

УДК 536.46:517.972.5

© А. И. Карпов, А. В. Кудрин

МЕТОД ЛОКАЛЬНОГО ПОТЕНЦИАЛА ДЛЯ РАСЧЕТА СТАЦИОНАРНОЙ СКОРОСТИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ПЛАМЕНИ¹

Рассматривается задача о расчете стационарной скорости распространения пламени. Для решения краевой задачи применяется метод конечных элементов с использованием двух подходов к получению системы алгебраических уравнений: метод взвешенных невязок для дифференциального уравнения сохранения и вариационная формулировка в виде локального термодинамического потенциала. Приводятся детали вычислительного алгоритма и результаты исследования устойчивости и сходимости численного решения.

Ключевые слова: распространение пламени, стационарное состояние, вариационный принцип, локальный потенциал.

Введение

Рассмотренная в работе [1] вариационная постановка задачи о расчете стационарной скорости распространения пламени основана на применении метода локального потенциала для формулировки функционала, исходящего из экстремальных принципов неравновесной термодинамики. Нелинейный характер такой задачи предполагает получение ее решения численными методами, что приводит к появлению значительного количества факторов, определенных теми или иными особенностями вычислительной реализации. Следовательно, необходимо последовательное детальное исследование, результат которого позволил бы определяющим образом разделить влияние вышеупомянутых вычислительных факторов и эффектов влияния физической модели задачи, обоснованность которой сама по себе далека от общепринятого вида.

Настоящая работа посвящена исследованию адекватности метода локального потенциала как вариационного принципа и основанного на нем вычислительного алгоритма решению задачи в дифференциальных уравнениях.

§ 1. Постановка задачи

Уравнение сохранения энергии, описывающее одномерное стационарное распространение пламени при макроскопическом учете одностадийной реакции горения в бинарной газовой смеси (реагент → продукт), имеет вид (например, [2, 3]):

$$Cm \frac{dT}{dx} = \lambda \frac{d^2T}{dx^2} + Q\rho W. \quad (1.1)$$

Здесь T — температура, C — теплоемкость, λ — коэффициент теплопроводности, Q — теплота реакции, m — массовая скорость распространения пламени, плотность ρ определяется уравнением состояния

$$\rho = p/RT, \quad (1.2)$$

где давление p полагается постоянным, $R = R_0/M$ — удельная газовая постоянная, R_0 — универсальная газовая постоянная, M — молярная масса. Скорость реакции определяется соотношением Аррениуса:

$$W = \left(\frac{T_f - T}{T_f - T_0} \right) k \exp(-E/R_0T), \quad (1.3)$$

где k — предэкспоненциальный множитель, E — энергия активации.

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 10-01-96017-р_урал_a).

Описание процесса распространения пламени одним уравнением (1.1) справедливо в случае числа Льюиса $Le = \rho DC/\lambda$ (D — коэффициент диффузии), равного единице, когда имеет место подобие распределений температуры и концентраций. Тогда концентрация реагента определяется соотношением $c_1 = (T_f - T)/(T_f - T_0)$, концентрация продукта реакции $c_2 = 1 - c_1$. Теплоемкость C полагается постоянной и одинаковой для реагента c_1 и продукта c_2 , что приводит к постоянству теплоты реакции Q . Равенство молярных масс обоих компонентов реакции соответствует постоянному значению удельной газовой постоянной R .

Граничные условия имеют вид:

$$x = -\infty: T = T_0, \quad (1.4)$$

$$x = 0: \frac{dT}{dx} = 0. \quad (1.5)$$

Условие адиабатического пламени предполагает выполнение дополнительного условия на «холодной» границе:

$$x = -\infty: \frac{dT}{dx} = 0. \quad (1.6)$$

Таким образом, постановка задачи состоит из дифференциального уравнения второго порядка (1.1), содержащего собственный параметр m , искомого значения которого при стационарном распространении пламени обеспечивает выполнение трех граничных условий (1.4)–(1.6).

Для полного выгорания исходного вещества ($c_1 = 0$ при $x = 0$) уравнение (1.1) с граничными условиями (1.4)–(1.6) интегрируется, результатом являются соотношения для адиабатической температуры и скорости распространения пламени соответственно:

$$T_f = T_0 + \frac{Q}{C}, \quad (1.7)$$

$$m = \int_{-\infty}^0 \rho W dx. \quad (1.8)$$

Далее граничное условие (1.5) может быть представлено как

$$x = 0: T = T_f. \quad (1.9)$$

С точки зрения постановки задачи в дифференциальных уравнениях условия (1.5) и (1.9) эквивалентны, однако приводят к некоторым особенностям при получении численного решения.

§ 2. Метод взвешенных невязок

Рассмотренное выше уравнение (1.1) может быть решено как задача с начальными условиями [4], что позволяет применить разностные схемы высокого порядка аппроксимации (например, схему Рунге–Кутты 4-го порядка). Поскольку цель настоящей работы состоит в формулировке вычислительного алгоритма, основанного на вариационном принципе, здесь рассматривается решение краевой задачи. Данный подход предполагает интегрирование исходного уравнения по заранее заданной области, что невыполнимо при решении задачи Коши.

Применение метода конечных элементов к решению уравнения (1.1) основывается на аппроксимации искомой функции вида

$$T(x) = T_\beta N_\beta(x) \quad (2.1)$$

с линейными (в рассматриваемом здесь элементарном случае) базисными функциями $N_\beta(x)$ и приводит его к виду

$$Cm \frac{d(T_\beta N_\beta)}{dx} - \lambda \frac{d^2(T_\beta N_\beta)}{dx^2} - Q\rho W = 0. \quad (2.2)$$

Далее используется метод взвешенных невязок с применением метода Галеркина, согласно которому в качестве весовых функций при интегрировании исходного уравнения принимаются

базисные функции N_β , введенные при аппроксимации (2.1). Интеграл уравнения (2.2) по расчетной области принимает вид

$$\int_V \left(Cm \frac{d(T_\beta N_\beta)}{dx} N_\alpha - \lambda \frac{d^2(T_\beta N_\beta)}{dx^2} N_\alpha - Q\rho W N_\alpha \right) dV = 0. \quad (2.3)$$

Применив для уравнения (2.3) теорему Остроградского–Гаусса, получим

$$Cm \int_V N_\alpha \frac{dN_\beta}{dx} T_\beta dV + \lambda \int_V \frac{dN_\alpha}{dx} \frac{dN_\beta}{dx} T_\beta dV - \lambda \int_\Gamma N_\alpha \frac{d(T_\beta N_\beta)}{dx} d\Gamma - Q \int_V N_\alpha \rho W dV = 0, \quad (2.4)$$

где поверхностный интеграл равен нулю вследствие граничных условий (1.5)–(1.6).

Интегрирование уравнения (2.4) по конечным элементам приводит к системе линейных алгебраических уравнений

$$a_i T_{i-1} + b_i T_i + c_i T_{i+1} = d_i, \quad (2.5)$$

где

$$\begin{aligned} a_i &= \frac{\lambda}{x_i - x_{i-1}} + \frac{Cm}{2}, \\ b_i &= -\frac{\lambda}{x_i - x_{i-1}} - \frac{\lambda}{x_{i+1} - x_i}, \\ c_i &= \frac{\lambda}{x_{i+1} - x_i} - \frac{Cm}{2}, \\ d_i &= -Q \left(\int_{x_{i-1}}^{x_i} N_i \rho W dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} N_i \rho W dx \right). \end{aligned} \quad (2.6)$$

Отметим, что применение метода конечных разностей (при аппроксимации первой производной центральными разностями) для решения уравнения (1.1) приводит к практически такому же дискретному аналогу, в котором коэффициенты левой части уравнения (2.5) совпадают, а правая часть принимает вид $d_i = -Q\rho_i W_i (x_{i+1} - x_{i-1})/2$, что соответствует аппроксимации интеграла (2.6) ступенчатой функцией нулевого порядка. Поскольку плотность ρ и скорость реакции W являются функциями T , причем последняя имеет существенно нелинейную (экспоненциальную) зависимость согласно уравнению (1.3), применение метода конечных элементов представляется предпочтительным и позволяет вычислить интегралы (2.6) с более высокой точностью.

§ 3. Метод локального потенциала

Вариационная формулировка задачи заключается в минимизации функционала

$$P = \int_V \sigma dV \rightarrow \min, \quad (3.1)$$

где потенциал представляет собой производство энтропии в рассматриваемой термодинамической системе (например, [5]):

$$\sigma = \sum_i L_i X_i. \quad (3.2)$$

Здесь L_i , X_i — термодинамические потоки и обобщенные силы i -го необратимого процесса, которыми в нашем случае являются теплопроводность и химическая реакция.

Термодинамический поток, обусловленный теплопроводностью (с учетом конвективного переноса [6]), выражается соотношением

$$J_T = -\lambda \frac{dT}{dx} + CmT. \quad (3.3)$$

Соотношение для обобщенной силы, соответствующей теплопроводности, имеет вид:

$$X_T = \frac{d}{dx} \frac{1}{T} = \frac{d\gamma}{dx}. \quad (3.4)$$

Здесь для удобства выкладок введена переменная, обратная температуре:

$$\gamma = 1/T. \quad (3.5)$$

Феноменологический коэффициент для процесса теплопроводности имеет вид:

$$L_T = \frac{J_T}{X_T} = \frac{-\lambda \frac{dT}{dx} + CmT}{\frac{d\gamma}{dx}}. \quad (3.6)$$

Термодинамический поток, обобщенная сила и феноменологический коэффициент, обусловленные химической реакцией, выражаются соответственно следующими соотношениями [5]:

$$J_W = \rho W, \quad (3.7)$$

$$X_W = \frac{Q}{T} = Q\gamma, \quad (3.8)$$

$$L_W = \frac{J_W}{X_W} = \frac{\rho W}{Q\gamma}. \quad (3.9)$$

При формулировке выражения (3.9) средство химической реакции полагалось равным ее тепловому эффекту [7, 8].

Обобщенный термодинамический потенциал представляется в виде

$$\sigma = \sum_i L_i X_i = L_T(\tilde{\gamma}) X_T^2(\gamma) + L_W(\tilde{\gamma}) X_W^2(\gamma), \quad (3.10)$$

где используется концепция локального потенциала [6, 9], заключающаяся в том, что варьирование по переменной $\tilde{\gamma}$ не проводится при получении уравнения Эйлера–Лагранжа

$$\frac{\partial \sigma}{\partial \tilde{\gamma}} - \frac{d}{dx} \frac{\partial \sigma}{\partial \left(\frac{d\tilde{\gamma}}{dx}\right)} = 0. \quad (3.11)$$

Применение (3.11) к потенциалу вида (3.10) приводит к уравнению

$$\left(\frac{\rho W}{Q\tilde{\gamma}}\right)_{\tilde{\gamma}=\gamma} Q^2 2\gamma - \frac{d}{dx} 2 \left(\frac{-\lambda \frac{dT}{dx} + CmT}{\frac{d\tilde{\gamma}}{dx}}\right)_{\tilde{\gamma}=\gamma} \frac{d\gamma}{dx} = 0, \quad (3.12)$$

которое обеспечивает эквивалентность вариационной постановки задачи (3.1) с потенциалом (3.10) и дифференциальной постановки (1.1).

Для решения задачи в вариационной постановке также используется метод конечных элементов. Аналогично (2.1), вводится аппроксимация искомой переменной линейными базисными функциями

$$\gamma(x) = \gamma_\beta N_\beta(x), \quad (3.13)$$

и функционал (3.1) приводится к виду

$$P = \int_V \sigma dV = \int_V \left[L_T(\gamma) \left(\frac{dN_\beta}{dx} \gamma_\beta\right)^2 + L_W(\gamma) (QN_\beta \gamma_\beta)^2 \right] dV. \quad (3.14)$$

Для минимизации функционала (3.14) составляется система уравнений, определяющая равенство нулю его производных по значениям искомой функции γ_i в узлах конечных элементов:

$$\frac{\partial P}{\partial \gamma_i} = 0. \quad (3.15)$$

Таким образом, получаем следующую систему линейных алгебраических уравнений:

$$a_i \gamma_{i-1} + b_i \gamma_i + c_i \gamma_{i+1} = 0, \quad (3.16)$$

где

$$a_i = -\frac{1}{(x_i - x_{i-1})^2} \int_{x_{i-1}}^{x_i} L_T dx + Q^2 \int_{x_{i-1}}^{x_i} L_W N_i N_{i-1} dx,$$

$$b_i = \frac{1}{(x_{i+1} - x_i)^2} \int_{x_i}^{x_{i+1}} L_T dx + \frac{1}{(x_i - x_{i-1})^2} \int_{x_{i-1}}^{x_i} L_T dx + Q^2 \int_{x_{i-1}}^{x_i} L_W N_i^2 dx + Q^2 \int_{x_i}^{x_{i+1}} L_W N_i^2 dx,$$

$$c_i = -\frac{1}{(x_{i+1} - x_i)^2} \int_{x_i}^{x_{i+1}} L_T dx + Q^2 \int_{x_i}^{x_{i+1}} L_W N_i N_{i+1} dx.$$

В [10] отмечено, что применение локального потенциала и метода взвешенных невязок приводит к эквивалентным формулировкам задачи. Однако отметим, что численная реализация данных подходов приводит к различным формам дискретных аналогов. Так, правая часть системы уравнений (3.16) равна нулю в отличие от системы (2.5), что непосредственно отражается на вычислительном алгоритме решения системы алгебраических уравнений.

§ 4. Особенности вычислительного алгоритма

Практическая реализация рассматриваемого здесь численного метода решения поставленной задачи содержит ряд особенностей, детальный анализ которых позволит обеспечить устойчивость и сходимость вычислительного процесса. Прежде всего, отметим, что исходное дифференциальное уравнение (1.1) является нелинейным вследствие соотношения (1.3) для источника члена, описывающего тепловыделение в ходе химической реакции горения. Фактически дискретные аналоги (2.5) и (3.16) являются системами квазилинейных алгебраических уравнений соответственно:

$$a_i T_{i-1}^{(n)} + b_i T_i^{(n)} + c_i T_{i+1}^{(n)} = d_i \left(T^{(n-1)} \right), \quad (4.1)$$

$$a_i \left(\gamma^{(n-1)} \right) \gamma_{i-1}^{(n)} + b_i \left(\gamma^{(n-1)} \right) \gamma_i^{(n)} + c_i \left(\gamma^{(n-1)} \right) \gamma_{i+1}^{(n)} = 0, \quad (4.2)$$

где n — номер приближения «внутренней» (назовем ее так) итерационной процедуры. Заметим, что применение метода взвешенных невязок приводит к необходимости обеспечения устойчивости разностной схемы (4.1) по правой части, тогда как дискретная реализация вариационной формулировки (4.2) связана с устойчивостью по начальным данным. Вид зависимости скорости реакции от температуры (1.3) не оставляет надежды на гарантированное получение устойчивого решения, поскольку в интересующей нас области определения данная функция является неограниченной. Таким образом, до тех пор, пока не будет определено более или менее согласованное распределение температуры в расчетной области, обеспечивающее баланс тепловыделения и теплоотвода, вычислительный процесс будет неустойчивым при любых положительных приращениях переменной T . Для разрешения данной проблемы здесь используется метод нижней релаксации [11]:

$$T^{(n)} = T^{(n-1)} + \alpha \left(\tilde{T}^{(n)} - T^{(n-1)} \right), \quad (4.3)$$

где $\alpha < 1$ — коэффициент релаксации (регуляризации), $\tilde{T}^{(n)}$ — истинное решение системы (4.1) на n -ой итерации. Очевидно, что применение корректировки решения вида (4.3) замедляет сходимость, но обеспечивает устойчивость решения. Отмеченная выше нелинейность рассматриваемого уравнения не дает возможности провести аналитические оценки параметра релаксации α , оптимальное значение которого может быть определено только в результате вычислительного эксперимента.

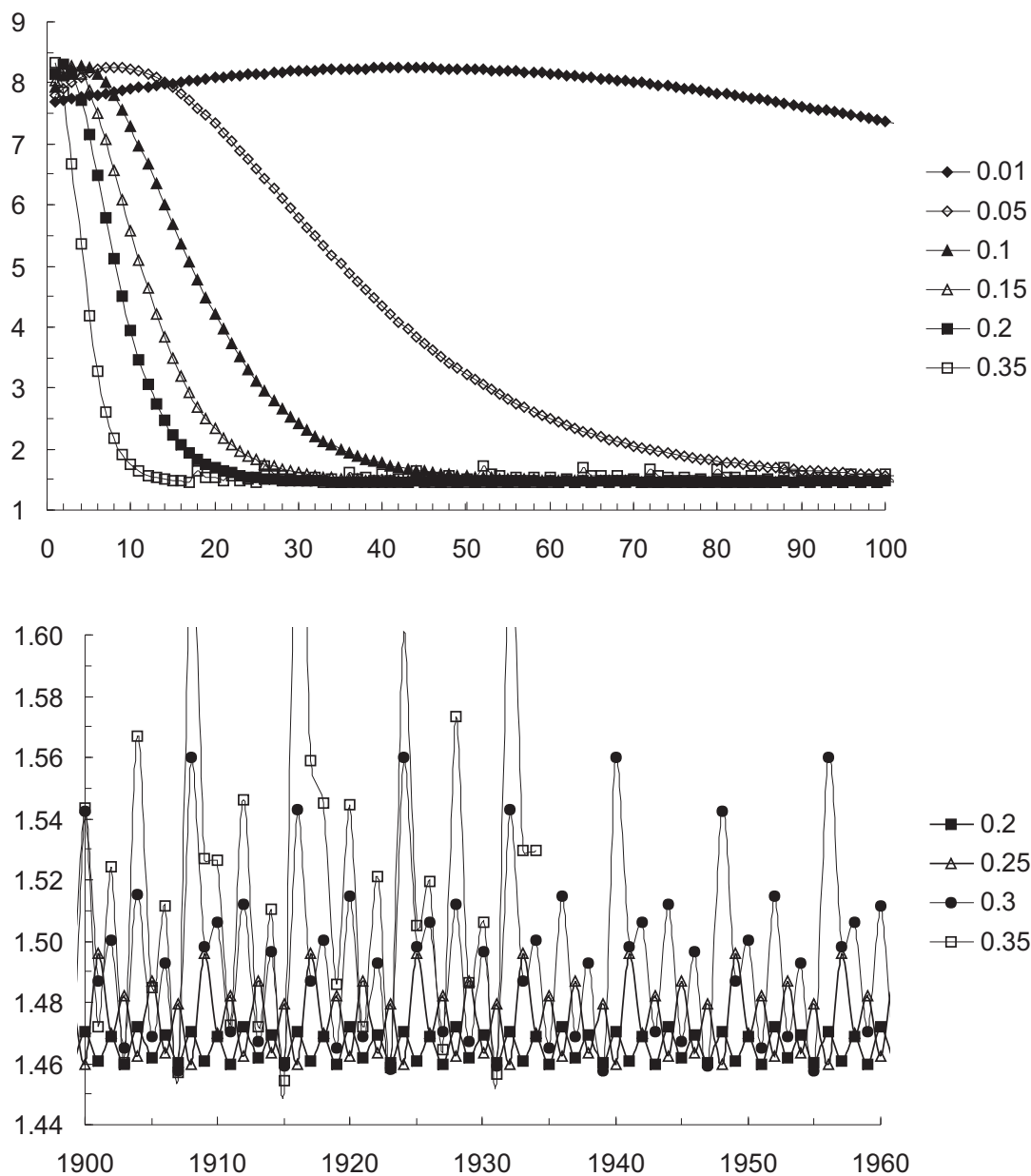


Рис. 1. Зависимость скорости распространения пламени от номера итерации при различных значениях коэффициента релаксации. Метод взвешенных невязок

Как отмечено выше, решение уравнения (1.1) может удовлетворять трем граничным условиям (1.4)–(1.6) только при одном значении параметра m , соответствующем стационарному распространению пламени. Поскольку данное значение заранее не известно, получение решения по итерационной схеме (4.1) проводится при некотором приближении m . То же самое относится к методу локального потенциала, представленному выражением для теплового потока (3.3) и системой алгебраических уравнений (4.2). Таким образом, рассмотренная нелинейность рассматриваемой задачи не ограничивается соотношениями (4.1), (4.2) для «внутреннего» итерационного цикла и требует введения «внешнего» (или глобального) итерационного процесса вида

$$m^{(k+1)} = \int_{-L}^0 \rho(T^{(k)}) W(T^{(k)}) dx, \quad (4.4)$$

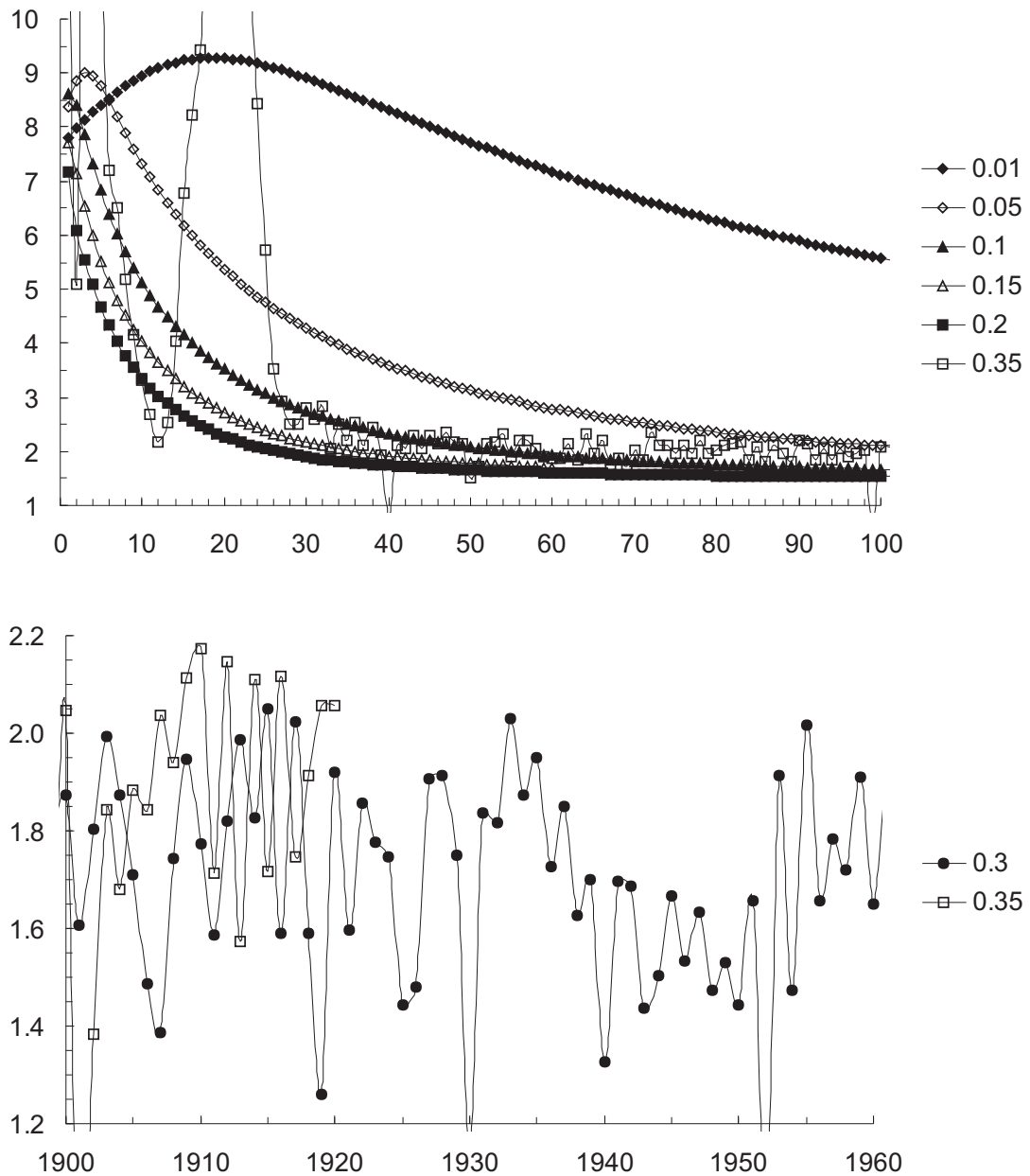


Рис. 2. Зависимость скорости распространения пламени от номера итерации при различных значениях коэффициента релаксации. Метод локального потенциала

обеспечивающего выполнение условия сохранения реагента в ходе химической реакции согласно уравнению (1.8).

Дополнительно отметим, что для повышения точности расчетов, интегралы в уравнениях (2.6), (3.16) вычисляются с помощью квадратурных формул Гаусса по трем внутренним точкам конечного элемента.

§ 5. Результаты и обсуждение

Проведенные расчеты соответствуют распространению пламени по смеси предварительно перемешанных газов, исходные данные взяты из [4, 12]. Прежде всего, отметим, что распределения физических переменных (температуры T , теплового потока $\lambda dT/dx$ и скорости химической реакции W) по расчетной области и значение стационарной скорости распространения пламени m , полученные как при решении исходного дифференциального уравнения (1.1)

с дискретным аналогом (2.5), так и при применении метода локального потенциала (3.16), полностью (до точности вычислений) совпадают. Поскольку эти зависимости, в общем, известны, приводить их не имеет смысла. Основное внимание здесь уделяется непосредственно параметрам вычислительного процесса.

На рис. 1, 2 представлены результаты исследования сходимости решения задачи от начального (линейного) распределения температуры $T = T_0 + (T_f - T_0)x/L$, где L — длина расчетной области. Отметим, что в обоих случаях полученное значение стационарной скорости распространения пламени (представляющее интерес, прежде всего, как макроскопический параметр задачи) составляет $1,46 \text{ кг}/(\text{м}^2 \text{ с})$. Данные нижних графиков (рис. 1, 2) позволяют определить критические значения коэффициента релаксации α , обеспечивающие устойчивую сходимость решения. Отметим, что для метода локального потенциала (рис. 2) данное значение составляет $\alpha \simeq 0,3$, для решения дифференциального уравнения методом взвешенных невязок (рис. 1) — $\alpha \simeq 0,2$.

Основным выводом представленных результатов является подтверждение адекватности применения метода локального потенциала для решения рассмотренной задачи о расчете стационарной скорости распространения пламени.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Карпов А. И. О формулировке термодинамического вариационного принципа для задачи о стационарном распространении пламени // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. — 2008. — Вып. 3. — С. 61–68.
2. Математическая теория горения и взрыва. / Зельдович Я. Б., Баренблатт Г. И., Либрович В. Б., Махвиладзе Г. М. — М.: Наука, 1980. — 478 с.
3. Вильямс Ф. А. Теория горения. — М.: Наука, 1971. — 616 с.
4. Karпов A. I. Minimal Entropy Production as an Approach to the Prediction of Stationary Rate of Flame Propagation // J. Non-Equilib. Thermodyn. — 1992. — Vol. 17, № 1. — P. 1–9.
5. де Гроот С., Мазур П. Неравновесная термодинамика. М.: Мир, 1964. — 456 с.
6. Гленсдорф П., Пригожин И. Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций. М.: Мир, 1973. — 280 с.
7. Карпов А. И., Булгаков В. К. Об одном нетрадиционном алгоритме расчета скорости распространения пламени // Физика горения и взрыва. — 1990. — Т. 26, № 5. — С. 137–138.
8. Герасев А. П. Неравновесная термодинамика тепловых волн в слое катализатора. Функционал автоволнового решения // Физика горения и взрыва. — 2000. — Т. 36, № 3. — С. 51–59.
9. Шехтер Р. С. Вариационный метод в инженерных расчетах. — М.: Мир, 1971. — 291 с.
10. Finlayson B. A, Scriven L. E. On the Search for Variational Principles // Int. J. Heat Mass Transfer. — 1967. — Vol. 10, — P. 799–821.
11. Патанкар С. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. — М.: Энергоатомиздат, 1984. — 152 с.
12. Karпов A. I., Bulgakov V. K., Novozhilov V. Quantitative estimation of relationship between the state with minimal entropy production and the actual stationary regime of flame propagation // J. Non-Equilib. Thermodyn. — 2003. — Vol. 28, № 3. — P. 193–205.

A. I. Karpov, A. V. Kudrin

Method of local potential for the prediction of stationary flame spread rate

The problem of the prediction of steady flame spread rate has been studied. Finite element method has been applied to the boundary value problem involving two approaches for deriving the system of algebraic equations: weighted residuals method for differential conservation equation and variational formulation in the form local thermodynamic potential. The detailed numerical algorithm and results of solution's stability and convergence study have been presented.

Keywords: flame spread, stationary state, variational principle, local potential.

Mathematical Subject Classifications: 49S05, 49M20, 76M30

Карпов Александр Иванович, д. ф.-м. н., профессор, заведующий кафедрой Вычислительной механики Удмуртского государственного университета, главный научный сотрудник, Институт прикладной механики УрО РАН, 426067, Россия, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной, 34, E-mail: karpov@udman.ru

Кудрин Алексей Владимирович, аспирант, кафедра вычислительной механики, Удмуртский государственный университет, 426034, Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1, E-mail: alexeykudrin1985@mail.ru