

УДК 517.9; 544.45

ВАРИАЦИОННЫЕ ЗАДАЧИ ДЛЯ НЕКОТОРЫХ УРАВНЕНИЙ ТЕОРИИ ГОРЕНИЯ

И. Г. Донской

Институт систем энергетики им. Л. А. Мелентьева СО РАН, 664033 Иркутск, Россия

E-mail: donskey.chem@mail.ru

Предложены вариационные формулировки для уравнений, описывающих стационарные состояния неизотермических одномерных реакторов, в том числе при конвективном переносе. Для предложенных вариационных формулировок рассматриваются несколько вариантов численного решения (на основе метода локальных вариаций и метода Рэлея — Ритца). Обсуждаются особенности использования численных методов при решении рассмотренных задач: сходимость, отношение шага пространственной сетки к степени аппроксимирующего полинома. Рассматриваются модификации задачи теплового зажигания с учетом конвективного переноса и теплопотерь. Предложен вариационный принцип, определяющий структуру фронта горения при заданной скорости распространения. Показано, что этот вариационный принцип может использоваться наряду с принципом минимального производства энтропии для полного решения задачи о стационарном распространении волны экзотермической реакции.

Ключевые слова: вариационные методы, уравнения реакции — диффузии — конвекции, тепловой взрыв, волны реагирования.

DOI: 10.15372/PMTF20220505

Введение. С использованием вариационных принципов можно, во-первых, сформулировать относительно простые методы численного решения дифференциальных уравнений или построения аналитических аппроксимаций, во-вторых, получить дополнительную информацию о математических особенностях решения и о природе явлений, описываемых исходными уравнениями. Линейные дифференциальные уравнения допускают относительно простое решение обратной вариационной задачи. Для построения вариационных функционалов для нелинейных систем в каждом случае требуется специальное исследование. Вариационные постановки нелинейных задач тепломассопереноса обсуждаются в работах [1–4].

В некоторых случаях стационарные уравнения реакции — диффузии можно свести к виду, допускающему вариационную формулировку. Например, в случае одномерного распределения концентрации в реагирующей среде с одним реагентом можно записать функцию Лагранжа в явном виде. С увеличением размерности (т. е. числа реагентов) кинетической задачи вид функции, формально соответствующей потенциальной энергии, существенно усложняется: ее градиент должен быть равен (или пропорционален) скоростям

Работа выполнена в рамках проекта государственного задания (№ FWEU-2021-0005) программы фундаментальных исследований РФ на 2021–2030 гг. с использованием ресурсов центра коллективного пользования “Высокотемпературный контур” Министерства образования и науки РФ (проект № 13.ЦКП.21.0038).

© Донской И. Г., 2022

химических реакций, что не всегда возможно. Также усложняется совместное решение уравнений реакции — диффузии и теплопроводности. Известны исследования вариационных постановок задач о тепловом взрыве в пренебрежении выгоранием (т. е. для поиска условий зажигания) [5–7]. Итерационный вариационный метод, основанный на расщеплении уравнений диффузии и теплопроводности, использовался при решении неизотермических задач для каталитических частиц [8]. Построение вариационных постановок на основе положений неравновесной термодинамики не всегда возможно, поскольку зависимость скорости реакции от свободной энергии системы существенно нелинейна даже в изотермическом случае [1].

Наиболее простым способом построения аппроксимаций является метод минимизации квадратов невязок [9, 10]. В работе [11] приведен обзор методов решения обратной вариационной задачи для физических процессов: введение дополнительных переменных или преобразование переменных; использование интегрирующих множителей; модификация дифференциального оператора или области поиска решения. Применимость этих методов определяется видом уравнения. Общего способа построения вариационных принципов, из которых следуют уравнения для описания реагирующих сред, до сих пор не предложено.

Для определения скорости распространения нелинейных волн в реагирующих средах используются вариационные оценки [12–16]. Например, в работах [17–19] показано, что экстремальные свойства волны реагирования связаны с производством энтропии.

Численные методы на основе вариационных методов включают проекционные методы (типа метода Рэлея — Ритца) [20], метод локальной вариации [21–23], метод последовательных приближений [24], итерационный вариационный метод [25, 26] и др. Вариационные оценки могут быть использованы для построения численных схем [27] или для контроля погрешности численного решения [28].

В работе [29] предложен метод построения функции Лагранжа для уравнений с производными первого и второго порядка (на примере нелинейных осцилляторов с трением). Заметим, что этот прием использовался ранее для описания динамики фазовых переходов [30], а также для получения гиперболических уравнений переноса в [31]. Вариационная постановка с фиксированной первой производной для итерационного решения уравнения реакции — диффузии — конвекции рассматривается в [24].

В настоящей работе подход, предложенный в работах [29, 31], используется для получения вариационной формы некоторых уравнений реакции — диффузии — конвекции при изотермических и неизотермических условиях. Получены оценки эффективности различных численных методов, используемых при решении полученных вариационных задач. Впервые предложен вариационный принцип для описания структуры фронта экзотермической реакции. В работах [18, 19] были предложены вариационные принципы для определения скорости распространения волны реакции при известной структуре фронта. В настоящей работе структура фронта и скорость распространения волны определяются в результате решения вариационных задач.

Тепловой взрыв при теплопотерях и конвекции. Рассмотрим уравнения с экспоненциальной нелинейностью в источниковом слагаемом. Теплоперенос в одномерном реакторе в низкотемпературном (“довзрывном”) режиме можно описать с помощью уравнения

$$-U \frac{dT}{dz} + \chi \frac{d^2T}{dz^2} - \frac{\alpha}{c_v R} (T - T_0) + \frac{q}{c_v} F(C, T) = 0, \quad (1)$$

где T — температура; χ — температуропроводность; q — тепловой эффект химической реакции; α — коэффициент теплоотдачи; c_v — объемная теплоемкость смеси; R — поперечный размер сосуда. Используя стандартные безразмерные переменные [32], запишем (1)

в виде

$$-\text{Pe}_T \frac{d\theta}{d\xi} + \frac{d^2\theta}{d\xi^2} - \text{Bi} \theta + \text{FK} e^\theta = 0, \quad (2)$$

где Bi — число Био; FK — число Франк-Каменецкого (отношение скорости химического тепловыделения к скорости теплоотдачи за счет теплопроводности [32]); Pe_T — тепловое число Пекле, которое строится аналогично диффузионному числу Пекле. При этом используется приближение высокой энергии активации, а зависимость скорости реакции от концентрации не учитывается. Рассматривая уравнение (2) в качестве модели саморазогрева при течении реакционноспособной смеси, можно получить условия теплового взрыва в виде значений параметров для границы между низко- и высокотемпературными режимами. Поскольку в низкотемпературном (“довзрывном”) режиме скорость реакции мала, изменением концентрации реагента можно пренебречь. Анализ решений уравнений типа (1) и их нестационарных вариантов проводился, например, в работе [33].

При $\text{Bi} = 0$ и $\text{Pe}_T = 0$ выражение (2) представляет собой классическое уравнение стационарной теории теплового взрыва для плоскопараллельного сосуда. Функция Лагранжа в вариационной задаче для этого уравнения имеет вид [5–7]

$$L|_{\text{Bi}=0, \text{Pe}_T=0} = \frac{1}{2} \left(\frac{d\theta}{d\xi} \right)^2 - \text{FK} e^\theta. \quad (3)$$

Для уравнения (2) используются следующие граничные условия: $\theta(0) = 0$, $\theta'(1) = 0$. В работах [6, 7, 34] для аппроксимации решения используются парабола и синусоида, при этом полученные результаты хорошо согласуются с аналитическими оценками (как и в случае интегродифференциального источникового члена [35]). Стационарное решение (2) не существует, в случае если интеграл от функции (3) по рассматриваемой области не имеет локального минимума: в случае однопараметрического семейства пробных функций условиям теплового взрыва соответствует вырождение локального минимума вариационного функционала в точку перегиба. Локальный минимум в данной задаче является единственным (в однопараметрическом случае существует также локальный максимум, который, однако, соответствует неустойчивому состоянию [7, 35]).

Используя метод [29, 31], получаем функцию Лагранжа для уравнения (2) в виде

$$L = e^{-\text{Pe}_T \xi} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{d\theta}{d\xi} \right)^2 + \frac{\text{Bi}}{2} \theta^2 - \text{FK} e^\theta \right]. \quad (4)$$

Результаты расчетов, проведенных при $\text{Pe}_T \neq 0$, $\text{Bi} \neq 0$, позволяют сделать вывод, что в данном случае нельзя использовать приближение для θ в виде параболы. Используя метод локальных вариаций для разностной аппроксимации функции Лагранжа, получаем разностные уравнения

$$e^{\text{Pe}_T h} (\theta_i - \theta_{i-1}) - (\theta_{i+1} - \theta_i) + \text{Bi} \theta_i - \text{FK} e^{\theta_i} = 0. \quad (5)$$

Заметим, что при малых значениях параметра h экспонента может быть аппроксимирована с помощью первых двух членов ряда Тейлора. Таким образом, разностные уравнения (5) соответствуют разностной схеме с аппроксимацией производных по потоку.

Другой возможный метод (метод Рунца) заключается в приближении решения θ полиномом более высокого порядка. Тогда для N -го приближения можно записать

$$\theta_N = \sum_{i=1}^N a_i \xi^i, \quad \theta'_N = \sum_{i=1}^N i a_i \xi^{i-1}.$$

В аппроксимирующем полиноме $a_0 = 0$, поскольку граничное условие на левой границе $\theta(0) = 0$. Запишем условия стационарности для подынтегральной функции (4):

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N ika_i \int_0^1 e^{-\text{Pe}_T \xi} \xi^{i-1} \xi^{k-1} d\xi + \text{Bi} \sum_{i=1}^N a_i \int_0^1 e^{-\text{Pe}_T \xi} \xi^i \xi^k d\xi = \\ = \text{FK} \int_0^1 \xi^k \exp \left(\sum_{i=1}^N a_i \xi^i - \text{Pe}_T \xi \right) d\xi. \end{aligned}$$

Обозначим интегралы следующим образом:

$$A_{k,i} = \int_0^1 e^{-\text{Pe}_T \xi} \xi^k \xi^i d\xi, \quad c_k = \text{FK} \int_0^1 e^{\bar{\theta} - \text{Pe}_T \xi} \xi^k d\xi.$$

Введем матрицу D с элементами в виде

$$D_{ki} = ikA_{k-1,i-1} + \text{Bi}A_{k,i}.$$

Тогда условия стационарности сводятся к матричному уравнению

$$D\mathbf{a} = \mathbf{c}. \quad (6)$$

Дополнительные ограничения на величину коэффициентов a_i являются следствием условия на правой границе, которое, как правило, имеет вид $\theta'(1) = 0$. Тогда

$$\sum_{i=1}^N ia_i = 0. \quad (7)$$

Ограничение (7) входит в целевой функционал с множителем Лагранжа λ . Тогда матричное уравнение можно записать следующим образом:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{D} & \mathbf{d} \\ \mathbf{b} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a} \\ \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{c} \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Здесь $\mathbf{b}$ — вектор-строка $\{1, 2, 3, \dots, N\}$; $\mathbf{d}$ — вектор-столбец, состоящий из единиц.

Элементы вектора $\mathbf{c}$ в (6), (8) нелинейно зависят от коэффициентов a_i , поэтому при численном решении вектор $\mathbf{c}$ рассчитывается для приближенных значений a_i , найденных на предыдущей итерации. Решение считается установившимся, если разность решений на двух последовательных итерациях становится меньше заданной погрешности (10^{-3}). На рис. 1 представлены результаты расчета для полиномов второй и шестой степеней. На рис. 2 показано, что погрешность аппроксимации (интеграл модуля разности решений, полученных по разностной схеме и с помощью метода Рунге) зависит также от шага сетки (поскольку интегралы c_i вычисляются численно по формуле трапеций). На сетке с шагом $h = 0,01$ предельная погрешность аппроксимации достигается уже для полинома четвертой степени; для сетки с шагом $h = 0,001$ точность можно повысить при использовании полинома седьмой степени. В обоих случаях существует значение погрешности, при котором увеличение степени полинома уже не оказывает влияния на точность аппроксимации.

Использование метода Рунге позволяет в несколько раз ускорить численное решение по сравнению с решением по разностной схеме (если порядок полинома не очень велик). Большая часть интегралов в приведенных примерах может быть вычислена аналитически, а численное интегрирование заданной функции (для определения элементов вектора $\mathbf{c}$)

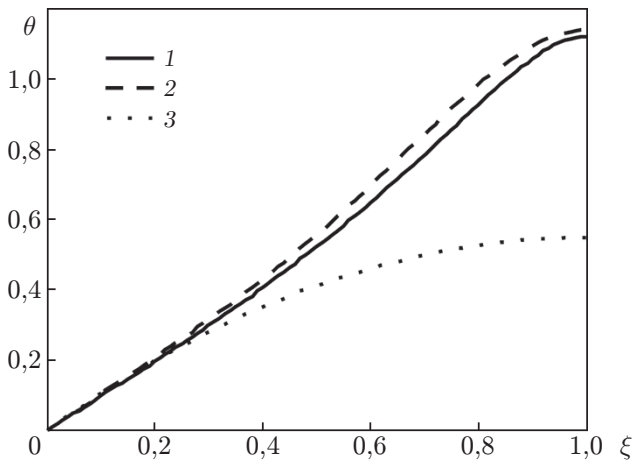


Рис. 1

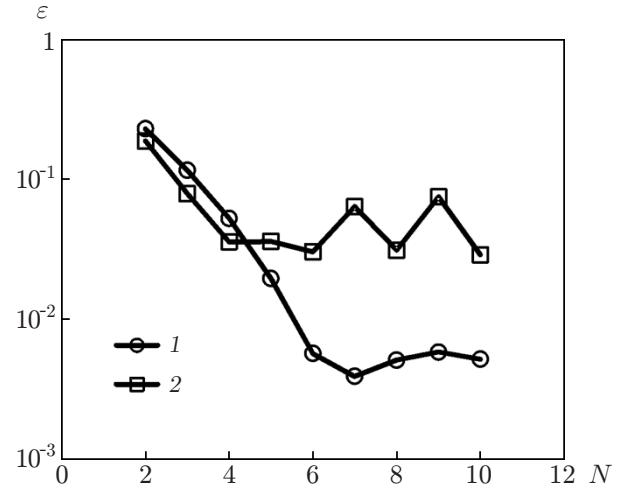


Рис. 2

Рис. 1. Распределение температуры в одномерном реакторе при $FK = 10$, $Bi = 10$, $Re_T = 10$:

1 — численное решение, полученное с помощью разностной схемы, 2 — аппроксимация полиномом шестой степени, 3 — аппроксимация полиномом второй степени

Рис. 2. Зависимость погрешности аппроксимации от степени полинома в задаче о тепловом взрыве при различных значениях шага сетки:

1 — $h = 0,001$, 2 — $h = 0,01$

можно вести с лучшим контролем точности. Заметим, что предложенные формулировки могут быть обобщены на двух- и трехмерные задачи (по аналогии с работами [34, 36]).

Уравнение (2) при $Bi = 0$ решалось, например, в работе [37], в которой рассматривалась зависимость критического значения параметра FK_{cr} от Re_T . Оценим, насколько точно можно аппроксимировать решение (2) полиномами разной степени, сравнивая отклонение критического значения FK_{cr} от известной зависимости. Результаты расчетов, проведенных по разностной схеме, совпадают с результатами работы [37]. На рис. 3 приведена зависимость FK_{cr} от Re_T при различных значениях степени аппроксимирующего полинома. Видно, что с увеличением Re_T требуется увеличение степени полинома. На рис. 4 представлена зависимость критического значения Bi_{cr} от Re_T при фиксированном значении FK . Эта зависимость делит положительный ортант на устойчивую и неустойчивую области. Как и в рассмотренном выше случае, при увеличении Re_T требуется увеличение степени полинома для корректной оценки пределов термической устойчивости.

Распространение адиабатического пламени. При соответствующих граничных условиях уравнение (1) описывает стационарное распространение тепловой волны в реагирующей среде. Запишем его в безразмерных переменных для случая адиабатического пламени с учетом зависимости скорости горения от концентрации реагента (в случае если отношение коэффициентов температуропроводности и диффузии равно единице):

$$-Re_T \frac{d\theta}{d\xi} + \frac{d^2\theta}{d\xi^2} + Da_T (\theta_m - \theta) e^\theta = 0, \quad (9)$$

где Da_T — число Дамкелера (отношение скорости химической реакции к скорости теплопередачи); θ_m — приведенная адиабатическая температура реакции. Функцию Лагранжа

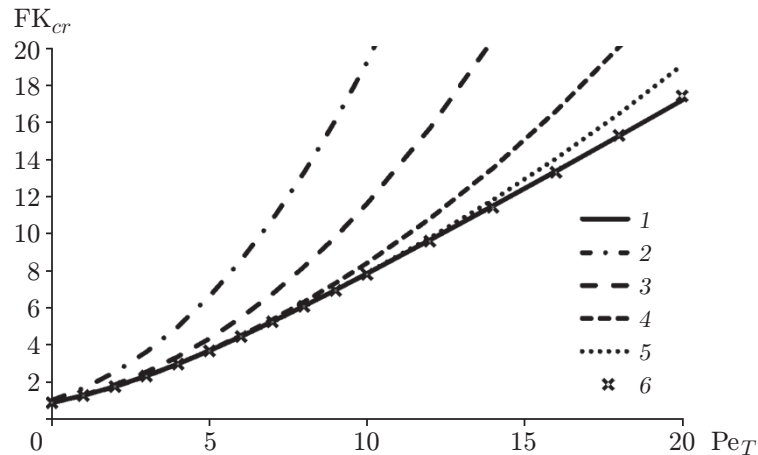


Рис. 3. Зависимость критического значения параметра FK_{cr} от числа Пекле Re_T , полученная путем численного решения с использованием разностной схемы (1) и путем аппроксимации полиномами различной степени (2–6):
2 — $N = 2$, 3 — $N = 3$, 4 — $N = 5$, 5 — $N = 7$, 6 — $N = 10$

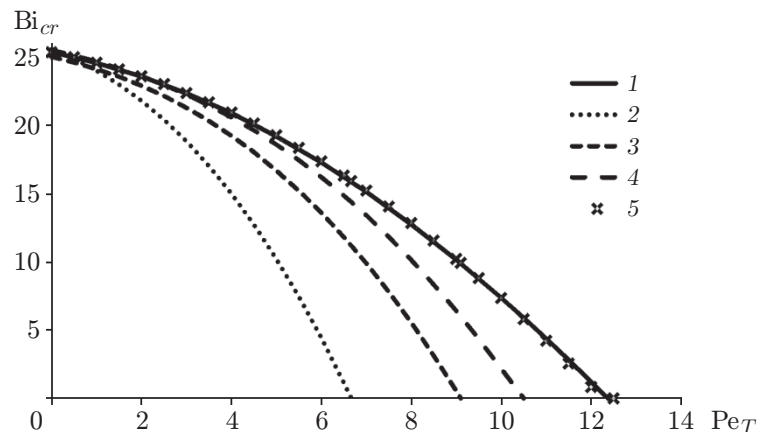


Рис. 4. Зависимость критического числа Био Bi_{cr} от числа Пекле Re_T , полученная при $FK = 10$ путем численного решения с использованием разностной схемы (1) и путем аппроксимации полиномами различной степени (2–5):
2 — $N = 2$, 3 — $N = 3$, 4 — $N = 4$, 5 — $N = 7$

для уравнения (9) можно представить следующим образом:

$$L = e^{-Pe_T \xi} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{d\theta}{d\xi} \right)^2 - Da_T (\theta_m - \theta + 1) e^\theta \right]. \quad (10)$$

При стационарном распространении пламени число Пекле Re_T является собственным числом задачи (9) при граничных условиях $\theta(0) = 0$, $\theta(X) = \theta_m$. В работах [17, 19] на основе гипотезы о минимальном производстве энтропии в волне реагирования построены функционалы для определения стационарной скорости распространения фронта горения. В настоящей работе предлагается комбинация разных функционалов для различных переменных. Структуру фронта (распределение температуры) можно определить из решения вариационной задачи для функции Лагранжа (10), однако зависимость соответствующего функционала от параметра Re_T не имеет экстремумов. Поэтому для определения скорости распространения пламени можно использовать условие экстремума для другого функционала, как это сделано в работах [17, 19].

С использованием метода локальных вариаций получена система разностных уравнений

$$e^{\text{Pe}_T h} (\theta_i - \theta_{i-1}) + (\theta_i - \theta_{i+1}) - \text{Da}_T (\theta_m - \theta_i) e^{\theta_i} = 0.$$

С помощью метода Рунта получаем уравнение для коэффициентов полинома

$$\begin{pmatrix} \mathbf{D} & \mathbf{d} \\ \mathbf{b} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a} \\ \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{c} \\ \theta_m \end{pmatrix},$$

где

$$D_{ki} = ki \int_0^X e^{-\text{Pe}\xi} \xi^{i+k-2} d\xi + \text{Da}_T \int_0^X e^{\bar{\theta} - \text{Pe}\xi} \xi^{i+k} d\xi,$$

$$c_k = \text{Da}_T \theta_m \int_0^X e^{\bar{\theta} - \text{Pe}\xi} \xi^k d\xi, \quad b_i = X^i.$$

Как и в (8), вектор $\mathbf{d}$ состоит из единиц. Значения θ , входящие в показатель экспоненты, фиксируются на каждой итерации.

Решения, полученные с использованием разностных уравнений или метода Рунта, показаны на рис. 5 при $\theta_m = 5$, $\text{Da}_T = 1$, $\text{Pe}_T = 6$. Фронт реакции должен оставаться неизменным при различных масштабах расчетной области, однако результаты, полученные с помощью метода Рунта при использовании полиномиального приближения, зависят от выбора этого масштаба (в расчетах размер расчетной области принят равным $X = 2$). На рис. 6 видно, что для хорошего соответствия решения задачи монотонному решению

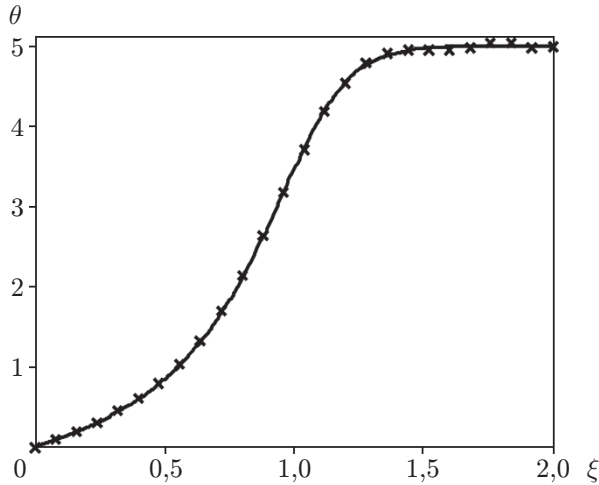


Рис. 5

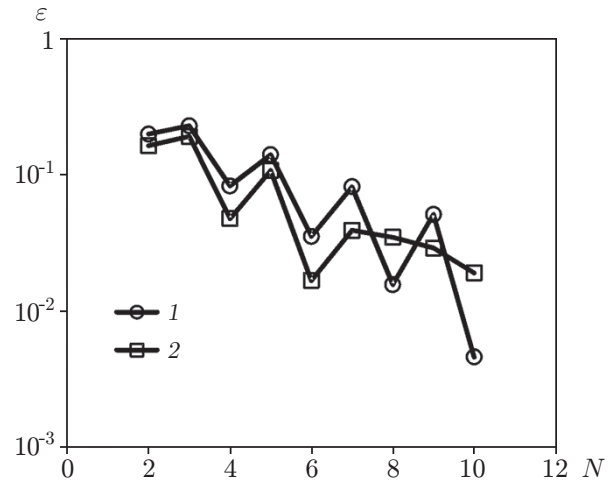


Рис. 6

Рис. 5. Профиль температуры в волне горения:

линия — решение с использованием разностной схемы, точки — аппроксимация полиномом 10-й степени

Рис. 6. Зависимость погрешности аппроксимации от степени полинома в задаче о распространении фронта пламени при различных значениях шага сетки по пространственной переменной:

1 — $h = 0,001$, 2 — $h = 0,01$

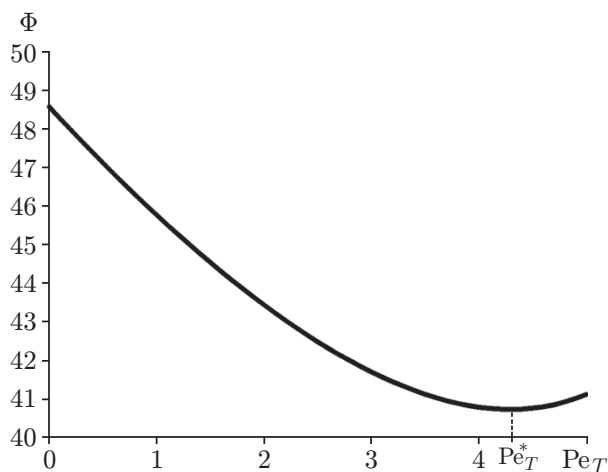


Рис. 7

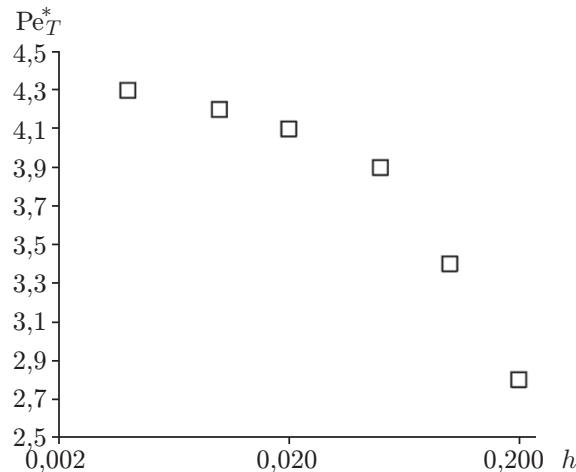


Рис. 8

Рис. 7. Зависимость производства энтропии Φ от числа Пекле Re_T при $\theta_m = 5$, $w = 1$

Рис. 8. Зависимость параметра Re_T^* от шага пространственной сетки

степень полинома необходимо увеличить до 10. Очевидно, в данном случае следует рассмотреть другой набор пробных функций.

Для определения реализуемой скорости распространения фронта горения используется функционал, соответствующий производству энтропии в расчетной области:

$$\Phi(\theta) = \int_0^X \left[\frac{1}{2} \left(\frac{d\theta}{d\xi} \right)^2 + w Da_T (\theta_m - \theta) e^\theta \right] d\xi.$$

Коэффициент w представляет собой весовую функцию для источникового слагаемого [38]. При изменении числа Пекле Re_T распределения температуры по толщине фронта различны, поэтому задача формулируется следующим образом:

$$Re_T^* = \min_{Re_T} \Phi[\theta(Re_T)]$$

(Re_T^* — скорость распространения фронта пламени, соответствующая минимальному значению Φ). Зависимость $\Phi(Re_T)$ при $\theta_m = 5$, $w = 1$ показана на рис. 7. Параметр Re_T в расчетах варьируется от 0 до 5 с шагом 0,1; найденное с такой точностью значение Re_T^* составило 4,3. На рис. 8, где показана зависимость Re_T^* от шага пространственной сетки h , видно, что эта зависимость имеет, по меньшей мере, два участка с разными порядками аппроксимации.

Следует отметить, что предложенные в работе вариационные постановки относятся к простейшим задачам теории горения. Это обусловлено тем, что в результате добавления уравнений для дополнительных переменных (концентраций реагентов, скоростей, давления и т. д.) образуются системы, которые не могут быть объединены в согласованную вариационную формулировку очевидным образом. Для сложной кинетики химических реакций общие вариационные формулировки пока не предложены даже для изотермического случая, несмотря на то что в работах [39–41] рассматривается несколько подходов к этой проблеме. По этой причине в данной работе не рассматриваются, например, задачи с диффузией реагентов (например, неадиабатическое распространение пламени). По аналогии с работами [8, 24] можно предложить итерационный метод решения, в котором вариационная постановка решается на каждом шаге итерации.

ционные задачи для групп переменных решаются последовательно при фиксированных значениях других переменных.

Таким образом, использование приближения высокой энергии активации позволяет аппроксимировать зависимость скорости реакции от температуры простой экспоненциальной функцией. Результаты работы, однако, легко обобщаются на формулу Аррениуса и ее модификации (при этом в выражении для функции Лагранжа вместо экспоненты появляются специальные функции). Вариант с использованием приближений более высокого порядка будет рассмотрен в одной из следующих работ.

Заключение. В работе предложены новые вариационные постановки задач, связанных с описанием стационарных режимов работы химических реакторов (одномерные уравнения реакции — диффузии — конвекции). При решении использовались метод Ритца и метод локальных вариаций, который приводит к последовательности оптимизационных задач либо к системе разностных уравнений. Определены условия сходимости методов к точному решению (для уравнения реакции — диффузии — конвекции в изотермическом реакторе). Получен вид функции Лагранжа для уравнений, описывающих тепловой взрыв и распространение фронта горения в реагирующей среде. Исследована зависимость характеристик приближенных решений от параметров сетки. Предложен способ определения стационарной скорости фронта горения с использованием специального функционала.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Гленсдорф П.** Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций / П. Гленсдорф, И. Пригожин. М.: Мир, 1973.
2. **Gyarmati I.** On the most general form of the thermodynamic integral principle // *Z. Phys. Chem.* 1968. Bd 2390. S. 133–137.
3. **Sieniutycz S.** Variational thermomechanical processes and chemical reactions in distributed systems // *Intern. J. Heat Mass Transfer.* 1997. V. 40, N 14. P. 3467–3485.
4. **Tsirelman N. M.** Variational solutions of complex heat and mass transfer problems // *Adv. Heat Transfer.* 1989. V. 19. P. 191–245.
5. **Гришин А. М.** Некоторые задачи теории воспламенения // *ПМТФ.* 1962. № 5. С. 75–79.
6. **Graham-Eagle J. G., Wake G. C.** Theory of thermal explosions with simultaneous parallel reactions. 2. The two- and three-dimensional cases and the variational method // *Proc. Roy. Soc. A. Math., Phys. Engng Sci.* 1985. V. 401. P. 195–202.
7. **Zarubin V. S., Kuvyrkin G. N., Savelyeva I. Y.** Variational estimates of the parameters of a thermal explosion of a stationary medium in an arbitrary domain // *Intern. J. Heat Mass Transfer.* 2019. V. 135. P. 614–619.
8. **Wazwaz A.-M.** Solving the non-isothermal reaction-diffusion model equations in a spherical catalyst by the variational iteration method // *Chem. Phys. Lett.* 2017. V. 679. P. 132–136.
9. **Van Gorder R. A., Vajravelu K.** A variational formulation of the Nagumo reaction — diffusion equation and the Nagumo telegraph equation // *Nonlinear Anal.: Real World Applicat.* 2010. V. 11, N 4. P. 2957–2962.
10. **Amat S., Legaz M. J., Pedregal P.** Some remarks on a variational method for stiff differential equations // *Mathematics.* 2019. V. 7. 455.
11. **Van P., Muschik W.** Structure of variational principles in nonequilibrium thermodynamics // *Phys. Rev. E.* 1995. V. 52, N 4. P. 3584–3590.
12. **Volpert Vit. A., Volpert Vl. A.** Propagation velocity estimation for condensed phase combustion // *SIAM J. Appl. Math.* 1991. V. 51. P. 1074–1089.

13. **Benguria R. D., Depassier M. C.** Speed of fronts of the reaction-diffusion equation // *Phys. Rev. Lett.* 1996. V. 77. P. 1171–1173.
14. **Xin J.** Front propagation in heterogeneous media // *SIAM Rev.* 2000. V. 42, N 2. P. 161–230.
15. **Stevens A., Papanicolaou G., Heinze S.** Variational principles for propagation speeds in inhomogeneous media // *SIAM J. Appl. Math.* 2001. V. 62, N 1. P. 129–148.
16. **Rodrigo M. R., Miura R. M.** Exact and approximate travelling waves of reaction-diffusion systems via a variational approach // *Anal. Appl.* 2011. V. 9, N 2. P. 187–199.
17. **Карпов А. И.** Minimal entropy production as an approach to the prediction of the stationary rate of flame propagation // *J. Non-Equilibrium Thermodynamics.* 1992. V. 17. P. 1–10.
18. **Карпов А. И., Кудрин А. В.** К расчету стационарной скорости распространения пламени: применение принципов термодинамики необратимых процессов // *Хим. физика и мезоскопия.* 2012. Т. 14, № 1. С. 5–11.
19. **Герасев А. П.** Неравновесная термодинамика автоволн ламинарного горения при произвольном числе Льюиса // *Физика горения и взрыва.* 2004. Т. 40, № 1. С. 64–74.
20. **Ректорис К.** Вариационные методы в математической физике и технике. М.: Мир, 1985.
21. **Черноусько Ф. Л.** Метод локальных вариаций для численного решения вариационных задач // *Журн. вычисл. математики и мат. физики.* 1965. Т. 5, № 4. С. 749–754.
22. **Александров В. В., Щенников В. В.** Об одном подходе к численному решению задач математической физики // *Журн. вычисл. математики и мат. физики.* 1967. Т. 7, № 4. С. 852–858.
23. **Баничук Н. В., Петров В. М., Черноусько Ф. Л.** Численное решение вариационных и краевых задач методом локальных вариаций // *Журн. вычисл. математики и мат. физики.* 1966. Т. 6, № 6. С. 947–961.
24. **Шехтер Р.** Вариационный метод в инженерных расчетах. М.: Мир, 1971.
25. **He J.-H.** Variational iteration method — a kind of non-linear analytical technique: some examples // *Intern. J. Non-Linear Mech.* 1999. V. 34, N 4. P. 699–708.
26. **Dehghan M., Shakeri F.** Application of He's variational iteration method for solving the Cauchy reaction — diffusion problem // *J. Comput. Appl. Math.* 2008. V. 214, N 2. P. 435–446.
27. **Liu C., Wang C., Wang Y.** A structure-preserving, operator splitting scheme for reaction-diffusion equations with detailed balance // *J. Comput. Phys.* 2021. V. 436. 110253.
28. **Moon K.-S., Szepessy A., Tempone R., Zouraris G. E.** A variational principle for adaptive approximation of ordinary differential equations // *Numer. Math.* 2003. Bd 93. S. 131–152.
29. **He J.-H.** Variational principles for some nonlinear partial differential equations with variable coefficients // *Chaos, Solitons Fractals.* 2004. V. 19, N 4. P. 847–851.
30. **Muratov C. B.** A global variational structure and propagation of disturbances in reaction-diffusion systems of gradient type // *Discrete Continuous Dynam. Systems. Ser. B.* 2004. V. 4, N 4. P. 867–892.
31. **Sieniutycz S.** The variational principles of classical type for non-coupled non-stationary irreversible transport processes with convective motion and relaxation // *Intern. J. Heat Mass Transfer.* 1977. V. 20, N 11. P. 1221–1231.
32. **Франк-Каменецкий Д. А.** Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М.: Наука, 1987.
33. **Мержанов А. Г., Озерковская Н. И., Шкадинский К. Г.** Динамика теплового взрыва в послеиндукционный период // *Физика горения и взрыва.* 1999. Т. 35, № 6. С. 65–70.
34. **Анисимов С. И., Виткин Э. И.** Некоторые вариационные задачи теории теплового взрыва // *ПМТФ.* 1966. № 4. С. 150–151.

-
35. **Донской И. Г.** Численная оценка критических условий в задаче о тепловом взрыве с флуктуациями реакционной способности // Информ. и мат. технологии в науке и управлении. 2021. № 1. С. 54–65.
36. **Kuvyrkin G. N., Savelyeva I. Y., Zarubin V. S.** Estimations of the parameters of a thermal explosion in a triaxial ellipsoid // Z. angew. Math. Phys. 2020. Bd 71. 113.
37. **Дик И. Г., Толстых А. В.** Воспламенение продуваемого слоя // Физика горения и взрыва. 1994. Т. 30, № 2. С. 3–7.
38. **Avellaneda J. M., Bataille F., Toutant A., Flamant G.** Variational entropy generation minimization of a channel flow: Convective heat transfer in a gas flow // Intern. J. Heat Mass Transfer. 2020. V. 160. 120168.
39. **Трусов Б. Г., Маланичев А. Г.** Применение вариационного принципа для решения задачи химической кинетики // Докл. АН. 1994. Т. 339, № 6. С. 771–775.
40. **Ross J., Vlad M. O.** Nonlinear kinetics and new approaches to complex reaction mechanisms // Ann. Rev. Phys. Chem. 1999. V. 50. P. 51–78.
41. **Lebiedz D., Reinhardt V., Siehr J.** Minimal curvature trajectories: Riemann geometry concepts for slow manifold computation in chemical kinetics // J. Comput. Phys. 2010. V. 229. P. 6512–6533.

*Поступила в редакцию 24/III 2022 г.,
после доработки — 15/IV 2022 г.
Принята к публикации 25/IV 2022 г.*
