



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 25 за 1974 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Посвянский В.С., Шноль Э.Э.

**О простейшей модели
холодного пламени**

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Посвянский В.С., Шноль Э.Э. О простейшей модели холодного пламени // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 1974. № 25. 41 с.
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=1974-25>



ОРДЕНА ЛЕНИНА
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
АКАДЕМИИ НАУК СССР
ОРДЕНА ЛЕНИНА
ИНСТИТУТ ХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
АКАДЕМИИ НАУК СССР

В.С. Посвянский , Э.Э. Шноль

**О ПРОСТЕЙШЕЙ МОДЕЛИ
ХОЛОДНОГО ПЛАМЕНИ**

Препринт № 25__ за 1974г

Москва

Препринт
П-61

ОРДЕНА ЛЕНИНА ИНСТИТУТ ХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
АКАДЕМИИ НАУК СССР

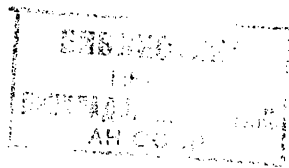
ОРДЕНА ЛЕНИНА ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
АКАДЕМИИ НАУК СССР

УДК 536.46

В.С.Посвянский, Э.Э.Шноль

О ПРОСТЕЙШЕЙ МОДЕЛИ ХОЛОДНОГО ПЛАМЕНИ

28/11



Москва, 1973 г.

Проведено численное исследование двухкомпонентной модели холодного пламени. Рассмотрены два варианта задачи:

- 1) стационарная бегущая волна (задача на бесконечной прямой)
- 2) "Химический реактор" с заданной скоростью течения (задача на конечном интервале).

Подробно обсуждается вопрос о неединственности решения как первой, так и второй задачи.

СОДЕРЖАНИЕ

	Стр.
Предисловия	4
§ I. Введение	
п.1.	6
п.2. Математическая модель	7
п.3. Результаты	8
§ 2. <u>Нахождение "бегущей волны" как задача о прохождении из одной особой точки в другую</u>	
п.4. Предварительные замечания	9
п.5. О структуре особых точек при $\beta > 0$	10
п.6. Подсчёт числа параметров	11
§ 3. <u>Редукция к задаче на конечном интервале</u>	
п.7. О решении задачи I "пристрелкой"	13
п.8. Можно ли краевую задачу на всей прямой приближённо заменить задачей на конечном отрезке?	13
п.9. Предельный переход $L \rightarrow \infty$ и исчезновение "лишних" решений	15
§ 4. <u>Организация вычислений</u>	
п.10. Граничные условия при численном решении	17
п.11. Численное решение задачи на конечном интервале	17
п.12. Численное нахождение быстрых волн	18
п.13. Задача о "химическом реакторе"	19
§ 5. <u>Иллюстрации</u>	
п.14. Пояснения к рисункам	21
<u>Дополнение 1</u>	
О решениях, стремящихся к особой точке системы (5) при $\beta \rightarrow \pm \infty$	23
<u>Дополнение 2</u>	
Возможно ли распространение пламени по сгоревшему материалу?	27
<u>Дополнение 3</u>	
О продолжении по параметру	28

Предисловие для физиков.

В работе рассматривается **двухкомпонентная** модель холодного пламени, предложенная В.Г.Воронковым и Н.Н.Семёновым . ([I]).

Математическая сложность проблемы очевидна. Уже для стационарных бегущих волн нужно рассматривать систему двух дифференциальных уравнений 2 порядка с континуумом особых точек.

В этой работе проведено подробное численное исследование указанной математической модели. В частности, найдено второе (физически осмысленное) решение задачи.

Вопрос о возможности экспериментальной реализации этого (неустойчивого в обычном смысле) решения не обсуждается.

Предисловие для математиков.

В математических задачах естествознания, имеющих неединственные решения, наблюдается обычно бифуркация решений: некое тривиальное решение существует при всех значениях параметра, при прохождении критического значения параметра рождается (или исчезает) пара нетривиальных решений. ж)

(рис. I^a).

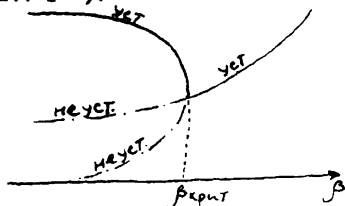


Рис. I^a

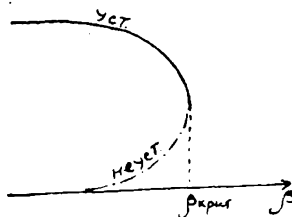


Рис. I^б

Задача о пламени интересна тем, что в ней реализуется более простая схема: при $\beta < \beta_{крит}$ есть 2 решения, при $\beta > \beta_{крит}$ — ни одного (см. рис. I^б). Она замечательна также необычной связью между исходной задачей на бесконечной прямой и приближенной задачей на конечном интервале: последняя имеет при каждом $\beta < \beta_{крит}$ бесконечно много решений.

В этой работе численно найдены обе ветви решений для неограниченной задачи и два "листа" решений для ограниченной задачи. Целесообразность доказательства соответствующих теорем сейчас не ясна и во всяком случае теоремы оставлены на будущее.

ж) Они могут различаться несущественно. Тогда говорят о рождении второго решения.

§ I. Введение.

п. I Мы будем рассматривать одномерную задачу о распространении фронта пламени. Читатель может представлять себе длинную тонкую трубу, заполненную некоторой смесью газов. При определённых условиях эту смесь удаётся "поджечь" с одного конца и возникает движущийся фронт, на котором происходят сложные химические реакции. Если тепловыми эффектами реакций можно пренебречь, говорят о "холодном пламени". (см., например, [5])

Два основных характерных свойства этого явления:

А. Установившаяся скорость распространения фронта и его структура (при фиксированных исходных условиях) не зависят от "способа поджигания".

Б. При некоторых значениях параметров (давления, температуры, диаметра трубы и т.д.) стационарный режим распространения пламени возможен. При других - невозможен.

В математической модели свойство Б должно проявиться так: решение уравнений исчезает при переходе через критическое значение какого-нибудь параметра. Естественно ожидать, что это исчезновение происходит посредством слияния с другой ветвью решений. Если это так, то в докритической области при каждом значении параметра должно быть два решения!

Интересующие нас явления слияния ветвей и исчезновения решений не могут быть смоделированы на одном уравнении типа

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + f(n)$$

Цель предлагаемой работы - детальное исследование этих явлений на простейшей модели холодного пламени с двумя компонентами. Используемые нами "химические слагаемые" $f(n)$ отвечают, хотя и сильно упрощённой, но правдоподобной схеме химических превращений

([1] , [2]).

Ниже мы подробно обсудим результаты соответствующих численных экспериментов.

п.2. Математическая модель.

Предполагается, что есть два исходных продукта, причём концентрация первого (А) очень мала. Изменением концентрации второго (В) пренебрегается. Предполагается, что возникают два радикала γ и некоторое промежуточное вещество β . Концентрации быстро реагирующих радикалов (γ , β) исключаются с помощью условия химического равновесия. Оставшиеся два уравнения для n_A и n_β после соответствующего обезразмеривания имеют вид ($n_A \rightarrow f$, $n_\beta \rightarrow \varphi$) (см. [1], [3]).

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\gamma^2 f}{\gamma^2 \alpha^2} - f \cdot \varphi^2 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \gamma \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} - \beta \varphi + f \varphi^2$$

Величину γ (отношение коэффициентов диффузии) мы будем считать фиксированной. Величину β (задающую скорость гибели компоненты β) - переменным параметром.

Решение типа бегущей волны $f(x, t) = f(\xi)$, $\varphi(x, t) = \varphi(\xi)$,

$\xi = x + vt$ задаётся, как и всегда, системой обыкновенных уравнений

$$\frac{d^2 f}{d \xi^2} - V \frac{df}{d \xi} - f \varphi^2 = 0 \quad (2)$$

$$\gamma \frac{d^2 \varphi}{d \xi^2} - V \frac{d\varphi}{d \xi} - \beta \varphi + f \varphi^2 = 0$$

Граничные условия (для $V > 0$ т. е. волны бегущей налево):

$$\text{при } \xi \rightarrow -\infty \quad f \rightarrow 1, \quad \varphi \rightarrow 0 \quad (3a)$$

($f = 1$ в исходной смеси).

$$\text{при } \xi \rightarrow +\infty \quad f \rightarrow \text{const} = a, \quad \varphi \rightarrow 0 \quad (3b)$$

Задача I. Найти решение системы (2), удовлетворяющее граничным условиям (3) при $a \neq 1$.

Скорость V и предельное значение $f_{\infty} = a$ заранее неизвестны: мы имеем здесь своеобразную задачу на собственные значения. Всякое решение задачи I определено с точностью до сдвига $\xi \rightarrow \xi - \xi_0$, $f(\xi) \rightarrow f(\xi - \xi_0)$, $\varphi(\xi) \rightarrow \varphi(\xi - \xi_0)$. Говоря ниже о двух решениях, мы будем иметь в виду два существенно различных решения.

п.3. Результаты.

Как и ожидалось, при $0 < \beta < \beta^*$ существует два решения задачи I, одно устойчивое*) ($V = V_1$), второе - неустойчивое ($V = V_2 < V_1$).

Первое решение отвечает почти полному "выгоранию" исходного продукта ($a \ll 1$), второе - лишь частичному выгоранию. Подчеркнём, что при $\beta > 0$ полное выгорание невозможно. ($f_{\infty} = a > 0$).

Решение задачи I численно находится на конечном интервале $(-L, L)$. Оказывается, краевая задача на конечном интервале $(-L, L)$ имеет континуум решений! Соответствующие значения V заполняют отрезок $[V_{\min}, V_{\max}]$. При $L \rightarrow \infty$

$$V_{\max} \rightarrow V_1, \quad V_{\min} \rightarrow V_2$$

Решения, соответствующие промежуточным V , с ростом L всё более сдвигаются и превращаются в константное решение $f = f_{\infty}$, $\varphi \equiv 0$ (подробнее см. п.9).

*) Речь идёт о временной устойчивости (в системе (I)) в смысле, который должен быть точно определён.

§ 2.

Нахождение "бегущей волны" как задача о прохождении
из одной особой точки в другую.

п.4. Предварительные замечания.

При постановке нашей задачи (см. п.2) предполагалось, что f и $\varphi \rightarrow \text{const.}$ при $|\xi| \rightarrow \infty$.

Нетрудно показать, что:

$$\begin{aligned} f(\xi) & \quad - \text{монотонно убывает при всех } \xi, \\ \varphi(\xi) & \quad - \text{монотонна при достаточно больших } |\xi|. \end{aligned}$$

Поэтому из граничных условий (3) вытекает: $f' \rightarrow 0$, $\varphi' \rightarrow 0$ при $|\xi| \rightarrow \infty$ (см. дополнение I).

В силу монотонности f и требования $f > 0$ асимптотическое условие $f \rightarrow \text{const.}$ равносильно:

$$f' \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad \xi \rightarrow +\infty \quad (4)$$

Условие (4) не содержит неизвестного значения a и поэтому удобнее.*)

Введя $f' = g$ и $\varphi' = \psi$, перепишем (2) в виде системы 4 уравнений I-го порядка:

$$\begin{cases} f' = g \\ g' = \sqrt{g} + f\varphi^2 \\ \varphi' = \psi \\ \psi\varphi' = \sqrt{\psi} + g\varphi - f\varphi^2 \end{cases} \quad (5)$$

или $\frac{d\bar{w}}{d\xi} = T(\bar{w})$, где $\bar{w} = \{f, g, \varphi, \psi\}$

Для интересующих нас решений системы (5) должно быть:

$$\begin{aligned} \text{при } \xi \rightarrow -\infty \quad & f \rightarrow 1; \quad g, \varphi, \psi \rightarrow 0 \\ \text{при } \xi \rightarrow +\infty \quad & f \rightarrow a; \quad g, \varphi, \psi \rightarrow 0 \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь a - неизвестная постоянная.

*) Условие (4), в отличие от (3) (где $a \neq 1$) допускает тривиальное решение системы (2): $f \equiv 1$, $\varphi \equiv 0$.

Отличительной особенностью системы (5) является наличие континуума неподвижных точек: в 4-мерном фазовом пространстве системы каждая точка с координатами $(a, 0, 0, 0)$ есть неподвижная точка. Таким образом, требуется найти траекторию, соединяющую фиксированную точку $(1, 0, 0, 0)$ на прямой неподвижных точек с какой-то другой неподвижной точкой.

п.5. 0-структура особых точек ($\beta > 0$)

Линеаризуя (5) в окрестности особой точки $(a, 0, 0, 0)$, получим

$$\frac{d}{dz} \begin{pmatrix} f \\ g \\ \varphi \\ \psi \end{pmatrix} = C \begin{pmatrix} f \\ g \\ \varphi \\ \psi \end{pmatrix} \quad (7)$$

, где

$$C = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\beta} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & \frac{\beta}{4} & \frac{\sqrt{\beta}}{4} \end{pmatrix}$$

Собственные значения C есть:

$$\lambda_1 = 0, \quad \lambda_2 = \sqrt{\beta} > 0, \quad \lambda_3 > 0, \quad \lambda_4 < 0.$$

Таким образом, в линейном приближении картина такова: двухпараметрическое семейство решений системы (7) стремится к неподвижной точке $M(a, 0, 0, 0)$ при $z \rightarrow -\infty$ и однопараметрическое семейство решений стремится к M при $z \rightarrow +\infty$.

Для случая, когда все $\operatorname{Re} \lambda(C) \neq 0$, соответствующая общая теорема теории дифференциальных уравнений утверждает, что полная нелинейная система имеет такое же число "входящих" и "выходящих" решений, как и линейная система ([4]).

Если одно из собственных значений равно нулю, то нелинейные члены могут увеличить число входящих и выходящих траекторий. Нелегко показать, что для нашего конкретного случая этого не проис-

ходит (см. дополнение 1).

Таким образом, система (5) при фиксированных β , ν имеет:

1) для каждой неподвижной точки M ($a, 0, 0, 0$) однопараметрическое семейство S_+ решений, стремящихся к M при $\xi \rightarrow -\infty$

2) для каждой неподвижной точки M ($a, 0, 0, 0$) двухпараметрическое семейство (S_-), стремящихся к M при $\xi \rightarrow -\infty$

Не всем этим решениям отвечают различные кривые в фазовом пространстве. Сдвиг $\xi \rightarrow \xi - \xi_0$ переводит одно решение системы (5) в другое, но не меняет траекторию в фазовом пространстве. Таким образом, из каждой точки M выходит однопараметрический пучок (S_-) траекторий системы (5), заполняющих некоторую поверхность и входит единственная траектория (S_+).

п.6. Подсчёт числа параметров.

Следующие, не претендующие на строгость, соображения подсказывают конечность числа возможных решений задачи I. Пусть сначала ν , β - фиксированы. Рассмотрим решение системы (5), определённое при $-\infty < \xi \leq 0$ и стремящееся к точке M_1 ($1, 0, 0, 0$) при $\xi \rightarrow -\infty$. Значения таких решений при $\xi = 0$ заполняют двумерное многообразие в 4-мерном пространстве R_4 векторов $\bar{w}$ (ξ, g, φ, ψ). Аналогично, значения при $\xi = 0$ решений, стремящихся к точке M_a ($a, 0, 0, 0$) образуют одномерное многообразие. Нет никаких оснований ожидать, что двумерное S_- и одномерное S_+ пересекутся. Тем самым, задача I при предписанных значениях скорости ν и $\xi_\infty = a$, вообще говоря, неразрешима.*)

*) Напомним, что полное "выгорание" ($\xi_\infty = 0$) вообще невозможно при $\beta > 0$. (см. дополнение 1).

Пусть теперь a - произвольно. Совокупность решений, стремящихся к какой-нибудь точке M_a , образует при $\xi = 0$ двумерное многообразие S_+ . По сумме размерностей ($\dim S_+ + \dim S'_- = 4$) кажется, что можно ожидать пересечения S_+ и S'_- . Заметим, однако, что многообразия S целиком состоят из траекторий системы (5) в R_4 . Два таких двумерных многообразия, как правило, не пересекаются. ^{жж} (а если пересекаются, то по целой траектории). Если менять V , то можно надеяться, что при некоторых (изолированных) значениях V_k такое пересечение произойдет.

При таких избранных значениях V_k существуют решения системы (5) с асимптотикой (6). Каждому такому решению отвечает "бегущая волна" в системе (1), имеющая скорость V_k .

^{жж} Эти многообразия не находятся в "общем положении". Если S_+ есть $\{F_1(\bar{w}) = 0, F_2(\bar{w}) = 0\}$, а S'_- есть $\{F_3(w) = 0, F_4(w) = 0\}$, то якобиан $\frac{\partial F}{\partial w} \equiv 0$.

§ 3. Редукция к задаче на конечном интервале.

п.7. О решении задачи I "пристрелкой".

Задачу I можно было бы попытаться решить, следуя рассуждениям

§ 2. Введя в качестве независимой переменной ξ , получим неавтономную систему 3 уравнений и следующую задачу:

найти решение $\omega(\xi) = \{g(\xi), \varphi(\xi), \psi(\xi)\}$, удовлетворяющее условиям $\omega(1) = 0$ и $\omega(a) = 0$; a, V - неизвестны.

Зафиксировав V и a , можно найти на участке $a < \xi \leq b$ единственное решение S_+ , для которого при $\xi \rightarrow a+0, g, \varphi, \psi \rightarrow 0$. Затем следует найти на участке $b \leq \xi < 1$ однопараметрическое семейство решений S_- , для которых при $\xi \rightarrow 1-0, g, \varphi, \psi \rightarrow 0$. Потом, варьируя два параметра V и a , нужно добиться, чтобы точка $\omega(b)$, отвечающая S_+ , попала на кривую $\omega(\xi)$, отвечающую S_- . На каждом шаге такого двухпараметрического поиска нужно находить много траекторий, чтобы достаточно точно задать S_- . Процедура в целом получается весьма сложной.*) Имея в виду расчёт моделей с несколькими компонентами и учёт температуры (для "горячих" пламен),***) мы отказались от этого пути и решали краевую задачу прямо, не сводя её к задаче Коши.

п.8. Можно ли краевую задачу на всей прямой приближённо заменить задачей на конечном отрезке?

Вопрос кажется чисто риторическим, так как численно краевая

*) Напомним, что нужно ещё достаточно аккуратно выходить из особых точек. Кроме того, в процессе "пристрелки" для отдельных

частных решений можно получить: $\varphi, \psi \rightarrow -\infty$

**) См., например, [6]

задача всегда решается на конечном отрезке.

Однако, эта замена в нашем случае совсем не безобидна. Именно, если на отрезке поставить простейшие граничные условия, то полученная задача радикально отличается от исходной: она имеет (при каждом β) континуум решений вместо двух!

В самом деле. Рассмотрим систему

$$\begin{aligned} \xi'' - \sqrt{\xi'} - \xi \varphi^2 &= 0 \\ \gamma \varphi'' - \sqrt{\varphi'} + \xi \varphi^2 - \beta \varphi &= 0 \end{aligned} \quad (8)$$

на отрезке $-L \leq \xi \leq +L$

Пусть (см. (3), (4))

$$\xi(-L) = 1, \quad \varphi(-L) = 0 \quad (9a)$$

$$\xi'(L) = 0, \quad \varphi(L) = 0 \quad (9b)$$

Четыре условия (9) для системы (8) - "нормальное" число граничных условий. Нельзя гарантировать, что при любом $\sqrt{\quad}$ будет существовать решение нелинейной краевой задачи (8-9). Но если решение есть при некотором $\sqrt{\quad}$, то "нормально" оно есть и при близких $\sqrt{\quad}$ *)

В нашем случае краевая задача (8,9) имеет решение для значений β и $\sqrt{\quad}$, заполняющих область на плоскости $(\beta, \sqrt{\quad})$.

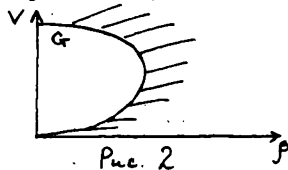


Рис. 2

*) Чтобы это было не так, нужно наличие ненулевого решения однородной линеаризованной задачи.

Причина того, что на (любом) конечном отрезке $(-L, L)$ решений больше, чем на всей прямой, грубо говоря, в следующем. Асимптотическое граничное условие $\dot{z} \rightarrow 1$ при $\xi \rightarrow -\infty$ влечёт за собой: $\dot{z}' \rightarrow 0$ при $\xi \rightarrow -\infty$ *). Положив $\dot{z}(-L) = 1$, мы ничего не требуем от $\dot{z}'(-L)$: условие $\dot{z}(-L) = 1$ в некотором смысле "слабее" первоначального.

п.9. Предельный переход $L \rightarrow +\infty$ и исчезновение "лишних" решений.

Пусть при некотором β существует континуум решений задачи на отрезке $(-L, L)$. Пусть $V_{\min}(L) < V < V_{\max}(L)$ - отрезок допустимых значений V . При $L \rightarrow +\infty$

$$V_{\max}(L) \rightarrow V_1, \quad V_{\min}(L) \rightarrow V_2$$

Зафиксируем некоторое V внутри интервала (V_1, V_2) . Тогда картина будет следующей. С ростом L графики $\dot{z}$ и φ , почти не меняясь по форме, будут отодвигаться всё более влево. При этом в каждой фиксированной точке ξ $\dot{z}(\xi) \rightarrow a = \dot{z}_\infty$, $\varphi(\xi) \rightarrow 0$: имеет место (разумеется неравномерная) сходимость к константному решению уравнений (8). (см. рис. 7).

Если же при каждом L взять наибольшее значение $V_{\max}(L)$, то соответствующие решения уже не будут "убегать" и при $L \rightarrow +\infty$ дадут решение на всей прямой. Аналогично, из решений со скоростью $V_{\min}(L)$ получается второе решение.

Коротко (хотя и не совсем точно): при $L \rightarrow +\infty$ из допустимых значений V останутся два крайних, все промежуточные отпадают.

*) То же верно и для 3 других граничных условий.

Следующие соображения делают несколько более понятным "выживание" крайних $V(V_{\min}(\beta), V_{\max}(\beta))$. Задача на всей прямой инвариантна относительно сдвига $\xi \rightarrow \xi - \xi_0$. Если для $V = V_4(\beta)$ она имеет решение, то соответствующая линеаризованная задача вырождена.

На конечном интервале $V_{\max}(\beta)$ и $V_{\min}(\beta)$ выделены также вырождением линеаризованной задачи: если при данном V линеаризованная задача невырождена, то можно продвинуться ещё немного по V . Именно поэтому решения для этих V "соответствуют" задаче на бесконечной прямой.

§ 4. Организация вычислений.

Организация вычислительного процесса будет подробно изложена в другом месте. Здесь мы коснёмся лишь нескольких узловых моментов.

п.10. Граничные условия при численном решении.

Для численного решения желательно использовать по возможности меньшее L . Поэтому в расчётах вместо граничных условий (9) использовались следующие граничные условия, учитывающие асимптотику поведения решения при $|\xi| \rightarrow \infty$:

$$\left. \begin{cases} \xi' = \sqrt{\xi - 1} \\ \varphi' = \mu_1 \varphi \end{cases} \right|_{\xi = -L} \quad \left. \begin{cases} \xi' = 0 \\ \varphi' = \mu_2 \varphi \end{cases} \right|_{\xi = L} \quad (10)$$

Здесь $\mu_1 > 0$, $\mu_2 < 0$ - корни уравнения $\gamma \mu^2 - \sqrt{\mu} - \beta = 0$. Использование граничных условий (10) вместо (9) существенно уменьшает вычислительную работу.*) Экономия тем значительнее, чем меньше β (т. е. чем медленнее гибнет промежуточное вещество).

п.11. Численное решение задачи на конечном интервале.

Как уже было сказано, при $\beta < \beta^*$ задача на конечном интервале (8), (10) имеет континуальное семейство решений. Скорость V при этом является параметром и может быть задана произвольно из интервала $V_{\min} < V < V_{\max}$. Решение непрерывно зависит от V . Найдя решение при одном V , можно, двигаясь небольшими шагами по V , найти всё семейство. На каждом шаге (при переходе от V к $V + \Delta V$) крайняя задача должным образом линеаризуется и решение находится итерациями. Трудности возникают лишь при приближении к концам интервала ($V_{\min}$, $V_{\max}$). Здесь зависимость от V становится более резкой (порядка $\sqrt{V - V_{\min}}$, $\sqrt{V_{\max} - V}$) и линеаризованная задача близка к вырождению.

*) Однако, условиям (10) удовлетворяет тривиальное решение $\xi \equiv 1$, $\varphi \equiv 0$.

Как показывает опыт, в середине интервала по V (точнее при $V^* < V < V_{\max}$) итерации обычно хорошо сходятся, даже если начальные профили f и φ далеки от точных. Значение V^* является граничным в следующем смысле. При $V < V^*$ решение задачи (8), (10) неустойчиво, если его рассматривать, как стационарное решение системы

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial^2 f}{\partial \xi^2} - V \frac{\partial f}{\partial \xi} - f \varphi^2$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \gamma \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \xi^2} - V \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} - \beta \varphi + f \varphi^2$$

п.12. Численное нахождение быстрых волн.

Как уже было отмечено (см. п.9) при достаточно больших L $V_{\max} \approx V_1$ - скорости быстрой (устойчивой) волны на бесконечной прямой.

Быстрые волны соответствуют обычной постановке физического эксперимента. Естественно для их нахождения численно смоделировать физический процесс установления. Выход на стационар должен происходить в правильно движущейся системе координат. Удачным оказывается следующий выбор скорости

$$V(t) = \frac{\int_{-L}^L f \varphi^2 d\xi}{1 - f(L)} \quad (11)$$

Итак, решаются уравнения

$$\begin{aligned} f_t' &= f'' - V(t) f' - f \varphi^2 \\ \varphi_t' &= \gamma \varphi'' - V(t) \varphi' - \beta \varphi + f \varphi^2 \end{aligned} \quad (12)$$

с граничными условиями (10), где $V(t)$ определяется по формуле (11). При $t \rightarrow \infty$ f , φ , V перестают зависеть от t - мы получаем некоторое стационарное решение задачи (1), (10) с таким-то значе-

нием скорости V . При этом наблюдается замечательная картина. Её можно приблизительно описать так. Если при $t=0$ мы "подожгли" недостаточно сильно, например $\int_L \varphi dx$ - мал, то в процессе установления мы получим $\xi \approx \cos \omega t$, $\varphi \approx 0$, $V \approx 0$. Если "поджечь" достаточно сильно (так чтобы $V(0)$ в формуле (II) было велико), то независимо от выбора профилей ξ и φ получится быстрая волна ($V \approx V_1$)*)

В процессе установления можно также получить любое V из интервала ($V^* < V < V_{\max}$), но для этого нужен специальный выбор начальных данных. Большая лёгкость получения решения с $V \approx V_1$ делает установление по формулам (II), (I2) самым удобным способом его нахождения.

Второе решение на всей прямой, отвечающее $V = V_2$, установлением не может быть найдено.

п.13. Задача о "химическом реакторе".

Задаче на конечном интервале можно попытаться придать самостоятельный физический смысл. Именно, при фиксированном L мы имеем проточный "химический реактор". Каждой скорости потока V из интервала ($V_{\min}$, $V_{\max}$) отвечает некоторый режим работы этого "реактора". Кавычки подчёркивают искусственный характер использованных нами граничных условий (I0). Эти граничные условия можно было бы заменить несколько более реалистическими***) Такая замена может изменить участок ($V_{\min}$, $V_{\max}$), но не меняет основного факта: задача имеет решения для некоторого интервала V и не имеет вне его. От-

*) Равенство, конечно, не является абсолютно точным.

**) Например, $\varphi' = V \varphi \Big|_{\xi=-L}$, $\varphi' = 0 \Big|_{\xi=L}$

сюда вытекает прямое указание: "ищи второе решение для $V_{min} < V < V_{max}$ ". Мы предприняли такие поиски и **рассчитали** второе решение задачи о "химическом реакторе" (т.е. второе решение задачи (8), (10) для ряда значений β и V).

По-видимому, вторые решения существуют для всех внутренних точек области G на рис.2. Чтобы изобразить всё многообразие решений задачи на конечном интервале, к рис.2 нужно было бы добавить ещё "второй лист". Нахождение решений на втором листе довольно трудно.

Не вдаваясь здесь в детали, отметим лишь, что при больших L (и промежуточных V) решения второго листа сосредоточены у правой границы интервала $(-L, L)$ (см. рис. 8), в то время как для первого листа ψ , φ сосредоточены у левой границы интервала $(-L, L)$.

§ 5. Иллюстрации.п.14 Пояснения к рисункам.

На рис.3 изображены профили $f(\xi)$ и $\varphi(\xi)$ для быстрой (устойчивой) волны. На этом рисунке $\beta = 0,02$, $\gamma = 1$, что приблизительно отвечает середине участка существования бегущих волн ($0 < \beta < 0,0461$). Стоит обратить внимание на то, что f_∞ очень мало: $f_\infty \approx 0,00006$. Бросается также в глаза, что наибольшая концентрация промежуточного вещества (φ) там, где исходного вещества f уже мало. Заметим, что сумма $f + \varphi$ на большом протяжении постоянна.*)

Картина рис.3 является типичной: примерно так же выглядят профили f и φ для всех β . С увеличением β волна "слабеет": скорость падает, максимум φ уменьшается (см. рис. 4,5), при этом остаток исходного вещества f_∞ возрастает.

При критическом значении $\beta = \beta^*$ f_∞ уже заметно отличается от 0 (при $\gamma = 1$ $\beta^* = 0,04$). Здесь сливаются 2 ветви - быстрые и медленные волны. Перейдя на нижнюю ветвь (рис.4), мы получим при уменьшении β дальнейшее убывание скорости и уменьшение "силы волны" ($\varphi_{\max}$ - убывает, f_∞ - растёт). Значения V и $\varphi_{\max}$, отвечающие слабым волнам, даны на рис. 4 и 5 - пунктиром.

Вблизи критического значения β^* зависимость более резкая (все величины $\sim \sqrt{\beta^* - \beta}$). На рис. 6а и 6б показано, насколько отличаются быстрая и медленная волны при $\beta = 0,04$ (здесь $\beta^* = 0,0461$)

Отметим, что численное нахождение слабых волн становится тем более трудным, чем меньше β . Расчёты здесь не доведены до очень малых β . По-видимому, при $\beta \rightarrow 0$ $V_2(\beta) \rightarrow 0$ и "ширина

*) Приближённое постоянство $f + \varphi$ использовалось в [1]. Заметим, что там вместо члена $\beta\varphi$ взят $\beta f\varphi$.

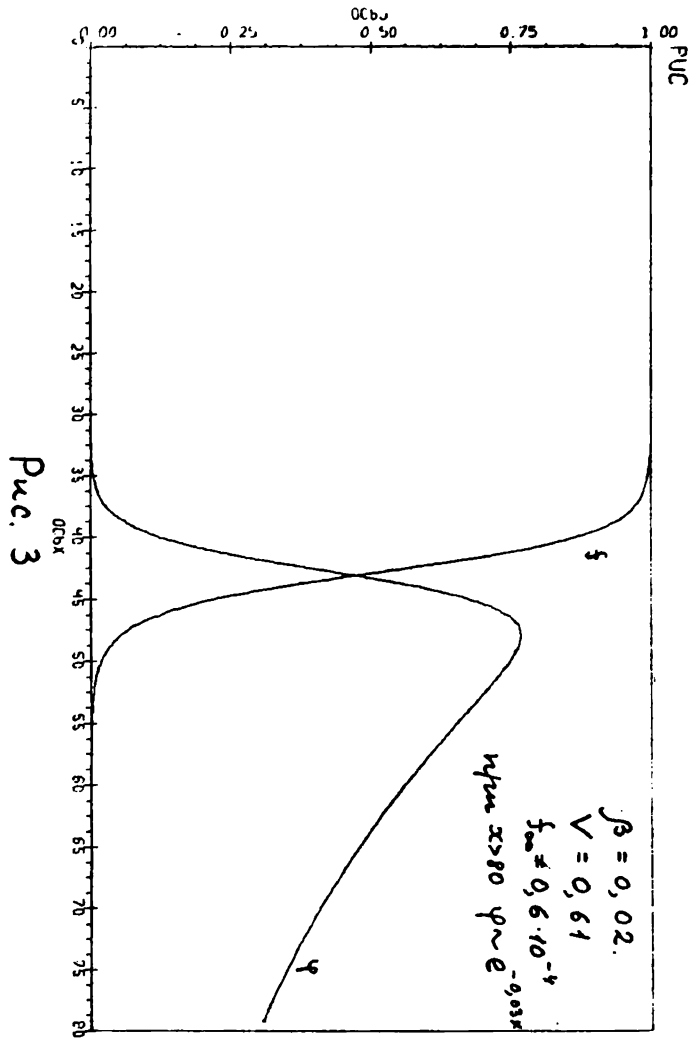
фронта" $\rightarrow \infty$.

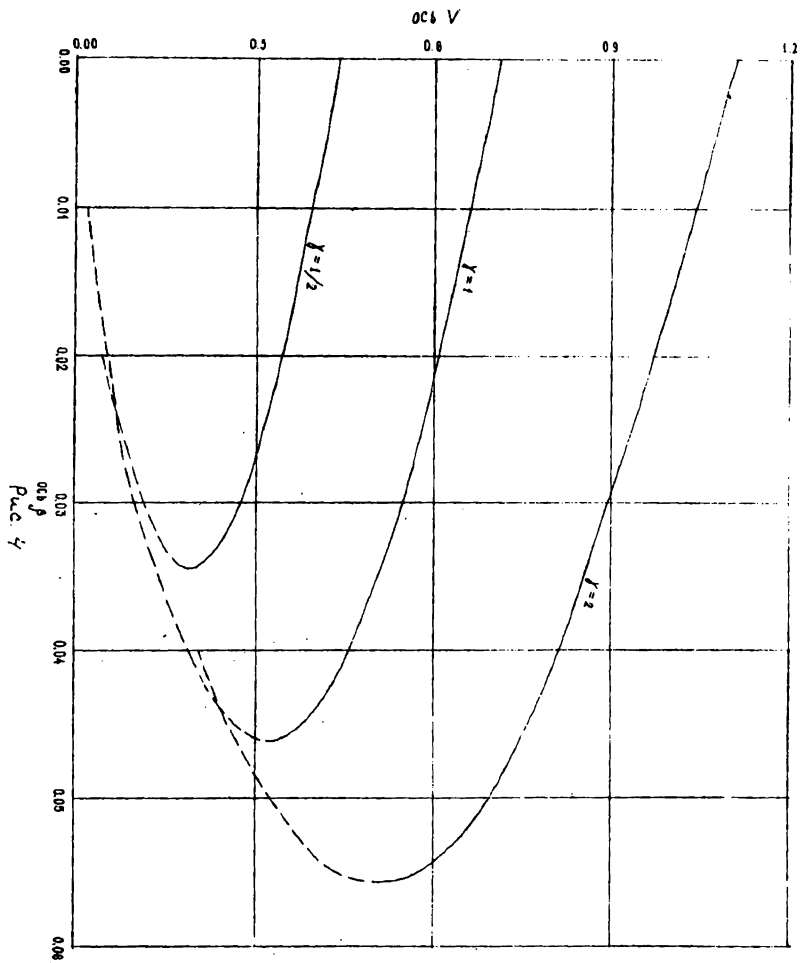
Напомним, наконец, что все данные рис.3-6 получены при граничных условиях (10), но с хорошей точностью на левой границе $f = 1$, $\varphi = 0$.

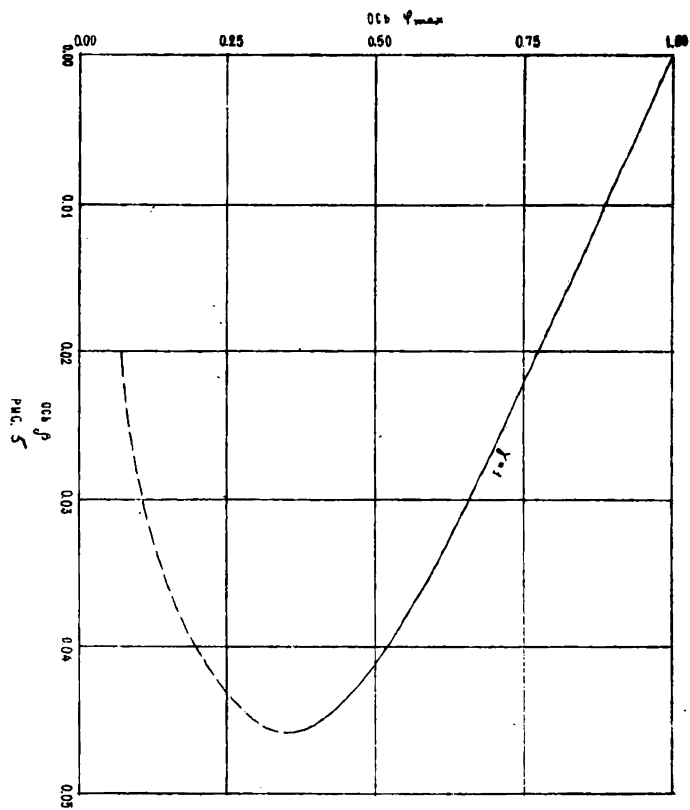
Рис. 7,8 относятся к задаче на конечном интервале. На рис. 7 - типичные профили f и φ при $\checkmark$, отличном от $\checkmark_{max}$ и $\checkmark_{min}$. Видно, что реакции происходят в существенном только вблизи левой границы*). При таких обстоятельствах простейшие граничные условия (9) далеко не эквивалентны условиям (10), полученным из асимптотики при $|\xi| \rightarrow \infty$ для бегущей волны. (рис.7а и рис.7б - для разных граничных условий; $\beta = 0,04$.)

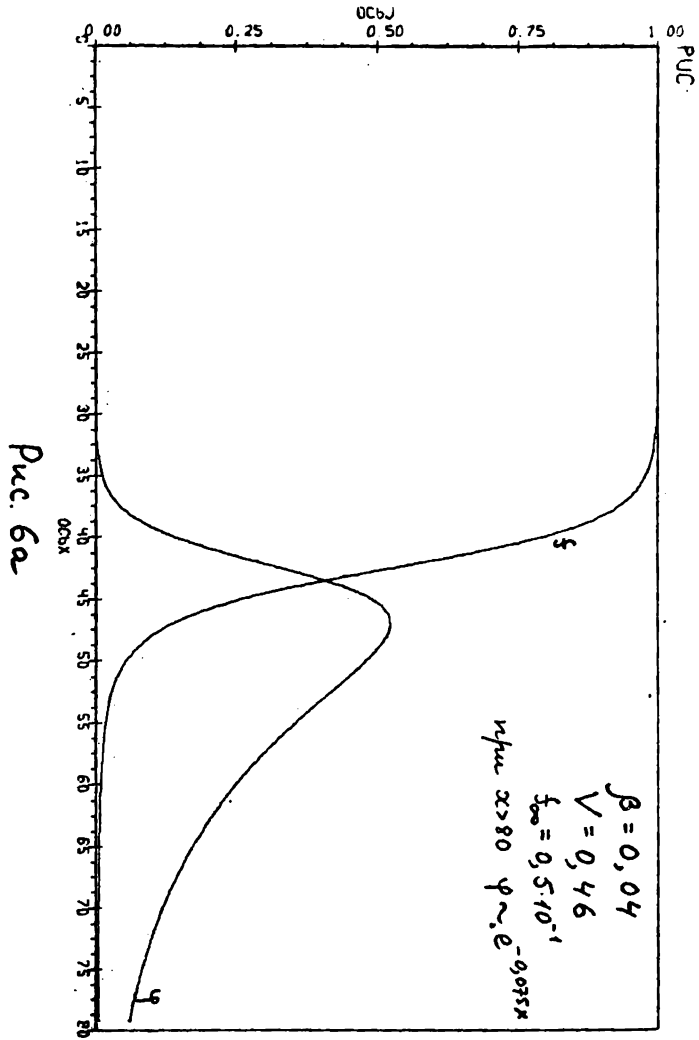
Рис.8 отвечает второму решению задачи на конечном интервале для значений $\beta = 0,04$; $\chi = 1$; $\checkmark = 0,7$ /(см. п.13).

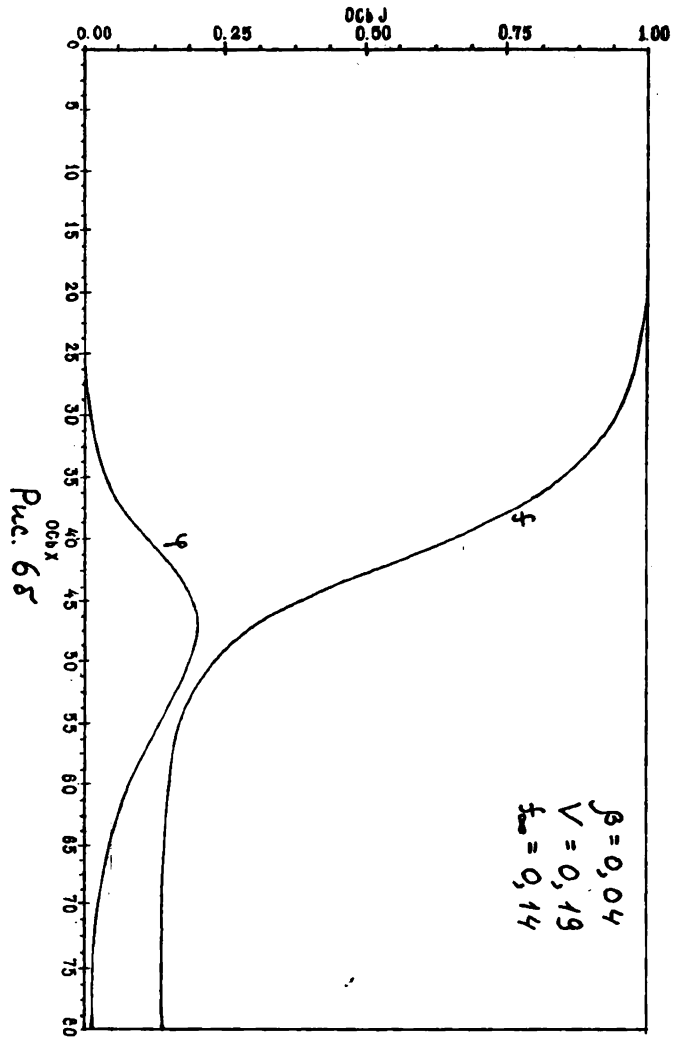
*) В терминах "химического реактора" : реакция начинается немедленно после вдува веществ.

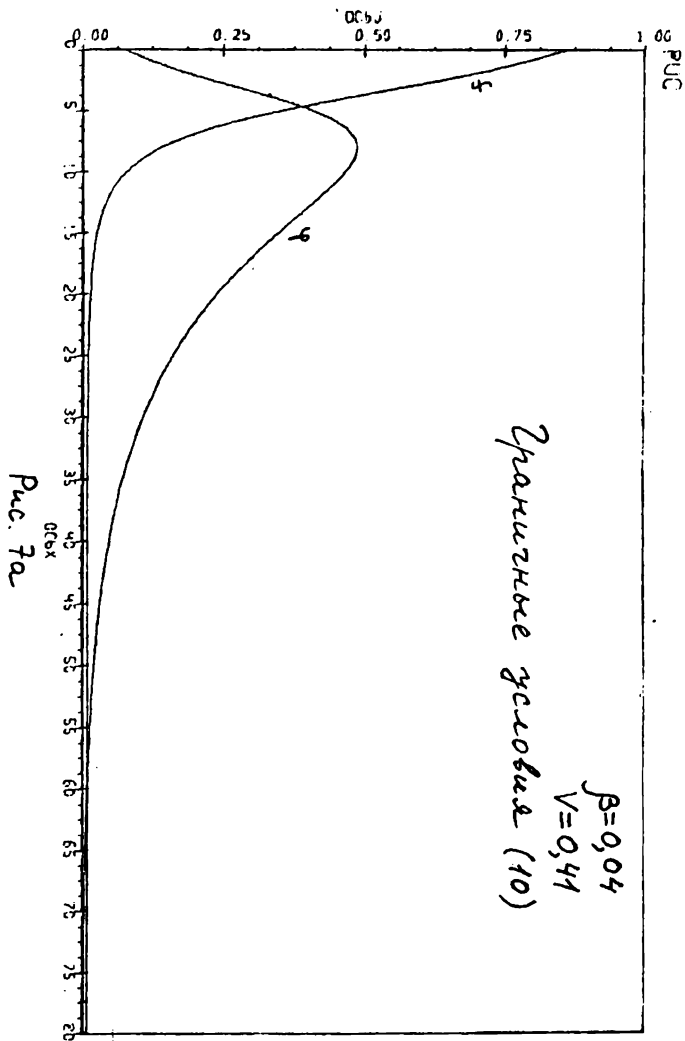


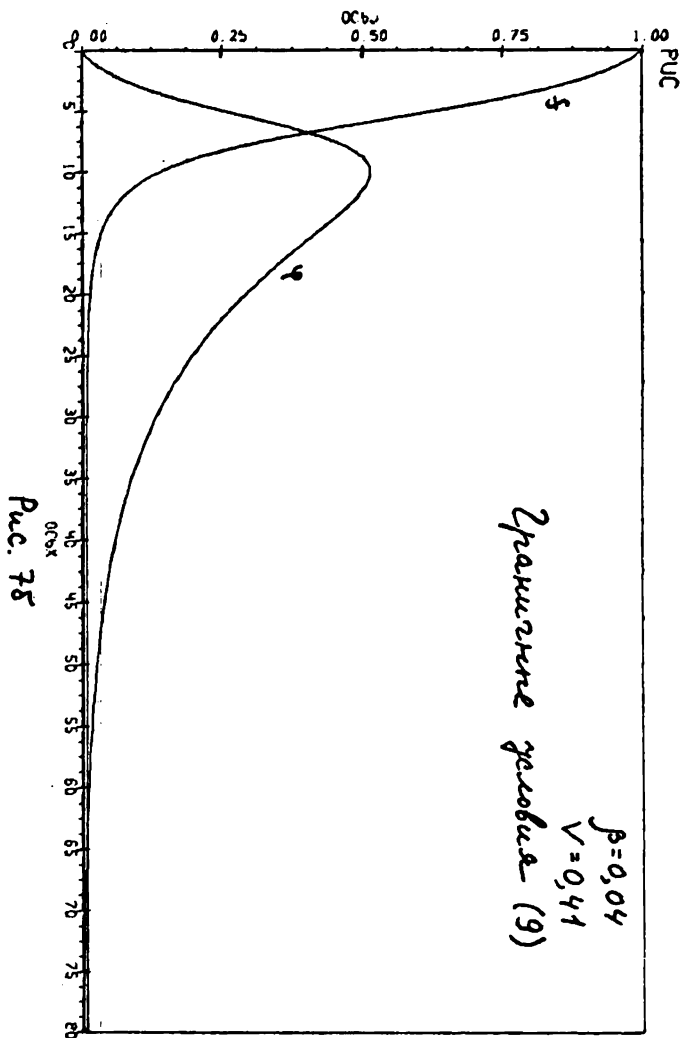


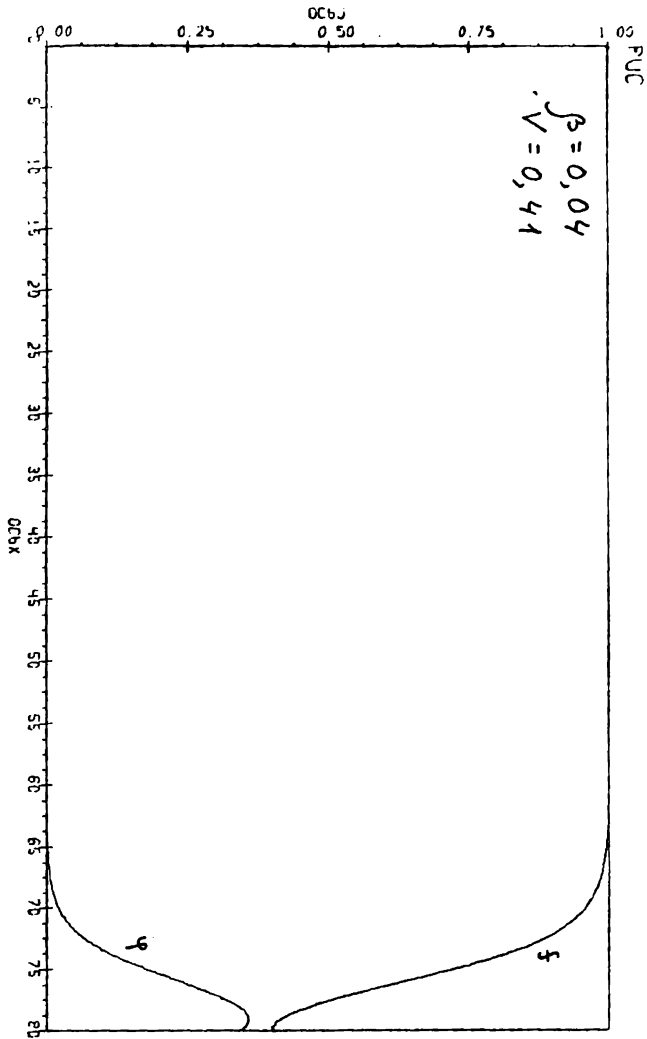












Puc. 8

ДОПОЛНЕНИЕ I.

О решениях, стремящихся к особой точке системы (5)

при $\xi \rightarrow \pm \infty$

Исследование поведения решений системы (5) в окрестности неподвижных точек основано на следующих 4 леммах.

Лемма I. Пусть дана автономная система обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\frac{d\bar{u}}{d\xi} = A\bar{u} + \bar{F}(\bar{u}); \quad F(0) = 0, \quad \left\| \frac{\partial F}{\partial u} \right\| \leq K \|u\| \quad (2.1)$$

Пусть матрица A имеет вид

$$A = \begin{pmatrix} A_1 & 0 \\ 0 & A_2 \end{pmatrix}, \quad \dim A_1 = S \quad \text{и все } \operatorname{Re} \lambda(A_1) \leq \mu < 0 \quad \text{ж)}$$

Тогда для любых $c_1, c_2, \dots, c_S$ ($|c_j| < \delta$) существует решение (Д.1) $\bar{u}(\xi)$ такое, что

$$1) \quad \|\bar{u}(\xi)\| < c e^{-\mu \xi} \quad 2) \quad u_j(0) = c_j \quad j = 1, 2, \dots, S.$$

Лемма 2. Если система (Д.1) имеет решение такое, что $\bar{V}(\xi) \rightarrow 0$ и $\int \|\bar{V}(\xi)\| d\xi < \infty$, то $\bar{V}(\xi)$ есть одно из решений S -параметрического семейства леммы I ж).

Таким образом, количество быстро убывающих решений любой системы определяется её линейной частью. В частности, если есть только одно собственное значение ($\lambda_1 < 0$), то существует только одно (с точностью до сдвига) быстро убывающее решение.

Эти две общие леммы доказываются небольшим видоизменением стандартных рассуждений. (см. [4], теорема 4.1 гл.13).

ж) $\lambda(c)$ — собственное значение C .

жж) Возможно $V(\xi) = u(\xi - \xi_0)$.

Следующая простая лемма относится к нашей системе.

Лемма 3. Пусть дана система

$$\frac{d^2 f}{d\xi^2} - \sqrt{\frac{df}{d\xi}} - f\varphi^2 = 0 \quad (Д.2)$$

$$\gamma \frac{d^2 \varphi}{d\xi^2} - \sqrt{\frac{d\varphi}{d\xi}} + f\varphi^2 - \beta\varphi = 0$$

Пусть для некоторого решения при $\xi \rightarrow +\infty$ $f \rightarrow f_\infty$, $\varphi \rightarrow 0$.

Тогда $f(\xi) - f_\infty$, $f'(\xi)$, $\varphi(\xi)$, $\varphi'(\xi)$ экспоненциально $\rightarrow 0$. То же верно при $\xi \rightarrow -\infty$.

Доказательство для $\xi \rightarrow -\infty$ сводится к следующим замечаниям:

1) Поскольку $f\varphi \rightarrow 0$, второе уравнение можно записать в виде:

$$\gamma \varphi'' - \sqrt{\varphi'} - \ell(\xi)\varphi = 0 \quad ; \text{здесь } \ell(\xi) \rightarrow \beta \text{ при } \xi \rightarrow +\infty \text{ и при } \xi \geq \xi_0 \quad |\ell(\xi) - \beta| < \varepsilon, \text{ где } \varepsilon < \beta/2.$$

2) Рассмотрим два уравнения с постоянными коэффициентами

$$\gamma h_+'' - \sqrt{h_+'} - (\beta - \varepsilon)h_+ = 0$$

$$\gamma h_-'' - \sqrt{h_-'} - (\beta + \varepsilon)h_- = 0$$

Легко показать, что при $\xi \geq \xi_0$

$$h_-(\xi) \leq \varphi(\xi) \leq h_+(\xi) \quad , \text{ если}$$

$$h_+(\xi_0) = h_-(\xi_0) = \varphi(\xi_0) \quad . \text{ Тем самым } 0 < \varphi(\xi) < A_1 e^{-\mu\xi}$$

3) Перепишем теперь первое уравнение системы (Д.2) в виде:

$$f'' - \sqrt{f'} = z(\xi), \quad z(\xi) = f(\xi)\varphi^2(\xi), \quad |z(\xi)| < A_1 e^{-2\mu\xi}$$

Отсюда

$$f'(\xi) = c e^{\sqrt{\xi}} - e^{\sqrt{\xi}} \int_{\xi}^{\infty} e^{-\sqrt{\tau}} z(\tau) d\tau = c e^{\sqrt{\xi}} + o(1)$$

Так как $f(\xi) \rightarrow f_\infty$ при $\xi \rightarrow +\infty$, то $c = 0$

Отсюда

$$f'(\xi) = -e^{\sqrt{\xi}} \int_{\xi}^{\infty} e^{-\sqrt{\tau}} z(\tau) d\tau \quad (Д.3)$$

$$|f'(\xi)| \leq \int_{\xi}^{\infty} |z(\tau)| d\tau \leq A_2 e^{-2\mu\xi}$$

$$|f(\xi) - f_{\infty}| \leq A_3 e^{-2\mu\xi}$$

4) Аналогично показывается, что

$$\varphi'(\xi) = -\frac{1}{8} e^{\frac{\mu}{2}\xi} \int_{\xi}^{\infty} e^{-\frac{\mu}{2}\tau} (\beta \varphi(\tau) - z(\tau)) d\tau \quad (Д.4)$$

и отсюда

$$|\varphi'(\xi)| \leq A_4 e^{-\mu\xi}$$

Лемма 4. Если для решения системы (Д.2) при $\xi \rightarrow +\infty$
 $f(\xi) \rightarrow f_{\infty}$ и $f(\xi) \neq 0$, то $f_{\infty} > 0$.

Доказательство. Предположим, что $f_{\infty} = 0$. В силу леммы 3

$|f(\xi)| < C e^{-\mu\xi}$ и, значит, $\int_{\xi}^{\infty} |f(\tau)| d\tau < \infty$. В силу леммы 2 существует только одно (с точностью до сдвига) решение быстро стремящееся к неподвижной точке. При $f_{\infty} = 0$ таким решением, очевидно, является $f(\xi) \equiv 0$, $\varphi(\xi) = e^{-\mu\xi}$.

Тем самым, если $f(\xi) \neq 0$, то $f(\xi)$ не стремится к нулю. Лемма доказана. Ввиду важности факта, мы дадим ему ещё одно, более прямое доказательство, заранее предположив, что $f(\xi) > 0$

Второе доказательство леммы 4.

Это доказательство сводится к двум пунктам.

а) Для достаточно больших ξ $f''(\xi) > 0$

в) Если при $\xi \gg \xi_0$ $f''(\xi) > 0$, то $f_{\infty} > 0$

Докажем сначала второе утверждение.

При $f''(\xi) > 0$ имеем $\forall f' + f\varphi^2 > 0$, т. е.

$$\frac{f'}{f} > -\frac{\varphi^2}{\varphi}$$

ж) Годится, очевидно, также $\varphi(\xi) = e^{-\mu(\xi - \xi_0)} = C e^{-\mu\xi}$

При $\xi_0 \rightarrow -\infty$ $C \rightarrow 0$.

$f_{\infty} > f(\xi) e^{-\frac{1}{\gamma} \int \varphi^2 d\tau} > 0$, т. к. $\int \varphi^2 d\tau < \infty$ в силу леммы 3.

Доказательство п.а).

1. Из формул (Д.3), (Д.4) при $f > 0$ вытекает, что $f'(\xi) < 0$ и $\varphi'(\xi) < 0$ при $\xi > \xi_0$.

2. Предположим, что $f''(\xi) < 0$ для каких-то значений $\xi > \xi_0$. : $f''(\xi) < 0$ при $c < \xi < d$. Тогда $f'(\xi) < f'(c)$ для любого $\xi \in (c, d)$. В силу монотонности f и φ
 $f(\xi) \varphi^2(\xi) < f(c) \varphi^2(c)$. Значит, $f''(\xi) = \sqrt{f'(\xi)} + f(\xi) \varphi^2(\xi) < \sqrt{f'(c)} + f(c) \varphi^2(c) = f''(c)$.

Итак, $f''(\xi) \leq f''(c) < 0$ для всех $\xi > \xi_0$. Это противоречит тому, что $f'(\xi) \rightarrow 0$ при $\xi \rightarrow \infty$.

Таким образом, доказана следующая теорема

Теорема. Пусть $M(0, 0, 0, 0)$ — неподвижная точка системы

$$\begin{cases} f' = g \\ g' = \sqrt{g} + f \varphi^2 \\ \varphi' = \psi \\ \psi \varphi' = \sqrt{\psi} + \beta \varphi - f \varphi^2 \end{cases} \quad (\text{Д.5})$$

или $\frac{d\bar{w}}{d\xi} = T(\bar{w})$, где $\bar{w} = \{f, g, \varphi, \psi\}$

Тогда

1) Существует точно однопараметрическое семейство решений, стремящихся к M при $\xi \rightarrow +\infty$. Все эти решения получаются из одного сдвига: $w_{\alpha}(\xi) = w_0(\xi - \alpha)$

1') Если для некоторого решения системы (Д.5) $f(\xi) \neq 0$, то оно не может **стремиться** к точке $(0, 0, 0, 0)$.

2) Существует точно двухпараметрическое семейство решений, стремящихся к M при $\xi \rightarrow -\infty$.

3) В обоих случаях решения стремятся к M экспоненциально.

Дополнение 2.

Возможно ли распространение пламени по сгоревшему материалу?

Как было отмечено, при стационарном распространении пламени исходное вещество A никогда полностью не сгорает. ($f_{\infty} = a > 0$).

Возникает вопрос: нельзя ли получить несколько волн, бегущих друг за другом. Чтобы разобраться с этим, напомним, что граничное условие

$f(-\infty) = 1$ соответствует выбору $f = \frac{[A]}{[A]_0}$, $\beta = \frac{\text{const}}{[A]^2}$ *)
(см. [3]).

После прохождения волны остаётся (асимптотически) $[A]_{\text{кон.}} = [A]_0 a$. Если концентрацию $[A]_{\text{кон.}}$ принять за исходную, то для такой (вторичной) волны нужно взять $\beta_2 = \beta/a^2$. Вопрос таким образом сводится к следующему: будет ли $\frac{\beta}{a^2(\beta)} > \beta^*$ или $\frac{\beta}{a^2(\beta)} < \beta^*$. В первом случае прохождение вторичной волны невозможно, во втором — возможно.

Мы видим, что нельзя дать ответ на поставленный вопрос без вычислений: нужно найти $a(\beta)$.

Расчёты показывают, что для всей верхней ветви $a(\beta)$ мало **)
и $\frac{\beta}{a^2(\beta)} \gg \beta^*$

Таким образом вторичное прохождение фронта пламени для устойчивых волн, как и следовало ожидать, невозможно.

На нижней ветви при достаточно малых β прохождение вторичной волн возможно.

*) $[A]$ — концентрация компоненты A .

***) при $\beta \rightarrow 0$ $a(\beta) \rightarrow 0$

Дополнение 3

О продолжении по параметру.

Продолжение по параметру – старая идея анализа. С появлением быстрых вычислительных машин было осознано, что эта идея – одна из немногих основных идей вычислительной математики. Действительно, зная решение нелинейной задачи $\Phi(\vec{u}, \beta_0) = 0$, близкой к данной $\Phi(\vec{u}, \beta) = 0$, можно надеяться последовательными приближениями справиться с данной задачей. Если движение по параметру β на некотором участке $\beta_0 - \delta < \beta \leq \beta_0$ уже проделано, можно использовать это для ускорения процедуры последовательных приближений.

Оставив в стороне эти возможности, отметим главное; можно гарантировать возможность при $\beta = \beta_0$ продвинуться далее по параметру β лишь в том случае, когда линеаризованная задача $A\vec{u} = \vec{h}$ при $\beta = \beta_0$ не вырождена. Решение $\vec{u}(\beta)$ тогда существует при малых $\beta - \beta_0$.

При вырождении линеаризованной задачи семейство решений $\vec{u}(\beta)$ может окончиться, может "разветвиться" или пересечься с другой ветвью решений – все это предмет специальной математической теории.

Сейчас сложилось любопытное положение. Специалисты по прикладной математике обсуждают продолжение по параметру, как метод решения различных вычислительных задач.*) При этом, как правило, оставляются в стороне все проблемы, связанные с ветвлением.**)

Математики, занимающиеся нелинейным анализом, обстоятельно разобрали случаи высокого вырождения и хитрого ветвления решений (см. 25-27). В приложениях же, по-видимому, почти всегда

*) См., в частности, заметку А.А.Дородницына [Д.1] и серию статей Д.Ф.Давиденко [Д.2 – Д.3].

**) Одно из исключений – статья [Д.2].

имеет место один из трёх простейших вариантов одномерного вырождения ($A\vec{u}=0$ - одномерно):

- а) исчезновение решения из-за слияния с другой ветвью,
- б) простейшая бифуркация,
- в) пересечение 2 ветвей.

Теория этих случаев проста. Из неё вытекает, что качественно картина ветвления решений системы $\Phi(\vec{u}, \beta) = 0$ такая же как для одного уравнения $f(x, \beta) = 0$. Случаям а), б), в) соответствуют канонические образцы: а) $x^2 + \beta = 0$; б) $x(x^2 - \beta) = 0$; в) $x^2 - \beta^2 = 0$.

Кажется назревшим продумывание и реализация алгоритмов продолжения по параметру, справляющихся с этими 3 случаями вырождения. Ясно, например, что в случае а) нужно проходить точку слияния решений движением по другому параметру.

Литература к дополнению 3

- [Д.1] А.А.Дородницын.
К задаче вычисления собственных чисел и собственных
векторов матриц, ДАН СССР т.126 №6 (1959)
- [Д.2] Д.Ф.Давиденко.
О приближенном решении систем нелинейных уравнений
Укр. мет.жур. т.5, № 2 (1953).
- [Д.3] Д.Ф.Давиденко.
Серия заметок в ДАН СССР с предложениями по применению
идеи продолжения по параметру в вычислительных задачах.
т.88 № 4; т.131 №№ 3,4,5; т.162 №№ 3,4 ...
- [Д.4] СМБ "Функциональный анализ". "Наука" 1972
- [Д.5] А.А.Вайнберг, В.А.Треногин.
Теория ветвления решений нелинейных уравнений,
"Наука", 1969
- [Д.6] М.А.Красносельский и др.
Приближенное решение операторных уравнений, "Наука", 1969
- [Д.7] М.А.Вайнберг, В.А.Треногин.
Методы Липунова и Шмидта в теории нелинейных интеграль-
ных уравнений и их дальнейшее развитие. УМН т.17,
вып. 2 (1962)

Литература

- [1] В.Г.Воронков, Н.Н.Семёнов.
Распространение холодного пламени в горючих смесях, со-
держащих 0,03% сероуглерода. ЖФХ, 1939, XIII, 12, 1695
- [2] Н.Н.Семёнов. О некоторых проблемах химической кинетики
и реакционной способности. М., Изд-во АН СССР, 1958 г.
- [3] Б.В.Новожилов, В.С.Посвянский. О скорости распространения
холодного пламени. Физика горения и взрыва, 9, № 2.
- [4] Э.А.Коддингтон, Н.Левинсон.
Теория обыкновенных дифференциальных уравнений. ИЛ 1958 г.
- [5] Д.А.Франк-Каменецкий.
Диффузия и теплопередача в химической кинетике.
М., Изд-во "Наука", 1967 г.
- [6] Я.Б.Зельдович
К теории распространения пламени. ЖФХ, 1948, XXII, 1

№ T-05162 от 28. 11 197Y г. Заказ № 2440 Тираж 120 экз.

Ордена Ленина институт прикладной математики
Москва, Мясницкая пл., 4.