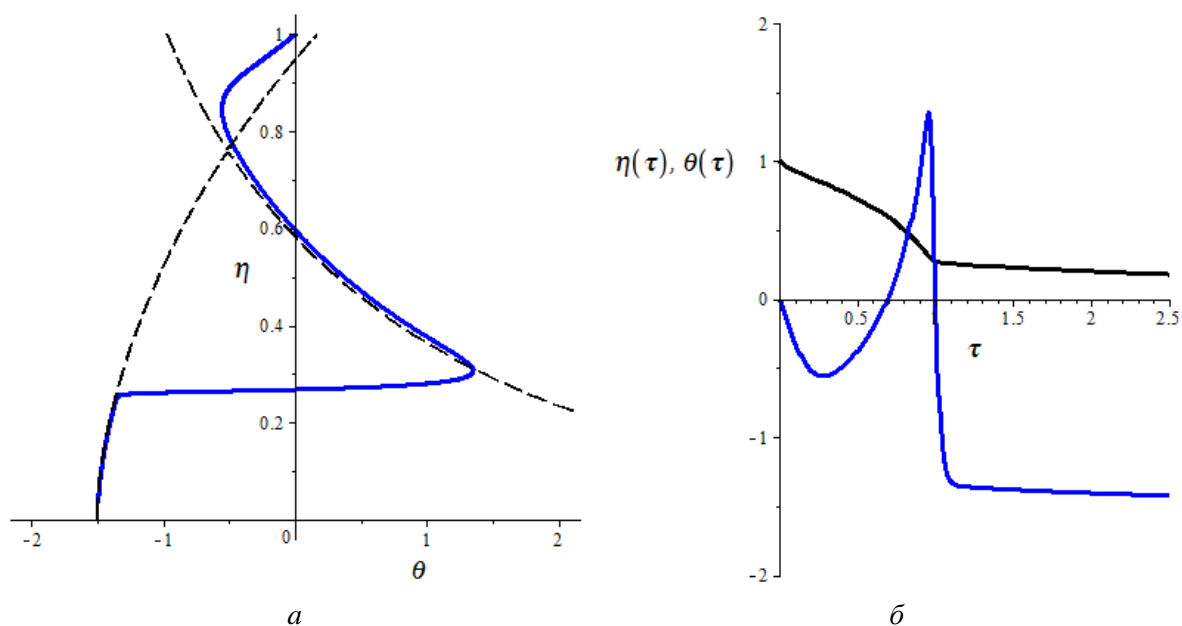


Рис. 3. а - Траектория (сплошная линия) и медленная кривая (пунктирная линия) системы (3)-(4), б - графики зависимости  $\theta = \theta(\tau)$  (синяя линия) и  $\eta = \eta(\tau)$  (черная линия) в случае критического режима:  $\alpha = 0,50796334626$ ;  $\gamma = 0,01$ ;  $\beta = 0,01$ ;  $\eta_0 = 0,9$ ;  $\xi_0 = 0,9$ ;  $\theta_r = -1,5$

#### 4. Заключение

В работе рассмотрена сравнительно новая модель процесса горения газообразного топлива для автокаталитической реакции с учетом расхода реагента и окислителя. Найдено условие реализации критического режима в виде асимптотического представления значения управляющего параметра системы, который характеризует теплоотвод из реакционной фазы. Такой режим особенно интересен тем, что значение температуры газа может быть сравнительно большим, но при этом сам процесс горения останется безопасным и не приведет к взрыву.

#### Литература

1. Gorelov G.N., Sobolev V.A. Mathematical modeling of critical phenomena in thermal explosion theory // Combustion and Flame. - 1991. - Vol. 87. - P. 203-210.
2. Gorelov G. N., Sobolev V. A. Duck-trajectories in a thermal explosion problem // Applied Mathematics Letters. - 1992. - Vol. 5. - P. 3-6.
3. Соболев В. А., Щепакина Е. А. Самовоспламенение запыленных сред // Физ. горения и взрыва. 1993. N 3. - С. 133-136.
4. Соболев В. А., Щепакина Е. А. Траектории-утки в одной задаче теории горения // Дифференциальные уравнения. 1996. Т. 32, N 9. - С. 1175-1184.
5. Соболев В. А. Редукция моделей и критические явления в макрокинетике / В. А. Соболев, Е. А. Щепакина. - М.: ФИЗМАЛИТ, 2010. - 320 с.
6. Shchepakina E. Unstable invariant manifolds in a control problem of the combustion process of a gas mixture // 2022 16th International Conference on Stability and Oscillations of Nonlinear Control Systems (Pyatnitskiy's Conference). - Moscow, Russian Federation: IEEE, 2022. - P. 1-4.
7. Sobolev V., Shchepakina E. Critical conditions of a thermal explosion in the case of autocatalytic combustion with account reagent and oxidant consumption // 2023 16th International Conference Management of large-scale system development (MLSD). - Moscow, Russian Federation: IEEE, 2023. - P. 1-4.
8. Эмануэль Н.М. Курс химической кинетики / Н. М. Эмануэль, Д. Г. Кнорре. - М.: Высшая школа, 1984. - 463 с.
9. Shchepakina E., Sobolev V., Mortell V. Singular Perturbations. Introduction to System order Reduction Methods with Applications // Springer Lecture Notes in Mathematics. - 2014. - Vol. 2114. - P. 212.
10. Shchepakina E. Black swans and canards in self-ignition problem // Nonlinear Analysis: Real World Applications. - 2003. - Vol. 4. - P. 45-50.

11. *Shchepakina E., Sobolev V.* Black swans and canards in laser and combustion models. // Singular perturbations and hysteresis (Eds. M. P. Mortell, R. E. O'Malley, A. Pokrovskii, V. A. Sobolev). - Philadelphia: SIAM, 2005. - P. 209-256.