

УДК 536.46

РАСЧЕТ СТАЦИОНАРНОЙ СКОРОСТИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ПЛАМЕНИ НА ОСНОВЕ ВАРИАЦИОННЫХ ПРИНЦИПОВ НЕРАВНОВЕСНОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ

© 2011 г.

А.И. Карпов¹, А.В. Кудрин²¹Институт прикладной механики УрО РАН, Ижевск²Удмуртский госуниверситет, Ижевск

karpov@udman.ru

Поступила в редакцию 16.05.2011

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.

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

Уравнение сохранения энергии, описывающее одномерное стационарное распространение пламени по смеси перемешанных газов при макроскопическом учете одностадийной реакции горения в бинарной газовой смеси (реагент → продукт) и соответствующие ему граничные условия имеют вид (см., например, [1]):

$$Cm \frac{dT}{dx} = \lambda \frac{d^2T}{dx^2} + Q\rho W, \quad (1)$$

$$x = -\infty: T = T_0, \quad (2)$$

$$x = -\infty: \frac{dT}{dx} = 0, \quad (3)$$

$$x = 0: \frac{dT}{dx} = 0. \quad (4)$$

Постановка задачи (1)–(4) замыкается уравнением состояния и соотношением для скорости химической реакции соответственно:

$$\rho = p/RT, \quad (5)$$

$$W = \left(\frac{T_f - T}{T_f - T_0} \right) k \exp(-E/R_0T). \quad (6)$$

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.

Интегрирование уравнения (1) с граничными условиями (2)–(4) приводит к соотношениям для адиабатической температуры и скорости распространения пламени:

$$T_f = T_0 + Q/C, \quad (7)$$

$$m = \int_{-\infty}^0 \rho W dx. \quad (8)$$

Решение представленной классической задачи давно известно и в таком простейшем модельном случае (рассматривается одна реакция, два компонента реакции, постоянные коэффициенты и т.п.) вряд ли представляет какой-либо интерес в настоящее время. В связи с этим отметим, что сам факт существования стационарного режима распространения пламени предполагает потенциальную возможность рассмотрения задачи на основе экстремального принципа, применение которого позволило бы сформулировать вариационную постановку задачи и представить искомую скорость распространения пламени в виде зависимой переменной. Представленные в [2] расчеты показали физическую адекватность применения принципа минимума производства энтропии для расчета скорости распространения пламени. В настоящем исследовании приводится развитие данного подхода, заключающееся в формулировке термодинамического потенциала.

Решение уравнения (1) методом взвешенных невязок в формулировке Галеркина и его численная реализация методом конечных элементов при аппроксимации линейными базисными функциями приводит к следующей системе квазилинейных алгебраических уравнений:

$$a_i T_{i-1} + b_i T_i + c_i T_{i+1} = d_i, \quad (9)$$

$$a_i = \frac{\lambda}{x_i - x_{i-1}} + \frac{Cm}{2}, \quad b_i = \frac{\lambda}{x_i - x_{i-1}} + \frac{\lambda}{x_{i+1} - x_i},$$

$$c_i = \frac{\lambda}{x_{i+1} - x_i} - \frac{Cm}{2},$$

$$d_i = -Q \left(\int_{x_{i-1}}^{x_i} N_i \rho W dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} N_i \rho W dx \right).$$

Здесь рассматривается вариационная формулировка задачи, заключающаяся в минимизации функционала $P = \int \sigma dx \rightarrow \min$, где потенциал представляет собой производство энтропии в рассматриваемой термодинамической системе (см., например, [3]) $\sigma = \sum J_i X_i$. Термодинамические потоки J_i и обобщенные силы X_i для i -го необратимого процесса, которыми здесь являются теплопроводность и химическая реакция, выражаются соотношениями:

$$J_T = -\lambda \frac{dT}{dx} + CmT, \quad X_T = \frac{d}{dx} \frac{1}{T} = \frac{d\gamma}{dx}, \quad (10)$$

$$J_W = \rho W, \quad X_W = Q/T = Q\gamma$$

с соответствующими феноменологическими коэффициентами

$$L_T = \frac{J_T}{X_T} = \frac{-\lambda dT/dx + CmT}{d\gamma/dx},$$

$$L_W = \frac{J_W}{X_W} = \frac{\rho W}{Q\gamma}. \quad (11)$$

Применение концепции локального потенциала [4] приводит к следующему виду обобщенно-термодинамического потенциала:

$$\sigma = L_T(\tilde{\gamma}) X_T^2(\gamma) + L_W(\tilde{\gamma}) X_W^2(\gamma). \quad (12)$$

Здесь при получении уравнения Эйлера–Лагранжа варьирование по переменной $\tilde{\gamma}$ не проводится.

Минимизация функционала $P = \int \sigma dx$ с потенциалом (12) по значениям искомой функции γ_i в узлах конечных элементов $\partial P / \partial \gamma_i = 0$ приводит к системе алгебраических уравнений:

$$a_i \gamma_{i-1} + b_i \gamma_i + c_i \gamma_{i+1} = 0, \quad (13)$$

где

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

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

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

$$+ Q^2 \int_{x_{i-1}}^{x_i} L_W N_i^2 dx + Q^2 \int_{x_i}^{x_{i+1}} L_W N_i^2 dx.$$

Проведенные расчеты показали, что распределения физических переменных (температуры, теплового потока, скорости химической реакции) и значение стационарной скорости распространения пламени, полученные как при решении исходного дифференциального уравнения (1) с дискретным аналогом (9), так и при применении метода локального потенциала (12) с дискретным аналогом (13) совпадают до точности вычислений, что подтверждает адекватность применения метода локального потенциала для решения рассмотренной задачи о расчете стационарной скорости распространения пламени.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант №10-01-96017-р_урал_а.

Список литературы

1. Зельдович Я.Б., Баренблатт Г.И., Либрович В.Б., Махвиладзе Г.М. Математическая теория горения и взрыва. М.: Наука, 1980. 478 с.
2. Karpov A.I. Minimal entropy production as an approach to the prediction of stationary rate of flame propagation // Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics. 1992. Vol. 17, No 1. P. 1–9.
3. Де Гроот С., Мазур П. Неравновесная термодинамика. М.: Мир, 1964. 456 с.
4. Гленсдорф П., Пригожин И. Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций. М.: Мир, 1973. 280 с.

PREDICTION OF THE STEADY FLAME SPREAD RATE BY THE VARIATIONAL PRINCIPLES OF NON-EQUILIBRIUM THERMODYNAMICS

A.I. Karpov, A.V. Kudrin

The problem of prediction of the steady flame spread rate is considered. The boundary-value problem was analyzed using finite element method with two approaches applied to the formulation of the system of algebraic equations: the weighed residuals for the differential conservative equation and the variational formulation for the local thermodynamic potential.

Keywords: flame spread, stationary state, variational principle.