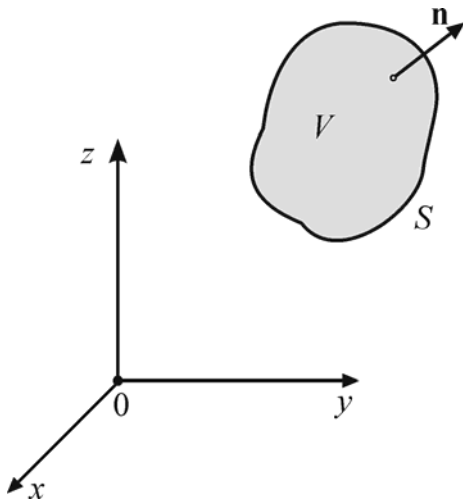


Лекция № 3: Баланс на количеството топлина. Уравнение на топлопроводността

3.1. Баланс на количеството топлина. Да разгледаме материален обем V , който представлява част от непрекъснатата среда: твърдо тяло, течност или газ. Най напред, ще разгледаме по-простия случай, когато в обема V не протичат химични реакции, а топлината, която се отделя при вискозно триене тук ще смятаме за пренебрежима. Тогава, промяната на количеството топлина, съдържащо се в обема V , за единица време ще бъде равна на топлинния поток, който влиза през неговата повърхност, S :

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} Q\rho dV = \oint_S dS(-\mathbf{n} \cdot \mathbf{q}) \quad (3.1)$$

Тук, t е времето; Q е масова плътност на количеството топлина, т.е. количество топлина на единица маса от средата; ρ е нейната масова плътност; \mathbf{n} е текуща единична външна нормала към повърхността S (Фиг. 3.1); \mathbf{q} е векторът на плътността на топлинния поток, т.е. количеството топлина, което преминава за единица време през единица площ. Знакът в дясната страна на ур. 3.1 е „-“, понеже посоката на влизания поток топлина е обратна на посоката на външната нормала \mathbf{n} .



Фиг. 3.1. Скица на материален обем V , ограден от повърхност S ; \mathbf{n} е текущата единична външна нормала към повърхността S .

За да преобразуваме лявата страна на ур. 3.1, ще използваме две известни формули от механиката на непрекъснатите среди. Първата от тях изразява производната по времето от интеграл по материален обем:

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} f(\mathbf{r}, t) dV = \int_{V(t)} \left(\frac{df}{dt} + f\nabla \cdot \mathbf{v} \right) dV \quad (3.2)$$

където \mathbf{r} е радиус-вектор; \mathbf{v} е векторът на скоростта; f е произволна функция на \mathbf{r} и t , която може да бъде скаларно поле; компонента на векторно поле, или компонента на тензорно поле. Втората формула от механиката на непрекъснатите среди свързва материалната (лагранжева) производна по времето на f с локалната (ойлерова) производна по времето на същата функция:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f \quad (3.3)$$

В частност, ако ρ е масовата плътност, тогава ур. 3.3 добива вида:

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla\rho \quad (3.4)$$

Ако в ур. 3.4 заместим локалната производна на ρ от уравнението за непрекъснатост, $\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}) = 0$, получаваме:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\nabla \cdot (\rho\mathbf{v}) + \mathbf{v} \cdot \nabla\rho = -\rho\nabla \cdot \mathbf{v} - \mathbf{v} \cdot \nabla\rho + \mathbf{v} \cdot \nabla\rho = -\rho\nabla \cdot \mathbf{v} \quad (3.5)$$

С други думи, в термини на материалната (лагранжева) производна по веремето, уравнението за непрекъснатост има вида:

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (3.6)$$

Като приложим ур. 3.2 към лявата страна на ур. 3.1 при $f = Q\rho$, получаваме:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{V(t)} Q\rho dV &= \int_{V(t)} \left(\frac{d(Q\rho)}{dt} + Q\rho\nabla \cdot \mathbf{v} \right) dV \\ &= \int_{V(t)} \left[\rho \frac{dQ}{dt} + Q \left(\frac{d\rho}{dt} + \rho\nabla \cdot \mathbf{v} \right) \right] dV = \int_{V(t)} \rho \frac{dQ}{dt} dV \end{aligned} \quad (3.7)$$

където при последната стъпка използвахме ур. 3.6. Съгласно втория принцип на термодинамиката, изменението на количеството топлина е свързано с диференциала на ентропията: $dQ = Tds$, където T е абсолютната температура, а s е ентропията на единица маса от непрекъснатата среда. Като разделим последното уравнение на dt , получаваме:

$$\frac{dQ}{dt} = T \frac{ds}{dt} = T \left(\frac{\partial s}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla s \right) \quad (3.8)$$

където при последната стъпка използвахме ур. 3.3 при $f = s$. Комбинирането на ур. 3.7 и 3.8 дава:

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} Q\rho dV = \int_{V(t)} \rho T \left(\frac{\partial s}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla s \right) dV \quad (3.9)$$

За да преобразуваме дясната страна на ур. 3.1, ще използваме теоремата на Гаус-Остроградски:

$$-\oint_S dS \mathbf{n} \cdot \mathbf{q} = -\int_{V(t)} dV \nabla \cdot \mathbf{q} \quad (3.10)$$

Заместването на ур. 3.9 и 3.10 в ур. 3.1 дава:

$$\int_{V(t)} \left[\rho T \left(\frac{\partial s}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla s \right) + \nabla \cdot \mathbf{q} \right] dV = 0 \quad (3.11)$$

Понеже ур. 3.11 е изпълнено за произволен избор на обема V в непрекъснатата среда, подинтегралната функция трябва да бъде равна на нула, т.е.:

$$\rho T \left(\frac{\partial s}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla s \right) = -\nabla \cdot \mathbf{q} \quad (3.12)$$

Уравнения 3.1 и 3.12 изразяват, съответно, баланса на ентропията в интегрална и в локална форма.

3.2. Закон на Фурие и уравнение на топлопроводността. Въз основа на проведените от него експерименти, френският физик и математик Жозеф Фурие (Joseph Fourier, 1768 – 1830) е формулирал следния емпиричен закон:

$$\mathbf{q} = -\kappa \nabla T \quad (\text{закон на Фурие}) \quad (3.13)$$

С други думи, топлинният поток е пропорционален на градиента на температурата, където κ се нарича *коэффициент на топлопроводност* (thermal conductivity). Знакът минус в ур. 3.13 означава, че топлината се пренася в посока обратна на градиента на температурата, т.е. от място с по-висока температура към място с по-ниска температура. По своята форма и смисъл, законът на Фурие е аналогичен на формулирания по-късно закон на Фик за дифузията, ур. 1.18. Тяхната обща физическа основа е фактът, че както дифузията, така и топлопреносът в кондензирани фази, са свързани с топлинното движение на молекулите.

При постоянно κ , заместването на ур. 3.13 в ур. 3.12 дава:

$$\rho T \left(\frac{\partial s}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla s \right) = \kappa \nabla^2 T \quad (3.14)$$

Понеже ентропията на единица маса зависи от температурата и налягането, $s = s(T, p)$, за производната в лявата страна на ур. 3.14 получаваме:

$$\frac{\partial s}{\partial t} = \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_p \frac{\partial T}{\partial t} + \left(\frac{\partial s}{\partial p} \right)_T \frac{\partial p}{\partial t} \quad (3.15)$$

Диференциалът на гибсовата свободна енергия, G , която е термодинамичен потенциал в променливи T и p , се представя във вида:

$$dG = -s dT + \frac{1}{\rho} dp \quad \Rightarrow \quad s = - \left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_p ; \quad \frac{1}{\rho} = \left(\frac{\partial G}{\partial p} \right)_T \quad (3.16)$$

В ур. 3.16 ектензивните термодинамични величини са отнесени към единица маса: G е гибсова свободна енергия на единица маса; s е ентропия на единица маса и $1/\rho$ е обем на единица маса. От ур. 3.16, поради равенството на кръстните производни, получаваме:

$$\left(\frac{\partial s}{\partial p} \right)_T = - \frac{\partial}{\partial p} \frac{\partial G}{\partial T} = - \frac{\partial}{\partial T} \frac{\partial G}{\partial p} = - \left(\frac{\partial (1/\rho)}{\partial T} \right)_p = \frac{1}{\rho^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p \quad (3.17)$$

За кондензирани фази (твърди тела и течности) е малка промяната на плътността ρ когато се повишава температурата при постоянно налягане. Затова, при кондензирани фази, последният член в ур. 3.15 може да се пренебрегне, откъдето получаваме:

$$ds \approx \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_p dT \quad (3.18)$$

От друга страна, от дефиницията на *специфична топлемност* (на единица маса) *при постоянно налягане*, c_p (specific heat capacity under constant pressure), имаме:

$$c_p \equiv \left(\frac{\delta Q}{dT} \right)_p = \left(\frac{T ds}{dT} \right)_p = T \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_p \quad (3.19)$$

Умножаваме ур. 3.18 по T , и като отчетем ур. 3.19 получаваме:

$$T ds \approx T \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_p dT = c_p dT \quad (3.20)$$

Като разделим ур. 3.20 на dt , получаваме:

$$T \frac{\partial s}{\partial t} = c_p \frac{\partial T}{\partial t} \quad (3.21)$$

Аналогично, като разделим ур. 3.20 на dx_i ($i = 1, 2, 3$), където x_1, x_2 и x_3 са декартовите координати, получаваме:

$$T \frac{\partial s}{\partial x_i} = c_p \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad \Rightarrow \quad T \nabla s = c_p \nabla T \quad (3.22)$$

Заместването на ур. 3.21 и 3.22 в ур. 3.14 дава уравнение за определяне на температурата, $T(\mathbf{r}, t)$:

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T \right) = \kappa \nabla^2 T \quad (3.23)$$

Като разделим двете страни на ур. 3.23 на ρc_p , получаваме:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T = \chi \nabla^2 T \quad (\text{уравнение на топлопроводността}) \quad (3.24)$$

където величината

$$\chi = \frac{\kappa}{\rho c_p} \quad (3.25)$$

се нарича коефициент на *температуропроводност* (thermal diffusivity). Уравнения 3.23 или 3.24 представляват две форми на уравнението на топлопроводността. Физическите размерности на участващите коефициенти са както следва:

$$[\kappa] = W / (m \cdot K), \quad [\rho] = kg/m^3, \quad [c_p] = J / (kg \cdot K), \quad [\chi] = m^2/s \quad (3.26)$$

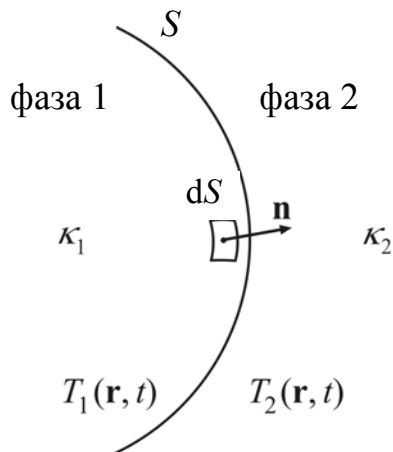
Таблица 3.1. Температуропроводност на някои материали

Материал	Температуропроводност χ (m^2/s)
Графит, успоредно на слоевете	1.22×10^{-3}
Чисто сребро (99.9 %)	1.6563×10^{-4}
Мед	1.1234×10^{-4}
Алуминий	8.418×10^{-5}
Водни пари (1 atm, 400 K)	2.338×10^{-5}
Въздух (1 atm, 300 K)	2.2160×10^{-5}
Алуминиев оксид (поликристален)	1.20×10^{-5}
Въглеродна стомана (1 %)	1.172×10^{-5}
Графит, нормално на слоевете	3.6×10^{-6}
Пясъчник (камък)	$1.12-1.19 \times 10^{-6}$
Тухла	5.2×10^{-7}
Стъкло за прозорци	3.4×10^{-7}
Гума (каучук)	1.3×10^{-7}
Найлон	9×10^{-8}
Дърво (бор)	8.2×10^{-8}
Машинно масло (100 °C)	7.38×10^{-8}

Лекция № 4: Гранични условия и топлопренос при екзотермична химична реакция

4.1. Гранични условия за уравнението на топлопроводността. Тук ще разгледаме границата между две фази (две различни непрекъснати среди), фаза 1 и фаза 2. Разпределенията на температурите в тези две фази ще означаваме, съответно, с $T_1(\mathbf{r}, t)$ и $T_2(\mathbf{r}, t)$; виж Фиг. 4.1. От физически съображения, не се очаква температурата да търпи скок върху границата между двете фази, S , ако тя е топлопроницаема. Затова, едно от граничните условия е за непрекъснатост на температурата:

$$T_1 = T_2 \quad \text{при } \mathbf{r} \in S \quad (4.1)$$



Фиг. 4.1. Скица на граничната област между две фази, фаза 1 и фаза 2, които имат различна топлопроводност, съответно, κ_1 и κ_2 ; S е междуфазовата граница; \mathbf{n} е единичната външна нормала към нея; dS е лицев елемент; $T_1(\mathbf{r}, t)$ и $T_2(\mathbf{r}, t)$ са температурите в двете фази.

Пак от физически съображения следва, че количеството топлина, което излиза от фаза 1 през междуфазовата границата, трябва да е равно на количеството топлина, което влиза във фаза 2. С други думи, трябва да имаме равенство на топлинните потоци върху границата S :

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{q}_1 dS = \mathbf{n} \cdot \mathbf{q}_2 dS \quad \text{при } \mathbf{r} \in S \quad (4.2)$$

Където \mathbf{q}_1 и \mathbf{q}_2 са плътностите на топлинните потоци в съответните фази. От закона на Фурие, ур. 3.13, имаме

$$\mathbf{q}_1 = -\kappa_1 \nabla T_1, \quad \mathbf{q}_2 = -\kappa_2 \nabla T_2 \quad (4.3)$$

където κ_1 и κ_2 са коефициентите на топлопроводност на двете фази. Заместването на ур. 4.3 в ур. 4.2 дава:

$$\kappa_1 \mathbf{n} \cdot \nabla T_1 = \kappa_2 \mathbf{n} \cdot \nabla T_2 \quad \text{при } \mathbf{r} \in S \quad (4.4)$$

Чести пъти се използва означението

$$\frac{\partial}{\partial n} \equiv \mathbf{n} \cdot \nabla \quad (\text{производна по направление на } \mathbf{n}) \quad (4.5)$$

което се нарича „производна по направление на вектора \mathbf{n} ”. С помощта на това означение, ур. 4.4. добива вида:

$$\kappa_1 \frac{\partial T_1}{\partial n} = \kappa_2 \frac{\partial T_2}{\partial n} \quad \text{при } \mathbf{r} \in S \quad (4.6)$$

Уравнение 4.4 (или 4.6) предствлява второ гранично условие за уравнението на топлопроводността, което изразява равенство на топлинните потоци.

При хетерогенни каталитични реакции, химичната реакция протича върху фзова граница (повърхността на катализатора), като в общия случай се отделя, или се поглъща топлина. Този ефект може да се отчете като в ур. 4.6 се въведе допълнителен член, Q_S , който отчита количеството топлина, отделено (погълнато) на единица площ от фазовата граница за единица време:

$$\kappa_1 \frac{\partial T_1}{\partial n} - \kappa_2 \frac{\partial T_2}{\partial n} = Q_S \quad \text{при } \mathbf{r} \in S \quad (4.7)$$

Q_S представлява *плътност на повърхностните източници на топлина* (индексът S идва от английската дума surface = повърхност).

Когато нагрятото (или охладено) твърдо тяло е в контакт с голяма течна или газова фаза (флуид), във флуида възникват конвективни хидродинамични потоци, поради това, че нагрятият флуид е по-лек и се издига нагоре. Подробното теоретично описание на този процес е доста сложно, но ако ни интересува само разпределението на температурата в твърдото тяло, можем да използваме следното емпирично гранично условие за топлопренос през стена на твърдо тяло:

$$\mathbf{q}_1 = \alpha [T_1(\mathbf{r}, t) - T_2] \mathbf{n} \quad \text{при } \mathbf{r} \in S \quad (4.8)$$

Тук сме допуснали, че твърдото тяло е фаза 1; $T_1(\mathbf{r}, t)$ е температурата в него; T_2 е средна температура във флуидната фаза; α е коефициент на пропорционалност между потока и температурната разлика, който се нарича *коефициент на топлопренос* (или коефициент на топлопредаване).

4.2. Обемни източници на топлина. Ако в непрекъснатата среда има вътрешни източници на топлина, в уравнението на топлопроводността, ур. 3.23, се въвежда допълнителен член, Q_B , който отчита техния принос (индексът B идва от английската дума bulk = обем):

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T + Q_B \quad (4.9)$$

Обемната плътност на топлинните източници, Q_B , може да има рзличен физически произход. Например, обемна топлина се отделя, когато през твърдо тяло или течност (резистор) протича електрически ток.

Друг важен случай е *отделянето на топлина при протичане на химична реакция*, например в обема на течен разтвор. Отделеното количество топлина е пропорционално на

скоростта на химичната реакция, която на свой ред зависи експоненциално от температурата:

$$Q_B = A \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right) \quad (4.10)$$

където k е болцмановата константа; T е абсолютната температура; E_a е активиращата енергия; за екзотермична реакция $A > 0$, докато за ендотермична реакция $A < 0$. При не много голямо загряване на средата, можем да използваме развитие в ред:

$$\frac{1}{T} = \frac{1}{T_0} + \left. \frac{\partial(1/T)}{\partial T} \right|_{T=T_0} (T - T_0) + \dots = \frac{1}{T_0} - \frac{T - T_0}{T_0^2} + \frac{1}{T_0} O\left[\frac{(T - T_0)^2}{T_0^2}\right] \quad (4.11)$$

където T_0 е външната температура. Например, ако при реакцията температурата на средата се повишава с $T - T_0 = 20$ °К и външната температура е $T_0 = 298$ °К (т.е. 25 °С), то относителната грешка в развитието 4.11 е от порядъка на

$$\frac{(T - T_0)^2}{T_0^2} \approx 4.5 \times 10^{-3} \quad (4.12)$$

Като заместим ур. 4.11 в ур. 4.10, получаваме:

$$Q_B \approx A \exp\left[-\frac{E_a}{k} \left(\frac{1}{T_0} - \frac{T - T_0}{T_0^2}\right)\right] = A \exp\left(-\frac{E_a}{kT_0}\right) \exp\left[\frac{E_a}{kT_0^2} (T - T_0)\right] \quad (4.13)$$

Последната формула ще представим във вида

$$Q_B = Q_0 \exp[a(T - T_0)] \quad (4.14)$$

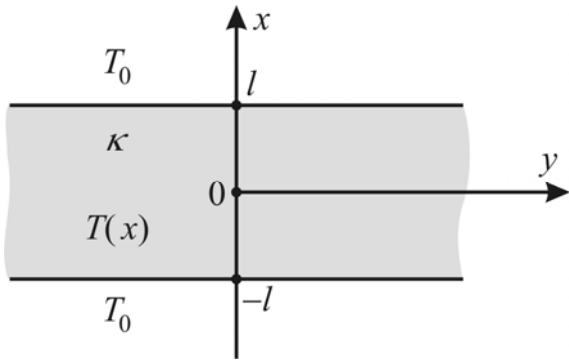
където сме въвели означенията:

$$Q_0 \equiv A \exp\left(-\frac{E_a}{kT_0}\right), \quad a \equiv \frac{E_a}{kT_0^2} \quad (4.15)$$

4.3. Стационарна екзотермична реакция в слой. Критично условие за взрив.

Да разгледаме слой вещество между две успоредни равнини, в които са разпределени равномерно обемни източници на топлина с плътност Q_B зададена от ур. 4.14. На двете гранични равнини се поддържа постоянна температура T_0 (Фиг. 4.2); т.е. имаме отвеждане на генерираната топлина в термостат. Нашата задача ще бъде да намерим разпределението на температурата, $T = T(x)$, при стационарни условия, при които T не зависи от времето t . Например, това може да бъде химична реакция, която се провежда стационарно. При тези условия, производната по времето в ур. 4.9 е нула, т.е. $\partial T / \partial t = 0$. Тогава, като заместим ур. 4.14 в ур. 4.9, получаваме следното уравнение:

$$\kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = -Q_0 \exp[a(T - T_0)] \quad (4.16)$$



Фиг. 4.2. Слой вещество с дебелина $2l$ и коефициент на топлопроводност κ , който е разположен между две успоредни равнини, и в който са разпределени равномерно обемни източници на топлина. $T(x)$ е температурата в слоя, а T_0 е външната температура.

Избрали сме оста x да е перпендикулярна на слоя, а координатното начало $x = 0$ да е в средата на слоя. Граничното условие за ур. 4.16 е

$$T = T_0 \quad \text{при} \quad x = \pm l \quad (4.17)$$

Удобно е да въведем следните безразмерни променливи:

$$z = \frac{x}{l} \quad \text{и} \quad \tau = a(T - T_0) \quad (4.18)$$

Тогава ур. 4.16 и граничното условие 4.17 добиват вида:

$$\frac{\partial^2 \tau}{\partial z^2} = -\lambda e^\tau \quad \text{където} \quad \lambda \equiv \frac{a}{\kappa} Q_0 l^2 > 0 \quad (\text{за екзотермична реакция}) \quad (4.19)$$

$$\tau = 0 \quad \text{при} \quad z = \pm 1 \quad (4.20)$$

Умножаваме ур. 4.19 по $d\tau/dz$ и интегрираме:

$$\frac{\partial^2 \tau}{\partial z^2} \frac{\partial \tau}{\partial z} = -\lambda e^\tau \frac{\partial \tau}{\partial z} \quad (4.21)$$

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tau}{\partial z} \right)^2 = -\lambda e^\tau + C \quad (4.22)$$

където C е интеграционна константа. Поради симетрията на задачата (Фиг. 4.2) температурата в средата на слоя е максимална и следователно там $\partial \tau / \partial z = 0$. От последното условие определяме константата C в ур. 4.22:

$$\left(\frac{\partial \tau}{\partial z} \right)^2 = 2\lambda (e^{\tau_0} - e^\tau) \quad (4.23)$$

където τ_0 е стойността на безразмерната температура τ в средата на слоя, т.е. при $x = 0$. По-нататък, в ур. 4.23 коренуваме и разделяме променливите:

$$\pm \frac{1}{\sqrt{2\lambda}} \frac{d\tau}{(e^{\tau_0} - e^\tau)^{1/2}} = dz \quad (4.24)$$

Превид физическия ход на температурата, с максимум в средата на слоя, знакът пред корена в ур. 4.24 трябва да е „+” при $z < 0$ и „-” при $z > 0$. Интегрирането на ур. 4.24 от точка с положителна координата z до горната граница $z = 1$, дава:

$$\frac{1}{\sqrt{2\lambda}} \int_0^{\tau} \frac{d\tau}{(e^{\tau_0} - e^{\tau})^{1/2}} = \int_z^1 dz = 1 - z \quad (4.25)$$

виж ур. 4.20. Интегралът в лявата страна на ур. 4.25 може да се вземе в термини на елементарни функции:

$$\begin{aligned} I &\equiv \int_0^{\tau} \frac{d\tau}{(e^{\tau_0} - e^{\tau})^{1/2}} = \int_0^{\tau} \frac{d\tau}{e^{\tau_0/2} e^{\tau/2} (e^{-\tau} - e^{-\tau_0})^{1/2}} \\ &= e^{-\tau_0/2} \int_0^{\tau} \frac{e^{-\tau/2} d\tau}{(e^{-\tau} - e^{-\tau_0})^{1/2}} = -2e^{-\tau_0/2} \int_0^{\tau} \frac{de^{-\tau/2}}{(e^{-\tau} - e^{-\tau_0})^{1/2}} \end{aligned} \quad (4.26)$$

Като въведем помощни променливи $u = e^{-\tau/2}$ и $b = e^{-\tau_0/2}$, интегралът в ур. 4.26 се свежда до табличен интеграл:

$$\int \frac{de^{-\tau/2}}{(e^{-\tau} - e^{-\tau_0})^{1/2}} = \int \frac{du}{(u^2 - b^2)^{1/2}} = \text{Arch} \frac{u}{b} = \text{Arch}(e^{(\tau_0 - \tau)/2}) \quad (4.27)$$

Напомниме, че обратната функция на хиперболичния косинус се изразява чрез логаритъм:

$$\text{Arch} x = \ln(x + \sqrt{x^2 - 1}) \quad (4.28)$$

Като комбинираме ур. 4.25–4.27, получаваме търсената връзка между τ и z :

$$1 - z = \frac{2}{\sqrt{2\lambda}} e^{-\tau_0/2} [\text{Arch}(e^{\tau_0/2}) - \text{Arch}(e^{(\tau_0 - \tau)/2})] \quad (4.29)$$

Очевидно граничното условие $z = 1$ при $\tau = 0$ е удовлетворено. Предвид ур. 4.18, уравнение 4.29 задава разпределението на температурата, $T(x)$.

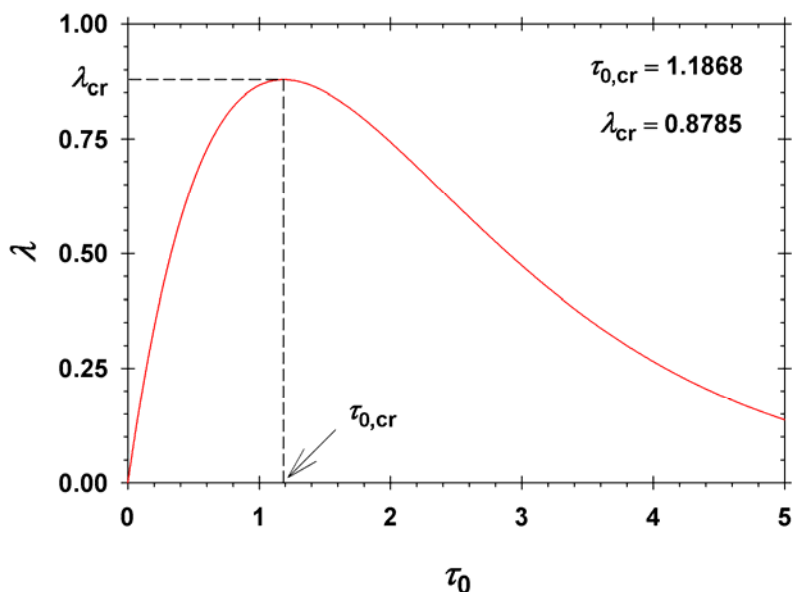
По-нататък, за да определим безразмерната температура, τ_0 , в средата на слоя, ще използваме факта, че по дефиниция имаме $\tau = \tau_0$ при $z = 0$. Полагайки $z = 0$ в ур. 4.29, получаваме:

$$1 = \sqrt{\frac{2}{\lambda}} e^{-\tau_0/2} \text{Arch}(e^{\tau_0/2}) \quad (4.30)$$

където сме използвали обстоятелството, че $\text{Arch}(1) = 0$, виж ур. 4.28. От ур. 4.30 получаваме връзка между материалния параметър λ и безразмерната температура τ_0 в средата на слоя:

$$\lambda = 2e^{-\tau_0} \text{Arch}^2(e^{\tau_0/2}) \quad (4.31)$$

Зависимостта $\lambda(\tau_0)$, която е показана на Фиг. 4.3, се изчислява в явен вид и от нея се намира стойността на безразмерната температура τ_0 съответстваща на дадена стойност на материалния параметър λ .



Фиг. 4.3. Зависимост $\lambda(\tau_0)$ изчислена от ур. 4.31.

На Фиг. 4.3 се вижда, че при $\lambda < \lambda_{cr} \equiv 0.8785$, на всяка стойност на λ съответствуват две стойности на τ_0 . С допълнително изследване може да се докаже, че физически смисъл има само по-малкият корен за τ_0 , който отговаря на устойчиво разпределение на температурата. (За левия клон от кривата на Фиг. 4.3, с увеличение на дебелината на слоя (увеличение на λ) нараства температурата τ_0 в средата на слоя, както би трябвало да бъде.)

Съгласно ур. 4.19, $\lambda \propto l^2$, и следователно λ може да расте неограничено с увеличаването дебелината на слоя. В частност, така може да получим стойности $\lambda > \lambda_{cr}$, за които ур. 4.31 няма решение за τ_0 . Физически, това означава, че в такъв случай задачата няма стационарно решение. Както вече стана дума, при увеличение на дебелината на слоя (увеличение на λ) нараства температурата τ_0 в средата на слоя. При $\lambda > \lambda_{cr}$, генерираната в слоя топлина няма да може да се отвежда като стационарен топлинен поток към термостата. Вследствие на това, температурата в средата на слоя ще нараства неограничено и ще се получи *взрив*. Стойностите λ_{cr} и $\tau_{0,cr}$ представляват критични стойности на съответните параметри за получаване на взрив. За да може реакцията да протича в стационарен режим, необходимо е да имаме $\lambda < \lambda_{cr}$ и $\tau_0 < \tau_{0,cr}$.

Подобна задача може да се реши за химическа реакция в сфера с радиус l , и в цилиндър с радиус l . Стойностите на критичните параметри за тези три геометрии (плоска, цилиндрична и сферична) са сравнени в Таблица 4.1.

Таблица 4.1. Стойности на параметрите λ_{cr} и $\tau_{0,cr}$ за три различни геометрии

Геометрия	λ_{cr}	$\tau_{0,cr}$
Плосък слой с дебелина $2l$	0.878	1.19
Цилиндър с диаметър $2l$	2.00	1.36
Сфера с диаметър $2l$	3.32	1.47

Лекция № 5: Теплопроводност в неограничена среда

5.1. Решаване на задачата с помощта на интегралното преобразуване на Фурие. Тук ще разгледаме топлопренос в неограничена неподвижна среда. В началния момент време е зададено разпределението на температурата в средата:

$$T(\mathbf{r}, 0) = T_0(\mathbf{r}) \quad \text{при } t = 0 \quad (5.1)$$

където $T_0(\mathbf{r})$ е ще считаме за известна функция. Търсим разпределението на температурата, $T(\mathbf{r}, t)$, във всеки следващ момент време като решение на уравнението на топлопроводността,

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \chi \nabla^2 T \quad (5.2)$$

За да сведем частното диференциално уравнение 5.2 до обикновено диференциално уравнение, ще използваме интегралното преобразуване на Фурие (Ландау & Лифшиц, 1953):

$$\tilde{T}(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{V_\infty} d\mathbf{r} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} T(\mathbf{r}, t) \quad (\text{право преобразуване}) \quad (5.3)$$

където V_∞ символизира интегриране по цялото тримерно пространство; $d\mathbf{r} \equiv dx dy dz$; \mathbf{k} е вектор с компоненти k_x, k_y и k_z ; $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = k_x x + k_y y + k_z z$ е скаларното произведение на векторите \mathbf{k} и \mathbf{r} . Съответното обратно преобразуване на Фурие има вида:

$$T(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{V_\infty} d\mathbf{k} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tilde{T}(\mathbf{k}, t) \quad (\text{обратно преобразуване}) \quad (5.4)$$

където $d\mathbf{k} \equiv dk_x dk_y dk_z$. Ще смятаме, че на безкрайност функцията $\tilde{T}(\mathbf{k})$ клони достатъчно бързо към нула, така че да е възможно диференциране под знака на интеграла:

$$\nabla^2 T(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{V_\infty} d\mathbf{k} \tilde{T}(\mathbf{k}, t) \nabla^2 e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (5.5)$$

$$\begin{aligned} \nabla^2 e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} &= \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \exp[-i(k_x x + k_y y + k_z z)] = \\ &= (-i)^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \exp[-i(k_x x + k_y y + k_z z)] = \\ &= -k^2 e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad \text{където } k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 \end{aligned} \quad (5.6)$$

Предвид последния резултат, като заместим ур. 5.4 в ур. 5.2, получаваме:

$$\int_{V_\infty} d\mathbf{k} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \left(\frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} + k^2 \chi \tilde{T} \right) = 0 \quad (5.7)$$

И правото, и обратното преобразуване на Фурие от нула е нула, така че подинтегралната функция в ур. 5.7 трябва да е нула:

$$\frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} + k^2 \chi \tilde{T} = 0 \quad (5.8)$$

Решението на полученото обикновено диференциално уравнение от 1-ви ред има вида:

$$\tilde{T}(\mathbf{k}, t) = A(\mathbf{k}) e^{-k^2 \chi t} \quad (5.9)$$

От ур. 5.1 следва гранично условие за определяне на $A(\mathbf{k})$:

$$\tilde{T}(\mathbf{k}, 0) = \tilde{T}_0(\mathbf{k}) \quad \text{при } t = 0 \quad (5.10)$$

където израз за $\tilde{T}_0(\mathbf{k})$ получаваме като положим $t = 0$ в ур. 5.3 и използваме ур. 5.1:

$$\tilde{T}_0(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{V_\infty} d\mathbf{r}' e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} T_0(\mathbf{r}') \quad (5.12)$$

Тук $\mathbf{r}' = (x', y', z')$ е векторна интеграционна променлива; $d\mathbf{r}' \equiv dx' dy' dz'$. Като положим $t = 0$ в ур. 5.9 и използваме ур. 5.10, получаваме $A(\mathbf{k}) = \tilde{T}_0(\mathbf{k})$, и така ур. 5.9 добива вида:

$$\tilde{T}(\mathbf{k}, t) = \tilde{T}_0(\mathbf{k}) e^{-k^2 \chi t} \quad (5.13)$$

Като заместим ур. 5.9 в ур. 5.4, намираме разпределението на температурата $T(\mathbf{r}, t)$:

$$T(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{V_\infty} d\mathbf{k} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tilde{T}_0(\mathbf{k}) e^{-k^2 \chi t} \quad (5.14)$$

По нататък, от ур. 5.12 заместяваме $\tilde{T}_0(\mathbf{k})$ в ур. 5.14:

$$T(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{V_\infty} d\mathbf{k} \int_{V_\infty} d\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} T_0(\mathbf{r}') e^{-k^2 \chi t} \quad (5.15)$$

Уравнение 5.15 може да се представи във вида:

$$T(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{V_\infty} d\mathbf{r}' T_0(\mathbf{r}') I \quad (5.16)$$

където сме въвели интеграла:

$$I \equiv \int_{V_\infty} d\mathbf{k} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} e^{-k^2 \chi t} \quad (5.17)$$

Последният интеграл може да се представи като произведение от три интеграла:

$$I \equiv \left(\int_{-\infty}^{+\infty} dk_x e^{-ik_x(x-x')} e^{-k_x^2 \chi t} \right) \left(\int_{-\infty}^{+\infty} dk_y e^{-ik_y(y-y')} e^{-k_y^2 \chi t} \right) \left(\int_{-\infty}^{+\infty} dk_z e^{-ik_z(z-z')} e^{-k_z^2 \chi t} \right) \quad (5.17)$$

Посредством субституциите $\alpha = \chi t$ и $\beta = x - x'$, първият интеграл в ур. 5.17 се свежда до известен табличен интеграл:

$$J_x = \int_{-\infty}^{+\infty} dk_x e^{-\alpha k_x^2} e^{-i\beta k_x} = \int_{-\infty}^{+\infty} dk_x e^{-\alpha k_x^2} \cos \beta k_x = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{-\frac{\beta^2}{4\alpha}} = \sqrt{\frac{\pi}{\chi t}} e^{-\frac{(x-x')^2}{4\chi t}} \quad (5.18)$$

За другите два интеграла в ур. 5.17, които означаваме J_y и J_z , аналогично получаваме:

$$J_y = \sqrt{\frac{\pi}{\chi t}} e^{-\frac{(y-y')^2}{4\chi t}}, \quad J_z = \sqrt{\frac{\pi}{\chi t}} e^{-\frac{(z-z')^2}{4\chi t}} \quad (5.19)$$

Заместването на ур. 5.18 и 5.19 в ур. 5.17, дава:

$$I = J_x J_y J_z = \left(\frac{\pi}{\chi t} \right)^{3/2} e^{-\frac{(x-x')^2}{4\chi t}} e^{-\frac{(y-y')^2}{4\chi t}} e^{-\frac{(z-z')^2}{4\chi t}} = \left(\frac{\pi}{\chi t} \right)^{3/2} e^{-\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2}{4\chi t}} \quad (5.19)$$

Накрая, заместването на ур. 5.19 в ур. 5.16 води до:

$$T(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{8(\pi\chi t)^{3/2}} \int_{V_\infty} d\mathbf{r}' T_0(\mathbf{r}') e^{-\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2}{4\chi t}} \quad (5.20)$$

По принцип, при всяко зададено начално разпределение на температурата $T_0(\mathbf{r})$, ур. 5.20 ни позволява да намерим разпределението на температурата в пространството във всеки следващ момент време, t .

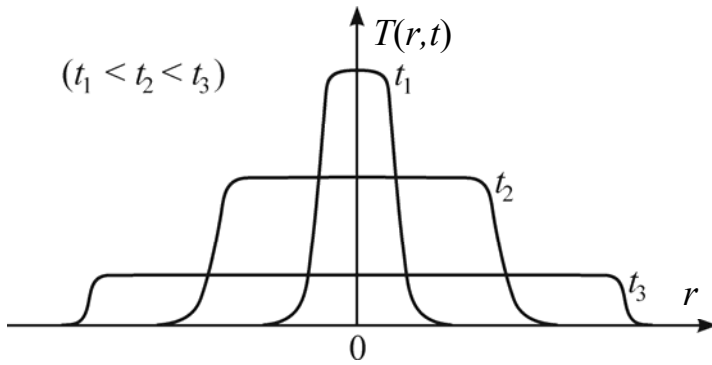
В частния случай, когато в началния момент температурата е повишена в една точка, и после топлината се разпространява радиално във всички посоки, имаме:

$$T_0(\mathbf{r}') = A\delta(\mathbf{r}') \quad \text{при } t = 0 \quad (5.21)$$

където A е константа, характеризираща интензитета на топлинния източник, а $\delta(\mathbf{r}') = \delta(x')\delta(y')\delta(z')$ е тримерна делта-функция; за простота сме предположили, че температурата е 0 в околната среда. Заместването на ур. 5.21 в ур. 5.20 води до това, че делта-функцията замества \mathbf{r}' с $\mathbf{0}$ и премахва интеграла:

$$T(r, t) = \frac{A}{(4\pi\chi t)^{3/2}} e^{-\frac{r^2}{4\chi t}} \quad (5.22)$$

Тук $r^2 = \mathbf{r} \cdot \mathbf{r}$, и температурата зависи само от радиалната координата, r .



Фиг. 5.1. Формата на зависимостта на T от r (зададена от ур. 5.22) в три последователни момента време, t_1 , t_2 и t_3 .

Както се вижда от Фиг. 5.1., амплитудата в средата, при $r = 0$, спада с времето, а от ур. 5.22 следва, че това става по закона:

$$T(r, t) = \frac{A}{(4\pi\chi t)^{3/2}} \quad (5.23)$$

При $r^2 \ll 4\chi t$, експонентата в ур. 5.22 е приблизително равна на 1, и на това се дължи платото в централната част на кривите от Фиг. 5.1.

Подобни резултати се получават, ако топлината се разпространява еднопосочно, по направление на оста x_i , $i = 1, 2, 3$ ($x_1 = x$; $x_2 = y$; $x_3 = z$). При едномерен топлопренос, вместо ур. 5.22 се получава:

$$T(x_i, t) = \frac{A}{(4\pi\chi t)^{1/2}} e^{-\frac{x_i^2}{4\chi t}} \quad (5.24)$$

Най-бързият спад на температурата от платото до нула става на разстояние l_i , за което:

$$\left. \frac{\partial^2 T}{\partial x_i^2} \right|_{x_i=l_i} = \frac{-2A}{\sqrt{\pi}(4\chi t)^{3/2}} \left(1 - \frac{2l_i^2}{4\chi t}\right) e^{-\frac{l_i^2}{4\chi t}} = 0 \quad (\text{условие за инфлексна точка})$$

Като приравним на нула израза в скобите, за квадрата на разстоянието, на което се разпространява топлината с времето, получаваме:

$$l_i^2 = 2\chi t \quad (i = 1, 2, 3) \quad (5.25)$$

За тримерен топлопренос получаваме:

$$l^2 = l_1^2 + l_2^2 + l_3^2 = 6\chi t \quad (5.26)$$