УДК 536.46

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ О ГОРЕНИИ ГАЗОВ ПРИ НАЛИЧИИ ДВУХ ХИМИЧЕСКИХ СТАДИЙ

М. О. Разникова, Л. С. Салакатова, С. И. Худяев

(Москва)

Рассматриваемая задача [1] описывается системой трех уравнений:

$$\frac{\partial a}{\partial t} = \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} - a\,\Phi_1(\theta),$$

$$\frac{\partial b}{\partial t} = \frac{\partial^2 b}{\partial x^2} - b\,\Phi_2(\theta) + a\,\Phi_1(\theta), \tag{1}$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \alpha\,\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} - \theta_0\left[\sigma_Q\,\Phi_1(\theta)\,a + (1-\sigma_Q)\,\Phi_2(\theta)\,b\right].$$

Здесь a и b — относительные концентрации реагирующих веществ; θ — безразмерная температура, x, t — безразмерные координата и время;

$$\Phi_1(\theta) = \sigma_K\, e^{\frac{1-\sigma_E}{\beta}} \cdot e^{-\frac{\sigma_E\,\theta}{1-\beta\theta}},\quad \Phi_2(\theta) = (1-\sigma_K)\, e^{\frac{\sigma_E}{\beta}}\, e^{-\frac{(1-\sigma_E)\,\theta}{1-\beta\theta}}; \tag{2}$$

α, β, θ_0, σ_Q, σ_K, σ_E — некоторые параметры.

Связи этих величин с исходными описаны в [1].

Задача состоит в отыскании стационарных решений системы (1), т. е. решений, зависящих от $\xi = x - \omega t$ при некотором ω, также подлежащем определению (ω называется стационарной скоростью горения). При этом требуется выполнение граничных условий:

$$\begin{aligned} \xi &= -\infty : a = b = \theta = 0, \\ \xi &= +\infty : a = 1,\ b = 0. \end{aligned} \tag{3}$$

Можно показать, что если существует ограниченное стационарное решение (1), удовлетворяющее условиям (3) при $\xi = +\infty$ и условиям $\frac{da}{d\xi} = \frac{db}{d\xi} = \frac{d}{d\xi} = 0$ при $\xi = +\infty$, при некотором $\omega \neq 0$, то $\theta = \theta_0$ при $\xi = +\infty$.

Пользуясь этим обстоятельством, для системы (1) зададим начальное условие:

$$t = 0:\quad a = \begin{cases} 0 \text{ при } x < 0 \\ 1 \text{ при } x > 0, \end{cases}\qquad b = 0:\quad \theta = \begin{cases} 0 \text{ при } x < 0 \\ \theta_0 \text{ при } x > 0 \end{cases} \tag{4}$$

и попытаемся получить стационарное решение как предел при $t \to \infty$ решения задачи (1) — (4). Основным в решении задачи является вопрос о выборе хорошей разностной схемы для системы (1).

При построении разностной схемы нужно стремиться к тому, чтобы хорошо аппроксимировать предельное стационарное решение. При этом качество аппроксимации на промежуточных этапах может не интересовать. От разностной схемы требуется выполнение следующих условий:

1. Абсолютная устойчивость, т. е. устойчивость без ограничений на шаги по пространству и по времени.

2. Сохранение балансов. Из (1) и (4) вытекают следующие соотношения:

$$\int_{-\infty}^{\infty} [\theta - \theta_0 [a + (1 - \sigma_Q) b] \, dx = 0 \text{ при всех } t, \tag{5}$$

$$\theta - \theta_0 [a + (1 - \sigma_Q) b] = 0 \tag{6}$$

при всех x и t, если $\alpha = 1$.

Нужно, чтобы соотношения (5) и (6) оставались в силе и для решений соответствующих разностных уравнений.

3. Независящая от шага по времени аппроксимация соответствующей стационарной системы уравнений.

В выбранной системе разностных уравнений шаги по пространству и по времени будут дополнительными параметрами. Тем не менее требуется, чтобы зависимость от шага по времени исчезала при $t \to \infty$ и схема переходила бы в разностную схему для стационарной системы уравнений. Это условие очень важно, так как считать приходится для больших времен, а поскольку нас совершенно не интересуют промежуточные этапы, то мелкий шаг по времени нежелателен.

4. Система разностных уравнений на каждом временном слое линейна.

Это требование принимается для удобства. Оно позволит применить на каждом слое метод прогонки для вычисления следующего слоя.

Пусть $\omega(t)$ — произвольная функция с одним лишь условием, чтобы $\lim\limits_{t \to \infty} \omega(t) = \omega$, где ω — искомая стационарная скорость. Речь о выборе такой функции пойдет ниже. Вместо исходной системы (1) рассмотрим другую:

$$\begin{gathered} \frac{\partial a}{\partial t} = \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} + \omega(t) \frac{\partial a}{\partial x} - a \Phi_1(\theta), \\ \frac{\partial b}{\partial t} = \frac{\partial^2 b}{\partial x^2} + \omega(t) \frac{\partial b}{\partial x} - b \Phi_2(\theta) + a \Phi_1(\theta), \\ \frac{\partial \theta}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \omega(t) \frac{\partial \theta}{\partial x} - \theta_0 [\sigma_Q \Phi_1(\theta) a + (1 - \sigma_Q) \Phi_2(\theta) b] \end{gathered} \tag{7}$$

при тех же начальных условиях (4). Очевидно, условия (5) — (6) выполняются и для этой системы. Если найти такую функцию $\omega(t)$, когда при $t \to \infty$ все функции имеют пределы, а их производные по t стремятся к нулю, то в пределе получим стационарное решение системы (1). Поэтому решаем до установления задачу (4), (7) и разностную схему пишем для этой задачи. Требованию 3 будет удовлетворять любая схема для (7), если только $\omega(t)$ хорошо выбрана. Таким образом, для удовлетворения требованию 3 сознательно искажается исходная задача для промежуточных времен. Теперь следует смотреть на решение системы (4), (7), как на некоторый итерационный процесс, дающий в пределе нужное стационарное решение системы (1).

Чтобы удовлетворить первому требованию, следует брать неявную разностную схему для старших членов, причем в младших членах в первом уравнении множитель a, во втором множитель b следует взять с верхнего слоя. Это гарантирует устойчивость схемы и положительность функций a и b независимо от шагов. Требование 2 удовлетворяется, если в младших членах всех трех уравнений каждая из функций a, b и θ входит одинаково. Таким образом, везде в младших членах следует брать a и b с верхнего слоя, а θ, согласно требованию 4, с нижнего слоя. Окончательно система разностных уравнений для (7) принимает вид:

$$
\begin{aligned}
&A_1(t)a(x+h,\ t)-B_1(x,\ t)a(x,\ t)+C_1(t)a(x-h,\ t)+D_1(x,\ t)=0,\\
&A_2(t)b(x+h,\ t)-B_2(x,\ t)b(x,\ t)+C_2(t)b(x-h,\ t)+D_2(x,\ t)=0,\\
&A_3(t)\theta(x+h,\ t)-B_3(x,\ t)\theta(x,\ t)+C_3(t)\theta(x-h,\ t)+D_3(x,\ t)=0,
\end{aligned}
\qquad (8)
$$

где

$$
\begin{gathered}
A_1(t)=A_2(t)=1+\frac{h}{2}\,\omega(t);\ C_1(t)=C_2(t)=1-\frac{h}{2}\,\omega(t);\\
A_3(t)=\alpha+\frac{h}{2}\,\omega(t);\quad C_3(t)=\alpha-\frac{h}{2}\,\omega(t);\\
B_1(x,\ t)=2+\frac{h^2}{\tau}+h^2\,\Phi_1\,[\theta\,(x,\ t-\tau)];\\
B_2(x,\ t)=2+\frac{h^2}{\tau}+h^2\,\Phi_2\,[\theta\,(x,\ t-\tau)];\\
B_3(x,\ t)=2\alpha+\frac{h^2}{\tau};\\
D_1(x,\ t)=\frac{h^2}{\tau}\,a\,(x,\ t-\tau);\\
D_2(x,\ t)=\frac{h^2}{\tau}\,b\,(x,\ t-\tau)+h^2\,a\,(x,\ t)\,\Phi_1\,[\theta\,(x,\ t-\tau)];\\
D_3(x,\ t)=\frac{h^2}{\tau}\,\theta\,(x,\ t-\tau)-h^2\,\theta_0\,\{\sigma_Q\,a\,(x,\ t)\,\Phi_1\,[\theta\,(x,\ t-\tau)]+\\
+(1-\sigma_Q)\,b\,(x,\ t)\,\Phi_2\,[\theta\,(x,\ t-\tau)]\},
\end{gathered}
\qquad (9)
$$

а h и τ — соответственно шаги по пространству и по времени.

Отметим, что если бы аналогичную схему записать для исходной системы (1), как это делается в работе [2], то предельные функции $a(\xi)$, $b(\xi)$, $\theta(\xi)$, $\xi=x-\omega t$ удовлетворяли бы разностным уравнениям, в которых функции Φ_1 и Φ_2 берутся при $\theta=\theta(\xi-\omega\tau)$, ввиду того, ~~что~~ эти функции считаем с нижнего слоя, т. е. шаг τ явно вошел бы как параметр в предельные разностные уравнения. Желая сколько-нибудь хорошо аппроксимировать стационарное решение, нужно было бы считать с мелким шагом τ.

В выбранной схеме для системы (7) шаг τ может влиять на скорость сходимости, но не на конечный результат, причем было проверено, что существует $\tau=\tau_0$, когда достигается наилучшая сходимость.

Система уравнений (8) решается методом прогонки [3, 4], причем треугольная зависимость младших членов от a и b позволяет избежать матричной прогонки и решать последовательно первое, второе и третье уравнения. Формулы для их решения строятся одинаково; выпишем их, для краткости, только для первого уравнения

$$a(x,\ t)=E^1(x,\ t)a(x+h,\ t)+F^1(x,\ t),$$

где $E^1(x,\ t)$ и $F^1(x,\ t)$ определяются из рекуррентных формул

$$E^1(x,\ t)=\frac{A_1(t)}{B_1(x,\ t)-C_1(t)\,E^1(x-h,\ t)},$$

$$F^1(x,\ t)=\frac{C_1(t)\,F^1(x-h,\ t)+D_1(x,\ t)}{B_1(x,\ t)-C_1(t)\,E^1(x-h,\ t)}.$$

Для предельных значений $E^1(-\infty, t)$ и $F^1(-\infty, t)$ имеем:

$$E^1(-\infty, t) = \frac{B_1(-\infty, t) - \sqrt{B_1^2(-\infty, t) - 4A_1(t)\, C_1(t)}}{2C_1(t)} < 1,$$

$$F^1(-\infty, t) = 0.$$

Из двух имеющихся корней для $E^1(-\infty, t)$ берем меньший, чтобы обеспечить устойчивость прогонки. Разумеется, при счете эти начальные значения коэффициентов прогонки относятся к некоторой конечной точке x_1, левее которой функция $a(x, t)$ была бы заведомо малой. Такая граничная точка для каждой из функций a, b и θ, вообще говоря, своя. Правый конец счета — x_2 также определялся из условия, чтобы правее этой точки a, b и θ были близки к значениям 1, 0 и θ_0 соответственно.

Следует отметить, что при произвольно больших τ схема (8)—(9) не обеспечивает положительности θ на всем интервале. Однако, как видно из соотношения (6), положительность θ обеспечена при $\alpha = 1$, для которого в основном и велся счет. Что касается других значений α, то, во-первых, как уже было сказано, слишком большие τ неразумны, а, во-вторых, там, где θ становится отрицательной, счет этой функции можно обрывать.

Функция $\omega(t)$ в системе (7) выбиралась двумя способами:

1. Как средний наклон линий уровня для $a(x, t)$, $\theta(x, t)$. Сначала считается $\omega(t) = 0$, т. е. считается система (1), пока не наступит грубое установление этих наклонов. Затем считается $\omega(t)$ равным этому наклону и через определенное число шагов вносятся поправки к $\omega(t)$.

Такой способ выбора $\omega(t)$ универсален, однако при $\alpha = 1$ более удобно использовать другой способ, аналогичный изложенному в работе [5].

2. Как следует из стационарной системы, для искомой скорости ω имеют место интегральные соотношения

$$\omega = \int_{-\infty}^{\infty} a\, \Phi_1(\theta)\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} b\, \Phi_2(\theta)\, dx.$$

В качестве $\omega(t)$ бралось взвешенное среднее этих интегралов с весами σ_Q и $(1 - \sigma_Q)$ на каждом слое, т. е.

$$\omega(t) = \sigma_Q \int_{-\infty}^{\infty} a\, \Phi_1(\theta)\, dx + (1 - \sigma_Q) \int_{-\infty}^{\infty} b\, \Phi_2(\theta)\, dx, \qquad (10)$$

где подынтегральные функции брались с предыдущего слоя. Можно показать, что не при всяком α формула (10) дает в пределе искомую скорость ω, даже в случае, рассмотренном в [5], однако при $\alpha = 1$ сходимость к ω имеет место, и такой способ счета удобен, так как достаточно следить за установлением $\omega(t)$; дополнительного контроля за установлением профилей не требуется.

Описанным выше методом было отсчитано большое количество вариантов [1]. Отметим, что были обнаружены качественно различные режимы и описанный метод счета по-разному проявлял себя в различных режимах. При $\sigma_E \geqslant \frac{1}{2}$ [2] этот метод быстро приводил к цели. При $\sigma_E < \frac{1}{2}$ счет сильно замедлялся и для каждого σ_E имелась такая область изменения параметра σ_Q, примыкающая к $\sigma_Q = 1$, где счет становился практически невозможным, требовались огромные массивы памяти и большое время.

Этот пробел удается восполнить путем непосредственного решения стационарной задачи. Причем, оказывается, можно ограничиться простым приближенным решением задачи. Стационарная система имеет вид:

$$a'' + \omega a' - a\Phi_1(\theta) = 0, \qquad (11)$$

$$b'' + \omega b' - b\Phi_2(\theta) + a\Phi_1(\theta) = 0, \qquad (12)$$

$$\alpha\,\theta'' + \omega\,\theta' - \theta_0\,[\sigma_Q\, a\,\Phi_1(\theta) + (1 - \sigma_Q)\, b\,\Phi_2(\theta)] = 0, \qquad (13)$$

$$x = -\infty:\ a = b = \theta = 0;\quad x = +\infty:\ a = 1,\ b = 0,\ \theta = \theta_0.$$

Для простоты будем считать $\alpha = 1$. Тогда уравнение (13) можно заменить соотношением

$$\theta = \theta_0\,[a + (1 - \sigma_Q)\, b]. \qquad (14)$$

Из формул (2) для $\Phi_1(\theta)$ и $\Phi_2(\theta)$ имеем

$$\frac{\Phi_2(\theta)}{\Phi_1(\theta)} = \frac{1 - \sigma_K}{\sigma_K}\, e^{-\frac{1 - 2\sigma_E}{\beta(1 - \beta\theta)}}. \qquad (15)$$

При $\sigma_E \leqslant \frac{1}{2}$ и фиксированном σ_K, $0 < \sigma_K < 1$ отношение (15) ограничено и можно показать, что

$$\lim_{x \to +\infty} \frac{1 - a}{b} = 1.$$

Более того, ввиду малости β, при достаточно малых σ_E выражение (15) мало и при σ_Q, достаточно близких к 1, почти на всем интервале изменения a от нуля до единицы в уравнениях (12) и (13) можно пренебречь членами, содержащими $b\ \Phi_2(\theta)$. Тогда на всем этом интервале

$$b(x) \simeq 1 - a(x), \qquad (16)$$

$$\theta(x) \simeq \theta_0\,[1 - \sigma_Q + \sigma_Q\, a(x)] \qquad (17)$$

(16) вытекает непосредственно из (12), а (17) следует из (14) и (16).

Решая теперь задачу

$$a'' + \omega a' - a\Phi_1(\theta) = 0,\quad a(-\infty) = 0,\quad a(+\infty) = 1 \qquad (18)$$

и считая θ по формуле (17), находим искомую скорость ω и функцию $a(x)$. Для полного восстановления функций $b(x)$ и $\theta(x)$ нужно теперь с найденным значением ω решить уравнение

$$b'' + \omega b' - b\Phi_2(\theta) = 0;\quad b(-\infty) = 0 \qquad (19)$$

(здесь $\theta(x)$, согласно (14), нужно считать равной $\theta_0\,(1 - \sigma_Q\, b\,(x))$ и «склеить» подходящим образом с функциями (16) и (17). Решение задач (18) и (19) не представляет трудностей. Пользуясь инвариантностью относительно сдвигов, можно задать при $x = 0$ для искомой функции и ее производной значения ε и $\lambda\varepsilon$ соответственно, где ε произвольно малое положительное число, а

$$\lambda = \frac{1}{2}\left(-\omega + \sqrt{\omega^2 + 4\Phi_i(0)}\right)\ (i = 1 \text{ для } (18),\ i = 2 \text{ для } (19))$$

и считать задачу Коши при $x > 0$, например, методом Рунге-Кутта. Задание таких начальных данных определяет выход из особой точки