第11卷 第3期
1991年7月

爆 炸 与 冲 击
EXPLOSION AND SHOCK WAVES

Vol. 11, No. 3
Jul., 1991

热爆炸临界状态的变分特性

秦承森

(北京应用物理与计算数学研究所)

摘要 本文利用热爆炸的临界状态是其定态方程分岔点的定义，给出了热爆炸临界参数的一个变分原理。泛函 $J(\varphi,\psi)$ 的极大值恰好是点火临界参数 λ_i；其极小值则是熄火临界参数 λ_e；其鞍点值是转点参数 λ_{tr}。

关键词 热爆炸 临界参数 变分原理

一、引 言

研究自热反应系统的热爆炸临界特性，给出临界参数，是热爆炸理论研究中的一个十分重要的研究课题。

热爆炸理论的基本方程是带反应能源项的反应扩散方程，化学反应速率一般采用 Arrhenius 反应律。由于这个方程能源项的强非线性性质，即使忽略反应物的消耗，求方程精确解的困难也很大。目前，除无限大平板、无限长圆柱这些特殊情况外[1,2]，其他情况下方程的精确解析解尚未给出。因此，一般是在反应项的各种近似下求出方程的解，找出临界参数[3~5]。但是，对于非一维形状的化学反应系统和较复杂的边界条件，采用求方程近似解的方法给出临界参数，困难也很大。而对于仅需求出临界参数的这类问题，并不要求给出反应扩散方程的解。因此，寻求不解方程而直接求临界参数的方法是必要的。目前，使用 Liapounov 稳定性理论[6]，抛物方程解的比较法[7~9]，已经给出了一些研究结果。本文从热爆炸的临界状态是定态方程解的分岔点出发，给出了一个变分原理，使用这个原理，采用变分的方法，不求解方程就可以给出反应扩散系统的临界参数。

二、热爆炸方程和临界参数

在无反应物消耗的情况下，对于化学反应系统 Ω，热爆炸方程的无量纲形式为[9]

$$\begin{cases} \dfrac{\partial\theta}{\partial\tau}=\nabla^2\theta+\lambda f(\theta) & (\xi\in\Omega,\tau>0) \\ \dfrac{\partial\theta}{\partial n}+\beta\theta=0 & (\xi\in\partial\Omega,\tau>0) \\ \theta(\xi,0)=\theta_0(\xi) & (\xi\in\Omega) \end{cases} \tag{2-1}$$

其中，$f(\theta)>0, f'(\theta)>0, \beta\geqslant 0$。

我们定义临界状态为定态方程解 $\theta(\xi;\lambda)$ 的分岔点 $(\bar\theta,\bar\lambda)$。因此，$\bar\theta,\bar\lambda$ 首先满足定态方

中国工程物理研究院科学基金资助项目。
1990年3月6日收到原稿。

程，即有

$$\begin{cases} \nabla^2\bar{\theta} + \bar{\lambda} f(\bar{\theta}) = 0 & (\xi \in \Omega) \\ \dfrac{\partial \bar{\theta}}{\partial n} + \beta\bar{\theta} = 0 & (\xi \in \partial\Omega) \end{cases} \tag{2-2}$$

按分岔理论[10]，分岔点参数 $\bar{\lambda}$ 是方程(2-2)的线性化方程

$$\begin{cases} \nabla^2 u + \lambda f'(\bar{\theta}) u = 0 & (\xi \in \Omega) \\ \dfrac{\partial u}{\partial n} + \beta u = 0 & (\xi \in \partial\Omega) \end{cases} \tag{2-3}$$

的最小特征值 $\bar{\lambda}$ 。

在文献[12]中，已经证明系统的转点条件为

$$T \equiv \int_\Omega u^3 f''(\bar{\theta}) = 0 \tag{2-4}$$

其中 u 为(2-3)式的对应于最小特征值 $\bar{\lambda}$ 的特征函数。点火和熄火时分别为

$$T > 0 \qquad 点火 \tag{2-5}$$

$$T < 0 \qquad 熄火 \tag{2-6}$$

当 $\bar{\theta}$ 是点火温度 θ_i 时，$\bar{\lambda}=\lambda_i$ 为点火临界参数。当 $\lambda<\lambda_i$ 时，定态方程在低温段有稳定的低温解；当 $\lambda>\lambda_i$ 时，系统无低温解，原处于低温状态的系统将跃入高温态。当 $\bar{\theta}$ 是熄火临界温度时，$\bar{\lambda}$ 为熄火临界参数 λ_e，当 $\lambda<\lambda_e$ 时，定态方程仅有稳定的低温解，原处于高温状态的系统将跃入低温态。对于参数满足一定条件的系统，既不可能产生温度突跃而爆炸，也不可能产生温度陡降而熄火，即不存在爆炸临界现象。这种使爆炸临界现象消失的参数阈值称为转点参数。

三、临界状态的变化特性

定义泛函 $J[\varphi,\psi]$ 为

$$J[\varphi,\psi] \equiv - I_1/I_2 \tag{3-1}$$

其中，$I_1 \equiv \int_\Omega \psi \nabla^2 \varphi dV$，$I_2 \equiv \int_\Omega \psi f(\varphi) dV$，可取函数 $\varphi(\xi)$，$\psi(\xi)$ 为在系统边界 $\partial\Omega$ 上满足条件

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \varphi}{\partial n} + \beta\varphi = 0 & (\xi \in \partial\Omega) \\ \dfrac{\partial \psi}{\partial n} + \beta\psi = 0 & (\xi \in \partial\Omega) \end{cases} \tag{3-2}$$

的任意函数。显然，若 $\varphi=\theta$，取为定态方程的解，ψ 为任意可取函数，则 $J[\theta,\psi]=\lambda$，可见泛函 J 的取值范围复盖了所有可能的 λ 值。

应用上节(2-2)～(2-6)各式，我们将证明临界参数 $\bar{\lambda}$ 是泛函 J 的极值。

泛函 $J[\varphi,\psi]$ 的一阶变分，二阶变分为（见附录）

$$\delta J = -\frac{1}{I_2}\int_\Omega \{[\nabla^2\varphi + Jf(\varphi)]\delta\psi + [\nabla^2\psi + Jf'(\varphi)\psi]\delta\varphi\} dV \tag{3-3}$$

$$\delta^2 J = -2\delta J \cdot \frac{\delta I_2}{I_2} - \frac{1}{I_2}\int_\Omega \{2[\nabla^2\delta\varphi + Jf'(\varphi)\delta\varphi]\delta\psi + J\psi f''(\varphi)(\delta\varphi)^2\} dV \tag{3-4}$$

由于函数 φ,ψ 的任意性，我们得到泛函 J 取驻点值的条件，即 $\delta J=0$ 的条件为

$$\begin{cases} \nabla^2\bar{\varphi} + \bar{J}f(\bar{\varphi}) = 0 & (\xi \in \Omega) \\ \dfrac{\partial\bar{\varphi}}{\partial u} + \beta\bar{\varphi} = 0 & (\xi \in \partial\Omega) \end{cases} \tag{3-5}$$

$$\begin{cases} \nabla^2\bar{\psi} + \bar{J}f'(\bar{\varphi})\bar{\psi} = 0 & (\xi \in \Omega) \\ \dfrac{\partial\bar{\psi}}{\partial n} + \beta\bar{\psi} = 0 & (\xi \in \partial\Omega) \end{cases} \tag{3-6}$$

其中上标“—”表示函数 φ,ψ 及泛函 J 的驻点函数和驻点值。(3-5)、(3-6)式就是(2-2)、(2-3)式，即 $\bar{\varphi}\equiv\bar{\theta},\bar{\psi}\equiv u,\bar{J}\equiv\bar{\lambda}$。这表明，泛函 J 的驻点值为爆炸临界参数 $\bar{\lambda}$，驻点函数 $\bar{\varphi}$ 为临界温度 $\bar{\theta}$，$\bar{\psi}$ 是对应于 $\bar{\lambda}$ 的特征函数 u。

将(3-5)式取变分，则有

$$\begin{cases} \nabla^2\delta\bar{\varphi} + \bar{J}f'(\bar{\varphi})\delta\bar{\varphi} = 0 & (\xi \in \Omega) \\ \dfrac{\partial\delta\bar{\varphi}}{\partial u} + \beta\delta\bar{\varphi} = 0 & (\xi \in \partial\Omega) \end{cases} \tag{3-7}$$

将此结果用于(3-4)式中，则在 $\delta J=0$ 的条件下，泛函 J 的二阶变分公式为

$$\delta^2 J = -\bar{J}\int_\Omega \bar{\psi}f''(\bar{\varphi})(\delta\bar{\varphi})^2 dV/I_2 \tag{3-8}$$

注意到(3-7)与(3-6)式具有完全相同的形式，故有

$$\delta\bar{\varphi} = \varepsilon\bar{\psi} \tag{3-9}$$

其中 ε 为小量常数。

由于 $\delta J=0$ 时，$\bar{\varphi}=\bar{\theta},\bar{\psi}=u,\bar{J}=\bar{\lambda}$，故(3-9)式可写为

$$\delta\bar{\theta} = \varepsilon u \tag{3-10}$$

此式表明临界温度的变分与 $\bar{\lambda}$ 所对应的特征函数成正比。在略去高阶小量的条件下，可以认为临界温度的变分就等于温度在临界温度附近的一阶扰动量，因此(3-10)式表明 εu 是温度 θ 在临界温度附近做扰动展开时的一阶扰动量。这一结论在一些使用摄动方法求热爆炸临界特性参数的文献中已经使用[11]。

使用符号 $\bar{\theta},u$ 及(3-10)式，则(3-8)式可写为

$$\delta^2 J = -\varepsilon^2\bar{\lambda}\int_\Omega f''(\bar{\theta})u^3 dV/I_2 \tag{3-11}$$

由于 $\bar{\lambda}>0,u>0,I_2>0$，可知 $\delta^2 J$ 与 $\int_\Omega f''(\bar{\theta})u^3 dV$ 的符号相反。根据上节所述点火临界参数 λ_i，熄火临界参数 λ_e 及转点特性(2-2)～(2-6)式，我们有如下结论：

(i)点火临界参数 λ_i 是泛函 J 的极大值，点火临界温度 θ_i 为其驻点的函数，即点火状态满足条件

$$\begin{cases} \delta J = 0 \\ \delta^2 J < 0 \end{cases} \tag{3-12}$$

其中 $\delta^2 J<0$ 的条件等价于

$$\int_{\omega} u^3 f''(\bar{\theta}) dV > 0 \tag{3-13}$$

(ii)熄火临界参数 λ_e 是泛函 J 的极小值，熄火临界温度 θ_e 为其驻点函数，即熄火状态满足条件

$$\begin{cases} \delta J = 0 \\ \delta^2 J > 0 \end{cases} \tag{3-14}$$

或
$$\int_{\omega} u^3 f''(\bar{\theta}) dV < 0$$

(iii)临界现象消失的条件，即转点条件为

$$\begin{cases} \delta J = 0 \\ \delta^2 J = 0 \end{cases} \tag{3-15}$$

或
$$\int_{\omega} u^3 f''(\bar{\theta}) dV = 0 \tag{3-16}$$

显然，J 的鞍点值就是参数 λ 的转点值 λ_{tr}。

从上述结论立即可以得到如下结果：

对于 $f''(\theta)>0$的系统仅有点火临界现象出现；而对于 $f''(\theta)<0$的系统仅有熄火现象出现。对于 $f(\theta)=a+b\theta$ （a 和 b 为常数）的系统，由于 $f''(\theta)=0$，不可能出现爆炸临界现象，即爆炸临界现象仅出现在反应速率函数与温度呈非线性关系的反应系统中。这个结论与分岔现象是非线性项产生的分岔理论结果相一致[13]。

四、应用与举例

使用上述变分原理，采用变分的直接方法，可以不求解方程就给出 $\bar{\lambda}$ 的近似值。我们首先估计一下使用 $\delta J = 0$ 的变分原理求得的临界参数 $\bar{\lambda}$ 的误差。

设所选的试验函数 φ,ψ 与 $\bar{\theta},u$ 的偏差分别 $\varepsilon_1\theta_1,\varepsilon_2 u_1$，即

$$\varphi = \bar{\theta} + \varepsilon_1\theta_1 \tag{4-1}$$

$$\psi = u + \varepsilon_2 u_1 \tag{4-2}$$

其中 θ_1,u_1为函数，$\varepsilon_1,\varepsilon_2$为小量常数，则由

$$J[\varphi,\psi] - \bar{J}[\bar{\theta},u] = \delta J + \frac{1}{2}\delta^2 J + \cdots \tag{4-3}$$

及变分的定义
$$\delta J = \varepsilon_1\left(\frac{\partial J}{\partial \varepsilon_1}\right)_0 + \varepsilon_2\left(\frac{\partial J}{\partial \varepsilon_2}\right)_0$$

$$\delta^2 J = \varepsilon_1^2\left(\frac{\partial^2 J}{\partial \varepsilon_1^2}\right)_0 + 2\varepsilon_1\varepsilon_2\left(\frac{\partial^2 J}{\partial \varepsilon_1 \partial \varepsilon_2}\right)_0 + \varepsilon_2^2\left(\frac{\partial^2 J}{\partial \varepsilon_2^2}\right)_0$$

其中下标“0”表示取 $\varepsilon_1 = 0,\varepsilon_2 = 0$ 的值。

使用 $\delta J = 0$ 的条件，求出 $\bar{\lambda}$(即 $\bar{J}$) 的近似值 $J[\varphi,\psi]$，其误差为

$$\triangle\lambda = J[\varphi,\psi] - \bar{J}[\bar{\theta},u] = \frac{\varepsilon_1^2}{2}\left(\frac{\partial^2 J}{\partial \varepsilon_1^2}\right)_0 + \varepsilon_1\varepsilon_2\left(\frac{\partial^2 J}{\partial \varepsilon_1 \partial \varepsilon_2}\right)_0 + \frac{\varepsilon_2^2}{2}\left(\frac{\partial^2 J}{\partial \varepsilon_2^2}\right)_0 \tag{4-4}$$

这表明，使用变分原理 $\delta J=0$求 $\bar{\lambda}$ 时，如果临界温度近似值的误差是 ε_1量级小量，则所

求的临界参数 λ 的近似值的误差是更高阶小量。同理，对于转点参数，由于 $\delta J=0$，$\delta^2 J=0$，则所求得的值将具有更高的准确度。

用上述结果所做的近似计算，将另文叙述。在此，我们仅举一例说明变分原理的应用。

通常采用常规的变分方法是选取带有待定常数的试验函数 φ,ψ，代入泛函中，令泛函对待定常数的导数为零，确定待定常数和泛函驻点值。在此，我们给出一种特殊的求 $\bar{J}$ 的方法。注意到在 $\delta J=0$ 的条件下，(3-5)式和(3-6)式成立。将 $\bar{\psi}$ 乘以式(3-5)对空间积分，将 $\bar{\varphi}$ 乘以式(3-6)再对空间积分，而后两式相减，使用格林公式和边界条件，我们得出

$$\int_{\Omega}\bar{\psi}[f'(\bar{\varphi})\bar{\varphi}-f(\bar{\varphi})]dV=0 \tag{4-5}$$

将此式作为约束条件加于泛函 $\bar{J}[\bar{\varphi},\bar{\psi}]$，则有在 $\delta J=0$ 条件下，泛函 J 的表达式

$$\bar{J}=-\int_{\Omega}\bar{\psi}\nabla^2\bar{\varphi}\,dV\Big/\int_{\Omega}\bar{\psi}f'(\bar{\varphi})\bar{\varphi}dV \tag{4-6}$$

这就是临界参数 λ 的近似表达式。只要我们选取的试验函数 $\bar{\varphi},\bar{\psi}$ 满足条件(3-2)式和(4-5)式。

例如，我们选 $\bar{\psi}$ 为下面特征值问题对应于最小特征值 μ_1 的特征函数 Φ_1

$$\begin{cases}\nabla^2\Phi+\mu\Phi=0\\ \dfrac{\partial\Phi}{\partial n}+\beta\Phi=0\end{cases} \tag{4-7}$$

注意到(4-7)式的解可以相差一个常数乘子，即 $\theta_{cm}\Phi_1$（θ_{cm} 是常数）亦为(4-7)式的解。则我们规定 Φ_1 为其最大值等于1的属于 μ_1 的特征函数。同时，我们选试验函数 $\bar{\varphi}=\theta_{cm}\Phi_1$，其中 θ_{cm} 为常数且等于临界状态温度最大值（待求），代入(4-6)式有

$$\bar{\lambda}=\bar{J}=\mu_1\int_{\Omega}\Phi_1^2dV\Big/\int_{\Omega}f'(\theta_{cm}\Phi_1)\Phi_1^2dV \tag{4-8}$$

将 $f'(\theta_{cm}\Phi_1)$ 在温度最大点处展开，取第一项，则

$$\bar{\lambda}\approx\frac{\mu_1}{f'(\theta_{cm})} \tag{4-9}$$

如果我们已经求得了临界温度的极大值 θ_{cm}，则由(4-9)式，就可以给出临界参数 $\bar{\lambda}$。一般情况下，θ_{cm} 并不容易求得，但是在均温近似下的临界温度 θ_m 较容易求得，我们用 θ_m 近似代替 θ_{cm}，则有近似式

$$\bar{\lambda}\approx\frac{\mu_1}{f'(\theta_m)} \tag{4-10}$$

这样，我们只要在均温近似下求得临界温度 θ_m，使用(4-10)式就可以给出非均温系统的临界参数 $\bar{\lambda}$。

对于 $f(\theta)$ 取 Arrhenius 反应律情况，(4-10)式恰好是文献[9]使用比较法得到的公式。使用该公式计算出的 $\bar{\lambda}$ 值与较精确的数值结果相比，其误差一般在3%之内，最大误差不超过10%。

附录：δJ 和 $\delta^2 J$ 的推导

①δJ

$$\delta J = -\frac{\delta I_1}{I_2} + \frac{I_1}{I_2^2}\delta I_2$$

$$= -\frac{1}{I_2}(\delta I_1 + J\delta I_2)$$

$$= -\frac{1}{I_2}\int_\Omega \{[\nabla^2\varphi + Jf(\varphi)]\delta\phi + [\phi\nabla^2\delta\varphi + Jf'(\varphi)\phi\,\delta\varphi]\}.dV$$

由格林公式 $\displaystyle\int_\Omega \phi\nabla^2\delta\varphi dV = \int_\Omega \nabla^2\phi.\,\delta\varphi dV + \int_{\partial\Omega}(\phi\frac{\partial\delta\varphi}{\partial n} - \delta\varphi\frac{\partial\phi}{\partial n})ds$

使用(3-2)式有 $\displaystyle\frac{\partial\delta\varphi}{\partial n} + \beta\delta\varphi = 0$

故 $\displaystyle\int_\Omega \psi\nabla^2\delta\varphi dV = \int_\Omega \nabla^2\phi\,\delta\varphi dV$

代入 δJ 表达式，有

$$\delta J = -\frac{1}{I_2}\int_\Omega \{[\nabla^2\varphi + Jf(\varphi)]\delta\phi + [\nabla^2\phi + Jf'(\varphi)\phi]\delta\varphi\}dV$$

②$\delta^2 J$

$$\delta^2 J = -\delta[\frac{1}{I_2}(\delta I_1 + J\delta I_2)]$$

$$= \frac{\delta I_2}{I_2^2}(\delta I_1 + J\delta I_2) - (\delta^2 I_1 + J\delta^2 I_2 + \delta J\cdot\delta I_2)/I_2$$

$$= -(2\delta J\cdot\delta I_2 + \delta^2 I_1 + J\delta^2 I_2)/I_2$$

$$= -\frac{2\delta J\delta I_2}{I_2} - \frac{1}{I_2}\int_\Omega \{2[\nabla^2\delta\varphi + Jf'(\varphi)\delta\varphi]\delta\phi + J\phi f''(\varphi)(\delta\varphi)^2\}dV$$

参 考 文 献

[1] Frank—Kamenetsky, D. A., Duffusion and Heat Transfer in Chemical Kinetics, Plenum Press, New York, (1969).

[2] Chamber, P. L., *J. Chem. Phys.*, **20**(1952), 1795—1797.

[3] Takeno, T., *Combust. Flame*, **29** (1977), 209.

[4] Bazley, N. W., Wake, G. C., *Combust. Flame*, **33**(1978), 161.

[5] Gill, W., Donaldson, A. B., Shoumun, A. R., *Combust. Flame*, **36** (1979), 217.

[6] Gray, B. F., Sherrington, M. E., *Combust. Flame*, **19**(1972), 435.

[7] Bebernes, J. W., Kassoy, D. R., SIAM *J. Appl. Math.*, **40**(3) (1981), 476.

[8] Lacey, A. A., SIAM *J. Appl. Math.*, **43**(1983), 1350.

[9] 秦承森，爆炸与冲击 **6**(2) (1986), 108.

[10] Sattinger, D. H., Topic in Stability and Bifurcation theory, Springer—Verlag, Berlin, (1973).

[11] Boddington, T., Feng, C. G., Grey. P., *Proc. Roy. Soc. Lond.*, A 385 (1983), 289.

[12] Kordylewski, W., *Combust. Flame*, **34**(1979), 109.

[13] Chow, S. N., Hale, J. K., Methods of Bifurcation theory, Springer—Verlag, Berlin, (1982).

VARIATIONAL PROPERTY FOR CRITICAL STATE OF THERMAL EXPLOSION

Qin Chengsen

(Beijing Institute of Applied Physics and Computational Mathematics)

ABSTRACT A variational principle for the critical parameter $\bar{\lambda}$ of thermal explosion is given by means of the definition of the critical state for thermal explosion being the point of bifurcation of the steady equation for thermal explosion. The maximum of the functional $J[\varphi,\psi]$ is just the ignition parameter λ_i, the minimum is the extinction parameter λ_e and the saddle point is just the transition parameter λ_{tr}.

KEY WORDS thermal explosion, critical parameter, variational principle.