Секция «Математика и механика»

Применение принципов термодинамики необратимых процессов для расчета стационарной скорости распространения пламени

Кудрин Алексей Владимирович

Аспирант

Удмуртский государственный университет, Математический факультет, Ижевск, Россия

E-mail: alexeykudrin1985@mail.ru

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

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

где T – температура, C – теплоемкость, λ – коэффициент теплопроводности, Q – теплота реакции, m – массовая скорость распространения пламени, ρ – плотность. Соотношения для скорости химической реакции и плотности имеют вид:

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

где k – предэкспоненциальный множитель, E – энергия активации, R_0 – универсальная газовая постоянная, p – давление, R – удельная газовая постоянная. Граничные условия и соотношения для адиабатической температуры и скорости распространения пламени при полном выгорании исходного вещества имеют вид:

$$x = -\infty: \quad \frac{dT}{dx} = 0, \quad T = T_0,$$

$$x = 0: \quad \frac{dT}{dx} = 0, \quad T_f = T_0 + Q/C,$$

$$m = \int_{-\infty}^{0} \rho W dx. \tag{2}$$

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

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

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

3. По полученному распределению $T_{n+1}^{(k)}(x)$ из интеграла (2) определяется следующее приближение скорости распространения пламени:
   $m^{(k+1)} = \int_{-\infty}^{0} \rho\left(T_{n+1}^{(k)}\right) W\left(T_{n+1}^{(k)}\right) dx.$
4. Проводится внешний итерационный процесс до получения сходящегося решения $m^{(k+1)} \to m^{(k)}$.

Представим вариационную формулировку рассмотренной выше задачи в виде минимизации функционала

$$P = \int_V \left(J_T X_T + J_W X_W\right) dV \to \min, \tag{3}$$

где потенциал представляет собой производство энтропии в рассматриваемой термодинамической системе, а минимум функционала (3) соответствует стационарному состоянию. Термодинамический поток (с учетом конвективного переноса) и обобщенная сила, обусловленные теплопроводностью и химической реакцией, имеют вид:

$$J_T = -\lambda\frac{dT}{dx} + CmT, \quad X_T = \frac{d}{dx}\frac{1}{T}, \quad J_W = \rho W, \quad X_W = Q/T.$$

В работе [2] проведен анализ соответствия друг другу дифференциальной (1) и вариационной (3) постановок, результатом которого стало выражение для скорости распространения пламени, полученное на основе применения вариационного принципа:

$$m = \frac{1}{C\ln\left(T_f/T_0\right)}\int_{-\infty}^{0}\left(\frac{\lambda}{T^2}\left(\frac{dT}{dx}\right)^2 + \frac{Q}{T}\rho W\right)dx. \tag{4}$$

Полученное соотношение (4) предназначено для применения в рассмотренном выше вычислительном алгоритме в качестве альтернативы интегралу (2). Представленные в [1] результаты расчетов показали, что предложенный алгоритм обеспечивает (при прочих равных условиях) лучшую сходимость и устойчивость итерационного процесса.

Литература

1. Карпов А.И., Кудрин А.В. К расчету стационарной скорости распространения пламени: применение принципов термодинамики необратимых процессов //Химическая физика и мезоскопия. 2012. Т. 14. No. 1. С. 5-11.
2. Кудрин А.В., Карпов А.И. Вариационная формулировка задачи о расчете стационарной скорости распространения пламени на основе обобщенного термодинамического функционала // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. 2011. No. 4. С. 80-85.