

УДК: 536.461:519.624.2

Параметрический анализ термодинамического алгоритма расчета стационарной скорости распространения пламени

А. И. Карпов^а, А. В. Кудрин^б

Институт механики УрО РАН,
Россия, 426067, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной, д. 34

E-mail: ^а karpov@udman.ru, ^б alexeykudrin1985@mail.ru

Получено 25 ноября 2013 г.

Представлены результаты расчетов стационарной скорости распространения пламени с использованием соотношения, полученного на основе термодинамического вариационного принципа. Показано, что предложенный вычислительный алгоритм обеспечивает устойчивую сходимость итерационного процесса при любом начальном приближении значительно отличающемся от искомого решения.

Ключевые слова: распространение пламени, стационарное состояние, термодинамический функционал, вычислительный алгоритм

Parametric study of the thermodynamic algorithm for the prediction of steady flame spread rate

A. I. Karpov, A. V. Kudrin

Institute of Mechanics, Ural Branch of the Russian Academy of Science, 34 T. Baramzinoi St., Izhevsk, 426067, Russia

Abstract. — The stationary flame spread rate has been calculated using the relationship based on the thermodynamic variational principle. It has been shown that proposed numerical algorithm provides the stable convergence under any initial approximation, which could be noticeably far from the searched solution.

Keywords: flame spread, stationary state, thermodynamic functional, numerical algorithm

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2013, vol. 5, no. 5, pp. 799–804 (Russian).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 13-08-01156а).

Введение

Расчет стационарной скорости одномерного распространения ламинарного пламени по перемешанной газовой смеси представляет собой классическую задачу теории горения [Франк-Каменецкий, 1967; Зельдович и др., 1980; Williams, 1985]. Несмотря на многолетнюю историю данной задачи, интерес к ней не уменьшается даже в фундаментальной части построения алгоритмов расчета, что подтверждается содержанием одного из пленарных докладов [Smooke, 2013] на последнем к настоящему времени международном симпозиуме по горению — главном форуме в данной области. Значение стационарной скорости распространения пламени представляет собой макроскопический параметр, отражающий результирующий эффект взаимодействия всех физико-химических и кинетических процессов, сопровождающих рассматриваемое явление, который может быть определен в сравнительно несложном эксперименте и является, как правило, основной характеристикой для сопоставления с результатами теоретических исследований.

Существование стационарного режима распространения пламени дает принципиальную возможность исключить время как независимую переменную и сформулировать задачу в стационарных уравнениях. Таким образом, понижение размерности уравнений предполагает разработку потенциально более эффективных алгоритмов расчета [Smooke, 1982] по сравнению с решением полной нестационарной задачи. Тем не менее возникающая при этом задача на собственное значение, приводит к необходимости разрешения своих сложностей, главная их которых связана с выбором начальных профилей рассчитываемых переменных.

В работах [Карпов, Булгаков, 1990; Карпов, 1992] был предложен алгоритм расчета скорости распространения пламени, основанный на принципе минимального производства энтропии. Далее [Кудрин, Карпов, 2011] данный подход был использован для формулировки вариационного термодинамического принципа, адекватность применения которого была подтверждена предварительными расчетами [Карпов, Кудрин, 2012]. В данной статье приводятся результаты параметрических расчетов скорости распространения пламени на основе соотношения, полученного в работе [Кудрин, Карпов, 2011].

Постановка задачи

В системе координат, связанной с фронтом пламени, математическая модель процесса одномерного распространения пламени по смеси перемешанных газов записывается в стационарных уравнениях сохранения (например, [Кудрин, Карпов, 2011]):

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

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

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

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

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

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

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.

Таким образом, постановка задачи состоит из дифференциального уравнения второго порядка (1), содержащего собственный параметр m , искомое значение которого при стационарном режиме распространения пламени обеспечивает выполнение трех граничных условий (2)–(4). Интегрирование уравнения (1) с граничными условиями (2)–(4) приводит к следующим соотношениям для адиабатической температуры горения и скорости распространения пламени соответственно:

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

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

С учетом уравнения (8) постановка задачи является замкнутой и имеет единственное решение. Таким образом, будем полагать, что значение стационарной скорости распространения пламени, полученное с использованием соотношения (8), является «физически» точным и удовлетворяющим основным уравнениям сохранения. На базе вариационного принципа, основанного на принципе минимального производства энтропии, в работе [Кудрин, Карпов, 2011] было сформулировано следующее соотношение:

$$m = \frac{1}{C \ln(T_f/T_0)} \int_x \left(\frac{\lambda}{T^2} \left(\frac{dT}{dx} \right)^2 + \frac{Q}{T} \rho W \right) dx. \quad (9)$$

Отметим, что уравнение (9) имеет схожую с (8) интегральную форму, однако включает в себя дополнительное слагаемое, связанное с обобщенной термодинамической силой, обусловленной процессом теплопроводности. Как показали тестовые расчеты [Карпов, Кудрин, 2012], данная особенность соотношения (9) приводит к большей устойчивости вычислительного алгоритма расчета скорости распространения пламени.

Результаты расчетов

Представленное выше уравнение (1) решается методом взвешенных невязок с использованием слабой формулировки Галеркина, для численной реализации применяется метод конечных элементов [Карпов, Кудрин, 2010]. Исходные данные для настоящих расчетов представлены в работе [Карпов, 1992]. Для таких теплофизических параметров полученное значение скорости распространения пламени составляет $m = 1.46$ кг/(м²с).

На рисунке 1 представлены результаты сходимости итерационного процесса для теплоты реакции составляющей $Q = 1.5$ МДж/кг, то есть увеличенной в полтора раза по сравнению с исходным вариантом. Важным в этом случае является тот факт, что значение скорости распространения пламени m для такого значения Q заранее неизвестно и расчеты начинались со значения $m^0 = 1.46$. Очевидно, что при использовании общепринятого соотношения (8) (кривая 1) итерационный процесс не сходится, тогда как предложенный интеграл (9) (кривая 2) дает устойчивое решение, сходящееся к значению $m = 5.34$, которое предполагается некоторым (достаточно хорошим) приближением к искомому значению. Подстановка полученного по соотношению (9) значения $m^0 = 5.34$ в алгоритм расчета, основанный на уравнении (8) (кривая 3) приводит к сходящемуся решению и значению скорости распространения пламени $m = 5.09$. На рисунке 2 представлены результаты расчетов при теплоте реакции $Q = 1.5$ МДж/кг при начальном значении $m^0 = 10$. Поведение кривых на рисунке 2 характеризуется такими же свойствами, как и данные рисунке 1 с небольшим различием в решении, полученном по предложенному алгоритму: $m^0 = 5.34$ и $m^0 = 5.28$ соответственно. Окончательное значение скорости распространения пламени

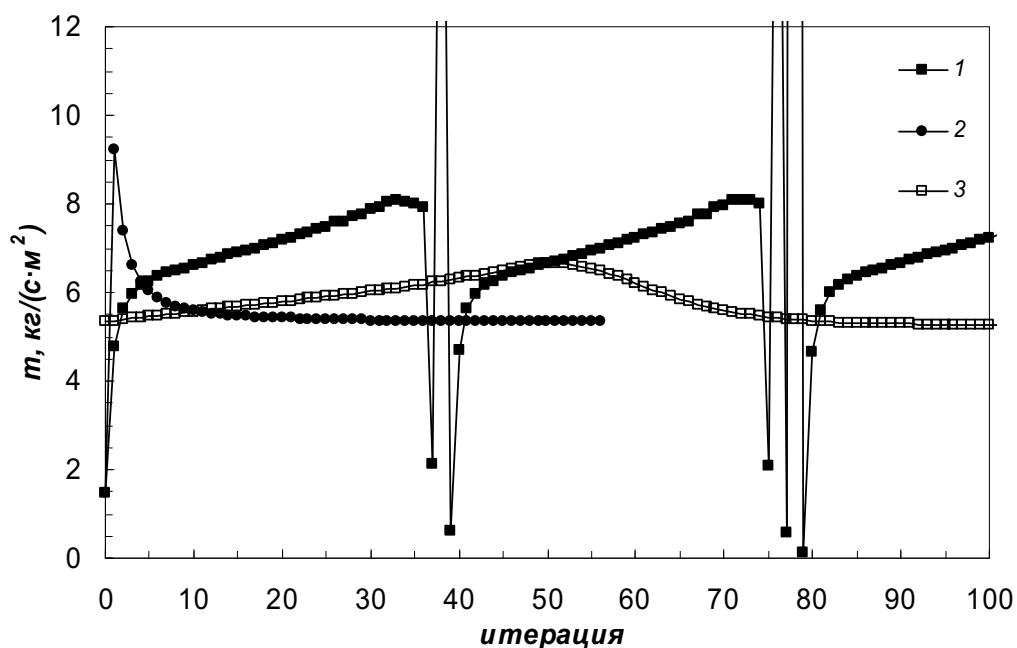


Рис. 1. Сходимость решения по скорости распространения пламени, $Q = 1.5$ МДж/кг. 1 — уравнение (8), $m^0 = 1.46$; 2 — уравнение (9), $m^0 = 1.46$; 3 — уравнение (8), $m^0 = 5.34$

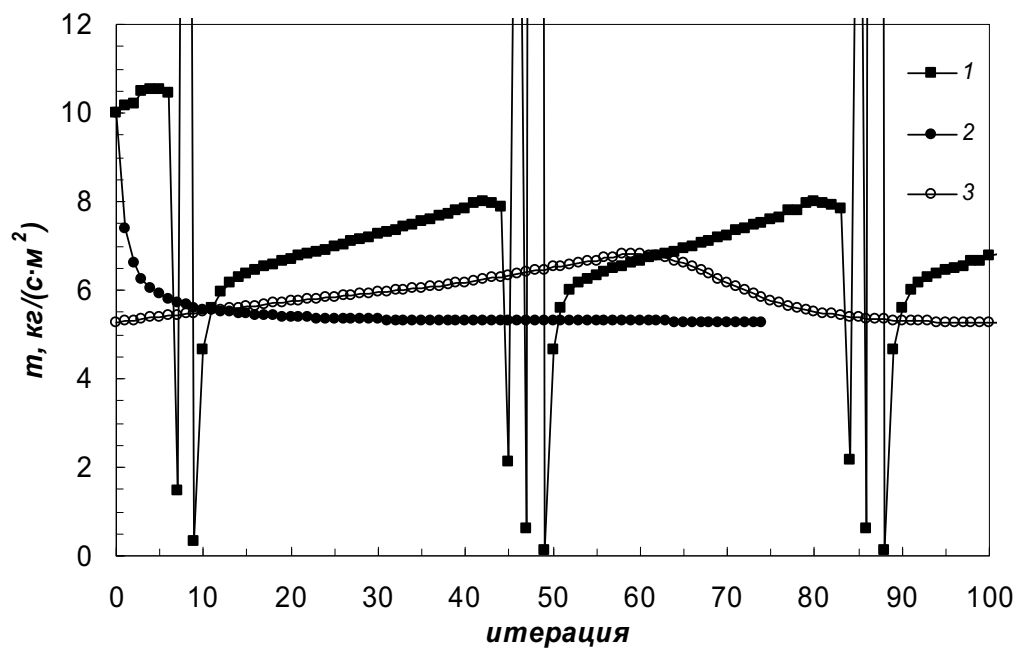


Рис. 2. Сходимость решения по скорости распространения пламени, $Q = 1.5$ МДж/кг. 1 — уравнение (8), $m^0 = 10$; 2 — уравнение (9), $m^0 = 10$; 3 — уравнение (8), $m^0 = 5.28$

одинаково для обоих случаев: $m = 5.09$. Далее были проведены расчеты для увеличенной начальной температуры смеси $T_0 = 500$ K (исходное значение составляло $T_0 = 300$ K) результаты которых представлены на рисунках 3, 4. Очевидны закономерности, аналогичные рассмотренному выше случаю, а полученное значение скорости распространения пламени составляет $m = 3.19$.

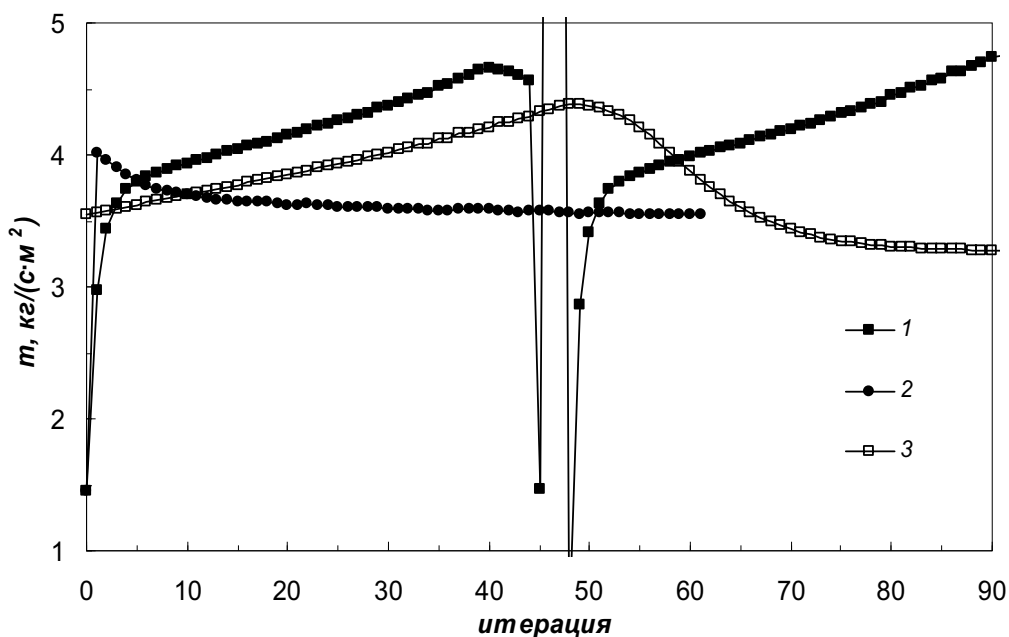


Рис. 3. Сходимость решения по скорости распространения пламени, $T_0 = 500$ К. 1 – уравнение (8), $m^0 = 1.46$; 2 – уравнение (9), $m^0 = 1.46$; 3 – уравнение (8), $m^0 = 3.55$

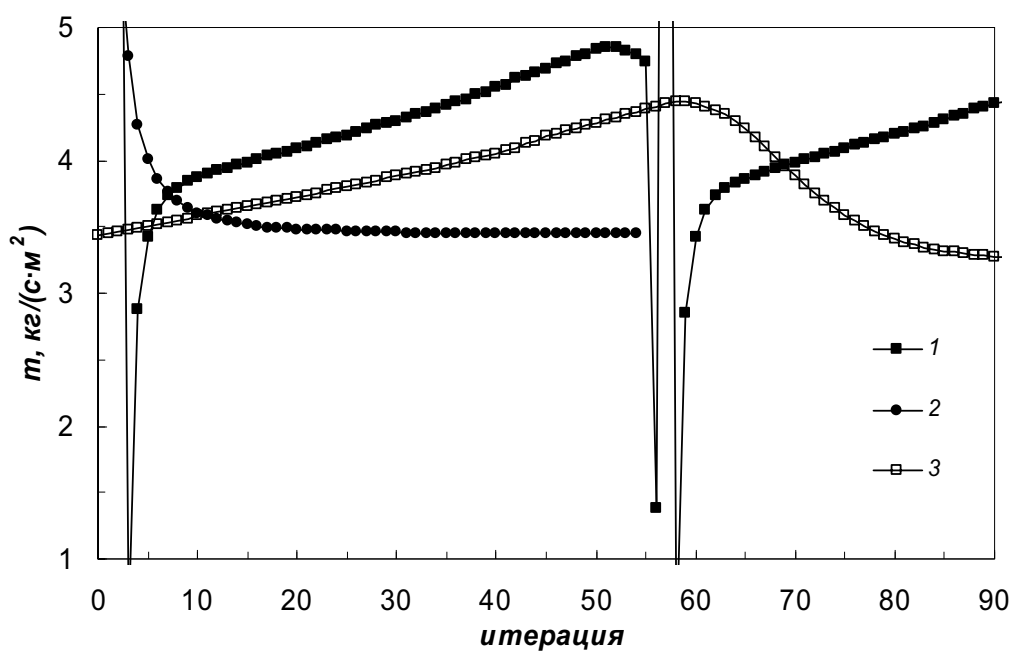


Рис. 4. Сходимость решения по скорости распространения пламени, $T_0 = 500$ К. 1 – уравнение (8), $m^0 = 10$; 2 – уравнение (9), $m^0 = 10$; 3 – уравнение (8), $m^0 = 3.44$

Таким образом, по результатам проведенных исследований можно сделать вывод, что использование традиционного соотношения (8) не обеспечивает сходимость решения по скорости распространения пламени, если начальное приближение для него достаточно далеко от искомого

го значения. Применение предлагаемого соотношения (9), полученного на основе вариационного термодинамического принципа [Кудрин, Карпов, 2011], дает устойчивое решение, сходящееся к значению, близкому к искомому, и которое может быть принято в качестве хорошего начального приближения.

Список литературы

- Зельдович Я. Б., Баренблатт Г. И., Либрович В. Б., Махвиладзе Г. М.* Математическая теория горения и взрыва. — М.: Наука, 1980. — 478 с.
- 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.
- 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.
- 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. — Вып. 4. — С. 80–85.
- Карпов А. И., Кудрин А. В.* К расчету стационарной скорости распространения пламени: применение принципов термодинамики необратимых процессов // Химическая физика и мезоскопия. — 2012. — Т. 14, №. 1. — С. 5–11.
- Франк-Каменецкий Д. А.* Диффузия и теплопередача в химической кинетике. — М.: Наука, 1967. — 491 с.
- Karпов 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.
- Smooke M. D.* Solution of burner stabilized premixed laminar flames by boundary value methods // Journal of Computational Physics. — 1982. — Vol. 48. — P. 72–105.
- Smooke M. D.* The computation of laminar flames // Proceedings of the Combustion Institute. — 2013. — Vol. 34. — P. 65–98.
- Williams F. A.* Combustion theory (2nd Edition). — Redwood, CA: Addison-Wesley, 1985. — 704 p.