

На правах рукописи

Якупов Эдуард Олегович

**Исследование механизмов формирования
пространственно-временных структур,
возникающих на движущемся фронте реакции**

Специальность 1.3.3. —
«Теоретическая физика»

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Москва — 2025

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки «Физическом институте им. П. Н. Лебедева Российской академии наук».

Научный руководитель: доктор физико-математических наук
Полежаев Андрей Александрович

Официальные оппоненты: **Киверин Алексей Дмитриевич**,
доктор физико-математических наук,
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Объединенный институт высоких температур Российской академии наук»,
заведующий лабораторией

Дмитричев Алексей Сергеевич,
кандидат физико-математических наук,
Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики им. А.В. Гапонова-Грехова Российской академии наук»,
старший научный сотрудник

Ведущая организация: Механико-математический факультет Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова»

Защита состоится 19 мая 2025 г. в 12:00 на заседании диссертационного совета 24.1.262.04 при Федеральном государственном бюджетном учреждении науки «Физическом институте им. П. Н. Лебедева Российской академии наук» по адресу: 119991, г. Москва, Ленинский проспект, д. 53.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФИАН, а также на сайте института <https://www.lebedev.ru>.

Отзывы на автореферат в двух экземплярах, заверенные печатью учреждения, просьба направлять по адресу: 119991, г. Москва, Ленинский проспект, д. 53, ученому секретарю диссертационного совета 24.1.262.04.

Автореферат разослан _____ 2025 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета
24.1.262.04,
кандидат физ.-мат. наук

Чернышов Дмитрий Олегович

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследования. Явления пространственно-временной самоорганизации имеют место в системах различной природы: физической, химической, биологической. Изучение таких явлений часто представляет собой достаточно сложную научную проблему. В настоящей работе рассматривается специфический тип самоорганизации, а именно, возникновение структур на движущемся фронте. Такие явления могут возникать, в том числе, в химических системах, в которых реакция происходит не однородно в пространстве, а в виде распространяющихся волн. Особое внимание уделено системам горения, так как они демонстрируют экспериментально наблюдаемые структуры на движущихся фронтах, которые представляют для нас наибольший интерес. В данной работе в основном рассматриваются системы, в которых структуры на фронте формируются за счет диффузионно-тепловой неустойчивости, когда фронт пламени распространяется в предварительно смешанной газовой смеси.

Сложные пространственно-временные структуры, наблюдаемые в реальных системах, по всей видимости порождены их внутренней специфической иерархической природой. При построении моделей, описывающих такие явления, необходимо учитывать эту иерархию, а именно, рассматривать такие системы как состоящие из взаимосвязанных блоков или подсистем. Этот подход был успешно реализован для описания механизмов формирования сегментированных волн и осциллонов (локальных осциллирующих структур), наблюдаемых в реакции Белоусова-Жаботинского^{1,2,3}, протекающей в водо-масляной микроэмульсии. Пространственно-временные структуры на фронте волны реакции относятся к явлениям того же типа. Моделирование таких сложных процессов представляет собой актуальную задачу, решение которой может дать ключ не только к объяснению лежащих в основе механизмов, но и предложить пути для их регуляции.

Целью диссертации является разработка подходов к объяснению механизмов формирования сложных пространственных структур, в частности, возникающих на фронте реакции, а также применение этого подхода для исследования диффузионно-тепловых неустойчивостей в системах горения.

Для достижения цели были поставлены следующие **задачи**:

1. Разработать комплексный подход, позволяющий объяснить механизм формирования диссипативных и автоволновых структур на движущемся фронте реакции, отражающий иерархическую структуру данного явления.

¹ Zaikin A., Zhabotinsky A. Concentration wave propagation in two-dimensional liquid-phase self-oscillating system // Nature. 1970. Т. 225, № 5232. С. 535.

² Zhabotinsky A. M. A history of chemical oscillations and waves // Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science. 1991. Т. 1, № 4. С. 379—386.

³ Yanag V. K., Epstein I. R. Segmented spiral waves in a reaction-diffusion system // Proceedings of the National Academy of Sciences. 2003. Т. 100, № 25. С. 14635—14638.

2. На примере иерархических систем, блоками которых являются простые базовые модели типа “реакция-диффузия”, в численных экспериментах продемонстрировать, что они способны описать возникновение пространственно-временных структур на движущемся фронте, в частности, спиральных и кольцевых волн, а также неоднородных диссипативных структур.
3. Исследовать зависимость формирования структур на фронте реакции от его характеристик — скорости движения и толщины.
4. На примере реакции горения водород-воздушной смеси продемонстрировать, что разработанный комплексный подход способен объяснить экспериментально наблюдаемые волновые структуры на фронте сферически расширяющегося пламени. А именно, в результате редукции модели с детальным механизмом горения водород-воздушной смеси, выделить блок, ответственный за образование структур.

Научная новизна: В диссертационной работе впервые сформулирован единый подход к объяснению широкого класса сложных пространственно-временных структур, возникающих в распределённых динамических системах. В основе этого подхода лежит учёт иерархической природы механизмов, ответственных за формирование таких структур. Соответствующие модели имеют блочную организацию, отражающую эту иерархичность. В рамках разработанного подхода можно описать широкий круг наблюдаемых явлений, но в данной работе основной акцент сделан на объяснении пространственно-временных структур, возникающих на движущемся фронте химической реакции. При этом не только удалось на примере относительно простых моделей, содержащих блоки, соответствующие известным классическим базовым моделям, впервые описать возникновение автоволновых и стационарных (Тьюринговских) структур на распространяющемся фронте в зависимости от его характеристик, но и успешно применить подход для объяснения механизма формирования спиральных волн на фронте горения водород-воздушных смесей, наблюдаемых в экспериментах при высоких давлениях. Впервые редукцией детальной модели горения водорода удалось выделить блок, ответственный за возникновение автоволн в низкотемпературном слое фронта горения, и сформулировать условия их возникновения в зависимости от параметров, в частности, от величины давления.

Теоретическая и практическая значимость работы заключается в разработке общего подхода к моделированию сложных пространственно-временных явлений, что существенно расширяет возможности теоретического описания процессов структурообразования в химических и физических системах, а также открывают новые возможности для управления процессами горения и могут быть использованы при разработке эффективных технологий сжигания топлива в энергетических установках.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Новый подход к объяснению формирования сложных пространственно-временных структур, основанный на концепции блочных иерархических моделей.
2. Анализ автоволновых и тьюринговских структур на фронте реакции с формулировкой критериев их существования, учитывающих параметры фронта, и демонстрацией этих результатов на примере классических феноменологических моделей.
3. Редукция полной модели горения водород-воздушной смеси при высоком давлении позволила выделить блок, ответственный за формирование автоволновых структур на фронте. На основе анализа редуцированной модели были установлены условия образования структур при повышении давления, а также выявлены механизмы их формирования, связанные с реакционно-диффузионными процессами в низкотемпературной зоне фронта.
4. Редуцированная модель позволяет охватить широкий класс структур на фронте, включая автоволновые, диссипативные и хаотические для набора параметров, соответствующих экспериментальным условиям.

Личный вклад. Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Основные результаты были получены им лично либо при непосредственном участии. Совместно с научным руководителем разработаны модели формирования структур на фронте реакции. Автором лично разработан и реализован комплекс программ для исследования этих моделей, проведен анализ их динамики, структуры и свойств возникающих нелинейных волн, а также анализ чувствительности, что позволило выявить области существования различных режимов в пространстве параметров. Автор принимал активное участие в подготовке статей по теме диссертации, а также в представлении результатов на конференциях и семинарах.

Достоверность в диссертации обусловлена использованием современных методов математического моделирования и численного анализа. Достоверность полученных результатов подтверждается их согласованностью с экспериментальными данными и успешной апробацией на научных конференциях.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались и обсуждались на международных и всероссийских конференциях:

- XXV Международная конференция “Математика. Компьютер. Образование” (МКО-2018), 29 января—3 февраля 2018 г., Дубна, Россия;
- XXVI Международная конференция “Математика. Компьютер. Образование” (МКО-2019), 28 января—2 февраля 2019 г., Пущино, Россия;
- 12 Asia–Pacific Conference on Combustion (ASPACC-2019), 1—5 Июля 2019 г., Фукуока, Япония;
- 12-я Международная школа «Хаотические автоколебания и образование структур» (ХАОС-2019), 1—6 октября 2019 г., Саратов, Россия;

- XXVII Международная конференция “Математика. Компьютер. Образование” (МКО-2020), 27 января—1 февраля 2018 г., Дубна, Россия;
- XXX Всероссийская научная конференция “Нелинейные дни в Саратове для молодых-2023”, 15—19 мая 2023 г., Саратов, Россия;
- IV Международная конференция “Интегрируемые системы и нелинейная динамика”, 26—28 сентября 2023 г., Ярославль, Россия.

Публикации. По результатам диссертационной работы было опубликовано шесть статей в журналах из Белого списка, три из которых относятся к первому уровню.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, 6 глав, заключения и 4 приложений. Полный объем диссертации составляет 112 страниц, включая 40 рисунков и 3 таблицы. Список литературы содержит 113 наименования.

Содержание работы

Во **введении** обосновывается актуальность исследований, раскрывается предмет работы, формулируются цели и задачи, новизна, достоверность, практическая значимость, выносимые на защиту основные результаты.

Первая глава содержит описания проведенных ранее экспериментов и наблюдений, где присутствуют пространственно-временные структуры различной природы на подвижном фронте. Внимание уделено автоволновым структурам и структурам Тьюринга, а так же общим описанием нелинейных структур в процессах горения. Выдвинута гипотеза о том, что сложные пространственно-временные структуры, наблюдаемые, в частности на фронте горения, могут быть описаны посредством создания блочных моделей. В таких моделях одна часть отвечает за распространение фронта реакции, а вторая — за формирование структур на таком фронте. При этом первая подсистема явно влияет на вторую. Ввиду того, что природа неустойчивостей, приводящих к возникновению интересующих структур, диффузионно-тепловая, то подсистемы должны быть реакция-диффузионного типа. В главе также представлены базовые математические модели, которые впоследствии будут использованы в качестве блоков в исследуемых феноменологических моделях, — это уравнение Фишера-Колмогорова-Петровского-Пискунова, модель Фицхью-Нагумо и Орегонатор.

Вторая глава посвящена исследованию систем, составленных из нескольких феноменологических блоков, достаточно простых и естественных с одной стороны и позволяющих качественно продемонстрировать поведение пространственно-временных структур с другой. Цель данной главы — продемонстрировать принципиальную возможность описания структур на фронте с использованием блочных моделей. Поэтому была рассмотрена простейшая — пространственно двумерная — ситуация, когда плоская волна движется вдоль одной оси y и описывается первой подсистемой, а структуры формируются внутри получившегося фронта, но распространяются вдоль оси x и описываются второй

подсистемой. В качестве блоков (подсистем) были рассмотрены три комбинации из известных простых моделей: Фицхью-Нагумо, Фишера-КПП и Орегонатор. В автореферате представлен один пример — модель, блоками которой являются уравнение Фишера-КПП и модель Фицхью-Нагумо. Две другие комбинации демонстрируют аналогичное поведение.

Рассмотрены две пространственные конфигурации: отрезок цилиндра, когда одна ось направлена вдоль его направляющей, а другая вдоль его оси, и прямоугольная область. В первом случае будет показано, как возникает волна, бегущая по спирали по поверхности цилиндра. Во втором случае продемонстрируем, как локальный пейсмейкер, расположенный на одной из сторон области, генерирует периодические волны на фронте, движущемся в перпендикулярном направлении. Первый случай является двумерным аналогом спиральных волн, а второй — кольцевых волн в трёхмерном пространстве.

Первая подсистема, отвечающая за формирование фронта, задана уравнением Фишера-КПП, а вторая подсистема, ответственная за формирование структур внутри фронта, задана уравнениями Фицхью-Нагумо.

$$\frac{\partial g}{\partial t} = kg(1 - g) + D_g \Delta g, \quad (1a)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} [u(u - \alpha(g))(1 - u) - v] + D_u \Delta u, \quad (1б)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = u - v + D_v \Delta v. \quad (1в)$$

Уравнение связи, определяющее влияние первой подсистемы на вторую, имеет вид

$$\alpha(g) = a - bg(1 - g). \quad (2)$$

Для возникновения автоволн во второй подсистеме (1б–1в) коэффициент диффузии “активаторной” переменной u должен быть больше, чем “ингибиторной” v , или $D_u \gg D_v$, а значение параметра ε , влияющего на “быстроту” переменной u , должно быть значительно меньше единицы.

Начальное условие для переменной g имеет вид сигмоиды $(1 + e^{y/\sqrt{D_g}})^{-1}$ в направлении y ; в результате формируется решение уравнения Фишера-КПП (1a) в виде волны переключения. Такой профиль функции $g(t, x, y)$ образует фронт, а квадратичный вид уравнения связи (2) позволяет менять состояние второй подсистемы от невозбудимого до возбудимого и колебательного. В качестве начальных условий для переменных u и v были использованы решения одномерного уравнения Фицхью-Нагумо. Граничные условия для всех переменных определены таким образом, что вдоль оси x граничные условия периодические, а вдоль оси y — задан нулевой поток.

В численных экспериментах для системы (1) использовались следующие параметры, допускающие появление волны переключения и автоволнового решения для уравнения Фишера-КПП и Фицхью-Нагумо соответственно: $k = 2$,

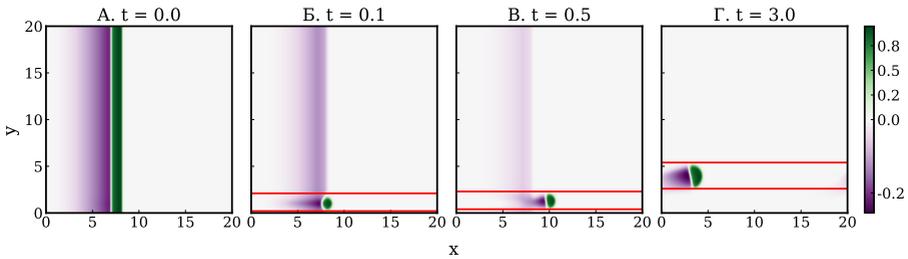


Рис. 1 — Результат численного моделирования системы, состоящей из уравнения Фишера-КПП и Фицжью-Нагумо (1), с периодическими граничными условиями вдоль оси x .

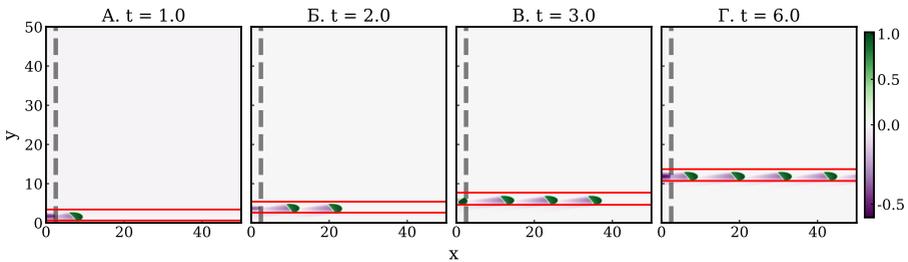


Рис. 2 — Результат численного моделирования системы (1), состоящей из уравнения Фишера-КПП и Фицжью-Нагумо, с нулевыми потоками на границах.

$D_g = 0.25$, $\varepsilon = 0.002$, $D_u = 1$, $D_v = 0$. Результат численного моделирования представлен на рисунке 1, где показана переменная $u(x,y)$ в моменты времени $t = 0.0, 0.1, 0.5, 3.0$. На фрагментах видно, как из предварительно заданной поперечной волны на фрагменте А формируется сегмент (Б–В) и распространяется вдоль узкого слоя, который в свою очередь движется снизу вверх (В–Г). В силу периодических граничных условий сегмент волны, достигнув правой границы области интегрирования, появляется слева. Положение фронта отмечено горизонтальными линиями.

Затем была рассмотрена система (1) с условиями, при которых на всех границах потоки равны нулю. Начальное условие для функции g имеет тот же вид сигмоиды для получения волны переключения, что и в предыдущем случае, тогда как для функций u и v в качестве начальных условий заданы малым отклонением от стационара. От уравнения связи (2) потребуем переводить систему в возбудимый режим на движущемся фронте g , а вне его — в невозбудимый. Дополним это требование особым условием: вблизи границы $x = 0$ пусть уравнение связи переводит систему в колебательный режим на фронте. Такая конфигурация позволяет создать источник колебаний, что создаёт волны только в пределах фронта, сформированного первой подсистемой, которые двигаются вместе с ним.

Результат численного моделирования с нулевыми потоками на границах и источником колебаний представлен на рисунке 2. На фрагментах (А–Г) показана переменная $u(t, x, y)$ в моменты времени $t = 1, 2, 3, 6$, на которых видно, как возникающий у левой границы импульс распространяется вправо вдоль узкого слоя, который в свою очередь движется снизу вверх. Колебательная область, служащая источником импульсов, обозначена пунктирной линией. Положение фронта отмечено горизонтальными линиями.

Таким образом, в данной главе описана потенциальная возможность качественно объяснить возникновение сложных структур на движущемся фронте. Подробному исследованию и демонстрации автоволновых структур уже в трехмерном пространстве на примере объединённой модели из уравнения Фишера-КПП и Фицью-Нагумо посвящена следующая глава.

В **третьей главе** исследована модель, состоящая из уравнений КПП и Фицью-Нагумо, в трёхмерном пространстве для получения автоволновых структур. Глава посвящена исследованию спиральных и кольцевых автоволновых структур, возникающих на движущемся фронте реакции в трехмерной области. Представлены как общие условия возникновения автоволновых структур, так и начальные условия, необходимые для формирования автоволн. В результате систематических расчетов при разных значениях, соответствующих скорости распространения и толщине фронта, были получены границы существования автоволновых структур.

Моделью для описания автоволновых структур в трехмерном пространстве на движущемся фронте служит комбинация уравнения Фишера-КПП и уравнений Фицью-Нагумо (1), но с оператором Лапласа вида $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$. Рассмотрено решение уравнений (1–2) внутри кубической области, на границах которой потоки для всех переменных равны нулю. Параметры системы выбраны из широкого диапазона возможных значений, позволяющие продемонстрировать возникновение спиральных структур и кольцевых волн в трёхмерном пространстве. Результаты представлены на рисунках 3 и 4 для переменной $u(x, y, z)$.

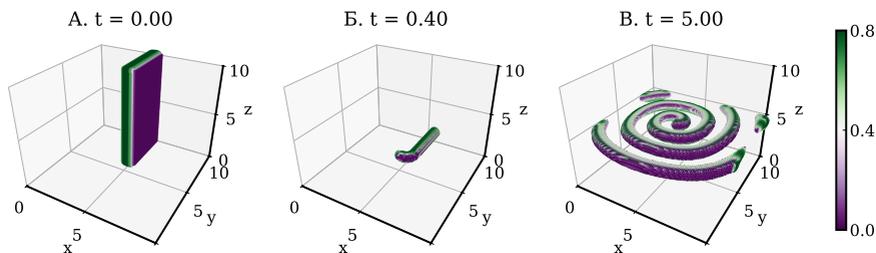


Рис. 3 — Формирование спиральной структуры на фронте из затравочной начальной волны в трёхмерном пространстве.

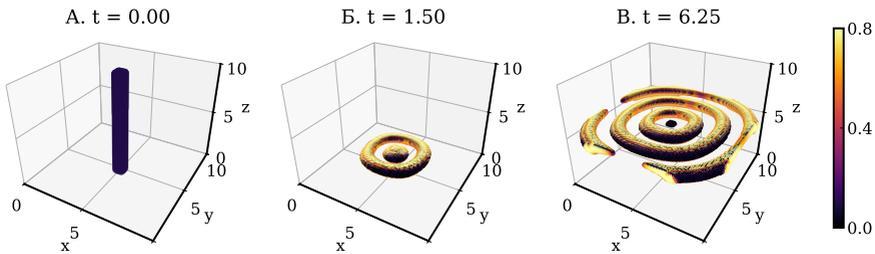


Рис. 4 — Формирование кольцевых структуры на фронте из колебательного области в центре фронта в трёхмерном пространстве.

В уравнении Фишера-КПП (1a) только два параметра: k — отвечающий за скорость реакции, и D_g — коэффициент диффузии, а их комбинации $\sqrt{kD_g}$ и $\sqrt{D_g/k}$, с точностью до множителя 2 и 8, соответствуют явным физическим характеристикам — скорости и толщине движущейся волны переключения, которая является решением этого уравнения. В ходе численных экспериментов в широком диапазоне значений этих параметров, было исследовано, как характеристики фронта реакции влияют на существование автоволновых структур на нём.

По результатам расчётов при различных значениях безразмерных скорости и толщины фронта была получена граница на рисунке 5 между параметрическими областями, в которых образуются (выше границы) или не образуются (ниже границы) автоволновые структуры. На рисунке границы аппроксимированы и показаны линиями зеленого и синего цвета соответственно. В левой части, в области, где скорость распространения фронта мала, граница горизонтальная. С ростом скорости движения фронта, начиная с $\sqrt{kD_g} \approx 0.3$, граница загибается вверх, что указывает на то, что для возникновения автоволновых структур при больших скоростях требуется большая толщина фронта. Таким образом, условия возникновения в трехмерном пространстве структур на движущемся фронте критически зависят от его толщины из-за выноса вещества из этой области наружу вне фронта. Причины такого рассеивания — диффузия вещества, соответствующего переменным u и v , через переднюю часть фронта и конвекционный поток через фронт при его движении. В обоих случаях граница существования автоволновых структур в координатах скорости и толщины

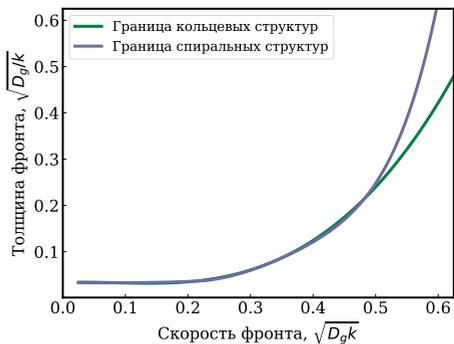


Рис. 5 — Границы существования спиральных и кольцевых структур на фронте.

фронта горизонтальна для малых значений и стремится вверх для больших скоростей, что означает, что фронт становится все более толстым и, фактически, структуры становятся трехмерными.

В **четвёртой главе** продолжается исследование представленной выше модели, составленной из уравнений Фишера-КПП и Фицхью-Нагумо для объяснения возникновения диссипативных структур на движущемся фронте в трехмерном пространстве. Дополнительно проведено исследование условия их формирования и существования в зависимости от скорости и толщины фронта при разных значениях параметров, отвечающих за неустойчивость по Тьюрингу.

Как и в предыдущей главе была рассмотрена система, состоящая из уравнения Фишера-КПП, отвечающего за движущийся фронт реакции:

$$\frac{\partial g}{\partial t} = kg(1 - g) + D_g \Delta g; \quad (3)$$

Фицхью-Нагумо, отвечающую за структуры, возникающие на фронте:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{1}{\epsilon} [u(u - \alpha)(1 - u) - v] + D_u \Delta u, \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= \beta u - \gamma v + D_v \Delta v; \end{aligned} \quad (4)$$

и уравнения связи, с помощью которого вводится влияние первой подсистемы на вторую:

$$\alpha(g) = a - b(1 - g)g. \quad (5)$$

Модель Фицхью-Нагумо (4) при определённых условиях способна формировать диссипативные структуры за счёт неустойчивости Тьюринга. Линеаризуя эти уравнения вблизи нулевой стационарной точки и пользуясь известными условиями неустойчивости Тьюринга в двухкомпонентной реакционно-диффузионной системе, было получено следующее условие существования в такой подсистеме неоднородных стационарных структур:

$$\alpha < \epsilon \frac{D_u}{D_v} \gamma - 2\sqrt{\epsilon \frac{D_u}{D_v}} \beta. \quad (6)$$

Для возникновения диссипативных (тьюринговских) структур отношение $\frac{D_u}{D_v}$ должно быть существенно малым, поэтому в данной работе были взяты коэффициенты диффузии $D_u = 0.01$ и $D_v = 1.0$. Остальные параметры системы уравнений (4) были выбраны следующие: $\epsilon = 1.0$, $\beta = 1.5$, $\gamma = 1.25$, при которых выполняется условие (6). Так как задача уравнения связи — перевести систему в режим, соответствующий тьюринговской неустойчивости на фронте, то параметры a и b приняты равными 0.3 и 3.0 соответственно. Выбранные параметры позволяют наблюдать в численных расчётах характерные диссипативные структуры, описываемые второй подсистемой. Комбинации параметров уравнения

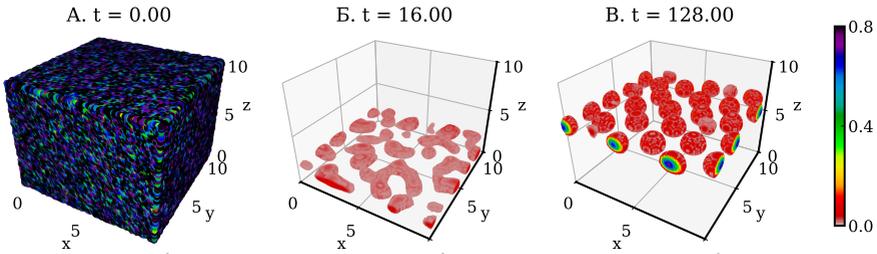


Рис. 6 — Формирование диссипативных структур на движущемся фронте в трёхмерном пространстве.

Фишера-КПП (3) соответствуют явным физическим характеристикам: $\sqrt{kD_g}$ — скорости, а $\sqrt{D_g/k}$ — толщине движущегося фронта реакции, используемые далее. Значения параметров уравнения (3) были выбраны в виде $k = 0.2$ и $D_g = 0.0031$, что соответствует толщине $\sqrt{D_g/k} = 0.125$ и скорости $\sqrt{kD_g} = 0.025$ образуемого фронта. Результат численного расчёта представлен на рисунке 6 для переменной $u(x, y, z)$.

Как и в предыдущей главе, было проведено исследование с целью получения границы существования структур в зависимости от толщины и скорости фронта реакции, определяемые из уравнений (3) — $\sqrt{D_g/k}$ и $\sqrt{kD_g}$, соответственно. В дополнение к этому было исследовано, как степень неустойчивости по Тьюрингу отразится на положении этой границы. В модели Фицхью-Нагумо неустойчивость определяется параметром α , который в полной системе (3–5) меняется согласно уравнению связи (5). Имея в виду, что неустойчивость достигается при выполнении условия (6), при выбранных параметрах в уравнениях (4), были проведены следующие действия:

- определено критическое значение $\alpha_{кр} = -0.23$, при значениях ниже которого выполняется условие тьюринговской неустойчивости;
- зафиксирован параметр $a = 0.3$, при котором вне фронта реакции система находилась в устойчивом состоянии;
- учитывая, что в уравнении связи множитель $(1 - g)g$ достигает максимума при $g = 0.5$ и равняется 0.25, выбираем несколько значений b для того, чтобы на фронте реакции переводить систему в неустойчивое состояние.

После множества численных расчётов при различных значениях параметров b , который регулирует степень неустойчивости $\alpha(g)$, были получены границы существования диссипативных структур на движущемся фронте в трёхмерном пространстве. Результаты представлены на рисунке 7, где показаны как характерные профили $\alpha(g)$ при различных значениях b , так и границы существования структур.

Во всех случаях система ведет себя качественно одинаково, а именно: сначала при малых скоростях движения фронта граница существования структур не зависит или мало зависит от скорости и является практически горизонтальной, а

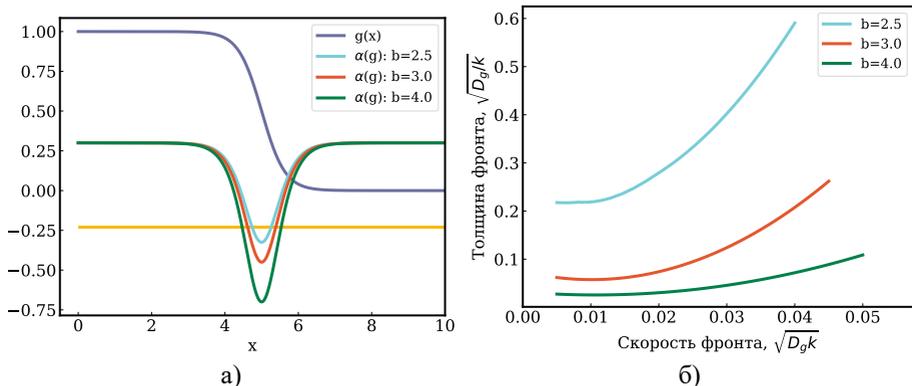


Рис. 7 — а) Профиль волны переключения $g(x)$ и функция $\alpha(g)$ при $a = 0.3$ и $b = 2.5, 3.0, 4.0$, соответствующая данному профилю. б) Границы существования структур на фронте в трёхмерном пространстве при различных значениях параметров b , который регулирует степень неустойчивости $\alpha(g)$.

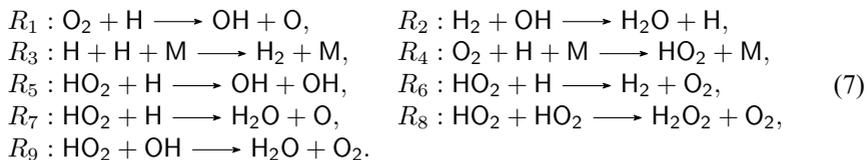
затем, после определенного значения скорости, эта граница начинает загибаться вверх. Можно предложить следующее качественное объяснение такого поведения. Случай, когда реакция протекает в слое, отличается от ситуации, когда она протекает в объеме, тем, что происходит потеря реагента во внешнее пространство из слоя, и чем он становится тоньше, тем сильнее это влияет на картину, возникающую в нем. Если слой движется, то вступает в действие еще один фактор — поток вещества через слой, причем он тем сильнее, чем больше скорость движения слоя. Тогда, для того чтобы компенсировать эту потерю за счет скорости слоя и чтобы в нем снова могли возникать структуры, его толщина должна увеличиваться по мере роста его скорости.

Сравнение результатов, полученных для различных значений b , позволяет установить существенные детали формирования структур на фронте волны реакции. При больших значениях b — в условиях развитой неустойчивости Тьюринга — структуры возникают для достаточно тонкого фронта реакции, но в этом случае эти структуры образуют слой, значительно превышающий толщину слоя неустойчивости Тьюринга. С уменьшением b , а значит, при приближении к точке бифуркации, толщина фронта, необходимая для образования структур, начинает резко возрастать. Однако в этом случае толщина слоя, в котором наблюдается тьюринговская неустойчивость, начинает сужаться в пределах этого фронта. В результате толщина слоя, в котором формируются структуры Тьюринга, не так сильно выходит за пределы последнего и не так значительно отличается от наблюдаемой при больших значениях b .

Пятая глава посвящена применению иерархического подхода для теоретического описания экспериментально наблюдаемых автоволновых спиральных структур, возникающих при горении богатого водород-воздушного пламени

при высоком давлении. Цель исследования — провести систематическую редукцию кинетического механизма горения водород-воздушного топлива, чтобы затем выделить механизм, приводящий к образованию нетривиальных волновых структур.

В качестве отправной точки была взята математическую модель распространения волн в водородно-воздушной смеси, которая описывается одномерной системой уравнений сохранения с использованием детальных химических механизмов и моделей переноса, состоящую из 38 реакций между 9 реагентами. На рисунке 8 представлены профили распределения нескольких реагирующих веществ и температуры в волне горения. Видно, что значительное количество Н-радикалов находится в высокотемпературной области пламени, а второй по количеству радикалом является гидропероксил, который локализован в низкотемпературной зоне волны горения. Таким образом можно заметить появление двух хорошо разрешенных областей в структуре пламени. Основываясь на предположении об устойчивом состоянии этих радикалов был получен редуцированный кинетический механизм. Принимая это приближение, были рассмотрены только температура и концентрации H_2 , O_2 , H_2O , H , HO_2 в качестве динамических переменных. Оставляя только те элементарные реакции, которые вносят более 15% в общую скорость образования компонентов редуцированного механизма. Эта процедура приводит общую кинетическую схему до набора следующих реакций:



Было высказано предположение, что структуры на фронте волны горения формируются именно в низкотемпературном слое. Чтобы это доказать, была проведена дальнейшая редукция модели и были оставлены два уравнения — для

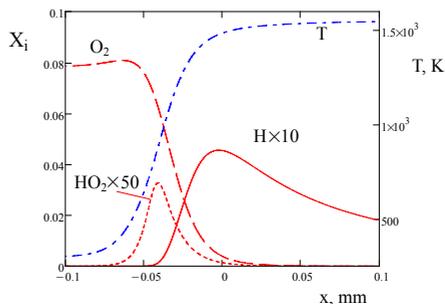


Рис. 8 — Структура волны горения для $\phi = 4$ и $P = 11$ бар. Молярные доли O_2 , H и HO_2 (левая ось) и температуры T (правая ось).

радикалов HO_2 и температуры θ . После обезразмеривания эти уравнения имеют следующий вид:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = p - m \exp(-E/\theta)u + D_u \Delta u, \quad (8a)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \gamma (m \exp(-E/\theta)u - k(\theta - \theta_0)) + D_\theta \Delta \theta. \quad (8б)$$

Концентрация радикала обозначена переменной u . Первое слагаемое p соответствует производству гидропероксида с постоянной скоростью за счёт подпитки радикалами H из высокотемпературного слоя. Данный путь реакции главным образом определяется элементарной стадией, которая является доминирующим каналом разветвления. Второе слагаемое представляет собой скорость рекомбинации подчиняющейся закону Аррениуса. Эта реакция экзотермическая, поэтому аналогичный член входит и во второе уравнение для температуры θ . Поскольку эти уравнения были исследованы в двумерном случае (в плоскости низкотемпературного слоя), то в уравнение для температуры был добавлен линейный член $k(\theta - \theta_0)$, который является своего рода диффузией тепла поперёк слоя, которой мы пренебрегли. Множитель γ — отношение характерных времён.

Параметрический анализ уравнений (8) показывает, что они могут описывать автоволну, если:

1. Изоклина второго уравнения $u = \frac{k}{m}(\theta - \theta_0) \exp(E/\theta)$ немонотонна. Это имеет место, когда $E > 4\theta_0$;
2. Система находится в возбужденном состоянии. Это, в частности, достигается, когда стационарная точка $(\theta_s, u_s) = (\theta_0 + \frac{p}{k}, \frac{p}{m} \exp(E/(\theta_0 + \frac{p}{k})))$ расположена на левой “устойчивой” ветви этой изоклины. Соответствующее условие: $\theta_0 + \frac{p}{k} < (E - \sqrt{E^2 - 4E\theta_0})/2$;
3. Вторая переменная, температура, является более “быстрой”, то есть $\gamma \gg 1$, и диффундирует быстрее первой ($D_u < D_\theta$), т.е. число Льюиса больше единицы.

Продемонстрировав возможность модели качественно описывать автоволновые структуры на фронте волны горения, проведём количественное сравнение характеристик волны с экспериментальными данными. Спиральные структуры, наблюдаемые в экспериментальной работе⁴ в сферическом расширяющемся водород-воздушном пламени, характеризуются двумя параметрами: длиной волны и периодом — временем прохождения волной этого расстояния. Длина волны определяется расстоянием между двумя радиальными максимумами амплитуды.

На рисунке 9 приведён результат численного моделирования системы (8) с параметрами, близкими к условиям эксперимента: $\theta_0 = 0.2$, $p = 0.1$, $k = 1.31$, $m = 1.2$, $E = 1.0$, $\gamma = 10$, $D_u = 0.01$ и $D_\theta = 0.02$. На нем показаны контуры спирали для переменной $\theta(x, y)$, обозначенные разными цветами,

⁴Jomaas G., Bechtold J., Law C. Spiral waves in expanding hydrogen–air flames: Experiment and theory // Proceedings of the Combustion Institute. 2007. Т. 31, № 1. С. 1039—1046.

в три момента безразмерного времени, когда положения спирали можно считать совпадающими. Как при моделировании, так и в экспериментах центр спирали перемещается, что затрудняет точное определение характеристик спиральной структуры. Выбрав несколько моментов времени таким образом, чтобы структуры приблизительно совпадали, можно определить по рисунку расстояние между витками, а также время, необходимое для прохождения этого промежутка.

Расстояние между витками спирали составляет примерно 8 единиц, а время полного оборота спирали — 23 безразмерные единицы. Учитывая, что размерные масштабы времени и длины при $\phi = 4.3$ и $P = 20$ бар можно оценить как $\tau \approx 2.5$ мс и $L \approx 5$ мм, параметр ε как 0.013, то значения частоты вращения и длины волны спиралей приблизительно равны 350 Гц и 2 мм, соответственно. По данным из приведённого выше эксперимента значения частоты и длины составляют $\nu_s \approx 2400$ Гц и $l_s \approx 2$ мм для $\phi = 4.3$ и $P = 20$ атм. Сопоставляя численные результаты с экспериментальными данными, можно сделать вывод, что длина волны достаточно хорошо совпадает, а частота в несколько раз меньше предсказанной. Таким образом продемонстрировано,

что модель построенная на основе редукции известной кинетической схемы горения водорода, способна объяснить наблюдаемые экспериментально автоволновые структуры на распространяющемся фронте горения.

В **шестой** главе продемонстрировано, что при иных экспериментальных условиях, приводящих к изменению параметров модели, она способна объяснить возникновение на фронте горения не только волновых, но и ячеистых (тьюринговских) структур.

Исходный вид модели тот же, что и в предыдущей главе, для радикалов HO_2 и температуры θ :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = p - m \exp(-E/\theta)u + D_u \Delta u, \quad (9a)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \gamma(m \exp(-E/\theta)u - s(\theta - \theta_0)) + D_\theta \Delta \theta. \quad (9б)$$

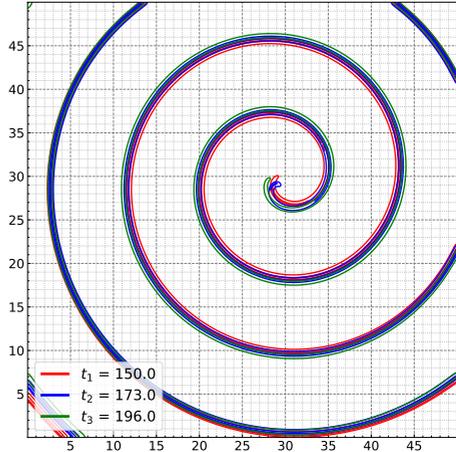


Рис. 9 — Результат численного эксперимента модели (8) с параметрами, близкими к экспериментальным значениям.

Модель (9) относится к реакционно-диффузионному типу, в которой для демонстрации нетривиального поведения, в частности, возникновения диссипативных структур, необходимо, чтобы изоклина активаторной переменной — в данном случае θ — была немонотонной. Это имеет место, когда $E > 4\theta_0$, а точка пересечения изоклин, стационар системы, с координатами $(\theta_{st}, u_{st}) = (\theta_0 + \frac{p}{s}, \frac{p}{m} \exp(E/(\theta_0 + \frac{p}{s})))$ находится на средней, неустойчивой ветви изоклины. Для нахождения области параметров, отвечающей достаточным и необходимым условиям для диффузионной неустойчивости и возникновения тьюринговских структур был проведён линейный анализ уравнений (9). Модель, представленная уравнениями (9), допускает большой набор варьируемых параметров. Зафиксируем часть из них: $E = 1.0$, $\theta_0 = 0.2$, $\gamma = 0.25$, $m = 1.2$, $D = D_\theta/D_u = 0.02$. Таким образом, в нашем случае, оставлены свободными только два параметра системы: p — скорость рекомбинации радикала из первого уравнения (9a) и s — поперечный коэффициент диффузии из второго уравнения (9б). На рисунке 10 показаны области параметров в координатах (p, s) , отражающие соотношения (10), где f и g обозначают реакционные части уравнений (9) для u и θ , а нижние индексы соответствует дифференцированию по соответствующей переменной.

$$f_u g_\theta - f_\theta g_u > 0, \quad (10a)$$

$$f_u + g_\theta < 0, \quad (10б)$$

$$Df_u + g_\theta > 0, \quad (10в)$$

$$(Df_u + g_\theta)^2 - 4D(f_u g_\theta - f_\theta g_u) > 0. \quad (10г)$$

Таким образом, объединив все вышеперечисленные условия, определяется область параметров (p, s) внутри зеленой границы, за исключением оранжевой области. Множество значений p и s вместе с прочими зафиксированными параметрами системы (9), полностью отвечает требованию тьюринговской неустойчивости, что должно обеспечить образование диссипативных структур.

Чтобы исследовать особенности возникающих структур, были выбраны несколько точек, отмеченные на рисунке 10, для которых было проведено численное моделирование.

Результаты численного моделирования системы (9) представлены на рисунке 11 при постоянном наборе параметров: $E = 1.0$, $\theta_0 = 0.2$, $\gamma = 0.25$,

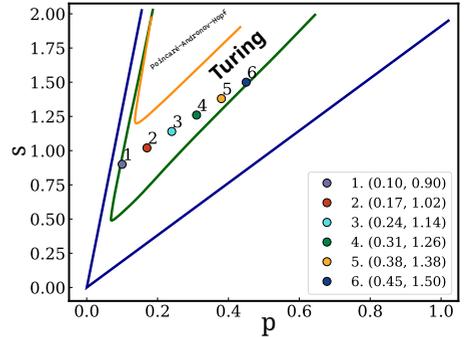


Рис. 10 — Области параметров, отвечающие набору условий (10).

$m = 1.2$, $D = D_\theta/D_u = 0.02$. На фрагментах показано распределение переменной $\theta(x,y)$. Красный и синий цвета соответствуют высоким и низким значениям θ . Вычисления проводились до тех пор, пока картина не принимала вид, сохраняющийся на протяжении долгого времени. Нумерация фрагментов соответствует точкам, отмеченным на рисунках 10.

Можно заметить, что при движении в параметрической области (p,s) слева направо, что соответствует перемещению стационарной точки вдоль неустойчивого участка изоклины $\partial\theta/\partial t = 0$ от её максимума до минимума, меняется вид получаемых структур. Сначала структуры организуются в виде “горячих” ячеек на “холодном” фоне на фрагментах 11 А и 11 Б. Это наблюдается, когда точка пересечения изоклин $u_1(\theta)$ и $u_2(\theta)$ находится в верхней части неустойчивой ветви. С ростом температуры θ , когда точка пересечения изоклин смещается в нижнюю часть ветви, характер структур становится инвертированным, а именно, имеет вид “холодных” ячеек на “горячем” фоне, как на фрагменте Е. В области параметров, при которых стационар располагается в средней части неустойчивой ветви изоклины, наблюдаются лабиринтные или полосные структуры, как на фрагменте Г, которые являются переходными от одного предельного случая к другому. В промежуточных состояниях получают такие конфигурации системы, когда пятна или ячейки и полосы сосуществуют, фрагменты В и Д, что приводит к долгому, по сравнению с остальными результатами, дрейфу структур в плоскости и их превращению из одного вида в другой. Структуры, представленные на рисунках 11 (А, Б, Г, Е), как ячеистые, так и лабиринтные, приходят к устойчивому стационарному состоянию за время, не превышающее 2000 безразмерных единиц. В промежуточных же режимах, представленных на рисунках 11 (В, Д),

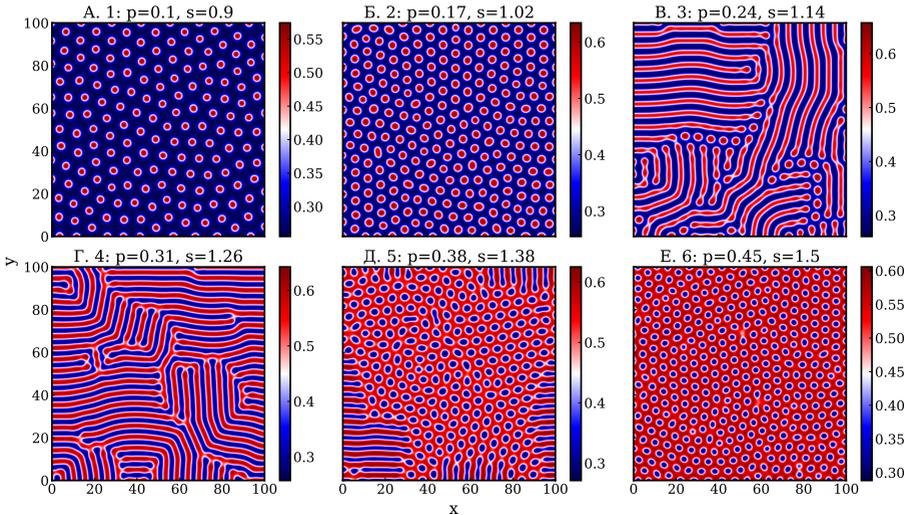


Рис. 11 — Структуры Тьюринга, полученные в результате численного моделирования системы (9).

эволюция структур — дробление полос на ячейки и обратный процесс — продолжается даже после 4000 единиц безразмерного времени, что может говорить о том, что в этих случаях в принципе не возникает стационарного состояния.

Таким образом, в результате численного моделирования было показано, что в полученной области параметров можно наблюдать возникновение тьюринговских структур. Структуры имеют вид как пятен, так и полос, в зависимости от того, в каком месте изоклины находится стационар.

Заключение

Данная работа посвящена разработке подхода к объяснению механизмов формирования сложных пространственных структур, возникающих на движущемся фронте реакции и применению этого подхода для исследования диффузионно-тепловых неустойчивостей.

1. Разработан новый подход к созданию моделей, способных объяснить образование сложных пространственно-временных структур, возникающих на фронте распространяющейся волны реакции. Такой подход отражает иерархическую организацию системы, учитывающий разделение её на взаимосвязанные подсистемы: одна отвечает за формирование волнового фронта, другая — за возникновение автоволновых и тьюринговских структур на нём.
2. В ходе численных расчетов с использованием классических феноменологических моделей продемонстрировано, что включение параметрической связи между подсистемами позволяет не только воспроизвести автоволновые и тьюринговские структуры, но и определить критические условия их образования в зависимости от скорости движения и толщины фронта.
3. Впервые путём редукции детальной кинетической модели выделен ключевой блок, ответственный за формирование автоволновых структур при высоком давлении. Анализ модели выявил критическую зависимость образования структур от давления, а также механизмы их формирования, связанные с реакционно-диффузионными процессами в низкотемпературной зоне фронта.
4. Сопоставление количественных характеристик спиральных волн на фронте горения водород-воздушной смеси, полученных численно, с экспериментальными данными продемонстрировало хорошее соответствие, при этом величины шага спирали практически совпали, а частота её вращения в модели оказалась несколько ниже, чем в эксперименте.
5. Демонстрировано, что для набора параметров, соответствующего другим экспериментальным условиям, модель способна также описать возникновение диссипативных и хаотических структур на фронте горения.

Список публикаций автора по теме диссертации

1. Якупов Э. О., Полежаев А. А. Исследование механизма возникновения автоволновых структур на фронте реакции. //Краткие сообщения по физике Физического института им. П.Н. Лебедева Российской Академии Наук. – 2018. – Т. 45. – С. 3–10.
2. Yakupov E. O. et al. Investigation of the mechanism of emergence of autowave structures at the reaction front //Physical Review E. – 2019. – Т. 99. – №. 4. – С. 042215.
3. Yakupov E. O., Gubernov V. V., Polezhaev A. A. Mathematical modeling of spatiotemporal patterns formed at a traveling reaction front //Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science. – 2020. – Т. 30. – №. 8. – С. 083147.
4. Якупов Э. О., Губернов В. В., Полежаев А. А. Моделирование волновых структур на фронте горения //Известия вузов. ПНД. – 2021. – Т. 29, – № 4. – С. 538–548.
5. Якупов Э. О., Губернов В. В., Полежаев А. А. Теоретическое исследование образования неоднородных структур на фронте горения на основе редуцированной модели. //Краткие сообщения по физике Физического института им. П.Н. Лебедева Российской Академии Наук. – 2022. – Т. 49. – №. 10. – С. 35–46.
6. Yakupov E. O., Gubernov V. V., Polezhaev A. A. Formation of spiral structures in rich-hydrogen air flames at elevated pressures //International Journal of Hydrogen Energy. – 2024. – Т. 49. – С. 784–795.

Якупов Эдуард Олегович

Исследование механизмов формирования пространственно-временных структур,
возникающих на движущемся фронте реакции

Автореф. дис. на соискание ученой степени канд. физ.-мат. наук

Подписано в печать _____.____._____. Заказ № _____

Формат 60×90/16. Усл. печ. л. 1. Тираж 100 экз.

Типография _____

