

УДК 517.972 : 536.77

© А. И. Карпов

### ФОРМЫ ПОТЕНЦИАЛА ДЛЯ ВАРИАЦИОННОЙ ПОСТАНОВКИ ЗАДАЧИ О СТАЦИОНАРНОМ РАСПРОСТРАНЕНИИ АВТОМОДЕЛЬНОЙ ВОЛНЫ ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ

Рассматривается математическая модель стационарного режима распространения фронта химического превращения на примере одного из наиболее распространенных процессов такого типа – распространения пламени по перемешанной газовой смеси [1]. В подвижной системе координат, связанной с фронтом реакции, стационарное уравнение переноса для переменной  $T$  (в данном случае – температуры) имеет вид

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

где скорость реакции определяется соотношением

$$W = T^m k \exp(-E/R_0T), \quad (2)$$

$C, \lambda, p, R, Q, k, E, R_0$  – константы, а значение стационарной скорости распространения  $m$  выступает в качестве собственного значения задачи, являющегося результатом преобразования системы координат при переходе к стационарной формулировке. Для определения  $m$  (значение которого, как интегрального параметра, отражающего совокупный результат взаимодействия всех имеющих место локальных физико-химических процессов, представляет наибольший интерес) используется замыкание постановки задачи, основанное на использовании интегральных соотношений сохранения массы реагирующего компонента.

Общая схема численного решения нелинейного уравнения (1) основана на итерационной последовательности вида

$$Cm^{(n)} \frac{dT^{(n+1)}}{dx} = \lambda \frac{d^2T^{(n+1)}}{dx^2} + Q \frac{p}{RT^{(n)}} W(T^{(n)}), \quad (3)$$

$$m^{(n+1)} = \int_{-\infty}^0 \left( p / RT^{(n+1)} \right) \rho W(T^{(n+1)}) dx, \quad (4)$$

для которой известны различные подходы к ускорению сходимости при сохранении ее двухшагового характера.

Основная идея предлагаемого здесь подхода к решению рассматриваемой задачи заключается в формулировке ее вариационной постановки в виде минимизации некоторого функционала  $P = \int \sigma dx$ , который, при соответствующем выборе потенциала  $\sigma$ , обеспечивал бы эквивалентность дифференциальной постановке. Целью является предполагаемая возможность получения условия вида  $\partial P / \partial m = 0$  для параметра  $m$  (дополнительно к соотношениям  $\partial P / \partial a_i = 0$ , для  $T(x) = \sum a_i N_i(x)$  при использовании проекционно-сеточных методов) и представлении его, таким образом, как зависимой переменной.

Исходной предпосылкой настоящего анализа является применение экстремальных термодинамических принципов, базирующихся на минимальном производстве энтропии в стационарном состоянии термодинамической системы (например, [2]). В оригинальном виде производство энтропии выражается билинейной формой  $\sigma = \sum J_i X_i$  для термодинамических потоков и обобщенных сил, соответствующих физическим типам необратимых процессов, которые для рассматриваемой здесь теплопроводности имеют вид  $J_T = -\lambda dT/dx$ ,  $X_T = d(1/T)/dx$ . Очевидно, что при использовании потенциала  $\sigma$  в классической форме производства энтропии функционал  $P = \int \sigma dx$  не разрешим относительно  $m$  и, более того, для него невозможно

получить уравнение Эйлера, соответствующее (1). Следуя [3], используется представление для теплового потока вида  $J_T = -\lambda dT/dx + CmT$ , позволяющее включить в анализ переменную  $m$ . Для обобщенной силы, соответствующей химической реакции, получено [4] соотношение  $X_W = Q(1/T - 1/T_f)$ ,  $T_f$  – константа интегрирования, поток определяется стандартным образом:  $J_W = Wp/RT$ .

Нелинейность уравнения (2) приводит к необходимости применения метода локального потенциала [3] (ограниченных вариаций) для квадратичной формы вида  $\sigma = L_i(\tilde{T})X_i^2(T)$ , где  $L_i = J_i(\tilde{T})/X_i(\tilde{T})$  – феноменологический коэффициент (здесь варьирование по  $\tilde{T}$  не проводится). Условие  $\partial P/\partial m = 0$  для полученного функционала выполняется при  $X = 0$  (соответственно,  $J = 0$ ), что соответствует метастабильному состоянию равновесия и дает тривиальное решение  $m = 0$ . Рассмотрение альтернативного представления потенциала через потоки [5], выражающегося соотношениями  $\sigma = R_i(\tilde{T})J(T)_i^2$ ,  $L_i = X_i(\tilde{T})/J_i(\tilde{T})$  приводит к окончательному уравнению для скорости распространения фронта реакции:

$$m = -\frac{\lambda}{C} \int_{-\infty}^0 \frac{1}{T} \left( \frac{d}{dx} \frac{1}{T} \right) dx \bigg/ \int_{-\infty}^0 \left( \frac{1}{T} \right)^2 dx. \quad (5)$$

Следует отметить, что в силу существенно нелинейной (экспоненциальной) зависимости (2) для скорости химической реакции от температуры, уравнение Эйлера для данного потенциала отличается от исходного дифференциального уравнения (1) на величину множителя  $1 + (1/T - 1/T_f)E/R_0$  для второго слагаемого правой части. Таким образом, эквивалентность обеих постановок асимптотически выполняется вблизи равновесного состояния при  $T \rightarrow T_f$  или для малых значений энергий активации реакции.

Полученное соотношение (5) главным образом представляет интерес для оптимизации вычислительного алгоритма решения рассматриваемой задачи, поскольку позволяет свести двухшаговую схему (3)-(4) к одношаговой, что имеет ценность для получения последовательных приближений для параметра  $m$ , особенно на начальных итерациях.

### Список литературы

1. Зельдович Я. Б., Баренблатт Г. И., Либрович В. Б., Махвиладзе Г. М. Математическая теория горения и взрыва. М.: Наука. 1980. 478 с.
2. де Гроот С., Мазур П. Неравновесная термодинамика. М.: Мир. 1964. 456 с.
3. Гленсдорф П., Пригожин И. Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций. М.: Мир. 1973. 280 с.
4. Karpov A. I. Minimal entropy production as an approach to the prediction of stationary rate of flame propagation // Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics. 1992. V. 17. No 1. P. 1–9.
5. Дьярмати И. Неравновесная термодинамика. Теория поля и вариационные принципы. М.: Мир. 1974. 304 с.

Карпов Александр Иванович  
Институт прикладной механики УрО РАН,  
Россия, Ижевск  
e-mail: karpov@udman.ru