Физика горения и взрыва

№ 4
1990 г.

УДК 536.46

В. А. Вольперт, Вл. А. Вольперт, Д. С. Давтян

ПРИМЕНЕНИЕ МИНИМАКСНОГО МЕТОДА В ЗАДАЧАХ ГОРЕНИЯ

Широкое распространение в теории волн горения получили приближенные методы, основанные, как правило, на узости зоны реакции, и асимптотические методы, также предполагающие наличие малого параметра, связанного с шириной зоны реакции [1]. В настоящей работе обсуждаются возможности применения другого подхода, связанного с использованием минимаксного метода, который может применяться в сочетании с указанными выше методами и независимо от них. Минимаксный метод позволяет определять точность получаемых результатов и область их применимости. Если пробные функции, используемые при реализации минимаксного метода, выбираются на основании физических представлений о структуре решений, то точность получаемых результатов позволяет судить о правильности физических представлений. Отметим также, что возможности его применения не ограничиваются только теми моделями, которые рассматриваются в этой работе (одностадийная химическая реакция в конденсированной среде), но и распространяются на модели горения газов, причем не только для простой кинетики [2, 3], но и в случае сложной многостадийной химической реакции.

Скорость волны горения в конденсированной среде. Описание минимаксного метода

Рассмотрим стационарную постановку задачи о распространении волны горения в конденсированной среде для реакции n-го порядка. В безразмерных переменных

$$\Theta = \frac{T - T_г}{T_г - T_н}, \quad \beta = \frac{RT_г}{E}, \quad \gamma = \frac{RT_г^2}{E(T_г - T_н)}$$

система уравнений имеет вид

$$\begin{gathered} \Theta'' - u\Theta' + \frac{1}{\gamma} a^n \Phi(\Theta) = 0, \\ ua' + \frac{1}{\gamma} a^n \Phi(\Theta) = 0. \end{gathered} \qquad (1)$$

Здесь Θ — безразмерная температура, $-1 \leqslant \Theta \leqslant 0$, $\Theta(-\infty) = -1$, $\Theta(+\infty) = 0$; a — безразмерная концентрация исходного вещества, $0 \leqslant a \leqslant 1$, $a(-\infty) = 1$, $a(+\infty) = 0$; u — скорость волны;

$$\Phi(\Theta) = \begin{cases} 0 & -1 \leqslant \Theta < -1 + h, \\ \exp(\Theta/(\gamma + \beta\Theta)) & -1 + h \leqslant \Theta \leqslant 0; \end{cases}$$

h — величина обрезки источника; T — размерная температура; E, R, $T_н$, $T_г$ — традиционные для задач горения обозначения. Параметры β и γ рассматриваются как независимые, $0 \leqslant \beta \leqslant \gamma$.

Наряду с функциями $\Theta(x)$ и $a(x)$ неизвестной в системе (1) является скорость волны u. В большом числе работ, посвященных определению скорости волны, используется метод узкой зоны реакции [4—6], другие приближенные методы [7—8], метод сращивания асимптотических разложений [9—11], получены оценки скорости снизу [12]. Однако не всегда известна область применимости и точность имеющихся результатов. Минимаксный метод для рассматриваемой задачи предложен в [13]. Прежде, чем перейти к изложению результатов, полученных этим методом, коротко его опишем.

Система уравнений (1) имеет первый интеграл и обычным образом может быть сведена к уравнению

$$\frac{da}{d\Theta} = -\frac{1}{\gamma u^2}\frac{a^n \exp(\Theta/(\gamma+\beta\Theta))}{a+\Theta}, \tag{2}$$

в котором Θ — независимая переменная, меняющаяся на отрезке $-1+h \leqslant \Theta \leqslant 0$, $a = a(\Theta)$;

$$a(-1+h) = 1;\ a(0) = 0. \tag{3}$$

Перепишем уравнение (2) в виде

$$u^2 = B(a(\Theta),\ \Theta), \tag{4}$$

$$B(\rho(\Theta)\,\Theta) = -\frac{1}{\gamma}\frac{\rho^n(\Theta)\exp(\Theta/(\gamma+\beta\Theta))}{(\rho(\Theta)+\Theta)\,d\rho/d\Theta}. \tag{5}$$

Если $a(\Theta)$ — решение задачи (2), (3), то правая часть равенства (4), рассматриваемая как функция Θ, есть константа, равная u^2. Если же функция $\rho(\Theta)$ не является решением уравнения (2), то $B(\rho(\Theta),\ \Theta)$ не является константой. Суть минимаксного метода заключается в том, что минимум этого выражения дает оценку скорости снизу, а максимум — сверху. Если же минимизировать максимум по всем функциям $\rho(\Theta)$, то получится точное значение u^2. Аналогично и максимум по всем минимумам равняется квадрату скорости (здесь не обсуждаются различные тонкости формулировки метода, связанные с описанием класса функций $\rho(\Theta)$, возможной неединственностью волны при $\beta=\gamma$, $h=0$ и т. д. [13, 14]).

Таким образом, задавая произвольную функцию $\rho(\Theta)$ и находя максимум и минимум определенного выражения, получим двусторонние оценки скорости, которые в принципе могут быть сколь угодно близки к точному значению при удачном выборе пробной функции. Подчеркнем еще раз, что пробная функция $\rho(\Theta)$ может быть выбрана произвольным образом из некоторого класса функций (монотонные непрерывные, кусочно-гладкие, удовлетворяющие граничным условиям) и этот выбор в обосновании не нуждается. Однако качество полученных оценок, т. е. близость оценок сверху и снизу и, следовательно, к точному значению скорости, зависит от пробной функции очень существенно. Хорошие оценки получаются на пробных функциях, близких, в определенном смысле, к точному решению.

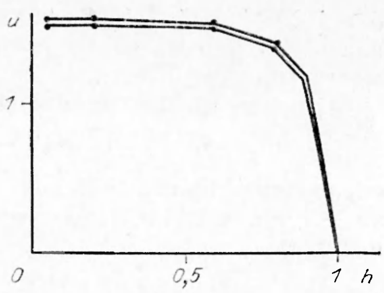
Оценки скорости

В уравнение (2) входят четыре параметра (n, γ, β, h) и свойства решений существенно зависят от их значений. В различных областях изменения параметров удобно пользоваться различными пробными функциями. В качестве основной будем рассматривать следующую:

$$\rho(\Theta) = \begin{cases} \left[1 - \frac{2-n}{\sigma} I(\Theta)\right]^{\frac{1}{2-n}}, & n \neq 2, \\ \exp\left[-\frac{1}{\sigma} I(\Theta)\right], & n = 2, \end{cases} \tag{6}$$

где σ — параметр, подбираемый для получения наилучших оценок;

$$I(\Theta) = \int\limits_{-1+h}^{\Theta} \frac{\exp(\tau/(\gamma+\beta\tau))}{\gamma(1+\tau)}\, d\tau.$$



Заметим, что функция $\rho(\Theta)$, задаваемая равенством (6), является решением уравнения, которое получается из (2), если числитель и знаменатель в правой части разделить на a и в знаменателе выражение Θ/a заменить на Θ. Это оправданно, поскольку $a(\Theta) \approx 1$ вне малого интервала вблизи нуля. При этом напомним еще раз, обосновывать наводящие соображения здесь не нужно.

Далее, функцию (6) надо подставить в (5) и найти или оценить максимум и минимум получившегося выражения на отрезке $-1+h \leqslant \Theta \leqslant 0$. Пользуясь представлением интеграла $I(\Theta)$ через специальные функции, достаточно просто при заданных параметрах построить функцию $B(\Theta)$ и тем самым получить двусторонние оценки скорости. Это представляется интересным, поскольку позволяет судить о близости пробной функции и решения. На рисунке показаны оценки скорости при $n=0$ ($\beta=0$, $\gamma=0{,}1$), полученные непосредственным вычислением функции $B(\Theta)$ ($\sigma = 2I(0)$). Как видно, оценки сверху и снизу близки между собой.

Другой подход связан с получением явных оценок скорости как функций параметров задачи путем оценки $B(\Theta)$ сверху и снизу, что, вообще говоря, может быть связано с определенными техническими сложностями. Приведем некоторые оценки, получающиеся таким образом. При

$$\begin{gathered} 0 \leqslant n \leqslant 1 \quad (\sigma = (2-n)I(0)) \\ (2-n)I(0) \leqslant u^2 \leqslant (2-n)I(0)/(1-\gamma I(0)). \end{gathered} \tag{7}$$

Величина $I(0) \approx 1$, поэтому оценки снизу и сверху в (7) отличаются на величину порядка γ и являются достаточно точными. Область изменения параметров, при которых имеет место (7), охватывает практически все характерные для горения значения и зависит от параметра $\delta = \beta/\gamma$. При $\delta = 1$, например, ограничение имеет вид $\gamma < 1$, при $\delta = 0$ $\gamma \leqslant 2{,}5h$. Отметим также, что $I(0)$ допускает асимптотическое представление (при малых γ)

$$I(0) = 1 + \gamma(1-2\delta) + \ldots$$

и различные оценки, которые позволяют упростить (7) за счет некоторого ухудшения оценок. Например, при $\delta = 1$ наиболее простая оценка имеет вид

$$(2-n)\left(\frac{1}{1+\gamma} - h\exp\frac{-1+h}{\gamma h}\right) < u^2 < \frac{2-n}{1-\gamma}.$$

Оценка снизу в (7) близка к тому, что получится по методу узкой зоны реакции: при $\delta = 0$ легко видеть, что $I(0) > 1 - \exp((-1+h)/\gamma)$. Она остается справедливой и неплохо работает при $n \leqslant 3/2$. При дальнейшем увеличении n эта оценка ухудшается и теряет смысл при $n \geqslant 2$, как и результаты, полученные методом узкой зоны реакции [5]. Поэтому наряду с этой приведем и другие оценки. Оценка сверху в (7), вообще говоря, не имеет места при $n > 1$.

Справедливы следующие оценки:

$$u^2 \leqslant 4I(0)/(1+\sqrt{1-\gamma(1-1/e)}),\ n = 0, \tag{8}$$

$$u^2 \leqslant (2-n)I(0)/(1-\gamma/(1-1/e)^{1/(2-n)}),\ 0 \leqslant n \leqslant 1, \tag{9}$$

$$u^2 \leqslant (2-n)I(0)/[1-(\gamma/(1-1/e))^{2-n}],\ 1 \leqslant n \leqslant 3. \tag{10}$$

Они имеют место при тех значениях γ, при которых определены правые части (8)—(10) ($\gamma < 1 - 1/e \approx 0{,}63$; в (10) — $\gamma < 1 - 2/e \approx 0{,}26$),

$\delta > 1/2$ и $h > (1 - \delta)/\delta$. Аналогичные оценки имеют место и при других значениях параметров, однако они усложняются и область их применимости (по γ) сужается.

Приведем еще две оценки снизу. Первая —

$$u^2 \geqslant (2-n)I(\tau)/(1-(-\tau)^{2-n}) \qquad (11)$$

справедлива при любых значениях параметров и для любого τ на отрезке $-1 + h \leqslant \tau \leqslant 0$. При $\tau = 0$ она совпадает с (7), а при $n > 1$ можно полагать

$$\tau = \left(\gamma \frac{2-n}{1-\gamma^{2-n}}\right)^{\frac{1}{n-1}}. \qquad (12)$$

Это значение близко (асимптотически) к точке максимума правой части в (11). Выражения (11), (12) хорошо работают при достаточно малых γ ($\gamma \leqslant 0{,}05$) и дают правильную асимптотику в старшем члене. При бóльших γ хорошо работает соотношение

$$u^2 \geqslant \gamma^{n-1} \frac{n^n}{(n-1)^{n-1}} \int\limits_{\frac{-1+h}{\gamma}}^{0} (-\Theta)^{n-1} \exp(\Theta/(1+\beta\Theta))\, d\Theta, \qquad (13)$$

справедливое при $n > 1$. Формула (13) найдена в работе [12] и получается также минимаксным методом (на другой пробной функции).

Асимптотика скорости

В литературе имеется ряд работ, посвященных определению асимптотики скорости в рассматриваемой модели при $\gamma \to 0$ [9—11]. Определенный интерес к этому вопросу связан со сложным поведением асимптотики как функции γ в окрестностях критических значений порядка реакции n. Для старшего члена асимптотики, которым мы ограничимся в этой работе, таким критическим значением является $n = 2$. Поясним это, используя полученные выше двусторонние оценки скорости.

Под старшим членом асимптотики будем понимать функцию $\psi = \psi(\gamma, \beta, n, h)$, которая дает следующую оценку скорости

$$\psi(1+\varepsilon_1) \leqslant u^2 \leqslant \psi(1+\varepsilon_2),$$

где ε_1 и $\varepsilon_2 \to 0$ при $\gamma \to 0$ равномерно по n. В качестве старшего члена асимптотики можно взять функцию

$$\psi \equiv c_n \frac{2-n}{1-\gamma^{2-n}}, \qquad (14)$$

где c_n — положительный числовой множитель, зависящий от порядка реакции. При $n \leqslant 2$ $c_n = 1$, что следует из приведенных выше оценок (10) (при $\gamma \to 0$ она справедлива при всех δ и h) и (11), (12). Об определении этого коэффициента при $n > 2$ речь пойдет ниже.

Из вида старшего члена асимптотики понятно, какая сложность возникает здесь для значений $n \approx 2$. Если искать разложение скорости по степеням γ, как это обычно делается при сращивании асимптотических разложений, то при $n \to 2$ надо выписывать все большее число членов ряда, в пределе равное бесконечности. Если же ограничиться конечным числом членов разложения, то при фиксированном γ, переходя к пределу при $n \to 2$, получим нуль, тогда как в (14) получается $1/\ln(1/\gamma)$. В этом смысле можно говорить о неравномерности асимптотического разложения скорости по степеням γ.

Вернемся к вопросу об определении c_n при $n > 2$. По-видимому, точное значение этого множителя не может быть найдено, и можно находить его приближенно, например, асимптотическими методами [9] или указывать интервал, в котором он содержится, на основании оценок. Выше приведены явные оценки скорости снизу при всех n и сверху — при

$n \leqslant 3$. На той же пробной функции при достаточно малых γ получаются оценки сверху при всех n, в том числе несколько более точные при $n \leqslant 3$. Оценка для c_n имеет вид

$$(n-2)^{n-2}\exp(2-n) < c_n < (n-1)^{n-1}\exp(2-n).$$

Можно получить также асимптотику скорости, применяя минимальный метод иначе. Для этого в уравнении (2), считая для простоты, что $\beta=0$, сделаем замену переменных

$$\tilde{\Theta} = \Theta/\gamma,\ \tilde{a} - a/\gamma,\ v^2 = u^2/\gamma^{n-2}.$$

Тогда

$$\frac{d\tilde{a}}{d\tilde{\Theta}} = -\frac{1}{v^2}\frac{\tilde{a}^n \exp\tilde{\Theta}}{\tilde{a}+\tilde{\Theta}},$$

$$\tilde{a}\left(\frac{-1+h}{\gamma}\right) = \frac{1}{\gamma},\quad \tilde{a}(0) = 0.$$

Если $n > 2$, то в пределе при $\gamma \to 0$ получается граничная задача на полуоси $\tilde{\Theta} \leqslant 0$ с условием $\tilde{a}(0)=0$ и экспоненциальным ростом $\tilde{a}(\tilde{\Theta})$ при $\tilde{\Theta} \to -\infty$ [9, 14]. Такое решение единственно [9] и соответствующее значение скорости может быть найдено минимаксным методом аналогично тому, как это делалось для задачи на отрезке [13]:

$$v^2 = \min_\rho \max_\Theta B(\rho(\Theta), \Theta) = \max_\rho \min_\Theta B(\rho(\Theta), \Theta).$$

Здесь B задается равенством (5) (при $\beta=0$, $\gamma=1$); $\rho(\Theta)$ — монотонные гладкие функции, экспоненциально растущие при $\Theta \to -\infty$. Для получения оценок сверху пробные функции должны удовлетворять условию $\rho(0) \geqslant 0$, снизу $\rho(\Theta_0) = -\Theta_0$ для некоторого $\Theta_0 \leqslant 0$. Если в качестве пробной взять функцию

$$\rho(\Theta) = \left(\frac{n-2}{\sigma}\exp\Theta\right)^{\frac{1}{2-n}},$$

которая фигурирует в качестве внешнего решения при сращивании асимптотических разложений, то, оптимизируя по σ, получим

$$(n-2)^{n-1}\exp(2-n) \leqslant v^2 \leqslant (n-2)(n-1)^{n-1}\exp(2-n).$$

Эти оценки могут быть улучшены либо за счет изменения пробной функции, либо при некоторых n оценками, аналогичными (13). Заметим, что асимптотика $u^2 \sim v^2\gamma^{n-2}$ является неравномерной при $n \to 2$, но при фиксированном значении n совпадает с (14) не только по степени γ, но и по оценке числового множителя.

Применение минимаксного метода

Ниже кратко описываются применения минимаксного метода к некоторым другим моделям, приводящим к системе уравнений (1) или близким к ней. В частности, при изучении горения в потоке (см. [15—17]) рассматривается система (1) на полуоси $x \geqslant 0$ с граничными условиями

$$\Theta(0) = -1,\quad a(0) = 1$$

или

$$\Theta'(0) = u(1+\Theta(0)),\quad a(0) = 1,$$

где u — скорость потока. В первом случае неизвестна конечная температура $\Theta_к = \Theta(+\infty)$, которая уже не равна нулю, как выше, а несколько меньше за счет потерь тепла на входе. При $\beta=0$ и $0 \leqslant n \leqslant 1$ имеет место оценка

$$\gamma\ln\frac{2-n}{u^2+(2-n)\exp(-1/\gamma)} \leqslant -\Theta_к \leqslant \gamma\ln\frac{2-n}{u^2} + 3\gamma^2,$$

справедливая при $\gamma \leqslant 0{,}13$ и $u^2 \leqslant 2/3 \cdot (2-n)$. Ограничиваясь этой оценкой, заметим, что из нее следует асимптотика

$$\Theta_к \sim \gamma \ln \frac{u^2}{2-n}, \quad \gamma \to 0.$$

В случае других граничных условий неизвестно значение температуры при $x=0$, которое при $0 \leqslant n \leqslant 1$ может быть определено из неравенства см. (7))

$$u^2/(2-n+\gamma u^2) \leqslant I(0) \leqslant u^2/(2-n),$$

где

$$I(0) = \int\limits_{\Theta(0)}^{0} \frac{\exp(\Theta/(\gamma+\beta\Theta))}{\gamma(1+\Theta)}\, d\Theta.$$

Из представлений и оценок для $I(0)$ не составляет труда получить оценки и асимптотику для $\Theta(0)$. В частности, при $\beta = 0$, $u^2 < 2-n$

$$\Theta(0) \sim \gamma \ln\left(1 - \frac{u^2}{2-n}\right), \quad \gamma \to 0.$$

Всюду выше при определении скорости волны или других неизвестных величин рассматривалась реакция n-го порядка. Сам минимаксный метод не зависит от кинетики одностадийной реакции, но выбор пробных функций и получающиеся оценки зависят от этого существенно. Приведем одну из возможных оценок скорости волны горения для кинетической функции $\varphi(a) = \exp(-m(1-a))$ $(\varphi(0)=0)$, отражающей торможение продуктами реакции [18], ограничившись для простоты случаем $\beta = \gamma$ и слабым торможением $(m \leqslant 2)$:

$$I(0)\frac{m^2}{\exp m - m - 1} \leqslant u^2 \leqslant I(0)\frac{m^2}{\exp m - m - 1}\,\frac{1}{1-1{,}5\gamma}$$

$(\gamma < 1$, $I(0)$ определено ранее).

В заключение отметим, что помимо рассмотренных примеров минимаксный метод можно применять также к элементарным моделям горения второго рода [19] и к моделям, учитывающим плавление вещества [20].

ЛИТЕРАТУРА

1. **Зельдович Я. Б., Баренблатт Г. И., Либрович В. Б. и др.** Математическая теория горения и взрыва.— М.: Наука, 1980.
2. **Hadeler K. P., Rothe F.** J. Math. Biol., 1975, 2, 251.
3. **Вольперт А. И.** Применение функционалов к исследованию бегущих волн/АН СССР. ОИХФ.— Препр.— Черноголовка, 1984.
4. **Зельдович Я. Б., Франк-Каменецкий Д. А.** ЖФХ, 1938, **12**, 1, 100.
5. **Новожилов Б. В.** Докл. АН СССР. 1961, **141**, 1, 151.
6. **Любченко И. С.** ИФЖ, 1968, **14**, 5, 849.
7. **Хайкин Б. И., Мержанов А. Г.** ФГВ, 1966, **2**, 3, 36.
8. **Алдушин А. П.** ПМТФ, 1974, 3, 96.
9. **Берман Б. С., Рязанцев Ю. С.** ФГВ. 1975, **11**, 1, 179.
10. **Галкина В. И., Любченко В. И., Марченко Г. Н.** Докл. АН СССР, 1986, **286**, 2, 373.
11. **Худяев С. И.** Хим. физика, 1987. **6**. 5, 681.
12. **Ваганов Д. А., Худяев С. И.** ФГВ, 1969, **5**, 2, 167.
13. **Вольперт В. А., Меграбова И. Н., Давтян С. П.** ФГВ, 1985, **21**, 25.
14. **Вольперт В. А., Вольперт В. А., Давтян Д. С.** Оценки скорости волны горения в конденсированной среде/АН СССР. ОИХФ.— Препр.— Черноголовка, 1989.
15. **Зельдович Я. Б., Зайдель Р. М.** ПМТФ, 1962, 4, 27.
16. **Мержанов А. Г., Филоненко А. К.** Докл. АН СССР, 1963, **152**, 1, 143.
17. **Хайкин Б. И., Руманов Э. Н.** ФГВ, 1975, **11**, 5, 671.
18. **Алдушин А. П., Мержанов А. Г., Хайкин Б. И.** Докл. АН СССР, 1972, **204**, 5, 1139.
19. **Мержанов А. Г.** Докл. АН СССР, 1977, **233**, 6, 1130.
20. **Алдушин А. П., Мержанов А. Г.** Докл. АН СССР, 1977, **236**, 5, 1133.

п. Черноголовка

Поступила в редакцию 21/IX 1988,
после доработки — 16/V 1989