

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МОДЕЛИ ТЕПЛООВОГО ВЗРЫВА

С.И.Фадеев

В статье предлагается численный метод исследования классической модели теплового взрыва в рамках одностадийной реакции первого порядка с учетом расхода исходного вещества. Изложение проблемы непосредственно связано с работами [1,2], в которых дан подробный качественный анализ модели как пример применения метода интегральных многообразий к сингулярно возмущенной динамической системе из двух уравнений. В итоге установлено согласование результатов численного и асимптотического исследований в практически интересной области изменения параметров.

1. Предварительные рассуждения

Рассматриваемая реакция описывается следующей задачей Коши:

$$\left. \begin{aligned} \tau > 0, \quad \frac{d\eta}{d\tau} &= -\eta \exp\left(\frac{\theta}{1+\beta\theta}\right), \\ \gamma \frac{d\theta}{d\tau} &= \eta \exp\left(\frac{\theta}{1+\beta\theta}\right) - \alpha\theta, \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

$$\eta = 1, \quad \theta = 0 \quad \text{при} \quad \tau = 0. \quad (2)$$

Здесь τ , η и θ - "безразмерные" время, концентрация и температура; α, β, γ - положительные безразмерные параметры, причем γ достаточно мало (0.1-0.01) и $\beta^2 < \gamma \leq \beta$. В этом

случае существует α_0 такое, что малым изменениям α в окрестности α_0 отвечает резкий переход от медленных режимов протекания реакции к режимам взрывного типа. Отмеченная параметрическая чувствительность задачи Коши объясняет затруднения, возникающие при численном решении задачи Коши (1), (2), когда α достаточно близко к α_0 . Предлагаемый подход к вычислительной стороне проблемы позволяет дополнить асимптотический анализ численными результатами, в частности, установить границы применимости формулы для α_0 , определяющей предел самовоспламенения.

Согласно [2]

$$\alpha_0 = (1-\beta) \exp[1 - 2.946(1+2\beta)\gamma^{2/3} - \frac{4}{9}(1+6\beta)\gamma \ln \gamma] + o(\gamma + \beta^2). \quad (3)$$

График зависимости α_0 от β по формуле (3) при $\gamma = 0.01$ дан на рис. 1 (сплошная линия). График той же зависимости в виде пунктирной линии представляет результат применения численного метода, изложение которого будет приведено ниже. Как мы видим, хорошее совпадение асимптотического и численного значений α_0 имеет место уже при $\gamma = 0.01$ и β порядка γ .

При переходе к фазовой плоскости (η, θ) задача Коши (1), (2) преобразуется к виду:

$$0 < \eta \leq 1, \quad \gamma \frac{d\theta}{d\eta} = \alpha \frac{\theta}{\eta} \exp\left[-\frac{\theta}{1+\beta\theta}\right] - 1, \quad (4)$$

$$\theta = 0 \quad \text{при} \quad \eta = 1. \quad (5)$$

Нас будет интересовать численный метод построения фазовой траектории, определяемой задачей Коши (4), (5). Предварительно сделаем ряд замечаний относительно фазового портрета модели.

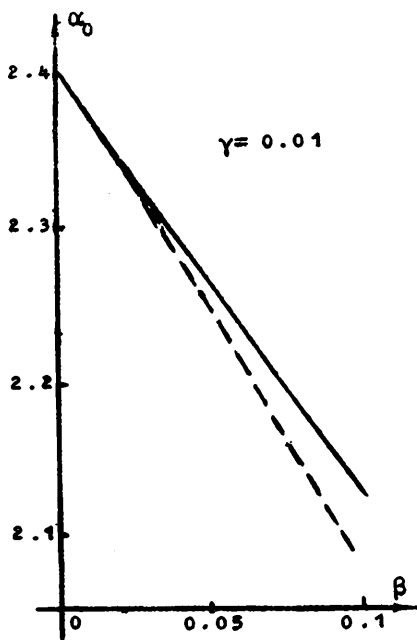


Рис. 1

Как легко убедиться, модель теплового взрыва отражает естественное течение реакции: с убыванием концентрации η от 1 до 0 температура θ , определяемая из (4), (5), вначале монотонно растет до некоторого максимального значения θ_1 , достигаемого при $\eta = \eta_1$, $0 < \eta_1 < 1$, а затем монотонно убывает до 0 при $\eta = 0$. Из равенства $d\theta/d\eta = 0$ следует, что точка (η_1, θ_1) фазовой плоскости принадлежит кривой L_α :

$$\eta_1 = \alpha \theta_1 \exp \left[- \frac{\theta_1}{1 + \beta \theta_1} \right]. \quad (6)$$

Эта кривая носит название медленной кривой, поскольку вдоль нее производная $d\theta/d\tau$ также равна 0.

Точка $(0,0)$, представляющая устойчивое стационарное решение системы (1), является по отношению к уравнению (4) особой точкой типа "узел". В ее окрестности фазовые траектории задаются функцией:

$$\theta = \frac{\eta}{\alpha - \gamma} + \text{const } \eta^{\frac{\alpha}{\gamma}}. \quad (7)$$

Очевидно, решение задачи Коши (4), (5) выделяет единственную фазовую траекторию Γ_α , проходящую через точки $(0,0)$ и $(1,0)$ (рис. 2).

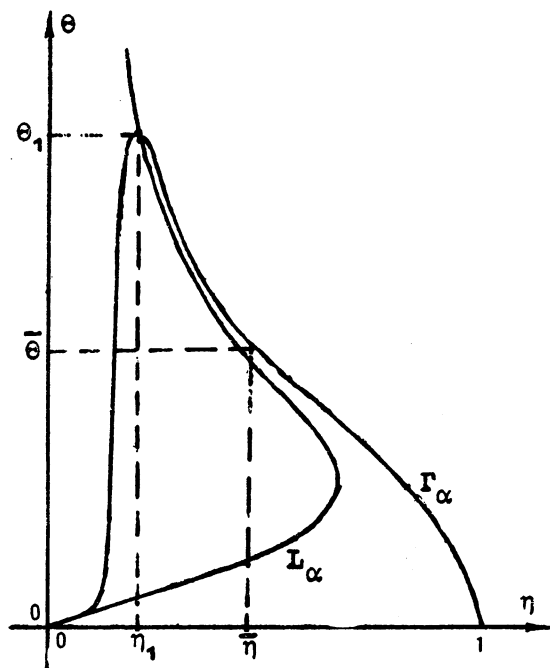


Рис. 2

Из непрерывной зависимости решения задачи Коши (4), (5) от параметра α следует, что всякому $\alpha > 0$ соответствует вполне определенная фазовая траектория Γ_α , пересекающая L_α в точке (η_1, θ_1) . Справедливо и обратное утверждение: по заданному $\theta_1 > 0$ всегда найдется единственное значение α и соответствующая ему фазовая траектория Γ_α . При этом значение η_1 определяется формулой (6).

В качестве иллюстрации к сказанному рассмотрим случай, когда $\theta_1 \ll 1$. Тогда приближенное решение задачи Коши (4), (5) удовлетворяет уравнению

$$\gamma \frac{d\theta}{d\eta} = \alpha \frac{\theta}{\eta} - 1, \quad (8)$$

решением которого является функция (7). Потребовав в (7), чтобы $\theta(1) = 0$, получим решение задачи Коши (8), (5) в виде:

$$\theta = \frac{1}{\alpha - \gamma} (\eta - \eta^{\alpha/\gamma}). \quad (9)$$

Из (9) следует, что

$$\theta_1 = \frac{1}{\alpha} \left[\frac{\gamma}{\alpha} \right]^{\frac{\gamma}{\alpha - \gamma}}, \quad (10)$$

причем $\theta_1 \ll 1$ для достаточно больших значений α . Если $\gamma\alpha \ll 1$, то, согласно (10), $\alpha\theta_1 \sim 1$. Поэтому $\theta_1 \ll 1$ отвечает значение α порядка $1/\theta_1$, точнее,

$$\alpha = \frac{1}{\theta_1} [1 + o(\gamma\theta_1 \ln(\gamma\theta_1))].$$

Выбор θ_1 в качестве параметра означает, что α и часть фазовой траектории Γ_{α} между точками (η_1, θ_1) и $(1, 0)$ определяются из решения краевой задачи:

$$\left. \begin{aligned} \eta_1 \leq \eta \leq 1, \quad \gamma \frac{d\theta}{d\eta} &= \alpha \frac{\theta}{\eta} \exp \left[-\frac{\theta}{1 + \beta\theta} \right] - 1, \\ \theta &= \theta_1 \text{ при } \eta = \eta_1; \quad \theta = 0 \text{ при } \eta = 1, \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

где значение η_1 заранее неизвестно. (Заметим, что решение краевой задачи (11) существует и единственно.) Остальная часть траектории Γ_{α} , проходящая через точки $(0, 0)$ и (η_1, θ_1) , строится из решения задачи Коши:

$$\left. \begin{aligned} 0 < \eta \leq \eta_1, \quad \gamma \frac{d\theta}{d\eta} &= \alpha \frac{\theta}{\eta} \exp \left[-\frac{\theta}{1 + \beta\theta} \right] - 1, \\ \theta &= \theta_1 \text{ при } \eta = \eta_1. \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

Итак, часть фазовой траектории Γ_α между точками (η_1, θ_1) и $(1, 0)$ может быть найдена либо из решения задачи Коши (4), (5) на отрезке $[\eta_1, 1]$ при заданном значении α , либо из решения краевой задачи (11) при заданном значении θ_1 . Выбор способа построения Γ_α связан с проблемой чувствительности решения к малым изменениям α . В качестве критерия чувствительности естественно взять величину $\rho = |\partial \theta / \partial \alpha(\eta_1)|$. С этой целью дополним задачу Коши уравнением в вариациях:

$$\left. \begin{aligned} \eta_1 \leq \eta \leq 1, \\ \gamma \frac{d}{d\eta} \frac{\partial \theta}{\partial \alpha} = \frac{1}{\eta} \left\{ \theta + \alpha \left[1 - \frac{\theta}{(1 + \beta \theta)^2} \right] \frac{\partial \theta}{\partial \alpha} \right\} \exp \left[- \frac{\theta}{1 + \beta \theta} \right], \\ \frac{\partial \theta}{\partial \alpha} = 0 \quad \text{при} \quad \eta = 1. \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

Совместное численное решение (4), (5) и (13) показывает, что ρ , определяемое из (13), мало при достаточно больших α (см. также (10)). В дальнейшем с убыванием α наблюдается увеличение ρ до значений порядка 1, а затем ρ , как уже отмечалось, при стремлении α к α_0 становится много больше 1. Поэтому при $\rho > 1$ следует обращаться к краевой задаче (11), в частности, для вычисления α_0 .

Итогом приведенных рассуждений является вывод о том, что численное исследование проблемы можно представить как продолжение по параметру с параметризацией решения (11), где либо α , либо θ_1 играют роль параметра задачи [3]. В данном случае параметризация заключается в выборе среди α и θ_1 параметра задачи для продолжения решения в зависимости от значения ρ .

Для того чтобы конкретизировать область определения решения краевой задачи, сделаем замену аргумента η на ξ :

$$\eta = \xi + \alpha(1 - \xi)\varphi(\theta_1), \quad \varphi(\theta) = \theta \exp \left[- \frac{\theta}{1 + \beta \theta} \right]. \quad (14)$$

При этом (11) преобразуется к виду:

$$\left. \begin{aligned} 0 \leq \xi \leq 1, \\ \gamma \frac{d\theta}{d\xi} = [1 - \alpha \varphi(\theta_1)] \left[\frac{\alpha \varphi(\theta)}{\xi + \alpha(1-\xi) \varphi(\theta_1)} - 1 \right], \\ \theta = \theta_1 \text{ при } \xi = 0, \quad \theta = 0 \text{ при } \xi = 1. \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

В дальнейшем основное внимание будет уделено численному методу решения краевой задачи (15). Применение здесь параметризации позволяет алгоритмически объединить оба способа построения Γ_α .

2. Дискретная модель краевой задачи

Процедура продолжения решения по параметру и параметризации наиболее просто применима к численному исследованию системы нелинейных уравнений, содержащей параметр [4]. Именно в таком виде ниже формулируется дискретная модель (15).

Введем в рассмотрение сетку по ξ , задав разбиение отрезка $[0,1]$ на N частей:

$$0 = \xi_1 < \xi_2 < \dots < \xi_{N+1} = 1, \quad h_k = \xi_{k+1} - \xi_k. \quad (16)$$

Обозначим $\theta_i = \theta(\xi_i)$, $\varphi_i = \varphi(\theta_i)$, $\theta'_i = d\theta/d\xi(\xi_i)$, $i = 1, 2, \dots, N+1$. Очевидно, имеет место следующая система из N интегральных уравнений:

$$\gamma(\theta_{k+1} - \theta_k) = (1 - \alpha \varphi_1) \left\{ \alpha \int_{\xi_k}^{\xi_{k+1}} \frac{\varphi[\theta(\xi)] d\xi}{\xi + \alpha(1-\xi) \varphi_1} - h_k \right\},$$

$$k = 1, 2, \dots, N.$$

Следующим шагом к построению дискретной модели (15) является приближенное представление интеграла в системе по формуле

Симпсона. Предварительно заметим, что значение $\bar{\theta}_k = \theta(\bar{\xi}_k)$, где $\bar{\xi}_k = (\xi_k + \xi_{k+1})/2$, с погрешностью порядка h_k^4 задается формулой:

$$\bar{\theta}_k = \frac{\theta_k + \theta_{k+1}}{2} + \frac{h_k}{8} (\theta'_k - \theta'_{k+1}),$$

или

$$\bar{\theta}_k = \frac{\theta_k + \theta_{k+1}}{2} + \frac{\alpha(1-\alpha\varphi_1)h_k}{8\gamma} \left[\frac{\varphi_k}{\eta_k} - \frac{\varphi_{k+1}}{\eta_{k+1}} \right],$$

где $\eta_j = \xi_j + \alpha(1-\xi_j)\varphi_1$. Обозначив $\bar{\varphi}_k = \varphi(\bar{\theta}_k)$, $\bar{\eta}_k = \bar{\xi}_k + \alpha(1-\bar{\xi}_k)\varphi_1$, получим

$$\int_{\xi_k}^{\xi_{k+1}} \frac{\varphi[\theta(\xi)] d\xi}{\xi + \alpha(1-\xi)\varphi_1} \approx \frac{h_k}{6} \left[\frac{\varphi_k}{\eta_k} + 4 \frac{\bar{\varphi}_k}{\bar{\eta}_k} + \frac{\varphi_{k+1}}{\eta_{k+1}} \right].$$

Таким образом, мы имеем систему нелинейных уравнений относительно приближенных сеточных значений $\theta(\xi)$ вида:

$$F_k(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_N, \alpha) = 0, \quad k=1, 2, \dots, N, \quad (17)$$

где

$$F_k = (1-\alpha\varphi_1)h_k \left[\alpha \left[\frac{\varphi_k}{\eta_k} + 4 \frac{\bar{\varphi}_k}{\bar{\eta}_k} + \frac{\varphi_{k+1}}{\eta_{k+1}} \right] - 6 \right] + 6\gamma(\theta_k - \theta_{k+1}).$$

В силу краевых условий (5) имеем $\theta_{N+1} = \varphi_{N+1} = 0$. Кроме того, $\varphi_1/\eta_1 = 1/\alpha$. Неизвестными в системе (17) являются $\theta_2, \theta_3, \dots, \theta_N$ и либо θ_1 , либо α , в зависимости от того, что является параметром системы - α или θ_1 соответственно. Систему (17) мы будем называть дискретной моделью краевой задачи (15).

3. Продолжение решения системы по параметру и параметризация

Эффективным средством решения систем нелинейных уравнений вида

$$\Phi(Y; \mu) = 0 \quad (18)$$

является метод Ньютона-Канторовича. Здесь Φ - достаточно гладкая вектор-функция векторного аргумента Y и скалярного аргумента μ , причем размерности Φ и Y совпадают. Пусть при некотором $\mu = \mu_0$ известно приближение решения Y^0 системы (18). Тогда согласно методу Ньютона-Канторовича вектор Z , задающий уточнение Y^0 , находится из решения системы линейных алгебраических уравнений:

$$\left. \begin{aligned} \Phi_Y(Y^0; \mu_0)Z &= -\Phi(Y^0; \mu_0), \\ \det \Phi_Y(Y^0; \mu_0) &\neq 0, \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

где Φ_Y - матрица якобиана. Далее, в качестве очередного приближения к решению принимается вектор $Y^0 + Z$, а из системы (19) находится соответствующий вектор Z и так далее, пока норма Z не будет меньше заданного положительного ϵ_0 . Для сходимости итерационного процесса требуется, вообще говоря, чтобы исходное приближенное решение мало отличалось от точного решения (18), существование которого при $\mu = \mu_0$, естественно, подразумевается.

Обозначим через $Y(\mu_0)$ решение системы (18) при $\mu = \mu_0$. После того как оно построено, нетрудно найти вектор производных $Y_\mu(\mu_0)$ по μ из системы линейных уравнений с той же матрицей, что и у системы (19), и правой частью - вектор производных - $\Phi_\mu[Y(\mu_0); \mu_0]$:

$$\Phi_Y[Y(\mu_0); \mu_0]Y_\mu = -\Phi_\mu[Y(\mu_0); \mu_0]. \quad (20)$$

Вектор $Y_\mu(\mu_0)$ можно использовать при продолжении решения системы нелинейных уравнений по параметру μ для формирования начального приближения решения (18), где $\mu = \mu_0 + H_\mu$, H_μ - шаг по параметру μ . Например, с погрешностью порядка H_μ^2 начальное приближение Y^0 может быть взято в виде:

$$Y^0 = Y(\mu_0) + H_\mu Y_\mu(\mu_0). \quad (21)$$

Если последовательно найдены два решения (18) при $\mu = \mu_1$ и $\mu = \mu_2$, то начальное приближение Y^0 при $\mu = \mu_2 + \bar{H}_\mu$, где μ достаточно близко к μ_2 , можно задать более точно, чем в (21). С погрешностью порядка $H_\mu^2(H_\mu + \bar{H}_\mu)$, $\bar{H}_\mu = \mu_2 - \mu_1$, имеем

$$Y^0 = Y(\mu_2) + H_\mu \left\{ Y_\mu(\mu_2) + \frac{H_\mu}{\bar{H}_\mu} \left[Y_\mu(\mu_2) - \frac{Y(\mu_2) - Y(\mu_1)}{\bar{H}_\mu} \right] \right\}. \quad (22)$$

Подробное описание варианта продолжения решения по параметру, включая адаптацию шага H_μ , дано в [4].

Возвращаясь к системе (17) в виде (18), где Φ - вектор с компонентами F_1, F_2, \dots, F_N , Y вектор с компонентами $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_N$, а μ - параметр α , отметим, что в этом случае матрица $[\Phi_Y, \Phi_\mu]$ является сильно разреженной:

$$[\Phi_Y, \Phi_\mu] =$$

$$\begin{array}{c}
 \Phi_Y \qquad \qquad \Phi_\mu \\
 = \left[\begin{array}{ccc|c}
 \frac{\partial F_1}{\partial \theta_1} & \frac{\partial F_1}{\partial \theta_2} & & \frac{\partial F_1}{\partial \alpha} \\
 \frac{\partial F_2}{\partial \theta_1} & \frac{\partial F_2}{\partial \theta_2} & \frac{\partial F_2}{\partial \theta_3} & \frac{\partial F_2}{\partial \alpha} \\
 \frac{\partial F_3}{\partial \theta_1} & & \frac{\partial F_3}{\partial \theta_3} & \frac{\partial F_3}{\partial \alpha} \\
 \dots & & \dots & \dots \\
 \frac{\partial F_{N-1}}{\partial \theta_1} & & \frac{\partial F_{N-1}}{\partial \theta_{N-1}} & \frac{\partial F_{N-1}}{\partial \alpha} \\
 \frac{\partial F_N}{\partial \theta_1} & & \frac{\partial F_N}{\partial \theta_N} & \frac{\partial F_N}{\partial \alpha}
 \end{array} \right] \quad (23)
 \end{array}$$

Поэтому решение систем линейных алгебраических уравнений с матрицей, имеющей структуру (23), строится при помощи экономичных численных методов типа ортогональной прогонки, учитывающих разреженность матрицы системы.

Как уже отмечалось, θ_1 может играть роль параметра системы (17) наряду с α . Если $\mu = \theta_1$, то компонентами вектора Y служат $\theta_2, \theta_3, \dots, \theta_{N-1}, \alpha$, а матрица $[\Phi_Y, \Phi_\mu]$ принимает следующий вид:

$$[\Phi_Y, \Phi_\mu] =$$

$$\begin{array}{c}
 \Phi_Y \qquad \qquad \qquad \Phi_\mu \\
 \left[\begin{array}{ccccccc}
 \frac{\partial F_1}{\partial \theta_2} & & & & & \frac{\partial F_1}{\partial \alpha} & \frac{\partial F_1}{\partial \theta_1} \\
 \frac{\partial F_2}{\partial \theta_2} & \frac{\partial F_2}{\partial \theta_3} & & & & \frac{\partial F_2}{\partial \alpha} & \frac{\partial F_2}{\partial \theta_1} \\
 & \frac{\partial F_3}{\partial \theta_3} & \frac{\partial F_3}{\partial \theta_4} & & & \frac{\partial F_3}{\partial \alpha} & \frac{\partial F_3}{\partial \theta_1} \\
 & & \dots & & & \dots & \dots \\
 & & & \frac{\partial F_{N-1}}{\partial \theta_{N-1}} & \frac{\partial F_{N-1}}{\partial \theta_N} & \frac{\partial F_{N-1}}{\partial \alpha} & \frac{\partial F_{N-1}}{\partial \theta_1} \\
 & & & & \frac{\partial F_N}{\partial \theta_N} & \frac{\partial F_N}{\partial \alpha} & \frac{\partial F_N}{\partial \theta_1}
 \end{array} \right]
 \end{array}$$

При программной реализации прогонки удобно формировать матрицу якобиана Φ_Y с одним "лишним" столбцом, выполнив в (23) перестановку столбцов:

$$\Phi_Y = \left[\begin{array}{ccccccc}
 \frac{\partial F_1}{\partial \theta_2} & & & & \frac{\partial F_1}{\partial \theta_1} & \frac{\partial F_1}{\partial \alpha} \\
 \frac{\partial F_2}{\partial \theta_2} & \frac{\partial F_2}{\partial \theta_3} & & & \frac{\partial F_2}{\partial \theta_1} & \frac{\partial F_2}{\partial \alpha} \\
 & & \dots & & \dots & \dots \\
 & & & \frac{\partial F_{N-1}}{\partial \theta_{N-1}} & \frac{\partial F_{N-1}}{\partial \theta_N} & \frac{\partial F_{N-1}}{\partial \theta_1} & \frac{\partial F_{N-1}}{\partial \alpha} \\
 & & & & \frac{\partial F_N}{\partial \theta_N} & \frac{\partial F_N}{\partial \theta_1} & \frac{\partial F_N}{\partial \alpha}
 \end{array} \right] \quad (24)$$

Предполагается, что в матрице (24) вычеркивается или столбец

производных по ϵ_1 , если θ_1 - параметр системы (17) или столбец производных по α , если параметром является α . Тем не менее вычеркиваемый столбец подвергается преобразованиям метода прогонки в ходе итерационного процесса по Ньютону-Кантовичу наравне с остальными столбцами матрицы Φ_Y . По завершении итерационного процесса вычеркнутый (и преобразованный) столбец используется в качестве правой части системы линейных алгебраических уравнений, определяющей вектор производных Y_μ решения (17). В соответствии с (24) последней компонентой вектора Y_μ будет либо $\partial\alpha/\partial\epsilon_1$, либо $\partial\epsilon_1/\partial\alpha$. Отсюда следует простое правило параметризации: если последняя компонента вектора Y_μ по модулю окажется меньше 1, то параметр системы (17), по которому будет продолжено решение, сохраняется; в противном случае параметр системы (17) меняется, а компоненты вектора Y_μ подвергаются нормировке путем деления на последнюю компоненту.

Отметим, что матрица (24) после вычеркивания соответствующего столбца производных не окажется вырожденной. Пусть, например, α - параметр системы (17) и при некотором его значении найдены вектор Y_α , т.е. решение системы, и вектор производных $Y_\alpha(\alpha)$. Обозначим через $\Phi_Y(\alpha)$ матрицу Φ_Y , определенную в (24), в которой вычеркнут столбец производных по α , а через $\Phi_Y(\theta_1)$ - матрицу с вычеркнутым столбцом производных по ϵ_1 . Тогда, очевидно,

$$\left| \frac{\partial\epsilon_1}{\partial\alpha} \right| = \left| \frac{\det \Phi_Y(\epsilon_1)}{\det \Phi_Y(\alpha)} \right|, \quad \det \Phi_Y(\alpha) \neq 0.$$

Если $|\partial\epsilon_1/\partial\alpha| \geq 1$, то $|\det \Phi_Y(\epsilon_1)| \geq |\det \Phi_Y(\alpha)|$ и, таким образом, для дальнейшего продолжения решения может быть использован параметр ϵ_1 .

Приведение матрицы (24) к верхней треугольной с учетом ее структуры составляет прямой ход метода прогонки при решении

систем линейных алгебраических уравнений (19) и (20). При этом используется цепочка плоских отражений, дающая искомое ортогональное преобразование матрицы Φ_Y [5]. Схематично результат прямого хода прогонки представляется в виде:

$$\Phi_Y = \begin{bmatrix} + & & & 0 & + & + \\ + & & & & + & + \\ \cdots & \cdots & & & \cdots & \\ & + & + & & + & + \\ 0 & & + & + & + & + \\ & & & + & + & + \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} x & x & & 0 & x & x \\ & x & x & & & x \\ \cdots & & & \cdots & \cdots & \\ & & x & x & x & x \\ 0 & & & x & x & x \\ & & & & x & x \end{bmatrix} = \tilde{\Phi}_Y.$$

Далее последовательно вычисляются неизвестные системы (19) или (20) по рекуррентным формулам, носящим название обратного хода метода прогонки.

4. Выбор начального приближения

Применение метода продолжения решения по параметру к дискретной модели краевой задачи предполагает задание начального приближения Y^0 при заданном значении параметра в стартовой позиции. Дальнейший процесс численного построения вектор-функции $Y(\alpha)$, определяемой системой (17), будет происходить согласно предложенному варианту метода, в котором на первом шаге Y^0 берется в виде (21), а начиная со второго шага, в виде (22).

Пусть краевая задача (15) рассматривается при достаточно больших значениях α . Воспользуемся сеткой (16) с равномерным разбиением отрезка $[0,1]$ с шагом h порядка γ для построения дискретной модели. В качестве параметра μ системы (17) в стартовой позиции естественно выбрать α , а сеточные значения функции $\theta(\xi)$, определяемой по формуле (9) с учетом (14), взять за компоненты вектора Y^0 . При этом направление продолжения решения по параметру задается в сторону уменьшения α .

При α , стремящемся к α_0 , параметром краевой задачи (15) становится θ_1 . В этом случае часть траектории Γ_α будет близка к кривой I_α , определяемой асимптотическим представлением решения уравнения (4). Перепишем (4) в виде:

$$\frac{d\eta}{d\theta} = \gamma \frac{\eta}{\alpha\varphi(\theta) - \eta}, \quad \varphi(\theta) = \theta \exp\left[-\frac{\theta}{1+\beta\theta}\right]. \quad (25)$$

Отсюда следует представление $\eta(\theta)$ для малых γ в виде ряда:

$$\eta = \alpha \left[\varphi(\theta) - \frac{\gamma}{\alpha} \psi_1(\theta) - \frac{\gamma^2}{\alpha^2} \psi_2(\theta) + \dots \right],$$

где

$$\psi_1(\theta) = \frac{\theta}{1-u(\theta)}, \quad u(\theta) = \frac{\theta}{(1+\beta\theta)^2},$$

$$\psi_2(\theta) = \psi_1^2(\theta)v(\theta),$$

$$v(\theta) = \frac{1 + \frac{1-\beta\theta}{[1-u(\theta)](1+\beta\theta)}}{(1+\beta\theta)^2[1-u(\theta)]} \exp\left[-\frac{\theta}{1+\beta\theta}\right].$$

Введем обозначения:

$$\left. \begin{aligned} X_0(\theta) &= \alpha\varphi(\theta), \\ X_1(\theta) &= \alpha\left[\varphi(\theta) - \frac{\gamma}{\alpha} \psi_1(\theta)\right], \\ X_2(\theta) &= \alpha\left\{\varphi(\theta) - \frac{\gamma}{\alpha} \psi_1(\theta)\left[1 + \frac{\gamma}{\alpha} v(\theta)\right]\right\}. \end{aligned} \right\} \quad (26)$$

Функции $\eta = X_i(\theta)$, $i = 0, 1, 2$, являются нулевым, первым и вторым приближениями решения (25) по крайней мере на отрезке $[\bar{\theta}, \theta_1]$, где $\bar{\theta}$ - положение перегиба графика функции $\eta(\theta)$, как это показано на рис. 2. После подстановки первого

приближения в условие $\frac{d^2 \eta}{d\theta^2} = 0$ получим $\frac{d\psi_1}{d\theta} = 1$ при

$\theta = \theta_1$. Отсюда находим, что $\bar{\theta} = 2/(1-2\beta)$. Поскольку

$\theta_1 > \bar{\theta}$, то наши дальнейшие рассуждения относятся к случаю, когда $\theta_1 > 2/(1-2\beta)$.

Начальное приближение решения краевой задачи (15) с параметром θ_1 пусть неявно определяется из склейки двух функций: на отрезке $[\bar{\theta}, \theta_1]$ начальное приближение задается функцией $x_1(\theta)$, а на отрезке $[0, \theta_1]$ - кубической параболой $s(\theta)$, где $s(\bar{\theta}) = x_1(\bar{\theta})$, $ds/d\theta(\bar{\theta}) = dx_1/d\theta(\bar{\theta})$, $s(1) = 0$, $ds/d\theta(1) = -\gamma$. Введем равномерную сетку по θ , разбив отрезок $[0, \theta_1]$ на N равных частей: $\theta_i = \theta_1 [1 - (i-1)/N]$, $i = 1, 2, \dots, N+1$. Значениям θ_i будут соответствовать узлы ξ_i сетки (16) как сеточные значения начального приближения решения краевой задачи, которое мы только что построили. При этом α берется равным α_0 согласно формуле (3). В результате нами сформулированы дискретная модель краевой задачи на сетке (16) и начальное приближение Y^0 при заданном параметре θ_1 в стартовой позиции.

Обратим внимание на то, что указанный способ выбора Y^0 позволяет вычислить значение α_0 уже в стартовой позиции, не прибегая к продолжению решения по параметру.

5. Расчет динамической системы

Пусть $\theta(\eta)$ - решение краевой задачи (15), где $\eta = \xi + \alpha(1-\xi)\varphi_1$. Тогда согласно (1), (2) функция $\tau(\eta)$ определяется из решения задачи Коши:

$$\eta_1 \leq \eta \leq 1, \quad \frac{d\tau}{d\eta} = -\frac{1}{\eta} \exp \left[-\frac{\theta(\eta)}{1+\beta\theta(\eta)} \right], \quad (26)$$

$$\tau = 0 \quad \text{при} \quad \eta = 1.$$

Отсюда

$$\tau(\eta) = \int_{\eta}^1 R(x) dx, \quad R(\eta) = \frac{1}{\eta} \exp \left[-\frac{\theta(\eta)}{1 + \beta \theta(\eta)} \right].$$

Для сеточных значений $\tau(\eta)$, отвечающих сетке (16) по ξ , имеем следующие выражения:

$$\tau_{i+1} = \tau_i + \int_{\eta_k}^{\eta_{k+1}} R(\eta) d\eta, \quad k = N+1-i, \quad i = 1, 2, \dots, N.$$

Здесь $\tau_j = \tau(\eta_j)$, $\eta_j = \xi_j + \alpha(1 - \xi_j)\varphi_1$, $\tau_1 = 0$.

Заменой интеграла на квадратурную формулу четвертого порядка точности получим приближенное значение τ_j с тем же порядком погрешности, что и решение краевой задачи:

$$\tau_{i+1} = \tau_i + \frac{\eta_{k+1} - \eta_k}{2} \left[R_k + R_{k+1} + \frac{\eta_{k+1} - \eta_k}{6} (R'_k - R'_{k+1}) \right], \quad (27)$$

$$i = 1, 2, \dots, N,$$

где $R_k = R(\eta_k)$, $R'_k = dR/d\eta(\eta_k)$, $k = N+1-i$. В силу (4)

$$R'_k = -R_k \left[\frac{1}{\eta_k} + \frac{\alpha \theta_k R_k - 1}{\gamma (1 + \beta \theta_k)^2} \right].$$

Кроме того, $\eta_{k+1} - \eta_k = h_k(1 - \alpha\varphi_1)$, $h_k = \xi_{k+1} - \xi_k$.

Отметим, что при $\tau = \tau_{N+1}$ температура θ достигает максимального значения θ_1 .

6. Численные результаты

Предложенный метод численного построения Γ_α был реализован в программе LIMIT, предназначенной для численного исследования модели теплового взрыва. Приведем ряд примеров, иллюстрирующих работу программы.

Результаты численного решения краевой задачи (15)
при $\gamma = 0,01$, $\beta = 0,02$, $\theta_1 = 3$, найденные
по программе LIMIT

η_i	τ_i	θ_i	$x_0(\theta_i)$	$x_2(\theta_i)$
0.41497	0.14015	3.00000	0.41497	0.433521
0.46913	0.13251	2.84754	0.45130	0.470211
0.50750	0.12684	2.70092	0.48828	0.507614
0.54792	0.12051	2.55095	0.52802	0.547898
0.59020	0.11348	2.40052	0.56960	0.590153
0.63402	0.10572	2.24999	0.61254	0.633958
0.67894	0.09720	2.09934	0.65633	0.678846
0.72292	0.08824	1.95322	0.69888	0.722757
0.76352	0.07936	1.81736	0.73772	0.763189
0.80075	0.07062	1.68956	0.77273	0.799999
0.83466	0.06205	1.56782	0.80378	0.832704
0.86528	0.05373	1.45023	0.83061	0.859183
0.89266	0.04570	1.33474	0.85277	0.867011
0.91685	0.03801	1.21897	0.86943	0.714886
0.93787	0.03072	1.09984	0.87900	-15.513900
0.95578	0.02388	0.97299	0.87831	-5.520260
0.97061	0.01756	0.83199	0.86048	0.765786
0.98240	0.01181	0.66716	0.80972	0.787537
0.99121	0.00676	0.46565	0.68823	0.679399
0.99706	0.00262	0.22233	0.41773	0.414869
1.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.000000

Табл. 1 содержит результаты численного решения краевой задачи (15) (т.е. системы (17)) при $\gamma = 0.01$, $\beta = 0.02$ и заданном значении $\theta_1 = 3$. Число разбиений отрезка $[0, \theta_1]$ по θ равно 100. Значения η_i , τ_i и θ_i выдаются на печать с шагом 5 по 1. Значение $\alpha_0 = 2.34614$, вычисленное по формуле (3), близко к $\alpha = 2.34442$, найденному из решения. Таблица дает возможность построить график кривой Γ_α на отрезке $[\eta_1, 1]$ и сопоставить его с графиками четленной кривой (функция $x_0(\theta)$) и вторым приближением кривой I_α (функция $x_2(\theta)$). Табличные значения $x_0(\theta)$ и $x_2(\theta)$ находились по формулам (26).

Результаты численного решения краевой задачи (15)
при $\gamma = 0,01$, $\beta = 0,02$, $\alpha = 10$, найденные
по программе LIMIT

η_1	τ_1	θ_1	$x_0(\theta_1)$	$x_2(\theta_1)$
0.99192	0.00738	0.11079	0.99192	0.990670
0.99232	0.00702	0.11078	0.99184	0.990596
0.99272	0.00665	0.11074	0.99158	0.990340
0.99313	0.00629	0.11068	0.99107	0.989831
0.99353	0.00593	0.11057	0.99022	0.988973
0.99394	0.00556	0.11040	0.98887	0.987632
0.99434	0.00520	0.11015	0.98686	0.985623
0.99475	0.00483	0.10978	0.98392	0.982690
0.99515	0.00447	0.10925	0.97970	0.978473
0.99555	0.00410	0.10850	0.97370	0.972480
0.99596	0.00374	0.10745	0.96522	0.964020
0.99636	0.00338	0.10596	0.95330	0.952119
0.99677	0.00301	0.10389	0.93657	0.935410
0.99717	0.00264	0.10099	0.91307	0.911951
0.99757	0.00228	0.09694	0.88002	0.878942
0.99798	0.00191	0.09128	0.83331	0.832301
0.99838	0.00154	0.08334	0.76684	0.765936
0.99879	0.00116	0.07214	0.67128	0.670498
0.99919	0.00078	0.05624	0.53168	0.531083
0.99960	0.00040	0.03339	0.32299	0.322643
1.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.000000

В табл. 2 представлены аналогичные результаты при заданном значении $\alpha = 10$.

Табл. 3 отражает процесс продолжения решения по параметру, сопровождающегося параметризацией, с $\theta_1 = 10$ в качестве стартового текущего параметра системы (17). Индекс текущего параметра равен 1, если текущим параметром является θ_1 , и 2, если текущим параметром является α . Из табл. 3 следует, что $\alpha_0 = 2.34442$ (по формуле (3) $\alpha_0 = 2.34614$) может быть найдено без продолжения решения (17) путем обращения к программе LIMIT, например, при $\theta_1 = 3$ (см. табл. 1). Этим же способом получены результаты, представленные на рис. 1.

Т а б л и ц а 3

Зависимости η_1 , θ_1 и τ_{N+1} от α при $\gamma = 0,01$ и $\beta = 0,02$, найденные по программе LIMIT

α	η_1	θ_1	τ_{N+1}	Индекс текущего параметра
2.3444	0.005635	10.00000	0.174223	1
2.3444	0.010277	9.00000	0.174698	1
2.3444	0.018967	8.00000	0.174953	1
2.3444	0.035352	7.00000	0.174766	1
2.3444	0.066315	6.00000	0.173575	1
2.3444	0.124434	5.00000	0.170049	1
2.3444	0.230992	4.00000	0.161124	1
2.3444	0.414974	3.00000	0.140154	1
2.3444	0.685308	2.00000	0.096316	1
2.3472	0.820692	1.50000	0.066772	1
2.3722	0.881832	1.20000	0.051234	1
2.5349	0.932105	0.84000	0.036574	1
2.8307	0.953720	0.62400	0.028831	2
3.0082	0.960138	0.54981	0.026163	2
3.2211	0.965479	0.48415	0.023749	2
3.4767	0.970022	0.42541	0.021525	2
3.7834	0.973942	0.37264	0.019455	2
4.1514	0.977349	0.32523	0.017523	2
4.5930	0.980325	0.28273	0.015719	2
5.1229	0.982929	0.24479	0.014039	2
5.7588	0.985211	0.21110	0.012484	2
6.5219	0.987205	0.18134	0.011054	2
6.9798	0.988146	0.16725	0.010354	2
7.5292	0.989096	0.15302	0.009632	2
8.1885	0.990039	0.13886	0.008897	2
8.9797	0.990963	0.12501	0.008162	2
9.9291	0.991857	0.11167	0.007433	2
11.0684	0.992706	0.09900	0.006725	2
12.4356	0.993509	0.08715	0.006043	2
14.0762	0.994252	0.07622	0.005398	2
16.0449	0.994937	0.06625	0.004793	2
18.4073	0.995559	0.05727	0.004235	2
21.2422	0.996124	0.04926	0.003720	2
24.6442	0.996631	0.04218	0.003253	2
28.7265	0.997079	0.03598	0.002834	2

Программа LIMIT применима также и для решения уравнения (4) с начальным условием: $\theta = 0$ при $\eta = \eta_0$, $0 < \eta_0 < 1$. Очевидно, к задаче (4), (5) приводит преобразование: $\eta' = \eta/\eta_0$, $\alpha' = \alpha/\eta_0$, $\gamma' = \gamma/\eta_0$.

7. Завершение построения фазовых траекторий

Обратимся теперь к задаче Коши (12), которую для удобства преобразуем к виду:

$$\left. \begin{aligned} \eta &= \eta_1 \zeta, \\ 0 < \zeta \leq 1, \quad \frac{d\theta}{d\zeta} &= \frac{\alpha}{\gamma} \left[\frac{\varphi(\theta)}{\zeta} - \varphi(\theta_1) \right], \\ \theta &= \theta_1 \text{ при } \zeta = 1. \end{aligned} \right\} \quad (28)$$

При решении (28) возможно появление больших градиентов. По этой причине мы будем использовать неявную схему с адаптацией шага по ζ .

Пусть найдено значение $\theta_1 = \theta(\zeta_1)$, и требуется найти $v = \theta(\zeta_{i+1})$, $\zeta_{i+1} = \zeta_1 - h$, $0 < \zeta_{i+1} < \zeta_1 < 1$. Проинтегрировав по ζ обе части дифференциального уравнения (28) от ζ_{i+1} до ζ_1 , получим после приближенной замены интеграла на формулу Симпсона следующее нелинейное уравнение относительно v :

$$F(v) = v - \theta_1 + \frac{\alpha h}{6\gamma} \left[\frac{\varphi(v)}{\zeta_{i+1}} + 8 \frac{\varphi(\bar{v})}{\zeta_1 + \zeta_{i+1}} + \frac{\varphi(\theta_1)}{\zeta_1} - 6\varphi(\theta_1) \right] = 0, \quad (29)$$

Т а б л и ц а 4

Результаты численного решения задачи Коши (28),
найденные по программе LIMIT0;
N = 247, шаг по i равен 10

η_1	τ_1	θ_1	$x_0(\theta_1)$	$x_2(\theta_1)$
0.41497	0.14015	3.00000	0.41497	0.433521
0.39423	0.14325	2.91651	0.43460	0.453330
0.38152	0.14553	2.68563	0.49225	0.511630
0.37255	0.14770	2.30330	0.59721	0.618298
0.36392	0.15133	1.53887	0.81072	0.839891
0.35945	0.15508	0.92504	0.87449	0.108171
0.35587	0.16020	0.47750	0.69758	0.688305
0.35165	0.16881	0.23850	0.44099	0.437853
0.34582	0.18250	0.18122	0.35467	0.352456
0.32720	0.22915	0.16561	0.32919	0.327199
0.30645	0.28504	0.15318	0.30826	0.306450
0.28570	0.34559	0.14108	0.28735	0.285701
0.26495	0.41149	0.12929	0.26644	0.264952
0.24420	0.48359	0.11779	0.24554	0.244203
0.22345	0.56299	0.10657	0.22465	0.223455
0.20271	0.65111	0.09562	0.20376	0.202706
0.18196	0.74980	0.08491	0.18289	0.181957
0.16121	0.86164	0.07444	0.16201	0.161208
0.14046	0.99023	0.06419	0.14115	0.140460
0.11971	1.14093	0.05416	0.12028	0.119711
0.09896	1.32219	0.04433	0.09943	0.098962
0.07821	1.54847	0.03470	0.07857	0.078213
0.05746	1.84782	0.02525	0.05772	0.057465
0.03672	2.28711	0.01598	0.03688	0.036716
0.01597	3.11311	0.00689	0.01604	0.015967

где

$$\bar{v} = \frac{v + \theta_1}{2} + \frac{\alpha h}{8\gamma} \left[\frac{\varphi(v)}{\zeta_{i+1}} - \frac{\varphi(\theta_1)}{\zeta_i} \right]$$

Для решения уравнения (29) воспользуемся методом Ньютона-Кан -
торовича, в котором начальное приближение v_0 задается в ви-
де:

$$v_0 = \theta_1 - h\theta_1^i + \frac{h^2}{2}\theta_1^{ii}.$$

Т а б л и ц а 5

Результаты численного решения задачи Коши (28),
найденные по программе LIMIT0;
N = 251, шаг по i равен 10

η_i	τ_i	θ_i	$x_0(\theta_i)$	$x_2(\theta_i)$
0.99191	0.00738	0.11078	0.99191	0.990669
0.96154	0.03528	0.10714	0.96274	0.961538
0.91194	0.08302	0.10099	0.91307	0.911942
0.86235	0.13373	0.09492	0.86340	0.862347
0.81275	0.18777	0.08893	0.81373	0.812751
0.76316	0.24556	0.08301	0.76406	0.763156
0.71356	0.30760	0.07716	0.71440	0.713560
0.66396	0.37449	0.07138	0.66473	0.663964
0.61437	0.44699	0.06568	0.61507	0.614368
0.56477	0.52605	0.06004	0.56541	0.564773
0.51518	0.61286	0.05446	0.51575	0.515177
0.46558	0.70900	0.04895	0.46610	0.465581
0.41599	0.81656	0.04349	0.41644	0.415986
0.36639	0.93846	0.03810	0.36679	0.366390
0.31679	1.07886	0.03277	0.31713	0.316794
0.26720	1.24410	0.02749	0.26748	0.267199
0.21760	1.44443	0.02227	0.21783	0.217603
0.16801	1.69814	0.01711	0.16818	0.168007
0.11841	2.04312	0.01200	0.11853	0.118412
0.06882	2.58144	0.00694	0.06889	0.068816
0.04008	3.11993	0.00403	0.04012	0.040076
0.02630	3.54001	0.00264	0.02633	0.026300
0.01764	3.93868	0.00177	0.01766	0.017643
0.01165	4.35335	0.00117	0.01166	0.011650
0.00755	4.78717	0.00076	0.00756	0.007549
0.00502	5.19523	0.00050	0.00502	0.005020

Здесь согласно (28)

$$\theta'_i = \frac{\alpha}{\gamma} \left[\frac{\varphi_i - \varphi_1}{\zeta_i} \right]; \quad \theta''_i = \frac{\alpha}{\gamma \zeta_i} \left[\frac{\alpha \varphi'_i}{\gamma} \left[\frac{\varphi_i - \varphi_1}{\zeta_i} \right] - \frac{\varphi_i}{\zeta_i} \right],$$

$$\varphi_i = \varphi(\theta_i), \quad \varphi'_i = \frac{d\varphi}{d\theta}(\theta_i).$$

Величина шага h всякий раз подчиняется условию, ограничивающему число итераций, за которое модуль невязки приближения ста-

новится меньше заданного ϵ_0 . Иными словами, здесь применяется правило адаптации шага h , введенное при продолжении решения по параметру системы (17), включая задание достаточно малого эталонного шага h_0 [4].

Отмеченная неявная схема, оформленная в виде программы LIMIT ϕ , позволяет достаточно эффективно найти решение задачи Коши (28). Кроме того, в программе LIMIT ϕ по найденным сеточным значениям θ_1 из (29) строится решение задачи Коши:

$$\left. \begin{aligned} 0 < \eta \leq \eta_1, \quad \frac{d\tau}{d\eta} = -\frac{1}{\eta} \exp \left\{ -\frac{\theta(\eta)}{1 + \beta\theta(\eta)} \right\}, \\ \tau = \tau(\eta_1) \quad \text{при} \quad \eta = \eta_1, \end{aligned} \right\}, \quad (30)$$

где $\tau(\eta_1) = \tau_{N+1}$ определяется в программе LIMIT.

Табл. 4,5 являются продолжением табл. 1,2. Число разбиений N отрезка $[0, \eta_1]$ формировалось в результате адаптации шага интегрирования задачи Коши (30) и равно 247 (табл.4) и 251 (табл.5).

З а к л ю ч е н и е

Использование программ LIMIT и LIMIT ϕ позволяет, в частности, построить полностью графики траекторий Γ_α , отвечающие различным значениям либо α , либо θ_1 , как это представлено на рис.3. Приведенные здесь траектории отмечены характерной для описываемого явления особенностью: при $\theta_1 > 1$ траектория Γ_α в некоторой своей части близкая к: ветви кривой I_α (неустойчивое интегральное многообразие), в малой окрестности точки (η_1, θ_1) "срывается" и становится близкой к другой ветви I_α (устойчивое интегральное многообразие). Поскольку и I_α , и L_α при малых γ близки на рассматриваемом участке, то качественно эта особенность учтена на рис.2 (см также табл. 3,2 и 4,5, содержащие координаты Γ_α и второго приближения I_α). На основе программ LIMIT и

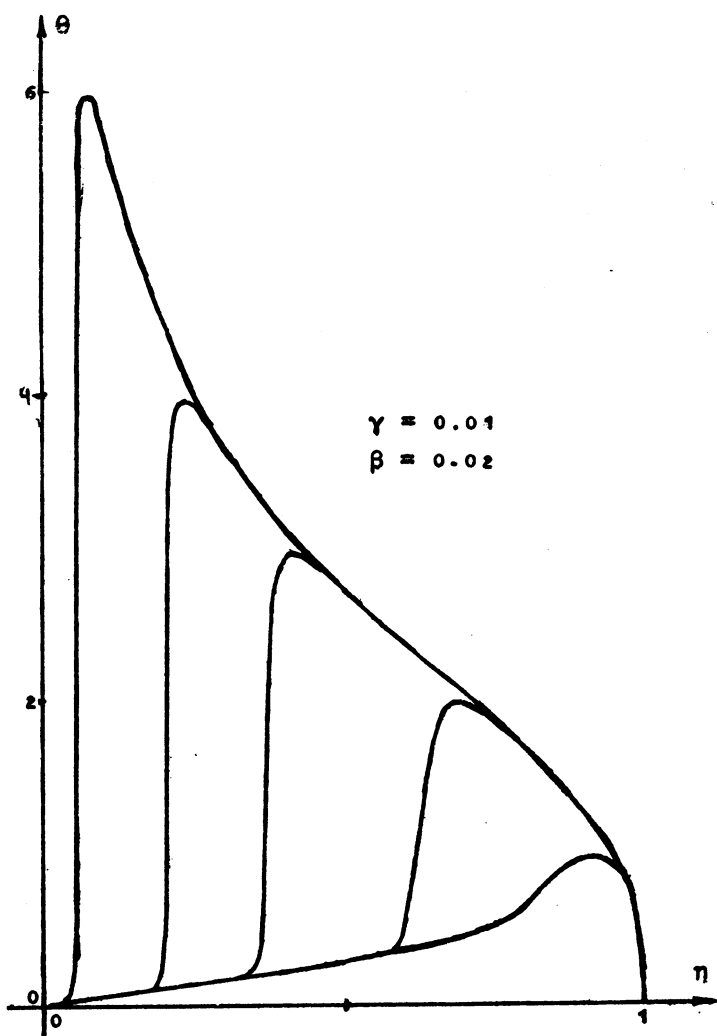


Рис. 3. Фазовые траектории Γ_α , построенные по программам
LIMIT и LIMITØ

LIMIT) могут быть найдены и другие характеристики модели в зависимости от параметров α, β и γ , представляющие интерес для их физической интерпретации (см. [1,2]).

Л и т е р а т у р а

1. БАБУШОК В.И., ГОЛЬДШТЕЙН В.М. Предел самовоспламенения: переходные режимы реакции. - Новосибирск, 1985. - 50 с. - (Препринт/СО АН СССР. Институт математики; № 40).
2. ГОЛЬДШТЕЙН В.М., СОБОЛЕВ В.А. Качественный анализ сингулярно-возмущенных систем. - Новосибирск: Институт математики СО АН СССР, 1988. - 154 с.
3. ФАДЕЕВ С.И. О решении системы трансцендентных уравнений с параметром методом Ньютона. - Новосибирск, 1984. - 25 с. - (Препринт/СО АН СССР. Институт математики; № 72).
4. ФАДЕЕВ С.И. Программа численного решения нелинейных задач для систем обыкновенных дифференциальных уравнений с параметром. - Новосибирск, 1988. - 142 с. - (Препринт/СО АН СССР. Институт математики, № 31,32,33).
5. ГОДУНОВ С.К. Решение систем линейных уравнений. - Новосибирск: Наука, Сиб.отд-ние, 1980. - 177 с.

Поступила в ред.-изд.отд.

14 июня 1990 года