

УДК 536.46:517.972.5

© А. В. Кудрин, А. И. Карпов

ВАРИАЦИОННАЯ ФОРМУЛИРОВКА ЗАДАЧИ О РАСЧЕТЕ СТАЦИОНАРНОЙ СКОРОСТИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ПЛАМЕНИ НА ОСНОВЕ ОБОБЩЕННОГО ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО ФУНКЦИОНАЛА¹

Сформулирована вариационная постановка задачи для обобщенной формы термодинамического функционала, заключающаяся в его минимизации относительно искомой скорости распространения пламени как дополнительной переменной. Для стационарного состояния рассмотренного функционала получено интегральное соотношение для скорости распространения пламени.

Ключевые слова: распространение пламени, стационарное состояние, вариационный принцип, термодинамический функционал.

Введение

Алгоритмы расчета стационарной скорости распространения пламени разделяются на две основные группы [1]: интегрирование нестационарных уравнений в частных производных и интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений. Решение нестационарных уравнений позволяет использовать стандартные схемы решения параболических уравнений, а также дает возможность непосредственного моделирования нестационарных процессов (воспламенения, погасания, пульсационных режимов), но предполагает значительные вычислительные затраты. Постановка задачи в подвижной системе координат, связанной с фронтом пламени, понижает размерность задачи и приводит к стационарным уравнениям, что однозначно сокращает вычислительную нагрузку, однако сопряжена со сложностями решения задачи на собственное значение, в качестве которого выступает искомая скорость распространения пламени. Вследствие последнего замечания большинство методик расчета [2–9] основано на комбинированных схемах, использующих алгоритм решения нестационарных уравнений на начальных итерациях (когда профили рассчитываемых переменных далеки от истинных и необходим некоторый релаксирующий фактор) с последующим переходом к решению стационарной задачи, в которой значение скорости распространения пламени определяется на основе интегрального соотношения для кинетической скорости химической реакции. Таким образом, необходимо либо решить нетривиальную задачу выбора начальных приближений для значения скорости распространения пламени и распределений температуры и концентраций при решении задачи в стационарной постановке, либо использовать нестационарные уравнения (фактически, решить вычислительно затратную физическую задачу воспламенения), хотя целью является исследование именно стационарного процесса.

Целью настоящей работы является получение соотношений, позволяющих обеспечить согласование начальных профилей температуры и концентраций со скоростью химической реакции, интеграл по области от которой определяет значение линейной скорости распространения пламени, что позволит решить рассматриваемую задачу в полностью стационарной постановке.

§ 1. Постановка задачи и общий алгоритм решения

Математическая модель процесса одномерного стационарного распространения пламени по смеси перемешанных газов выражается следующими соотношениями (рассмотрим постановку

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

задачи в ее формализованном виде [10, 11]:

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

$$x = -\infty : T = T_0, \quad (1.2)$$

$$x = -\infty : \frac{dT}{dx} = 0, \quad (1.3)$$

$$x = 0 : \frac{dT}{dx} = 0, \quad (1.4)$$

$$\rho = p/RT, \quad (1.5)$$

$$W = \left(\frac{T_f - T}{T_f - T_0} \right) k \exp(-E/R_0T). \quad (1.6)$$

Здесь T — температура, C — теплоемкость, λ — коэффициент теплопроводности, Q — теплота реакции, m — массовая скорость распространения пламени, ρ — плотность, p — давление, R — удельная газовая постоянная, R_0 — универсальная газовая постоянная, k — предэкспоненциальный множитель, E — энергия активации.

Таким образом, постановка задачи состоит из дифференциального уравнения второго порядка (1.1), содержащего собственный параметр m , искомое значение которого при стационарном распространении пламени обеспечивает выполнение трех граничных условий (1.2)–(1.4). Интегрирование уравнения (1.1) с граничными условиями (1.2)–(1.4) приводит к соотношениям для адиабатической температуры и скорости распространения пламени соответственно:

$$T_f = T_0 + Q/C, \quad (1.7)$$

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

Общая схема решения рассмотренной задачи заключается в применении следующего вычислительного алгоритма:

1. Имеется некоторое приближение для функции $T_n^{(k)}(x)$ и параметра $m^{(k)}$.
2. Проводится внутренний итерационный процесс для решения уравнения

$$Cm^{(k)} \frac{dT_{n+1}^{(k)}}{dx} = \lambda \frac{d^2T_{n+1}^{(k)}}{dx^2} + Q\rho W \left(T_n^{(k)} \right),$$

соответствующего (1.1), при некотором значении $m^{(k)}$ до получения сходящегося решения $T_{n+1}^{(k)} \rightarrow T_n^{(k)}$.

3. По полученному распределению $T_{n+1}^{(k)}(x)$ из интеграла (1.8) определяется значение скорости распространения пламени: $m^{(k+1)} = \int_{-\infty}^0 \rho W \left(T_{n+1}^{(k)} \right) dx$.

4. Проводится внешний итерационный процесс до получения сходящегося решения $m^{(k+1)} \rightarrow m^{(k)}$.

Таким образом, алгоритм расчета скорости распространения пламени является глобально итерационным (двухуровневым), требующим для вычисления его каждого последовательного приближения информации о пространственных распределениях температуры по области, которые сами по себе являются результатом итерационного решения системы нелинейных дифференциальных уравнений, полученным для некоторого приближения значения скорости распространения пламени. Основная сложность численной реализации алгоритмов подобного типа относится к получению решения на начальных итерациях, когда отсутствует достоверная информация о профиле температуры, который вынужденно подбирается из некоторых эвристических соображений, как правило, является негладким (обычно, линейно-ступенчатым) и,

соответственно, приводит к несогласованности искомой скорости распространения пламени с интегралом от скорости химической реакции. Результатом этого является нередко наблюдаемая расходимость решения, для преодоления которой проводится детальный подбор (практически, ручной) начальных данных, причем данная работа обычно не отражается в общих вычислительных затратах при оценке эффективности вычислительного алгоритма.

Отметим, что поиск стационарного решения любой задачи может быть представлен как определение экстремума некоторого функционала и сформулирован в виде вариационного принципа. Данный подход предполагает существование некоторого потенциала, прямое получение которого из дифференциальной постановки (применение теоремы о минимуме квадратичного функционала для линейных систем) для нелинейного уравнения вида (1.1) в общем случае невозможно. Тем не менее, нашей целью является не требование полной идентичности дифференциальной и вариационной постановок, а получение некоторых приближенных соотношений, позволивших бы получить обоснование для применения вариационного принципа, основанного на дополнительных физических представлениях.

§ 2. Вариационная формулировка

Представим вариационную формулировку рассмотренной выше задачи в виде минимизации функционала

$$P = \int_V \sigma dV \rightarrow \min, \quad (2.1)$$

где потенциал представляет собой производство энтропии в рассматриваемой термодинамической системе (например, [12]):

$$\sigma = J_T X_T + J_W X_W. \quad (2.2)$$

Термодинамический поток (с учетом конвективного переноса [13]) и обобщенная сила, обусловленные процессом теплопроводности, выражаются следующими соотношениями соответственно [12]:

$$J_T = -\lambda \frac{dT}{dx} + CmT, \quad (2.3)$$

$$X_T = \frac{d}{dx} \frac{1}{T}. \quad (2.4)$$

Соотношения для термодинамического потока и обобщенной силы, обусловленных химической реакцией, имеют вид [12]:

$$J_W = \rho W, \quad (2.5)$$

$$X_W = Q/T. \quad (2.6)$$

При формулировке выражения (2.6) сродство химической реакции полагалось равным ее тепловому эффекту [14, 15].

В работе [10] показано, что в общем случае уравнение Эйлера–Лагранжа для потенциала (2.2) с соотношениями (2.3)–(2.6) не соответствует исходному дифференциальному уравнению (1.1), однако применение концепции локального равновесия [13] позволяет получить эквивалентность вариационной и дифференциальной постановок при использовании метода ограниченных вариаций [11]. Далее, в работе [11] проведено сравнение решения уравнения (1.1) методом взвешенных невязок и решение вариационной задачи (2.1). В обоих случаях для численной реализации использовался метод конечных элементов. Результаты проведенных расчетов показали, что распределения физических переменных (температуры, теплового потока, скорости химической реакции) и значение стационарной скорости распространения пламени, полученные обоими методами, совпадают до точности вычислений, что подтверждает принципиальную адекватность применения вариационного подхода для решения задачи о расчете стационарной скорости распространения пламени. Тем не менее, следует особо подчеркнуть, что в обоих случаях решение проводилось согласно представленной выше итерационной процедуре, с той лишь разницей, что на шаге 2 для вариационной постановки вместо решения уравнения (1.1) минимизировался функционал (2.1).

Таким образом, функционал вида (2.1) не позволяет определить скорость распространения пламени из его непосредственной минимизации по переменной m , все возможные манипуляции [10] приводят к тривиальному решению $m = 0$ (соответственно $T(x) = T_0$), соответствующему метастабильному равновесию в отсутствие распространения пламени, а поставленная задача определения m как дополнительной переменной остается нерешенной.

Рассмотрим обобщенный термодинамический функционал вида

$$\hat{P} = f(m) \int_x \sigma dx, \tag{2.7}$$

полученный умножением функционала (2.1) на непрерывно дифференцируемую функцию $f(m)$, основная цель введения которой — получение возможности прямого дифференцирования функционала (2.7) по переменной m , что приводит к следующему выражению:

$$\frac{\partial \hat{P}}{\partial m} = \frac{df}{dm} \int_x \left(-\lambda \frac{dT}{dx} X_T \right) dx + m \frac{df}{dm} \int_x CT X_T dx + \frac{df}{dm} \int_x J_W X_W dx + f \int_x CT X_T dx. \tag{2.8}$$

Здесь термодинамические потоки и обобщенные силы потенциала (2.2) определяются соотношениями (2.3)–(2.6). Введем следующие обозначения для интегралов уравнения (2.8):

$$a = \int_x \left(-\lambda \frac{dT}{dx} X_T \right) dx, \quad b = \int_x CT X_T dx, \quad c = \int_x J_W X_W dx.$$

Условие стационарности функционала (2.7) по переменной m определяется соотношением $\partial \hat{P} / \partial m = 0$, которое преобразуется к дифференциальному уравнению с разделяющимися переменными:

$$\frac{df}{dm} (d - m) = f, \tag{2.9}$$

где $d = -(a + c)/b$. Решение уравнения (2.9) имеет вид:

$$f(m) = \frac{f(m_0) (d - m_0)}{(d - m)}, \tag{2.10}$$

где параметр d определяется следующим интегралом:

$$d = \frac{1}{C \ln(T_f/T_0)} \int_x \left(\frac{\lambda}{T^2} \left(\frac{dT}{dx} \right)^2 + \frac{Q}{T} \rho W \right) dx. \tag{2.11}$$

Семейство функций (2.10) обеспечивает стационарность функционала (2.7) по переменной m , который принимает следующий вид:

$$\hat{P} = \frac{f(m_0) (d - m_0)}{(d - m)} \int_x \sigma dx \rightarrow \min \tag{2.12}$$

Отметим, что в соотношение (2.12) входят две константы интегрирования: m_0 и $f(m_0)$. При $f(m_0) = 0$ функционал (2.12) тождественно равен 0, что соответствует метастабильному равновесию при отсутствии распространения пламени. При $m = m_0$ получим формулировку задачи эквивалентную (2.7) с точностью до величины $f(m_0)$, что исключает возможность поиска экстремума функционала по переменной m . Оба случая не представляют интереса с точки зрения цели данной работы и далее рассматриваться не будут. Для поиска значения m , обеспечивающего минимум функционала (2.12), рассмотрим следующую формулировку.

Лемма 1. Пусть $m = d + \text{sign}[f(m_0)(d - m_0)]\varepsilon$, где $\varepsilon > 0$. Тогда $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \hat{P}(m) = -\infty$.

Доказательство. Обозначим $f(m_0)(d - m_0) = A$. Тогда

$$\begin{aligned} \hat{P}(m) &= -\frac{|A|}{\varepsilon} \int_x \sigma(d + \text{sign}[A]\varepsilon) dx = -\frac{|A|}{\varepsilon} \left(\int_x \sigma(d) dx + \text{sign}[A]\varepsilon C \int_x TX_T dx \right) = \\ &= -\frac{|A|}{\varepsilon} \int_x \sigma(d) dx - AC \int_x TX_T dx. \end{aligned}$$

Из (2.4) получим, что $X_T = -\frac{1}{T^2} \frac{dT}{dx}$, тогда интеграл из второго слагаемого будет равен:

$$\int_x TX_T dx = - \int_x \frac{1}{T} \frac{dT}{dx} dx = -\ln T(x) \Big|_{-\infty}^0 = -\ln \frac{T_f}{T_0}.$$

Согласно [12, 13] имеем, что $\int_x \sigma(d) dx > 0$; второе слагаемое представляет собой число, не зависящее от ε , в итоге получим

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(-\frac{|A|}{\varepsilon} \right) \int_x \sigma(d + \text{sign}[A]\varepsilon) dx = \int_x \sigma(d) dx \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(-\frac{|A|}{\varepsilon} \right) + AC \ln \frac{T_f}{T_0} = -\infty. \quad \square$$

Минимум функционала в данной постановке определяется только величиной m , вернее ее близостью к параметру d . Учитывая перечисленные выше ограничения на начальные условия и результаты леммы, получим выражение для скорости распространения пламени из вариационной постановки (2.12):

$$m = \frac{1}{C \ln(T_f/T_0)} \int_x \left(\frac{\lambda}{T^2} \left(\frac{dT}{dx} \right)^2 + \frac{Q}{T} \rho W \right) dx. \quad (2.13)$$

Полученное соотношение (2.13) предназначено для применения в вычислительном алгоритме в качестве альтернативы формуле (1.8). Стоит отметить, что интеграл (2.13), определяющий значение скорости распространения пламени, более полно представлен с физической точки зрения, поскольку включает две составляющие, первая из которых определяется теплопроводностью, вторая — скоростью химической реакции, что потенциально позволяет согласовать взаимовлияние обоих физических процессов, что и являлось целью поставленной задачи.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Williams F. A. Combustion theory (2nd Edition). Redwood, CA: Addison–Wesley, 1985.
2. Numerical methods in laminar flame propagation A GAMM workshop / Peters N., Warnatz J. (Eds.), Notes on numerical fluid mechanics. Vol. 6. Braunschweig: Vieweg, 1982.
3. Ловачев Л. А., Каганова З. И. Расчет характеристик бромоводородного пламени // Доклады АН СССР. 1969. Т. 188. № 5. С. 1087–1089.
4. Spalding D. B., Stephenson P. L. Laminar flame propagation in hydrogen+bromine mixtures // Proceedings of the Royal Society of London, A. 1971. Vol. 324. P. 315–337.
5. Smooke M. D. Solution of burner stabilized premixed laminar flames by boundary value methods // Journal of Computational Physics. 1982. Vol. 48. P. 72–105.
6. Smooke M. D., Miller J. A., Kee R. J. Determination of adiabatic flame speeds by boundary value methods // Combustion Science and Technology. 1983. Vol. 34. P. 79–90.
7. Басевич В. Я., Беляев А. А., Новожилов Б. В., Посвянский В. С. Численное исследование ламинарного распространения пламени для определения физико-химических характеристик горючей смеси // Горение гетерогенных и газовых систем. Материалы VIII Всесоюзного симпозиума по горению и взрыву. Черногловка: Институт химической физики АН СССР, 1986. С. 8–11.

8. Mukunda H. S., Deshpande S. M., Bhashyam A. T. New formulation for one-dimensional premixed flames // *AIAA Journal*. 1986. Vol. 24. P. 1127–1128.
9. Sermange M. Contribution to the numerical analysis of laminar stationary flames // *Numerical Simulation of Combustion Phenomena* / Glowinski R., Larrouturou B., Temam R. (Eds.), *Lecture Notes in Physics*. Vol. 241. Berlin–Heidelberg: Springer, 1985. P. 375–388.
10. 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.
11. Карпов А. И., Кудрин А. В. Метод локального потенциала для расчета стационарной скорости распространения пламени // *Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные Науки*. 2010. Вып. 4. С. 87–95.
12. де Гроот С., Мазур П. *Неравновесная термодинамика*. М.: Мир, 1964. 456 с.
13. Гленсдорф П., Пригожин И. *Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций*. М.: Мир, 1973. 280 с.
14. 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.
15. Герасев А. П. Неравновесная термодинамика тепловых волн в слое катализатора. Функционал автоволнового решения // *Физика горения и взрыва*. 2000. Т. 36. № 3. С. 51–59.

Поступила в редакцию 27.09.11

A. V. Kudrin, A. I. Karpov

Variational formulation of the problem of steady flame spread rate prediction using the generalized thermodynamic functional

The variational statement for the generalized form of thermodynamic functional has been formulated consisting in its minimization relatively to the sought steady flame spread rate treated as additional variable. An integral relationship for the flame spread rate has been achieved for the stationary state of considered functional.

Keywords: flame spread, stationary state, variational principle, thermodynamic functional.

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

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

Карпов Александр Иванович, д. ф.-м. н., заведующий лабораторией физико-химической механики, Институт прикладной механики УрО РАН, 426067, Россия, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной, 34.
Заведующий кафедрой вычислительной механики, Удмуртский государственный университет, 426034, Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1.
E-mail: karpov@udman.ru

Kudrin Aleksei Vladimirovich, post-graduate student, Department of Computational Mechanics, Udmurt State University, ul. Universitetskaya, 1, Izhevsk, 426034, Russia

Karpov Aleksandr Ivanovich, Doctor of Physics and Mathematics, Institute of Applied Mechanics, Ural Branch of RAS, ul. T. Baramzinoi, 34, Izhevsk, 426067, Russia
Department of Computational Mechanics, Udmurt State University, ul. Universitetskaya, 1, Izhevsk, 426034, Russia