Физика горения и взрыва

4

1980 г.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВРЕМЕНИ ЗАЖИГАНИЯ ПРИ БОЛЬШИХ НАГРЕВАХ ПОВЕРХНОСТИ

Ю. И. Бабенко

(Ленинград)

В настоящей работе время зажигания вычислено с помощью метода, предложенного в [1, 2] для определения градиента температуры на границе полубесконечной области без нахождения всего температурного поля.

Рассмотрим задачу элементарной теории зажигания

$$\partial\Theta/\partial\tau = \partial^2\Theta/\partial\xi^2 + \varepsilon(\exp\Theta - 1) = 0, \tag{1}$$

$$0 \leqslant \xi < \infty, \quad 0 < \tau < \infty,$$

$$\Theta|_{\xi=0} = A = \mathrm{const}, \quad \Theta|_{\xi=\infty} = 0, \quad \Theta|_{\tau=0} = 0. \tag{2}$$

Здесь использованы безразмерные переменные:

$$\Theta = E(T - T_i)/RT_s^2, \quad A = E(T_s - T_i)/RT_s^2,$$

$$\xi = x/x_*, \ \tau = t/t_{ad}(T_s), \ \varepsilon = \exp(-A).$$

Размерные обозначения совпадают с общепринятыми [3, 4]:

$$x_* = \left[\left(QEk_0/\lambda RT_s^2\right)\exp(-E/RT_s)\right]^{-1/2},$$

$$t_{ad}(T_s) = \left(c\rho RT_s^2/QEk_0\right)\exp(E/RT_s),$$

T — температура, T_i — начальная температура, T_s — температура поверхности $\xi = 0$ после нагревания.

Аналогичная задача решалась в работах [5—7]. Время зажигания определялось по моменту, когда градиент температуры у границы становился равным нулю. Будем определять время зажигания из этого же условия. В отличие от указанных работ функция тепловыделения $\exp\Theta$ для математической корректности заменена на $\exp\Theta - 1$. Это несущественно для вычислений при больших скачках температуры поверхности.

В работе [1] для уравнения

$$\partial\Theta/\partial\tau - \partial^2\Theta/\partial\xi^2 + \gamma(\xi, \tau)\Theta = 0$$

при условиях (2) найдена связь между $\partial\Theta/\partial\xi$ и Θ в виде

$$-\frac{\partial\Theta}{\partial\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n D^{\frac{1-n}{2}}\Theta. \tag{3}$$

Функции a_n последовательно определяются по заданной γ из рекуррентных соотношений. Производные дробного порядка определены выражением

$$D^{\nu} f(t) = \frac{1}{\Gamma(1-\nu)}\frac{d}{dt}\int_0^t (t-\tau)^{-\nu} f(\tau)\,d\tau, \quad -\infty < \nu < 1. \tag{4}$$

Для дальнейшего заметим, что

$$D^{\nu} t^{\mu} = \frac{\Gamma(\mu + 1)}{\Gamma(\mu + 1 - \nu)} t^{\mu - \nu}, \quad \mu - \nu > -1. \tag{5}$$

Положим в формулах работы [1] $\alpha = 1$, $\beta = 0$, $\gamma = -\varepsilon(\exp\Theta - 1)/\Theta$. Тогда

$$\begin{aligned}
&a_0 = 1, \ a_1 = 0, \ a_2 = -\varepsilon(e^{\Theta} - 1)/2\Theta, \\
&a_3 = \varepsilon\left[(e^{\Theta} - 1)/4\Theta^2 - e^{\Theta}/4\Theta\right]\Theta', \\
&a_4 = -\varepsilon\left[(e^{\Theta} - 1)/4\Theta^3 - e^{\Theta}/4\Theta^2 + e^{\Theta}/8\Theta\right]\Theta'^2 - \\
&\qquad - \varepsilon^2(e^{\Theta} - 1)^2/4\Theta^2 + \varepsilon^2 e^{\Theta}(e^{\Theta} - 1)/8\Theta, \\
&a_5 = \varepsilon\left[3(e^{\Theta} - 1)/8\Theta^4 - 3e^{\Theta}/8\Theta^3 + 3e^{\Theta}/16\Theta^2 - \right. \\
&\qquad \left. - e^{\Theta}/16\Theta\right]\Theta'^3 - \varepsilon\left[(e^{\Theta} - 1)/8\Theta^3 - e^{\Theta}/8\Theta^2 + \right. \\
&\qquad \left. + e^{\Theta}/16\Theta\right]\Theta'\dot{\Theta} - \varepsilon\left[(e^{\Theta} - 1)/16\Theta^2 - e^{\Theta}/16\Theta\right]\dot{\Theta}' + \\
&\qquad + \varepsilon^2\left[5(e^{\Theta} - 1)^2/8\Theta^3\right]\Theta' - \varepsilon^2\left[11e^{\Theta}(e^{\Theta} - 1)/16\Theta^2\right]\Theta' + \\
&\qquad + \varepsilon^2\left[3e^{\Theta}(e^{\Theta} - 1)/16\Theta\right]\Theta' + \varepsilon^2\left[e^{2\Theta}/16\Theta\right]\Theta', \\
&\qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots
\end{aligned}$$

$$2a_{n+2} = \frac{\partial a_{n+1}}{\partial x} - \left(\sum_{m=1}^{2q+m\leqslant 2+k}\sum_{q=0}\ ' + \sum_{m=0}^{m\neq 2+k}\sum_{q=1}\right)\binom{\frac{1-m}{2}}{q} a_m \frac{\partial^q a_{2+n-2q-m}}{\partial t^q}. \tag{6}$$

Здесь штрих означает производную по координате, точка — по времени.

При вычислении функций (6) полагается, что решение задачи (1), (2), по крайней мере до момента зажигания τ_{ign}, является аналитическим по ξ и имеет все производные по τ и что последовательность операций дифференцирования по этим аргументам не имеет значения (аналогия с линейной задачей $\varepsilon = 0$). Все производные по ξ порядка два и выше исключаются с помощью исходного уравнения (1).

Уравнение (3), записанное при $\xi = 0$, дает связь между градиентом у границы $q_s = (\partial\Theta/\partial\xi)_{\xi=0}$ и самой температурой границы $\Theta_s = A$ в виде обыкновенного дифференциального уравнения бесконечно высокого порядка для величины q_s

$$F(q_s, \dot{q}_s, \ddot{q}_s, \ldots, q_s^{(n)}, \ldots; A) = 0.$$

Это уравнение разрешается относительно искомой функции, если искать решение в виде ряда по степеням параметра ε

$$q_s = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon^n q_n. \tag{7}$$

Подставляя (7) в (3) и (6) и приравнивая выражения при одинаковых степенях ε, найдем последовательно q_0, q_1, q_2. . .

Таким образом, предлагаемый метод в применении к нелинейной задаче есть вариант метода разложения решения по степеням параметра. Однако его гораздо удобнее использовать при вычислениях, так как для каждого приближения не требуется определять температурного поля.

В [5] методом последовательных приближений найдено лишь два члена ряда (7), а в данной работе — четыре члена этого ряда. После подстановки (7) в (3) находим, что членов, не содержащих ε, только два. Они приводят к выражению

$$-q_0 = A/\sqrt{\pi\tau} \tag{8}$$

(решение линейной задачи при $\varepsilon = 0$).

В теории зажигания представляет интерес случай $A \gg 1$, для которого произведены дальнейшие вычисления. При этом в каждом члене формул (6) при каждом множителе ε^n сохранено только доминирующее при $\xi = 0$ слагаемое. Общий член последовательности (6), содержащий множитель ε, при достаточно больших Θ будет иметь вид

$$a_n = -\varepsilon e^{\Theta}\Theta'^{n-2}/2^{n-1}\Theta, \quad n \geqslant 2.$$

Подставляя (7) в (3) с учетом (8) и (5) и приравнивая члены при ε (напомним, что здесь $\Theta' = q_s$, $\Theta = A$), получим

$$-q_1 = -\frac{e^A}{A}\sum_{n=0}^{\infty} 2^{1-n}\left(-A/\sqrt{\pi\tau}\right)^{n-2} D^{\frac{1-n}{2}} A = -\frac{1}{2} e^A \sqrt{\tau} S, \tag{9}$$

$$S = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n z^n}{\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)}, \quad z = A/2\sqrt{\pi}.$$

Просуммируем ряд (9), используя формулу (5).

$$S = \frac{1}{z}\left[\frac{z}{\Gamma(3/2)} + \frac{z^3}{\Gamma(5/2)} + \frac{z^5}{\Gamma(7/2)} + \ldots\right] - \frac{1}{z}\left[\frac{z^2}{\Gamma(2)} + \frac{z^4}{\Gamma(3)} + \frac{z^6}{\Gamma(4)} + \ldots\right] =$$

$$= \frac{1}{z} D_{z^2}^{-1/2} e^{z^2} - \frac{1}{z}\left(e^{z^2} - 1\right) = \left[e^{z^2}\operatorname{erf} z - \left(e^{z^2} - 1\right)\right]/z.$$

При $z \gg 1$

$$S \approx 1/z + 0(1/z^2) = 2\sqrt{\pi}/A.$$

Подставляя это значение в (9), найдем

$$q_1 = \sqrt{\pi\tau/A}\, e^A. \tag{10}$$

Теперь имеется достаточно данных, чтобы определить время зажигания в первом приближении $\tau_{\text{ign}}^{\text{I}}$ из условия $q_s = 0$.

$$q_s = q_0 + \varepsilon q_1 = -A/\sqrt{\pi\tau} + \sqrt{\pi\tau}/A = 0,$$

$$\tau_{\text{ign}}^{\text{I}} = A^2/\pi \approx 0{,}315A^2,$$

что совпадает с результатом [5].

Последующие приближения вычисляются при условии, что доминирующие при $\xi = 0$, $\Theta \gg 1$ составляющие членов a_n образуются по формуле

$$a_{n+2} = a'_{n+1}/2, \tag{11}$$

гораздо более простой, нежели (6). Кроме того, можно убедиться, что, исключая вторые производные по ξ из (1), достаточно положить $\Theta'' = -\varepsilon \exp\Theta$.

Удержим в (6) для $\Theta \gg 1$ члены, содержащие ε и ε^2. Можно показать, что a_n имеют вид

$$a_3 = -\varepsilon\alpha_3\Theta' e^{\Theta}/\Theta,$$

$$a_n = -\varepsilon\alpha_n\Theta'^{n-2}e^{\Theta}/\Theta + \varepsilon^2\beta_n\Theta'^{n-4}e^{2\Theta}/\Theta, \quad n \gg 4, \tag{12}$$

где α_n и β_n — числа. Как следует из (11),

$$\alpha_n = 2^{1-n}, \quad \beta_n = \beta_{n-1} + (n-3)/2 \cdot \alpha_{n-1} = \beta_{n-1} + (n-3)2^{1-n}.$$

Решая уравнение в конечных разностях для β_n при условии $\beta_3 = 0$ (см. [8]), получим

$$\begin{aligned} &\alpha_n = 2^{1-n}, \quad n \geqslant 3, \\ &\beta_n = 2^{-1} - 2^{2-n} - (n-3)2^{1-n}, \quad n \geqslant 4. \end{aligned} \tag{13}$$

Подставляя (7), (8), (10), (12) и (13) в (3), приравнивая члены при ε^2 и применяя ту же технику суммирования рядов, что и при вычислении q_1, найдем для $A \gg 1$

$$q_2 = 1/2 \cdot e^{2A}(\sqrt{\pi\tau}/A)^3. \tag{14}$$

Время зажигания с учетом трех членов (7) определится из уравнений

$$-(A/\sqrt{\pi\tau}) + (\sqrt{\pi\tau}/A) + \frac{1}{2}(\sqrt{\pi\tau}/A)^3 = 0,$$

$$\tau_{\text{ign}}^{\text{II}} = A^2(\sqrt{3} - 1)/\pi \approx 0{,}233A^2.$$

Для вычисления q_3 сохраним в (6) при $\Theta \gg 1$, $\xi = 0$ члены, содержащие ε, ε^2, ε^3. Тогда

$$a_3 = -\varepsilon\alpha_3\Theta' e^{\Theta}/\Theta,$$

$$a_4 = -\varepsilon\alpha_4\Theta'^2 e^{\Theta}/\Theta,$$

$$a_5 = -\varepsilon\alpha_5\Theta'^3 e^{\Theta}/\Theta + \varepsilon^2\beta_5\Theta' e^{2\Theta}/\Theta,$$

$$a_n = -\varepsilon\alpha_n\Theta'^{n-2}e^{\Theta}/\Theta + \varepsilon^2\beta_n\Theta'^{n-4}e^{2\Theta}/\Theta - \varepsilon^3\gamma_n\Theta'^{n-6}e^{3\Theta}/\Theta, \quad n \geqslant 6. \tag{15}$$

Здесь числа α_n и β_n определены ранее. Соотношение для вычисления γ_n вытекает из (11)

$$\gamma_n = [2^{-n} - 2^{2-n} - (n-4)2^{-n}](n-5) + (3/2)\gamma_{n-1}, \quad n \geqslant 6.$$

Решая это уравнение [8] при условии $\gamma_5 = 0$, найдем

$$\gamma_n = (1/6)(3/2)^n - (3/2) + (15/2^{n+1}) + (5/2^n - 1/2)(n-5) + \\ + (n-5)(n-4)/2^n. \tag{16}$$

Подставляя в (3) формулы (13), (15), (16), приравнивая выражения при ε^3 и производя суммирование аналогично первому приближению с учетом (6), (10), (14), найдем при $A \gg 1$

$$q_3 = 1/2 \cdot e^{3A}(\sqrt{\pi\tau}/A)^5.$$

Время зажигания с учетом четырех членов ряда (7) определится из уравнений

$$q_s = -(A/\sqrt{\pi\tau}) + (\sqrt{\pi\tau}/A) + \frac{1}{2}(\sqrt{\pi\tau}/A)^3 + \frac{1}{2}(\sqrt{\pi\tau}/A)^5 = 0,$$

$$\tau_{\text{ign}}^{\text{III}} = \left(\sqrt[3]{15\sqrt{6} + 35} - \sqrt[3]{15\sqrt{6} - 35} - 1\right)A^2/3\pi \approx 0{,}207A^2.$$

Полагая в задаче (1), (2) $\Theta = \Theta_0 + \varepsilon\Theta_1 + \varepsilon^2\Theta_2 + \ldots$, можно показать, что все приближения τ_{ign}^{N} дают искомое значение τ_{ign} с избытком, причем $\tau_{\text{ign}}^{\text{I}} > \tau_{\text{ign}}^{\text{II}} > \tau_{\text{ign}}^{\text{III}} > \ldots > \tau_{\text{ign}}$. Таким образом, нами найдено, что $\tau_{\text{ign}} < \tau_{\text{ign}}^{\text{III}} = 0{,}207A^2$. Указанное значение меньше $\tau_{\text{ign}} = 0{,}25\,A^2$, найденного в [6] методом Швеца [9]. Этот результат должен быть завышен, так как метод [9] в данной задаче дает абсолютную величину q_s с избытком. Полученное в данной работе значение близко к $\tau_{\text{ign}} = 0{,}2\,A^2$, определенному в [10] на ЭВМ (расчет по явной разностной схеме). Значение $\tau_{\text{ign}} = A^2/2\pi \approx 0{,}159\,A^2$ получено в [7] методом сращиваемых асимптотических разложений (САР) и проверено на ЭВМ (расчет по неявной разностной схеме с переменным шагом).

В настоящее время указать исчерпывающим образом причины такого расхождения не представляется возможным ввиду недостаточного опыта решения задач типа (1), (2) как предложенным методом, так и методом САР. Одна из причин расхождения — учет конечного числа членов ряда (7). Согласно сказанному, учет последующих членов приведет к меньшему значению τ_{ign}.

Настоящая работа носит методический характер. Показано, что предложенный ранее для линейных задач метод определения градиента температуры на границе без предварительного нахождения температурного поля, пригоден для практических вычислений в существенно нелинейных задачах теории теплопередачи.

Автор благодарит А. С. Штейнберга за внимание к работе.

Поступила в редакцию
18/VII 1979

ЛИТЕРАТУРА

1. Ю. И. Бабенко.— В сб.: Тепло- и массоперенос. Т. 8. Минск, ИТМО АН БССР, 1972, с. 541.
2. Ю. И. Бабенко. ПММ, 1975, **39**, 6.
3. Д. А. Франк-Каменецкий. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М., Наука, 1966.
4. A. G. Merzhanov, A. E. Averson. Comb. and flame, 1971. **16**, 89.
5. I. W. Enig. J. Chem. phys., 1964. 1964. **41**, 12.
6. А. М. Гришин. ПМТФ, 1966, 5.
7. Р. С. Буркина, В. Н. Вилюнов. ПМТФ, 1976, 6.
8. А. О. Гельфонд. Исчисление конечных разностей. М.— Л., ГИТТЛ, 1952.
9. М. Е. Швец. ПММ, 1949, **13**, 3.
10. А. Э. Аверсон, В. В. Барзыкин, А. Г. Мержанов. ИФЖ, 1965, **9**, 2.

КИНЕТИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ТУРБУЛЕНТНОГО ПЛАМЕНИ В ОДНОМЕРНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

В. Я. Басевич, В. П. Володин, С. М. Когарко,
Н. И. Перегудов
(Москва)

Изменения температуры T и концентрации n, вызываемые пульсациями скорости, обусловливают сложную картину турбулентного горения. Ее можно характеризовать двояко: с одной стороны, реальными параметрами T и n, распределенными некоторым образом в пространстве, с другой — усредненными, полученными путем наложения мгновенных параметров и обычно наблюдаемыми инерционными методами. Пользуясь усредненными параметрами, в силу неоднозначности невозможно перейти к мгновенным параметрам. Этим обусловлено возникновение различных моделей турбулентного горения [1—3]. Наоборот, переход от мгновенных параметров к усредненным является однозначным.

В [4] предложен метод определения мгновенных параметров турбулентного горения. Реализация этого метода в приближении одномерной турбулентности апробирована при изотермическом смешении [5, 6] и турбулентном горении [7]. В последнем случае скорость химической реакции описывалась простой аррениусовской формулой $W=nA\exp(-E/RT)$ с эмпирическими значениями предэкспонента A и энергии активации E (R — газовая постоянная). Но главная особенность метода — возможность описания реального сложного химического процесса в турбулентной среде без введения каких-либо эмпирических соотношений. Это должно позволить выявить роль кинетики в таком сложном процессе, как турбулентное горение. В настоящей работе сделаны расчеты турбулентного горения водородно-кислородных смесей. Ограниченность, вытекающая из одномерного рассмотрения турбулентности, здесь сохраняется.

В простейшей постановке квазистационарные уравнения баланса энергии и вещества при пренебрежении средним движением (в прибли-