

УДК 519.633.6

МЕТОД ДИНАМИЧЕСКОЙ АДАПТАЦИИ В ПРОБЛЕМЕ ЛАМИНАРНОГО ГОРЕНИЯ¹⁾

© 2001 г. М. М. Дёмин, В. И. Мажукин, А. В. Шапранов
(125047 Москва, Миусская пл., 4А, Ин-т Матем. моделирования РАН)
e-mail: immras@orc.ru

Поступила в редакцию 29.03.2000 г.

Излагается метод построения динамически адаптирующихся к решению расчетных сеток применительно к задачам с неустойчивым (релаксационным или колебательным) характером изменения решения. С помощью математического моделирования исследуются стационарные и пульсирующие режимы ламинарного горения в широком диапазоне значений числа Льюиса и энергии активации. Оценена эффективность метода по быстродействию и количеству используемых узлов. Математическое моделирование показало, что применение динамической адаптации позволяет уменьшить число узлов сетки на 1–2.5 порядка, а быстродействие увеличить в 2–50 раз.

ВВЕДЕНИЕ

Опыт численного моделирования [1]–[5] свидетельствует о том, что применение адаптирующихся к решению сеток существенно увеличивает эффективность вычислительных алгоритмов, проявляющуюся в значительном повышении точности решения при одновременном сокращении числа узлов сетки. Особенно эффективными они оказываются при решении нестационарных задач, имеющих быстро перемещающиеся узкие зоны с большими градиентами. К таким задачам относится проблема ламинарного пламени, распространяющегося по веществу с дозвуковой скоростью. Высокая скорость химического превращения реагента и медленное распространение тепловых возмущений по непрореагировавшей смеси приводит к формированию узкой зоны горения, характеризующейся большими градиентами температуры и концентрации.

Основной задачей теоретических исследований процесса горения является определение нормальной скорости и режима распространения пламени. В проблеме ламинарного (послойного) горения или горения во фронте одним из наиболее важных факторов, влияющих на режим распространения фронта пламени, является соотношение коэффициентов переноса: диффузии D и температуропроводности α . В зависимости от их соотношения (отношение D к α получило название числа Льюиса $Le = D/\alpha$) горение имеет стационарный $Le = 1$, либо пульсирующий характер $Le \neq 1$ (см. [6]). Стационарные режимы характеризуются постоянной скоростью распространения фронта и устойчивой диффузионно-тепловой структурой пламени. Возникновение диффузионно-тепловой неустойчивости сопровождается нарушением подобия температурного и концентрационного распределений, а скорость фронта может приобретать сложный пульсирующий характер. Дестабилизирующее действие проявляется тем сильнее, чем больше число Льюиса отклоняется от единицы. Равенство $Le = 0$ формально соответствует горению конденсированного вещества. Нахождению условий тепловой устойчивости горения конденсированных сред и диффузионно-тепловой устойчивости горения газовых сред посвящено значительное число теоретических работ [7]–[11]. Однако численное моделирование неустойчивых и автоколебательных режимов по-прежнему является непростой вычислительной проблемой [3], что проявляется, в частности, в необходимости использования расчетных сеток с очень большим числом узлов [11].

Вычислительные особенности проблем горения обуславливаются наличием процессов с сильно различающимися характерными временами: малым временем химической реакции и большим временем диффузионного механизма тепловой релаксации. Соответственно высокая скорость химического превращения вещества и медленное распространение тепловых возмуще-

¹⁾Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (код проекта 01-00604), РФФИ-БРФФИ (код проекта 00-01-81065 Бел 2000а).

ний и диффузионного перемешивания реагирующей смеси приводят к формированию узкой зоны горения с большими градиентами температуры T и плотности ρ . Фронт горения зарождается на одной из границ и быстро перемещается к противоположной. При численном решении требуется, чтобы в зоне реакции находилось определенное число узлов сетки. Эти два обстоятельства не позволяют при использовании сеток с фиксированными узлами производить дискретизацию пространственных переменных с крупным шагом. При больших отношениях размера рассматриваемой области к характерной толщине зоны горения эффективность вычислительных алгоритмов с фиксированными сетками быстро снижается из-за большого числа используемых узлов. Так традиционная сетка с фиксированными узлами для типичной задачи неустойчивого горения содержит 3000–5000 узлов [11]. Значительно более эффективными в подобных ситуациях оказываются сетки, динамически адаптирующиеся к решению, позволяющие в зонах быстрого изменения оперативно концентрировать необходимое число узлов.

В работах [12]–[14] для решения нестационарных задач был предложен метод динамической адаптации, показавший высокую эффективность в проблемах с подвижными границами и большими градиентами решения. Его применение позволяет решать задачи с автоматическим выделением сильных разрывов типа межфазных границ во многофронтных задачах Стефана [15], [16] и ударных волн в газовой динамике [17]. В проблемах типа Бюргерса применение динамической адаптации [18] позволило резко улучшить качество разностных схем за счет почти полного устранения их дисперсионных и значительного уменьшения диссипативных свойств. В конечном итоге это позволило уменьшить количество используемых узлов на 2–3 порядка по сравнению с сетками с фиксированными узлами. Однако метод динамической адаптации, в котором функция преобразования определяется из принципа квазистационарности, никогда ранее не применялся к решению задач, в которых решение носит колебательный характер.

Целью данной работы является распространение динамической адаптации для математического моделирования различных устойчивых, неустойчивых и автоколебательных режимов ламинарного горения. На их примере определяется эффективность метода по быстродействию и количеству используемых узлов.

1. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФОРМУЛИРОВКА ЗАДАЧИ

В основе физического механизма распространения пламени по неподвижной газовой смеси лежит процесс теплопередачи из области сгоревшего газа, имеющей высокую температуру, к более холодным слоям непрореагировавшего газа. Рассмотрим гомогенную в тепловом и концентрационном отношении неподвижную газовую среду. Распространение фронта экзотермической реакции в ней формулируется в простейшем варианте одностадийного горения, для которого функция тепловыделения Φ определяется химической реакцией первого порядка и имеет вид

$$\Phi(\tilde{T}, \tilde{\rho}) = h\tilde{\rho}k e^{-E/R\tilde{T}}, \quad (1)$$

где h – массовая теплота сгорания, k – коэффициент скорости, E – энергия активации, R – газовая постоянная.

Тем самым скорость тепловыделения экзотермической реакции оказывается линейно зависящей от плотности среды $\tilde{\rho}$ и экспоненциально (по Аррениусовскому закону) от температуры \tilde{T} , что соответствует современным представлениям о кинетике химических реакций в гомогенных средах. Предполагая также, что горение является изобарическим, а перенос тепла имеет диффузионную природу, задача о распространении ламинарного пламени в простейшей постановке может быть описана системой из двух дифференциальных уравнений параболического типа: теплопроводности и диффузии с постоянными коэффициентами теплопроводности α и диффузии D . В физическом пространстве $\Omega_{\tilde{x}\tilde{t}}$ в размерном виде формулировка задачи приобретает вид

$$c_p \rho_0 \frac{\partial \tilde{T}}{\partial \tilde{t}} = \lambda \frac{\partial^2 \tilde{T}}{\partial \tilde{x}^2} + h\tilde{\rho}k \exp\left(-\frac{E}{R\tilde{T}}\right), \quad (2)$$

$$\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial \tilde{t}} = D \frac{\partial^2 \tilde{\rho}}{\partial \tilde{x}^2} - \tilde{\rho}k \exp\left(-\frac{E}{R\tilde{T}}\right), \quad (3)$$

$$0 = \tilde{x}_0 \leq \tilde{x} \leq \tilde{x}_1 = L, \quad \tilde{t} \geq 0,$$

где \tilde{t} и \tilde{x} – независимые переменные времени и пространственной координаты; D , λ , C_p и ρ_0 – коэффициенты диффузии, теплопроводности, удельная теплоемкость и начальная плотность вещества, L – длина рассматриваемой области.

Начальные и граничные условия. При выборе величины L учитывалось то обстоятельство, что в типовом двигателе внутреннего сгорания характерный размер камеры сгорания составляет ≈ 5 см. В расчетах, как правило, величина L не превышала 10 см.

Обычно химическая реакция в веществе инициируется на одной из границ с помощью внешнего источника энергии, а затем фронт реакции распространяется в направлении противоположной границы. Предположим, что таким источником является горячая стенка, помещенная в начало координат $\tilde{x} = 0$. Ее температура меняется по линейному закону от некоторой начальной температуры \tilde{T}_0 до так называемой адиабатической температуры горения $\tilde{T}_a = \tilde{T}_0 + h/C_p$, $\tilde{T}_0 \leq \tilde{T} \leq \tilde{T}_a$. Поток вещества на левой границе полагался равным нулю. Этим предположениям соответствуют следующие соотношения:

$$\tilde{T}(0, \tilde{t}) = \tilde{T}_0 + c\tilde{t}, \quad -D \frac{\partial \tilde{\rho}(0, \tilde{t})}{\partial \tilde{x}} = 0, \quad \tilde{x} = \tilde{x}_0 = 0. \quad (4)$$

Противоположный правый конец стержня $\tilde{x} = \tilde{x}_L$ полагался изолированным в тепловом и диффузионном отношении:

$$-\lambda \frac{\partial \tilde{T}(\tilde{x}_L, \tilde{t})}{\partial \tilde{x}} = 0, \quad -D \frac{\partial \tilde{\rho}(\tilde{x}_L, \tilde{t})}{\partial \tilde{x}} = 0, \quad \tilde{x} = \tilde{x}_L = L. \quad (5)$$

Начальные значения температуры $\tilde{T}(x, 0)$ выбирались из условия практического равенства нулю функции скорости тепловыделения (1) при данной температуре \tilde{T}_0 . Начальная плотность $\tilde{\rho}(x, 0)$ полагалась равной плотности невозмущенного газа ρ_0 :

$$\tilde{T}(x, 0) = \tilde{T}_0, \quad \tilde{\rho}(x, 0) = \rho_0, \quad \tilde{t} = 0. \quad (6)$$

Для удобства численного решения задача (2)–(6) приводилась к безразмерному виду с помощью следующих безразмерных переменных:

$$\rho = \frac{\tilde{\rho}}{\rho_0}, \quad x = \frac{\tilde{x}}{L}, \quad t = \frac{\tilde{t}\alpha}{L^2}, \quad T = \frac{\tilde{T}C_p}{h}, \quad \theta = \frac{E C_p}{Rh}, \quad A = \frac{kL^2}{a}, \quad a = \frac{\lambda}{C_p \rho_0}, \quad Le = \frac{D}{\alpha},$$

где θ – безразмерная энергия активации, A – предэкспонент.

В безразмерной форме уравнения (2), (3) имеют вид

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \rho A \exp\left(-\frac{\theta}{T}\right), \quad (7)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = Le \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} - \rho A \exp\left(-\frac{\theta}{T}\right), \quad (8)$$

где $0 = x_0 \leq x \leq x_1 = 1$, $t \geq 0$, $(x, t) \in \Omega_{xt}$.

Начальные условия и граничные условия в пространстве Ω_{xt} :

$$T(x, 0) = T_0, \quad \rho(x, 0) = \rho_0, \quad t = 0,$$

$$T(x_0, t) = \begin{cases} T_0 + ct, & t \leq 1/c, \\ T_a, & t > 1/c, \end{cases} \quad -D \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0, \quad x = x_0 = 0, \quad (9)$$

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial x} = 0, \quad -D \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0, \quad x = 1,$$

где c – постоянная величина.

В полученных уравнениях плотность ρ изменяется от единицы до нуля. При отсутствии подвода тепла извне величина безразмерной температуры T заключена в интервале $T_0 \leq T \leq T_a$, где $T_a = 1 + T_0$. Принятые в данной работе значения параметров выбраны по аналогии с [19], для горения углеводородного топлива в воздухе, для которого характерно шестикратное увеличение температуры. Поэтому в большинстве случаев в качестве начального условия бралось значение $T_0 = 0.2$, что дает $T_a/T_0 = 6$. Типичные значения безразмерной активации для реакции горения углеводородов в воздухе находятся в диапазоне $\theta = 3-6$.

2. НЕСТАЦИОНАРНАЯ ПРОИЗВОЛЬНАЯ СИСТЕМА КООРДИНАТ И ПОСТРОЕНИЕ ДИНАМИЧЕСКИ АДАПТИРУЮЩЕЙСЯ СЕТКИ

Воспользуемся методом динамической адаптации [12], [13], в котором построение расчетной сетки осуществляется на основе перехода к произвольной нестационарной системе координат с переменными (q, τ) , принадлежащей некоторому расчетному пространству $\Omega_{q\tau}$. Преобразование координат производится с помощью искомого решения. Уравнение обратного преобразования, являющееся дифференциальным уравнением в частных производных, составляется таким образом, что скорость движения узлов зависит от динамики решения уравнений, описывающих физические процессы.

Переход из физического пространства Ω_x в расчетное $\Omega_{q\tau}$ осуществляется с помощью замены общего вида $x = \xi(q, \tau)$, $t = \tau$, имеющей обратное преобразование $q = \phi(x, t)$, $\tau = t$. Якобианом такого преобразования является функция $\psi = dx/dq$. Частные производные зависимых переменных выражаются обычным образом:

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\partial q}{\partial t} \frac{\partial}{\partial q} = \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\partial x}{\partial \tau} \frac{1}{\psi} \frac{\partial}{\partial q} = \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{Q}{\psi} \frac{\partial}{\partial q},$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial q}{\partial x} \frac{\partial}{\partial q} = \frac{1}{\psi} \frac{\partial}{\partial q}, \quad \frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{\partial q}{\partial x} \frac{\partial}{\partial q} \frac{\partial q}{\partial x} \frac{\partial}{\partial q} = \frac{1}{\psi} \frac{\partial}{\partial q} \frac{1}{\psi} \frac{\partial}{\partial q},$$

где $dx/d\tau = -Q$ – скорость движения нестационарной системы координат. В новых переменных (q, τ) задача (7)–(9) запишется в виде

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = -\frac{1}{\psi} \frac{\partial W}{\partial q} - \frac{Q}{\psi} \frac{\partial T}{\partial q} + \rho A \exp\left(-\frac{\theta}{T}\right), \quad W = -\frac{1}{\psi} \frac{\partial T}{\partial q}, \quad (10)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial \tau} = -Le \frac{1}{\psi} \frac{\partial J}{\partial q} - \frac{Q}{\psi} \frac{\partial \rho}{\partial q} - \rho A \exp\left(-\frac{\theta}{T}\right), \quad J = -\frac{1}{\psi} \frac{\partial \rho}{\partial q}, \quad (11)$$

$$\partial \psi / \partial \tau = -\partial Q / \partial q, \quad \partial x / \partial q = \psi, \quad 0 = q_0 \leq q \leq q_L = L, \quad \tau \geq 0. \quad (12)$$

В результате перехода к произвольной нестационарной системе получили расширенную систему дифференциальных уравнений, в которой уравнение (12) после определения конкретного вида функции Q может быть использовано для построения адаптирующейся сетки.

В пространстве $\Omega_{q\tau}$ начальные и граничные условия (9) приобретают вид

$$T(q, 0) = T_0, \quad \rho(q, 0) = \rho_0, \quad \tau = 0,$$

$$T(q_0, \tau) = \begin{cases} T_0 + c\tau, & \tau \leq 1/c, \\ T_a, & \tau > 1/c, \end{cases} \quad -\frac{1}{\psi} \frac{\partial \rho}{\partial q} = 0, \quad q = q_0 = 0, \quad (13)$$

$$-\frac{1}{\psi} \frac{\partial T}{\partial q} = 0, \quad -\frac{1}{\psi} \frac{\partial \rho}{\partial q} = 0, \quad q = q_L = 1.$$

Учитывая, что в физическом пространстве границы рассматриваемой области являются неподвижными, граничные условия для дополнительного уравнения (12) запишем в виде равенства нулю функции Q :

$$Q(q_0, \tau) = Q(q_L, \tau) = 0. \quad (14)$$

Функция Q по-прежнему является произвольной. Ее задание определяет конкретный вид преобразования координат и с ее помощью осуществляется конкретное управление движением узлов сетки.

3. ФУНКЦИЯ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ Q

В общем случае преобразование координат стремятся выбрать таким, чтобы в расчетном пространстве градиенты решения были много меньше, чем в физическом. Правильный выбор функции преобразования Q обеспечивает согласованное с решением движение узлов и является одним из наиболее важных моментов в методе динамической адаптации. При недостаточно быстром движении узлов их сгущение может не успевать за перемещением особенностей решения, что вызовет снижение эффективности адаптации. Слишком высокая скорость движения узлов может вызывать либо осцилляции решения, либо связанные колебания сетки и решения, либо вообще приводить к глобальной неустойчивости счета.

Обычно для компенсации неполной согласованности искомого решения с механизмом перестройки сетки в функцию преобразования вводят подгоночные коэффициенты, подбором которых можно уменьшить степень несогласованности. В то же время наличие подгоночных коэффициентов в методе адаптации свидетельствует о его несовершенстве.

Для определения необходимой функции преобразования воспользуемся сформулированным в [17] принципом квазистационарности. Его применение позволяет определять функции преобразования, свободные от подгоночных параметров [17], [18]. В основе принципа квазистационарности лежит предположение о том, что существует такая нестационарная система координат, в которой все процессы протекают стационарно, т.е. временные производные решения равны нулю или достаточно малы. Распространяя принцип квазистационарности на систему уравнений (10)–(12), полагаем, что имеется такая система координат, в которой $\partial T/\partial \tau = \partial \rho/\partial \tau = 0$. Тогда из (10)–(12) следует

$$\frac{Q}{\psi} \frac{\partial T}{\partial q} + \frac{1}{\psi} \frac{\partial W}{\partial q} - \rho A \exp\left(-\frac{\theta}{T}\right) = 0, \quad (15)$$

$$\frac{Q}{\psi} \frac{\partial \rho}{\partial q} + Le \frac{1}{\psi} \frac{\partial J}{\partial q} + \rho A \exp\left(-\frac{\theta}{T}\right) = 0. \quad (16)$$

Разрешая (15), (16) относительно Q , получаем искомую функцию преобразования

$$Q = \frac{1}{\psi} \left(Le \frac{\partial}{\partial q} \left| \frac{\partial \rho}{\partial q} \right| + \frac{\partial}{\partial q} \left| \frac{\partial T}{\partial q} \right| \right) \left(\left| \frac{\partial}{\partial q} (\rho + T) \right| + \text{reg} \right)^{-1} + \left(\frac{\partial}{\partial q} \frac{1}{\psi} \right) \left(Le \left| \frac{\partial \rho}{\partial q} \right| + \left| \frac{\partial T}{\partial q} \right| \right) \left(\left| \frac{\partial}{\partial q} (\rho + T) \right| + \text{reg} \right)^{-1}. \quad (17)$$

Первое слагаемое в этой формуле обеспечивает сгущение узлов сетки, а второе ограничивает сближение двух соседних узлов до некоторой конечной величины. Учитывая немонотонный характер решения, первые производные плотности и температуры взяты по модулю, $\text{reg} \ll 1$ – постоянная, предотвращающая обращение в нуль знаменателя в тех точках, где пространственные производные обращаются в нуль.

Для численного решения систему уравнений (10)–(12) целесообразно представить в строго дивергентной форме:

$$\frac{\partial(\psi T)}{\partial \tau} = \frac{\partial W}{\partial q} - \frac{\partial(QT)}{\partial q} + \psi \rho A \exp\left(-\frac{\theta}{T}\right), \quad (18)$$

$$\frac{\partial(\psi \rho)}{\partial \tau} = -Le \frac{\partial J}{\partial q} - \frac{\partial(Q\rho)}{\partial q} - \psi \rho A \exp\left(-\frac{\theta}{T}\right), \quad (19)$$

$$\partial \psi / \partial \tau = -\partial Q / \partial q, \quad \partial x / \partial q = \psi. \quad (20)$$

4. МОДИФИКАЦИЯ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ

С целью повышения эффективности метода динамической адаптации модифицируем граничные условия (14) таким образом, чтобы задача (18)–(20) была представлена в виде задачи со свободной границей [3], [20]. Учитывая, что процесс горения инициируется на левой границе $q = q_0$,

а затем волна горения распространяется по холодному фону в направлении правой границы $q = q_L$, целесообразно исключить из рассмотрения область, не охваченную возмущением, сформулировав на правой границе соответствующие граничные условия, представляющие исходную задачу в виде задачи со свободной границей. Для этого произвольная точка $q_* \in (q_0, q_L)$, но такая, что $q_* > q_0$ и $q_* \ll q_L$, объявляется новой границей с граничными условиями [3], [20]:

$$T(q_*, \tau) = T_0, \quad \rho(q_*, \tau) = \rho_0, \quad Q(q_*, \tau) = u = \lim_{q \rightarrow q_*} -\frac{a}{T} \frac{1}{\psi} \frac{\partial T}{\partial q}. \quad (21)$$

До тех пор, пока возмущение не достигнет точки $q = q_*$, граница остается неподвижной. Ее движение начинается с приходом тепловой волны и заканчивается при достижении точки $q = q_L$. В окончательном виде граничные и начальные условия для уравнений (18)–(20) запишутся в виде

$$T(q, 0) = T_0, \quad \rho(q, 0) = \rho_0, \quad \psi(q, 0) = 1, \quad \tau = 0, \\ T(q_0, \tau) = \begin{cases} T_0 + c\tau, & \tau \leq 1/c, \\ T_a, & \tau > 1/c, \end{cases} \quad -\frac{1}{\psi} \frac{\partial \rho}{\partial q} = 0, \quad Q(q_0, \tau) = 0, \quad q = q_0 = 0, \quad (22)$$

$$T(q_*, \tau) = T_0, \quad \rho(q_*, \tau) = \rho_0, \quad Q(q_*, \tau) = u = \lim_{q \rightarrow q_*} -\frac{a}{T} \frac{1}{\psi} \frac{\partial T}{\partial q}, \quad q = q_* = L_*.$$

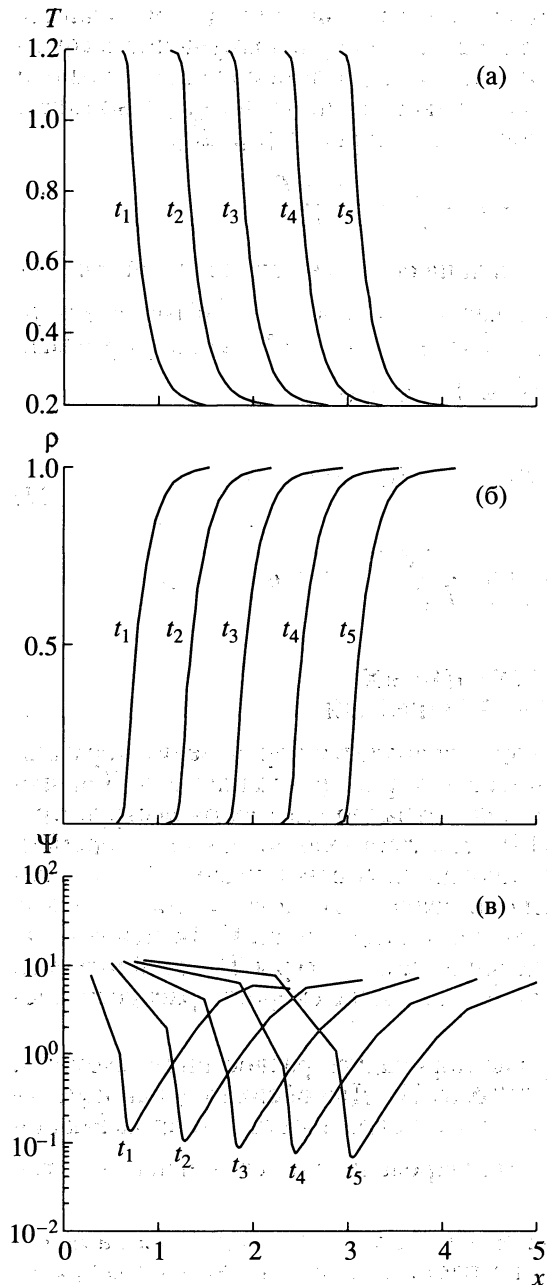
5. МОДЕЛИРОВАНИЕ УСТОЙЧИВЫХ И НЕУСТОЙЧИВЫХ РЕЖИМОВ ГОРЕНИЯ

Основной целью исследования различных режимов горения является определение нормальной скорости распространения u и диффузионно-тепловой структуры фронта пламени. Для численного анализа распространения фронта пламени и его концентрационно-тепловой структуры использовались обе математические модели (7)–(9) и (18)–(22), сформулированные в переменных стационарной (x, t) и нестационарной (q, τ) системах координат соответственно. Модель горения (7)–(9), сформулированная в переменных (x, t) , использовалась в основном для сравнения результатов и определения эффективности метода динамической адаптации. Из решения (18)–(22) определялись пространственно-временные распределения температуры $T(x, t)$, плотности $\rho(x, t)$, толщины зон прогрета $\delta_T(t)$ и химической реакции $\delta_p(t)$, а также скорость распространения фронта пламени $u(t)$.

Дифференциальные модели (7)–(9) и (18)–(22) аппроксимировались разностными схемами, построенными с помощью интегроинтерполяционного метода [21]. Для обеих моделей использовались симметричные консервативные разностные схемы с погрешностью аппроксимации $O(\Delta t^2 + \Delta h_x^2)$ и $O(\Delta \tau^2 + \Delta h_q^2)$, где $\Delta t, \Delta h_x, \Delta \tau, \Delta h_q$ – шаги интегрирования по переменным t, x, τ, q соответственно.

В начале каждого расчета принимался линейный закон возрастания температуры на левой границе. С ростом температуры на этой границе резко возрастает скорость химической реакции. Выделяющаяся в процессе реакции теплота формирует градиент температуры, вызывающий резкий рост потока тепла, направленный внутрь стержня. В результате зона горения начинает быстро перемещаться в направлении правой границы. Характер дальнейшего распространения фронта пламени зависит от значений ряда определяющих параметров. В газовых средах к таким параметрам относятся число Льюиса Le , характеризующее диффузионный перенос непрореагировавшего газа в зону реакции, и температурный коэффициент скорости горения α , характеризующий избыточное количество энтальпии во фронте. Горение конденсированных сред, которому формально соответствует $Le = 0$, характеризуется отсутствием диффузионных потоков вещества в зоне химической реакции и его структура зависит только от величины температурного коэффициента α .

Как показали экспериментальные [6], [21] и теоретические исследования [7], [10] горения в газовых средах, в зависимости от соотношения между коэффициентами Le и α , существуют два качественно различающихся режима, характеризующихся устойчивым или неустойчивым распространением фронта реакции. В первом режиме с $Le = D/\alpha \approx 1$ процесс одномерного горения протекает устойчиво. Для него характерны распространение с постоянной скоростью пространственных профилей $T(x, t)$, $\rho(x, t)$ и плоского фронта пламени с устойчивой тепловой и диффузионной структурой. Во втором случае при значениях $\alpha = (T_a - T_0)d(\ln u)/dT_0 > \alpha_c$, где α_c – некото-



Фиг. 1.

ющую, во сколько раз по сравнению с начальным моментом времени ($t = 0$, ψ_i) изменился пространственный шаг. Расчеты показали, что в зоне горения пространственный шаг уменьшается примерно в 10 раз, а в остальной области увеличивается в 2–5 раз (см. фиг. 1в). На диаграмме движения узлов положению фронта горения соответствует область наиболее сильного сгущения траекторий (см. фиг. 3). По результатам численных расчетов для фиксированного значения адиабатической температуры T_a и $Le = 1$ была получена эмпирическая формула для скорости горения:

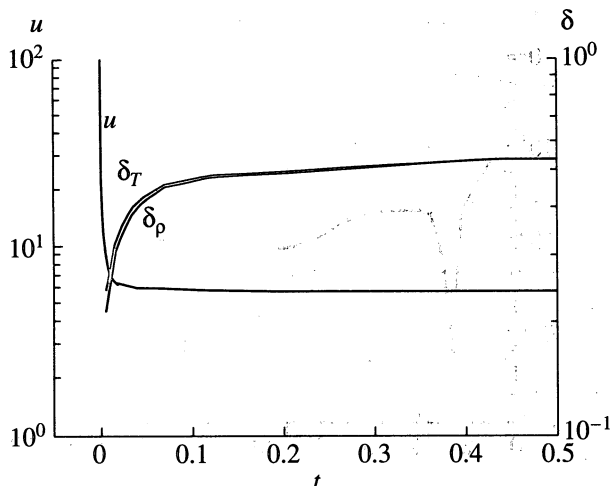
$$U = \frac{1.6\sqrt{A} \exp(-0.408\theta)}{\theta},$$

которая аппроксимирует результаты расчетов при различных A и θ с погрешностью, не превышающей 5%.

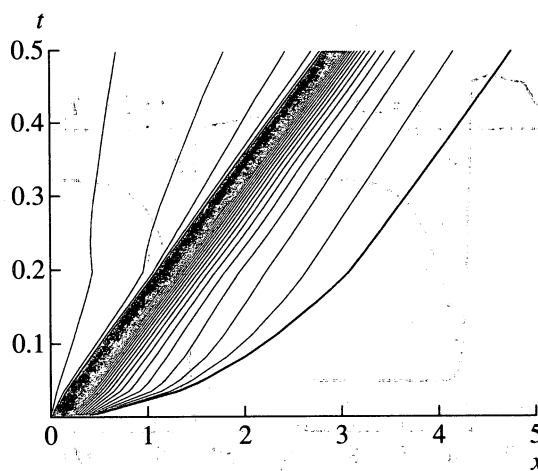
рое критическое значение; T_a – адиабатическая температура и $Le < 1$, возникает так называемый режим одномерной диффузионно-тепловой неустойчивости [6], [10], в котором горение приобретает колебательный характер. Для двухмерного пламени условия диффузионно-тепловой неустойчивости [7] оказались противоположными: пламя устойчиво при $Le < 1$ и неустойчиво при $Le > 1$.

Режим стационарного горения. Как уже отмечалось, стационарные режимы горения реализуются при значениях $Le \approx 1$. После того, как влияние левого граничного условия (греющаяся стенка) становится малым, т.е. с момента установления равновесия между кондуктивным потоком тепла из зоны реакции и подводом тепла за счет химической реакции, зона реакции начинает двигаться вправо с постоянной скоростью. Устанавливается режим стационарного горения, типичные профили температуры $T(x)$, плотности $\rho(x)$ и функции $\psi(x)$, для которого при $Le = 1$, $\theta = 18$, $A = 10^{10}$ представлены на фиг. 1. На фиг. 2 при тех же значениях представлены временные зависимости скорости горения $u(t)$, толщины зоны прогрева $\delta_T(t)$ и зоны химической реакции $\delta_p(t)$. Траектории движения узлов сетки $x_i(t)$ приведены на фиг. 3. Характерные особенности горения при $Le = 1$, $\theta = 18$, $A = 10^{10}$ состоят в том, что максимум температуры совпадает с адиабатической температурой горения $T_m = T_a (T_a = T_0 + \Phi/C_p)$. Толщины теплового $\delta_T(t)$ и диффузионного $\delta_p(t)$ фронтов совпадают $\delta_T(t) = \delta_p(t)$ между собой, а скорость их распространения постоянна $u(t) = \text{Const}$.

В вычислительном отношении основной особенностью стационарных режимов является наличие практически не изменяющейся во времени пространственной зоны с крутыми градиентами $T(x)$ и $\rho(x)$, распространяющейся слева направо с постоянной скоростью. Появление зоны сильного изменения решения влечет за собой автоматическое перераспределение узлов сетки с концентрацией их в зоне горения. Крутизной градиентов определяется минимальный пространственный шаг $h_{x, \min}$. Динамику изменения пространственных шагов h_x удобно характеризовать с помощью функции $\psi(x_i) = h(x_i)/h(q_i)$ (см. фиг. 1в), представляющую собой безразмерный шаг h_x в физическом пространстве и показыва-



Фиг. 2.



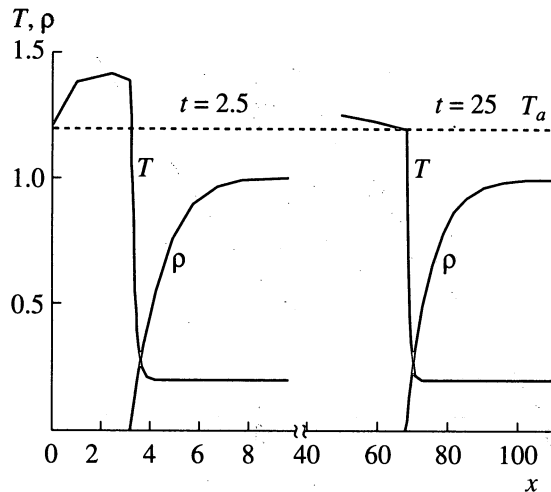
Фиг. 3.

Неустойчивые режимы горения. Одним из наиболее важных факторов интенсивного изменения температуры горения является неустойчивость фронта пламени. В ламинарных режимах горения диффузионно-тепловая неустойчивость возникает при отсутствии подобия концентрационных и температурных распределений, т.е. при $Le \neq 1$. Диффузионно-тепловая неустойчивость влияет на структуру пламени, не вызывая при этом значительных газодинамических возмущений. Дестабилизирующее действие проявляется тем сильнее, чем больше число Льюиса отклоняется от единицы. Как уже отмечалось, основным дестабилизирующим фактором, приводящим к появлению пульсаций, является избыток энтальпии в зоне реакции. К стабилизирующим факторам относятся количество тепла, выделяющегося при горении, и диффузия компонентов смеси. При уменьшении любого из этих факторов условия возникновения пульсаций усиливаются. Переход от одного режима к другому происходит при некотором критическом значении определяющих параметров Le и α . Вопрос о критических условиях, вызывающих смену режимов, рассматривался в нескольких работах [8]–[11]. Было показано, что в зависимости от соотношения параметров Le и α диффузионно-тепловая неустойчивость может носить как монотонный, так и колебательный характер.

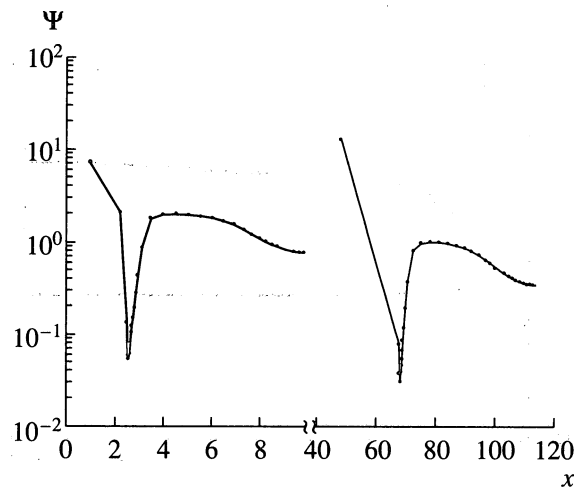
При $Le \gg 1$ реализуется неустойчивый режим горения перегретой реагирующей смеси с избытком энтальпии за фронтом, из-за чего температура горения оказывается выше адиабатической, $T_{max} > T_a$, фиг. 4. Неустойчивость носит монотонный характер. Максимальный перегрев достигается в начальные моменты времени, а затем процесс протекает с плавно уменьшающейся скоростью, фиг. 6 (на фиг. 4–7 $Le = 10$; $\theta = 18$, $A = 10^{10}$). Несмотря на то, что процесс протекает с избытком энтальпии и $T_{max} > T_a$, термокинетические колебания, для возникновения которых необходимо, чтобы характерное время химической реакции было много меньше характерного времени диффузии, т.е. $t_r \ll t_D$, отсутствуют. Так как при $Le \gg 1$ толщина диффузионного фронта оказывается больше толщины теплового фронта $\delta_p(t) > \delta_T(t)$ (см. фиг. 6), то условие $t_r \ll t_D$ не выполняется и термокинетические колебания не возникают. В вычислительном отношении режимы горения с $Le \gg 1$ мало чем отличаются от режимов $Le = 1$. Как и в предыдущем случае, узлы адаптирующей сетки концентрируются в зоне горения (см. фиг. 5, 7), но так как толщины фронтов различные, то сгущение их происходит в области фронта с большей крутизной. При $Le \gg 1$ большей крутизной обладают температурные профили $T(x)$ (см. фиг. 4).

В случае безгазового горения ($Le = 0$) неустойчивость приобретает тепловой характер и полностью определяется температурным коэффициентом скорости горения α (см. [9]): $\alpha = (T_a - T_0)d \ln u / (dT_0) > \alpha_c$. Явное выражение температурного коэффициента зависит от вида стационарного закона горения $u(T_a)$. В случае аррениусовской зависимости скорости химической реакции (1), $u \sim \exp[-E/(2RT_a)]$ условие устойчивости приобретает вид $\alpha = E(T_a - T_0)/(2RT_a^2) < \alpha_c$, $\alpha_c = 4.24$ (см. [8], [9]). С ростом числа Льюиса ($0 < Le < 1$) значение α_c увеличивается [10].

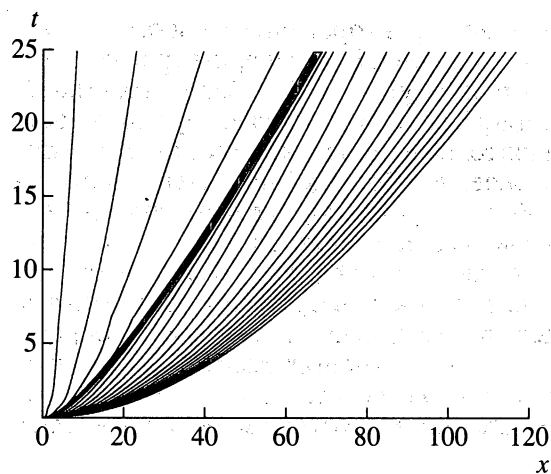
Динамика пульсаций. Математическое моделирование показало, что при незначительном отклонении числа Льюиса от единицы $Le < 1$ размеры зоны сильного химического превращения



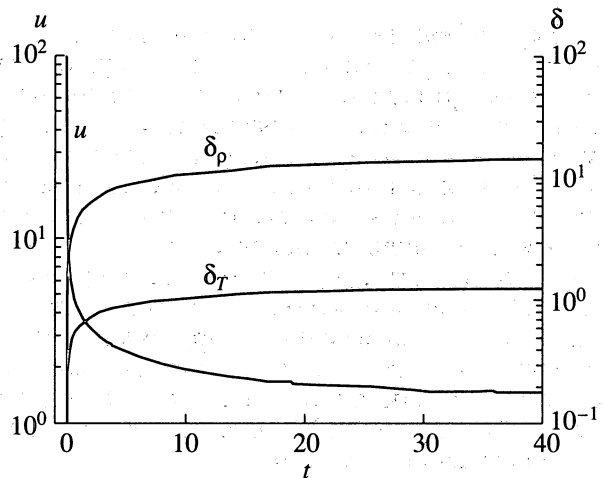
Фиг. 4.



Фиг. 5.



Фиг. 6.



Фиг. 7.

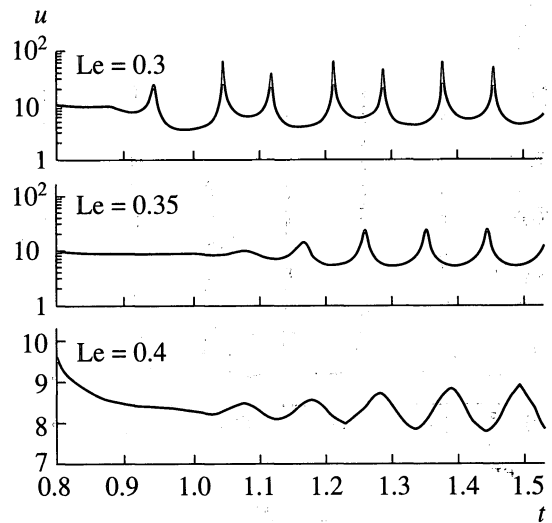
реагента приблизительно совпадают с размерами зоны прогрева $\delta_p(x) \leq \delta_T(x)$ и неустойчивость стационарного горения не проявляется. Однако с уменьшением числа Льюиса уменьшается диффузионный поток в зону горения и возрастает роль дестабилизирующих факторов. Первоначально неустойчивость горения проявляется в виде затухающих колебаний (см. фиг. 8, $A = 10^{10}$, $\theta = 18$). По мере удаления от порога устойчивости, вызванного, например, сильным уменьшением числа Льюиса $Le \ll 1$, несовпадение характерных масштабов $\delta_p(x)$ и $\delta_T(x)$ значительно возрастает, что приводит к появлению значительного избытка энтальпии. Избыток тепла во фронте горения приводит к появлению пульсаций с возрастающей амплитудой и частотой (см. фиг. 8). При определенных значениях Le и α колебания перестают зависеть от нагревающей стенки и в системе реализуется автоколебательный режим горения (см. фиг. 8). Распространение фронта горения в автоколебательном режиме представляет собой последовательность периодически чередующихся стадий вспышек и депрессии, которым соответствуют максимумы и минимумы температуры и скорости соответственно, фиг. 8. В этом режиме скорость перемещения фронта не является постоянной, а меняется по определенному закону, зависящему от степени удаления от порога возникновения автоколебаний и определяемому значениями Le и α . При незначительном удалении от порога автоколебаний скорость горения совершает почти синусоидальные колебания около своего стационарного значения. По мере удаления от порога автоколебаний, достигаемого при фиксированном α за счет уменьшения Le , структура пульсаций изменяется: возрастают амплитуда и частота колебаний, уменьшается длительность вспышки и растет время депрессии.

На фиг. 9 представлены пространственно-временные распределения температуры и плотности, полученные при $Le = 0.3$, $A = 10^{10}$ и $\theta = 18$. Моментам времени с нечетными индексами соответствуют положения всплесков, а четным – депрессии. В момент всплески температура за фронтом превышает температуру стационарного адиабатического горения. Максимуму температуры на фиг. 9а, соответствует максимум скорости горения (фиг. 10) и минимум величин $\delta_p(x)$ и $\delta_T(x)$. Высокая скорость способствует быстрому сгоранию прогретого слоя. С уменьшением размеров прогретой зоны пространственные градиенты T и ρ становятся крутыми, фиг. 9а, 9б, что способствует интенсивной теплопередаче из зоны реакции и наступлению стадии депрессии. На стадии депрессии происходит восстановление прогретого слоя за счет теплового потока из зоны сгоревшего вещества и, как следствие, понижение температуры (а соответственно и скорости) за фронтом горения. К концу стадии депрессии образуется толстый слой прогретого реагента, который вновь вспыхивает. На диаграмме движения этим колебаниям соответствуют периодические сгущения узлов сетки (см. фиг. 11). Динамика узлов адаптирующейся сетки характеризуется также пространственными профилями функции ψ , представленными на различные моменты времени (см. фиг. 12). Функция $\psi(x)$ характеризует изменение пространственного шага h_x и показывает, во сколько раз изменилось расстояние между соседними узлами в физическом пространстве, по сравнению с их положением в момент времени $t = 0$. В моменты всплесков, которым соответствуют максимальные значения температуры и скорости, узлы сетки концентрируются в зонах теплового и диффузионного фронтов, что проявляется на графиках $\psi(x)$ в виде резких провалов.

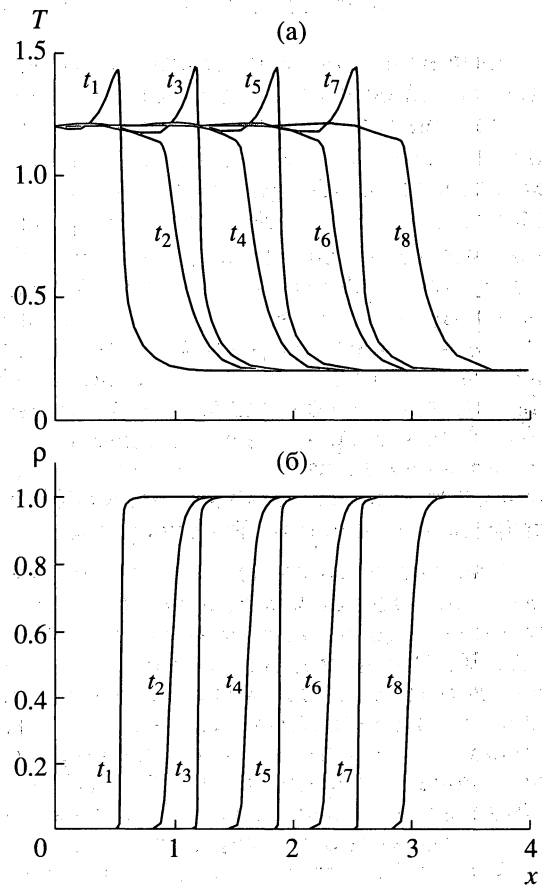
Расчеты показали, что автоколебательные режимы горения реализуются в сравнительно узком диапазоне значений Le и α . При этом период их колебаний можно оценить как $t_a \sim LeA^{-1} \exp(\theta)$. Дальнейшее уменьшение Le или увеличение α приводит к разрушению автоколебаний. Амплитуда пульсаций и их частота при этом возрастают, а сами колебания приобретают все более релаксационный характер, при котором длительность стадии депрессии еще больше увеличивается, а длительность всплески сокращается (фиг. 13).

Уменьшение числа Льюиса до значений $Le \sim 0.1$ приводит к пульсациям со сложной структурой, когда в течение одного периода наблюдаются несколько всплесков скорости, фиг. 13. Сложный характер решения предопределяет сложный механизм перестройки сетки, при котором минимальный пространственный шаг уменьшается примерно на три порядка (значение функции ψ достигает, соответственно, 10^{-3}). О сложности перестройки можно судить по диаграмме движения узлов, приведенной на фиг. 14, соответствующей $Le = 0.1$, $A = 10^{10}$ и $\theta = 18$ и общему числу узлов $N = 30$.

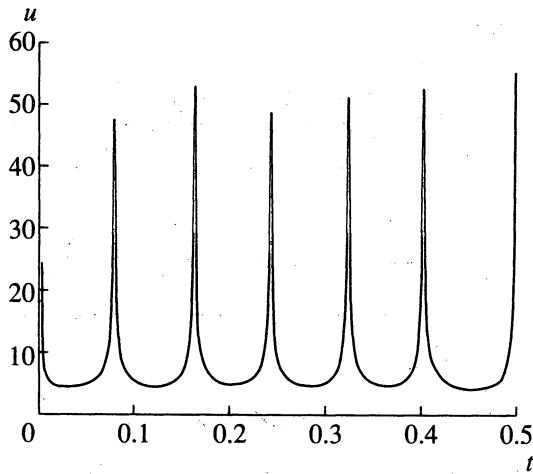
В заключение отметим, что пульсирующие режимы неоднократно наблюдались экспериментально [22], [23].



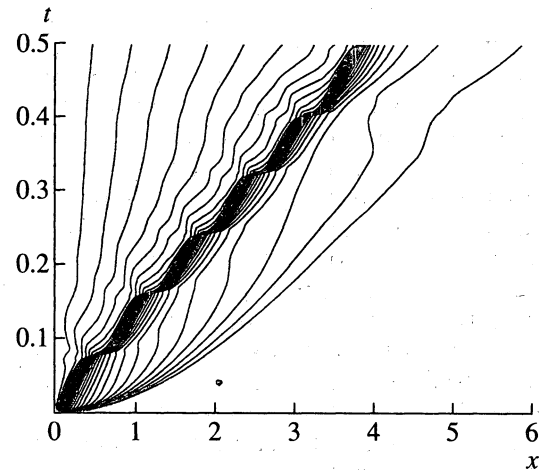
Фиг. 8.



Фиг. 9.



Фиг. 10.



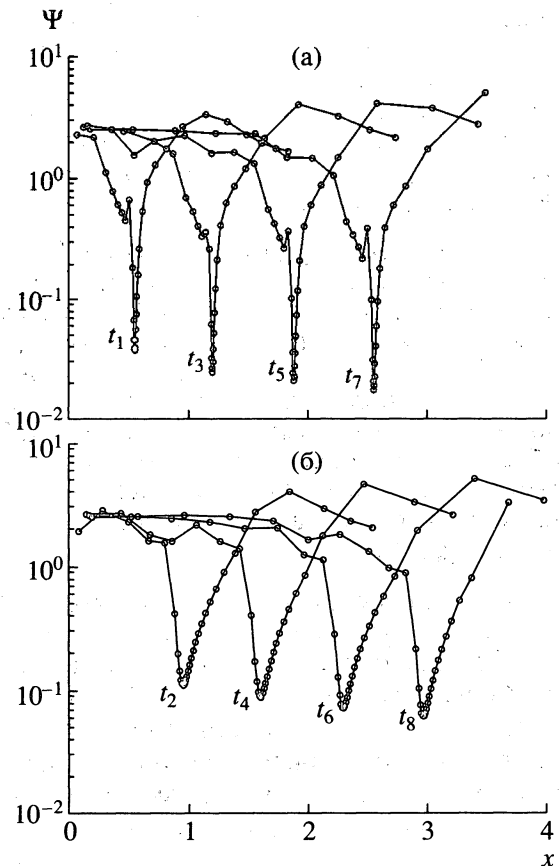
Фиг. 11.

6. ЭФФЕКТИВНОСТЬ МЕТОДА ДИНАМИЧЕСКОЙ АДАПТАЦИИ

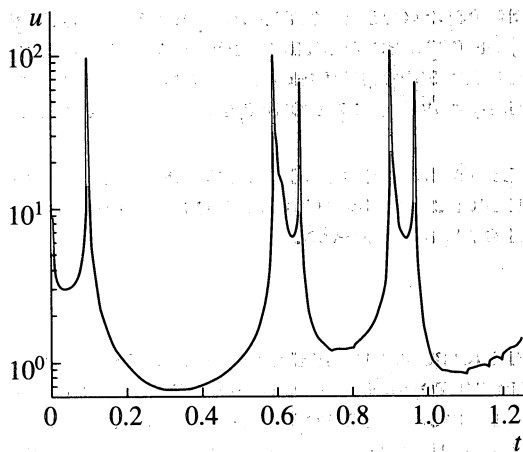
Основным преимуществом адаптирующихся сеток является возможность проведения расчетов на небольшом числе узлов. На примере математического моделирования стационарных и нестационарных режимов одностадийного горения получим количественные оценки эффективности метода динамической адаптации. В количественном отношении эффективность метода характеризовалась двумя показателями: быстродействием t_e и количеством используемых узлов n_e . Показатели t_e и n_e определялись посредством сравнения затрат процессорного времени $t_e = t_f/t_a$ и количества используемых узлов $n_e = N_f/N_a$ в алгоритмах с динамической адаптацией (t_a, N_a) и алгоритмах, использующих сетки с фиксированными узлами (t_f, N_f). В качестве меры эффективности рассматривалась зависимость t_e и n_e от отношения толщины фронта пламени δ к размеру области расчета L , δ/L . Толщина и скорость фронта пламени легко варьировались путем изменения значений Le и $\alpha(\theta)$. Очевидно, что с уменьшением величины δ/L , возрастают затраты времени и количества узлов.

Как показали расчеты, минимальное число узлов, необходимое для решения типовых задач горения с помощью адаптирующихся сеток, составляет $\sim 20-30$. Все последующие расчеты на адаптирующихся сетках производились с одним и тем же числом узлов $N = 40$. Этого количества оказалось достаточно для проведения расчетов в широком диапазоне изменения параметров Le , θ , A . Размер расчетной области L полагался равным 10, а число узлов в фиксированных сетках выбиралось таким, чтобы максимальная погрешность скорости не превышала 1%. Необходимая точность определялась в стационарных режимах горения по сходящимся значениям скорости распространения пламени на последовательно сгущающихся сетках.

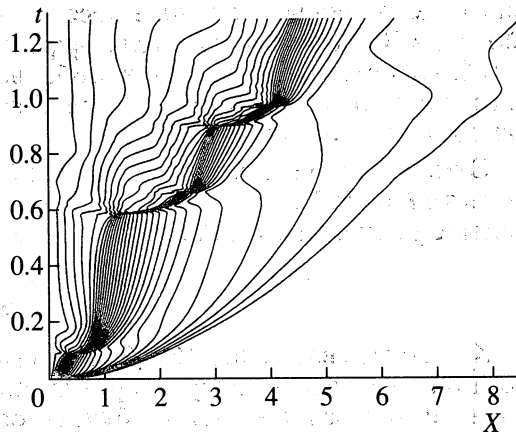
Для определения эффективности адаптирующихся сеток в условиях стационарного горения была проведена серия расчетов при фиксированных значениях $A = 10^8$ и $Le = 1$ и переменной энергии активации θ , изменяющейся в диапазоне 4–17. Результаты расчетов сравнивались с аналогичными резуль-



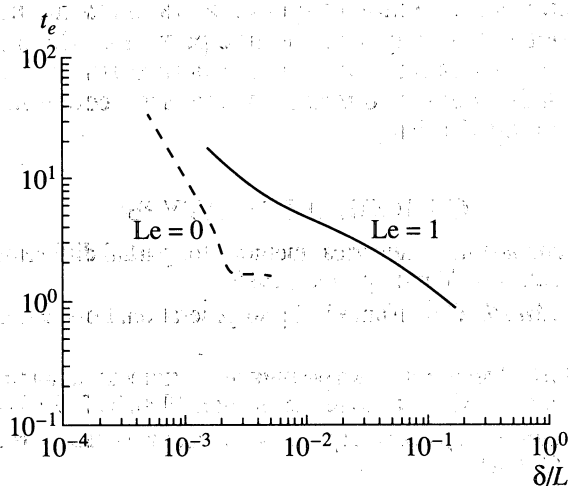
Фиг. 12.



Фиг. 13.



Фиг. 14.



Фиг. 15.

татами, полученными на сетке с фиксированными узлами. На фиг. 15 для режимов с $Le = 1$ приведена зависимость показателя эффективности по быстродействию t_e от соотношения δ/L . При изменении θ от 17 до 4 толщина зоны химической реакции уменьшается на два порядка. Соответственно, отношение размера зоны реакции к размеру области δ_{\min}/L уменьшается с 0.2 до 2×10^{-3} . Отношение затрат процессорного времени $t_e = t_f/t_a$ возрастает от 0.8 до 18. Во всех расчетах число узлов адаптирующей сетки оставалось постоянным ($N_a = 40$), а для сетки с фиксированными узлами оно увеличилось от $N_f = 500$ до $N_f = 6000$. Таким образом, при расчете стационарных режимов горения показатель эффективности $n_e = N_f/N_a$ алгоритмов с динамической адаптацией по количеству используемых узлов находится в диапазоне 10–150. Максимальная эффективность по быстродействию для алгоритмов с динамической адаптацией достигает значения $t_e \approx 20$. Однако если размеры зоны горения сопоставимы с размерами рассматриваемой области, то эффективность адаптирующихся сеток по быстродействию заметно снижается. А при $\delta/L \approx 0.2$ некоторое преимущество $\approx 20\%$ получают алгоритмы на сетках с фиксированными узлами.

Исследование эффективности динамической адаптации в режимах нестационарного горения производилось при $Le = 0$. На фиг. 15 штриховой кривой представлена зависимость $t_e(\delta_{\min}/L)$, характеризующая эффективность динамической адаптации по быстродействию при $Le = 0$. Смене стационарного режима горения ($\theta \leq 10$) на колебательный ($\theta > 10$) на графике $t_e(\delta_{\min}/L)$ соответствует область $\delta/L \approx 2 \times 10^{-3}$. Эффективность динамической адаптации по быстродействию в колебательном режиме ($\delta/L > 2 \times 10^{-3}$, $\theta > 0$) заметно снижается из-за относительно частой и сильной перестройки сетки в моменты всплеск и депрессии. Этим моментам соответствуют измене-

ния размера зоны реакции в десятки и сотни раз. При переходе к стационарному режиму ($\delta/L < 2 \times 10^{-3}$, $\theta \leq 10$) показатель эффективности $t_e(\delta_{\min}/L)$ быстро возрастает, достигая значения ≈ 30 . В колебательных режимах особенно заметной становится эффективность адаптирующихся сеток по числу используемых узлов. Величина показателя $n_e = N_f/N_a$ в рассматриваемых вариантах достигает значений ≈ 500 .

Отметим, что приведенные оценки были получены при фиксированном размере расчетной области $L = 10$. При его увеличении выигрыш адаптирующейся сетки по быстродействию еще больше увеличивается. Рост его пропорционален примерно L^q , $q = 0.4-0.5$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Как показывает опыт [6], [22], в подавляющем большинстве промышленных устройств для сжигания топлива реализуется режим послойного горения, который в реальных установках дополнительно осложняется турбулентностью и процессами смешения горючего и окислителя. Однако в основе ламинарного или послойного горения лежит диффузионно-тепловой механизм распространения волны химических реакций. Типичные режимы стационарного и пульсирующего режима горения и их особенности рассмотрены в данной работе. Полученные результаты показывают, что метод динамической адаптации может успешно применяться для математического моделирования проблем ламинарного горения в широком диапазоне значений Le и θ , охватывающих как стационарные, так и пульсирующие режимы. Метод обладает достаточно высокой эффективностью. Его применение позволяет уменьшить число узлов на 1–2.5 порядка и увеличить быстродействие в 2–50 раз, что может оказаться особенно ценным при моделировании многомерных постановок проблемы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Modeling, mesh generation, and adaptive numerical methods for partial differential equations / Eds. I. Babuska, W.D. Henshaw, J.E. Olinger et al. New York: Springer, 1995.
2. Tomphson J.F., Warsi Z.U.A., Mastin C.W. Numerical grid generation. Foundations and applications. New York: North-Holland, 1985.
3. Мажукин В.И., Такоева Л.Ю. Принципы построения динамически адаптирующихся к решению сеток в одномерных краевых задачах // Матем. моделирование. 1990. Т. 2. № 3. С. 101–118.
4. Лисейкин В.Д. Обзор методов построения структурных адаптивных сеток // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1996. Т. 36. № 1. С. 3–41.
5. Иваненко С.А., Прокопов Г.П. Методы построения адаптивно-гармонических сеток // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1999. Т. 37. № 6. С. 643–662.
6. Льюис Б., Эльбе Г. Горение, пламя и взрывы в газах. М.: Мир, 1968.
7. Зельдович Я.Б., Баренблатт Г.И., Либрович В.Б., Махвиладзе Г.М. Математическая теория горения и взрыва. М.: Наука, 1980.
8. Шкадинский К.Г., Хайкин Б.И., Мержанов А.Г. Распространение пульсирующего фронта экзотермической реакции в конденсированной фазе // Физ. горения и взрыва. 1971. Т. 7. № 1. С. 19–28.
9. Махвиладзе Г.М., Новожилов Б.В. Двумерная устойчивость горения конденсированных систем // Прикл. механ. и техн. физ. 1971. № 5. С. 51–59.
10. Гришин А.М., Берцун В.Н., Агранат В.М. Исследование диффузионно-тепловой неустойчивости ламинарных пламен // Докл. АН СССР. 1977. Т. 235. № 3. С. 550–553.
11. Гришин А.М., Зеленский Е.Е. Анализ диффузионно-тепловой неустойчивости ламинарных пламен // Числ. методы в механ. сплошной среды. Новосибирск, 1977. Т. 8. № 4. С. 5–19.
12. Дарьин Н.А., Мажукин В.И. Математическое моделирование задачи Стефана на адаптивной сетке // Дифференц. ур-ния. 1987. Т. 23. № 7. С. 1154–1160.
13. Дарьин Н.А., Мажукин В.И. Об одном подходе к построению адаптивных разностных сеток // Докл. АН СССР. 1988. Т. 298. № 1. С. 64–68.
14. Дарьин Н.А., Мажукин В.И., Самарский А.А. Конечно-разностный метод решения уравнений газовой динамики с использованием адаптивных сеток, динамически связанных с решением // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1988. Т. 28. № 8. С. 1210–1225.
15. Бреславский П.В., Мажукин В.И. Математическое моделирование процессов импульсного плавления и испарения металла с явным выделением фазовых границ // Инж.-физ. журнал. 1989. Т. 57. № 1. С. 107–114.
16. Mazhukin V.I., Smurov I., Dupuy C., Jeandel D. Simulation of Laser induced melting and evaporation processes in superconducting ceramics // J. Numer. Heat Transfer. Part A. 1994. V. 26. P. 587–600.

17. *Мажукин В.И., Самарский А.А., Шапранов А.А.* Метод динамической адаптации в проблеме Бюргерса // Докл. РАН. 1993. Т. 333. № 2. С. 165–169.
18. *Бреславский П.В., Мажукин В.И.* Метод динамической адаптации в задачах газовой динамики // Матем. моделирование. 1995. Т. 7. № 12. С. 48–78.
19. Otey G.R., Dwyer H.A., Numerical study of the interaction of fast chemistry and diffusion // AIAA Journal. 1979. V. 17. № 6. P. 606–613.
20. *Василевский В.Ф., Мажукин В.И.* Численные расчеты температурных волн со слабыми разрывами на сетках с динамической адаптацией // Дифференц. уравнения. 1989. Т. 25. № 7. С. 1188–1193.
21. *Самарский А.А.* Теория разностных схем. М.: Наука, 1989.
22. *Шетинков Е.С.* Физика горения газов. М.: Наука, 1965.
23. *Мержанов А.Г., Филоненко А.К., Боровинская И.П.* Новые явления при горении конденсированных систем // Докл. АН СССР. 1973. Т. 208. № 4. С. 892–894.