Прикладная математика и механика. Том 41, 1977

УДК 536.46 : 533.6 + 534.222.2

ОДИН КЛАСС РЕШЕНИЙ НЕСТАЦИОНАРНЫХ УРАВНЕНИЙ ТЕОРИИ ГОРЕНИЯ КОНДЕНСИРОВАННЫХ ВЕЩЕСТВ

В. С. Берман

(Москва)

Рассматривается один класс решений уравнений теории горения конденсированных систем, описываемый достаточно простыми обыкновенными дифференциальными уравнениями, которые в ряде случаев могут быть проинтегрированы до конца. Рассмотрены некоторые частные случаи применения найденного класса решений к конкретным задачам. Эти решения представляют самостоятельный интерес и могут служить эталонами для проверки численных и приближенных методов интегрирования нестационарных уравнений теории горения.

1. Основные уравнения. Задача о протекании экзотермической одностадийной химической реакции в конденсированной среде при ряде предположений может быть описана системой безразмерных уравнений

$$\partial\theta / \partial t = \Delta\theta + y\Phi(\theta), \quad \partial y / \partial t = -y\Phi(\theta) \tag{1.1}$$

Здесь t — время r-вектор пространственных переменных, $\Delta = \nabla^2$ — оператор Лапласа, θ — безразмерная температура ($\theta \geqslant 0$), y — концентрация реагента ($0 \leqslant y \leqslant 1$), $\Phi(\theta)$ — температурная зависимость скорости химической реакции.

Обычно $\Phi(\theta) \geqslant 0$ — монотонно растущая функция θ. Например

$$\Phi(\theta) = \begin{cases} \Phi_1(\theta) \geqslant 0, & \theta_0 \leqslant \theta \\ 0, & 0 \leqslant \theta \leqslant \theta_0 \end{cases} \tag{1.2}$$

Для системы (1.1), наиболее исследованной аналитически и численно, является задача распространения стационарной волны горения в пространстве, полностью заполненном реагирующим веществом. При этом неизвестные функции зависят только от одной комбинации независимых переменных: $\eta = x + Vt$ (при распространении вдоль оси x), где V — скорость распространения волны, и удовлетворяют граничным условиям

$$\theta(+\infty, t) = 1, \quad y(+\infty, t) = 0 \quad \text{и} \quad \theta(-\infty, t) = 0$$

$y(-\infty, t) = 1$ (для волны, распространяющейся справа налево).

Здесь значения температуры и концентрации при $x = -\infty$ соответствуют полностью активному веществу, а при $x = +\infty$ — продуктам реакции. Температура $\theta = 1$ соответствует адиабатической температуре горения.

Искомые функции $\theta(x, t) = \Theta(\eta)$, $y(x, t) = Y(\eta)$ — решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений

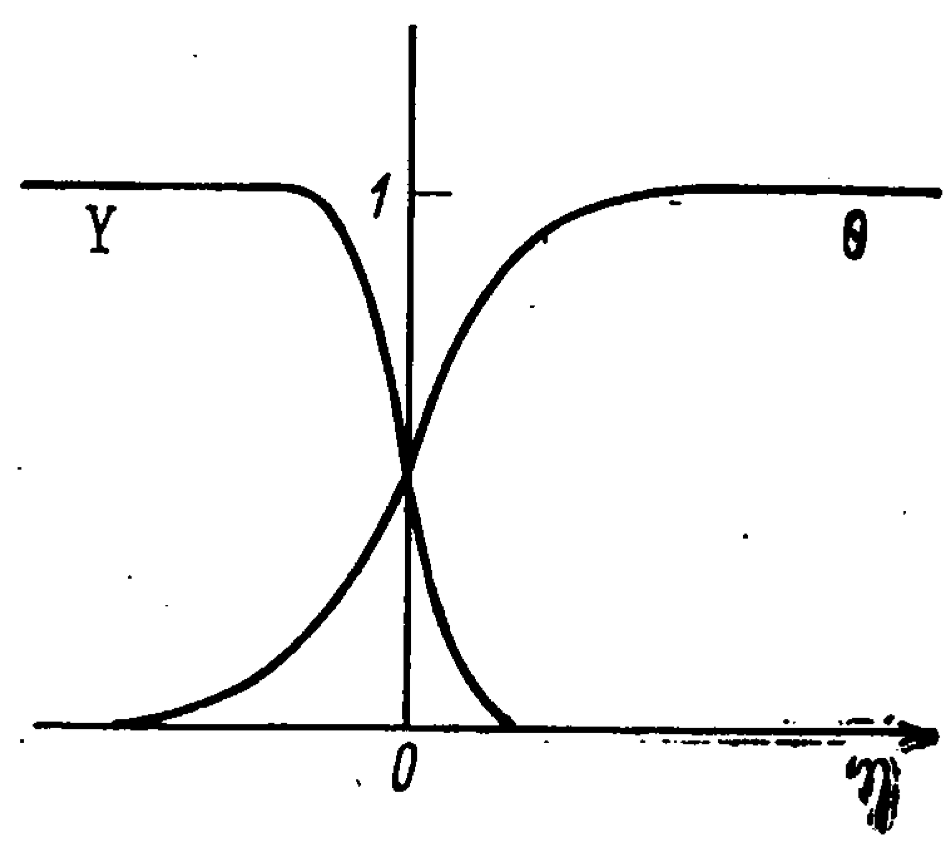
$$\frac{d^2\Theta}{d\eta^2} - V\frac{d\Theta}{d\eta} + Y\Phi(\Theta) = 0 \tag{1.3}$$

$$V\frac{d\Theta}{d\eta} + Y\Phi(\Theta) = 0, \quad V > 0$$

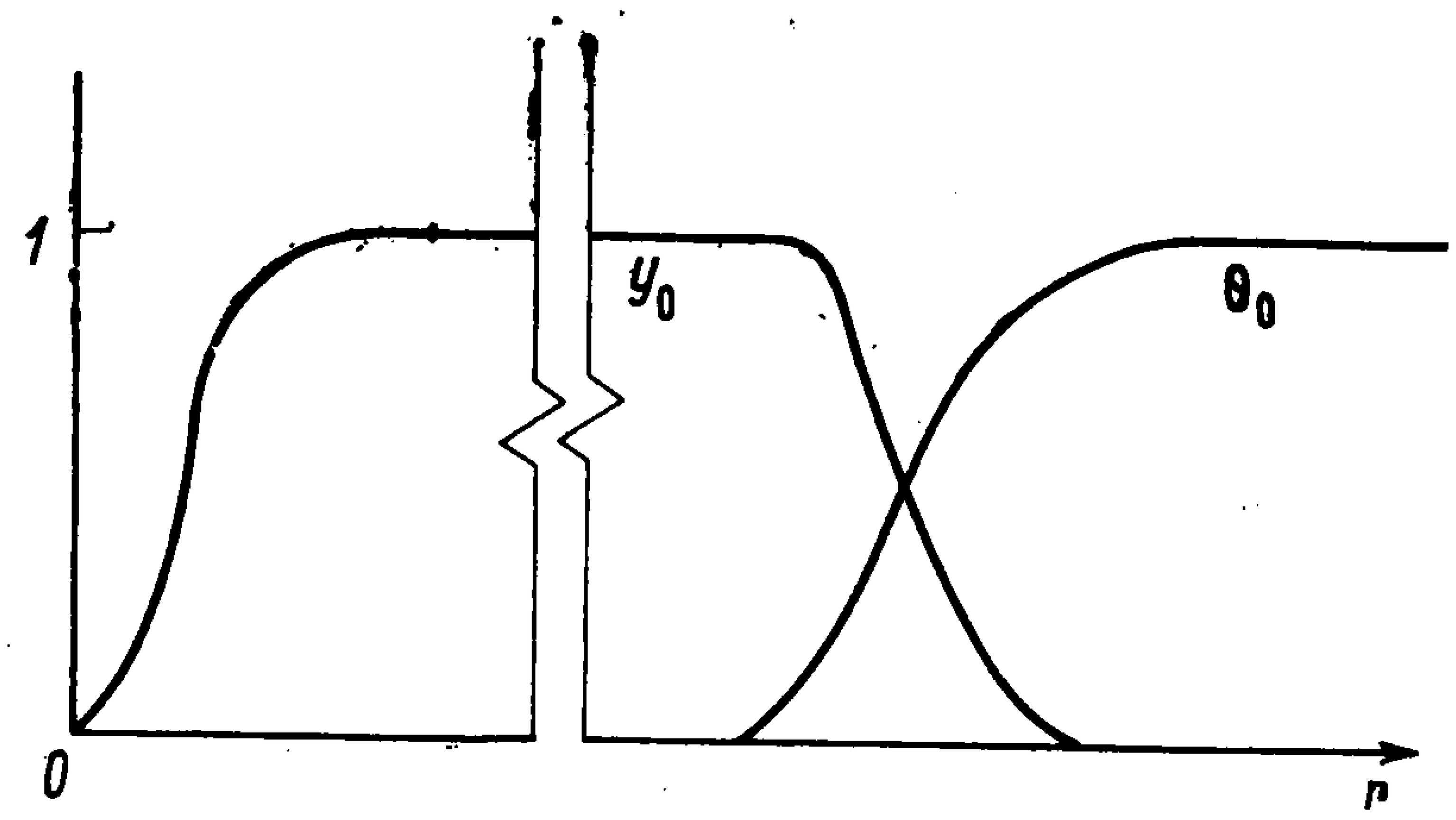
$$\theta(+\infty) = 1, \quad Y(+\infty) = 0, \quad \theta(-\infty) = 0, \quad Y(-\infty) = 1$$

Величина V — собственное значение задачи (1.3).

Эта задача изучалась в ряде работ, например [1-5], где доказаны ряд теорем существования и единственности решения и построены приближен-



Фиг. 1



Фиг. 2

ные решения. Так, для функции $\Phi(\theta)$ вида (1.2) при $\Phi_1 < \mathrm{const}$ решение задачи (1.3) существует и единственно. Типичный вид решения представлен на фиг. 1.

В связи с тем, что решение задачи (1.3) инвариантно по отношению к сдвигу вдоль оси η (при $\eta \to \eta + C$, $C = \mathrm{const}$), выберем трансляционную постоянную C так, чтобы при $\eta = 0$ величина $\Theta(0)$ соответствовала некоторой заданной величине θ^* $(0 < \theta^* < 1)$, например, $\theta^* = 1/2$. Далее полагаем, что функции $\Theta(\eta)$ и $Y(\eta)$ удовлетворяют такой нормировке.

Кроме приведенного выше решения типа стационарной бегущей волны для системы (1.1), удается построить более широкий класс решений. Для этого будем искать решение системы (1.1) в виде

$$\theta(\mathbf{r}, t) = z(\xi), \quad y(\mathbf{r}, t) = f(\mathbf{r})\varphi(\xi), \quad \xi = at + g(\mathbf{r}) \tag{1.4}$$

где функции $z(\xi)$, $f(\mathbf{r})$, $\varphi(\xi)$ и $y(\mathbf{r})$ будут определены далее, a — произвольная постоянная $(a \neq 0)$.

Подставляя (1.4) в (1.1), имеем

$$\frac{d^2z}{d\xi^2}|\nabla g|^2 + \frac{dz}{d\xi}(\Delta g - a) + f(\mathbf{r})\varphi(\xi)\Phi(z(\xi)) = 0 \tag{1.5}$$

$$a\frac{d\varphi}{d\xi} + \varphi(\xi)\Phi(z(\xi)) = 0$$

Для того, чтобы решение системы (1.1) имело вид (1.4), необходимо положить

$$\Delta g - a = b\,|\nabla g|^2, \quad f(\mathbf{r}) = d\,|\nabla g|^2 \tag{1.6}$$

где b и d — произвольные постоянные. В задачу входит только произведение $f(\mathbf{r})\varphi(\xi)$, поэтому без ограничения общности можно положить $d = 1$.

Тогда с учетом (1.6) имеем из (1.5)

$$\frac{d^2z}{d\xi^2}+b\frac{dz}{d\xi}+\varphi\Phi(z)=0,\quad a\frac{d\varphi}{d\xi}+\varphi\Phi(z)=0 \tag{1.7}$$

Таким образом, любое решение уравнений (1.6), (1.7) дает решение исходной системы (1.1).

При $b\neq 0$ первое уравнение (1.6) нелинейное, поэтому для его исследования удобно ввести новую неизвестную функцию. Имеем

$$\Delta u=-abu\quad (g(\mathbf{r})=-b^{-1}\ln|u(\mathbf{r})|) \tag{1.8}$$

Уравнения (1.7) имеют первый интеграл

$$dz/d\xi+bz-a\varphi=c$$

с помощью которого из (1.7) получим

$$\frac{dp}{dz}=p^{-1}[(c-bz-p)\Phi(z)-abp],\quad \frac{dz}{d\xi}=p(z) \tag{1.9}$$

Отметим, что существенное отличие системы (1.7) от системы (1.3) состоит в том, что переменная ξ может меняться на полуограниченном интервале и постоянные a, b и c не являются в общем случае связанными между собой величинами.

2. Частные случаи. Рассмотрим некоторые задачи, решения которых можно построить в виде (1.4).

Предположим, что постоянные a, b и c выбраны так, что

$$a=-b=-c=V>0 \tag{2.1}$$

Тогда решение системы (1.7) имеет вид

$$z(\xi)=\Theta(\xi),\quad \varphi(\xi)=Y(\xi) \tag{2.2}$$

Для функций $u(\mathbf{r})$, обладающих центральной симметрией, имеем из (1.8)

$$r^{-n}\frac{d}{dr}\left(r^n\frac{du}{dr}\right)=V^2u \tag{2.3}$$

Значения n, равные 0, 1, 2, соответствуют плоской, цилиндрической и сферической симметрии. Тогда из (1.4), (1.6), (1.8) и (2.3) получим

$$\xi=Vt+V^{-1}\ln\operatorname{ch}(Vr)+A,\quad f(r)=\operatorname{th}^2(Vr)\quad (n=0) \tag{2.4}$$

$$\xi=Vt+V^{-1}\ln I_0(Vr)+A,\quad f(r)=I_1^2(Vr)I_0^{-2}(Vr)\quad (n=1) \tag{2.5}$$

$$\xi=Vt+V^{-1}\ln[r^{-1}\operatorname{sh}(Vr)]+A \tag{2.6}$$

$$f(r)=[\operatorname{cth}(Vr)-V^{-1}r^{-1}]^2\quad (n=2)$$

Здесь $I_i(r)$ $(i=0,1)$ — функции Бесселя мнимого аргумента, A — произвольная постоянная.

Будем считать, что $0\leqslant r\leqslant\infty$. Рассмотрим сначала случай $n=0$ и положим $t=0$, тогда решение (1.7) описывает эволюцию начального распределения

$$\theta_0=\theta(r,0)=\Theta(V^{-1}\ln\operatorname{ch}(Vr)+A) \tag{2.7}$$

$$y_0=y(r,0)=\operatorname{th}^2(Vr)Y(V^{-1}\ln\operatorname{ch}(Vr)+A)$$

вид которого представлен на фиг. 2.

Для того, чтобы описать изменение профилей концентрации и температуры во времени, будем следить за движением изотермы $\theta(\xi, t) = \theta_i$. Тогда, как видно из (2.4)

$$r_i(t) = V^{-1} \ln (E + \sqrt{E^2 - 1}), \quad E(t) = B_i e^{-V^2 t}, \tag{2.8}$$

$$\frac{dr_i(t)}{dt} = -V \frac{E}{\sqrt{E^2 - 1}}, \quad E \geqslant 1$$

где B_i — постоянная, различная для разных изотерм.

При $t \to -\infty$, как видно из (2.8), все изотермы движутся с постоянной скоростью V. С увеличением t скорость движения изотерм растет и становится различной для разных изотерм. При $t_i = V^{-2} \ln B_i$ скорость движения обращается в бесконечность, при $t > t_i$ температура $\theta(r, t) > \theta_i$, $0 \leqslant r \leqslant \infty$.

Задача, решение которой описывается соотношениями (2.2), (2.4), (2.7) и (2.8), физически соответствует распространению волны горения по полупространству, ограниченному слева ($r = 0$) адиабатической стенкой ($\partial\theta(0, t) / \partial r = 0$). В окрестности стенки до расстояний порядка V^{-1} концентрация реагента отличается от концентрации в непрореагировавшей среде и имеет вид $\mathrm{th}^2(Vr)$. При $(-A) \gg 1$, как видно из (2.7), имеем

$$\theta(r, 0) \approx 0, \quad y(r, 0) \approx \mathrm{th}^2(Vr) \quad \text{при} \quad Vr \sim 1$$

$$\theta(r, 0) = \theta(A + r - \ln 2) \quad \text{и} \quad y(r, 0) = Y(A + r - \ln 2)$$

$$\text{при} \quad Vr \gg 1$$

Таким образом, начальное распределение представляет собой возмущенную стационарную волну. При $A = \mathrm{const}$ и $-\infty \leqslant t \leqslant +\infty$ решение (2.2) и (2.4) соответствует «взаимодействию» с адиабатической стенкой стационарной (при $t \to -\infty$) волны горения, распространяющейся справа налево в полупространстве с распределением концентрации $\mathrm{th}^2(Vr)$ (или, что то же, движущимся навстречу одна другой волнам горения).

Аналогично строятся решения для сходящихся цилиндрических (2.5) и сферических (2.6) волн горения в конденсированном веществе с начальным распределением концентрации $f(r)$ и температурой $\theta = 0$. Вопрос об устойчивости полученного нестационарного решения остается открытым. Однако, в связи с тем, что при $t \to +\infty$ данное решение описывает физически правильное распределение концентрации и температуры $\theta(r, +\infty) = 1$, $y(r, +\infty) = 0$, следует ожидать, что найденное решение устойчиво.

Можно также построить решения типа (1.4), воспользовавшись другими решениями уравнения (1.8).

Так, иной тип решений ($ab = 0$) можно получить, полагая, $b = 0$, $a = 1$, $c = 0$ и отыскивая одномерное симметричное решение при $n = 0$, удовлетворяющее условиям

$$\theta(\pm\infty, t) = 1, \quad y(\pm\infty, t) = 0$$

Из (1.6), (1.7) в этом случае получим (A — произвольная постоянная)

$$-\frac{dz}{d\xi} = \int_1^z \Phi(z')\, dz', \quad \varphi = -\int_1^z \Phi(z')\, dz', \quad g(r) = {}^1/_2 r^2 + A \tag{2.9}$$

Полагая для простоты, что $\Phi(z) = z$, имеем из (2.9)

$$\theta(r,t) = \operatorname{th}\frac{\xi}{2}, \quad \xi = t + \frac{r^2}{2} + A \quad (A \geqslant 0), \quad y(r,t) = \frac{r^2}{2}\operatorname{ch}^{-2}\frac{\xi}{2}$$

Теперь положим $ab = \gamma^2 \geqslant 0$ (например $b = a = \gamma > 0$) и в одномерном случае ($n = 0$) и возьмем ξ в виде

$$\xi = \gamma t - \gamma^{-1}\ln|\cos(\gamma_r)| + A, \quad f(r) = \operatorname{tg}^2(\gamma r) \tag{2.10}$$

где A — произвольная постоянная, связанная с выбором начала отсчета времени. Тогда удается описать протекание химической реакции (1.1) в бесконечном плоском сосуде, расстояние между стенками которого $2l$, а температура стенок θ_s поддерживается постоянной. Для этого необходимо положить

$$\gamma(k) = \pi(1/2 + k)\,l^{-1}, \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$
$$z(+\infty) = \theta_s, \quad c = \gamma\theta_s$$

Для простоты рассмотрим функцию $\Phi(\theta)$ вида (1.2) при $\Phi_1 = 1$. Тогда из (1.7) имеем

$$z(\xi) = A_1 + A_2\exp(-\gamma\xi)$$
$$\varphi(\xi) = A_1 - \theta_s \quad \text{при } z < \theta_0$$
$$z(\xi) = \theta_s + A_s\exp(-\gamma\xi) - A_4(1-\gamma^{-2})\exp(-\xi\gamma^{-1}),$$
$$\varphi(\xi) = A_4\exp(-\xi\gamma^{-1}) \quad \text{при} \quad z > \theta_0$$

Здесь A_i ($i = 1, 2, 3, 4$) — произвольные постоянные. Из условия непрерывности поля температуры $\theta(r, t)$ и теплового потока $\partial\theta(r,t)/\partial r$ имеем на изотерме $z(\xi) = 0$ три соотношения

$$\theta_0 = A_1 + A_2\exp(-\gamma\xi_0) = \theta_s + A_3\exp(-\gamma\xi_0) -$$
$$- A_4(1-\gamma^{-2})\exp(-\xi_0\gamma^{-1})$$
$$A_2\exp(-\gamma\xi_0) = A_3\exp(-\gamma\xi_0) - A_4\gamma^{-2}(1-\gamma^{-2})\exp(-\xi_0\gamma^{-1})$$

где ξ_0 — координата расположения изотермы $z(\xi) = \theta_0$.

В связи с произволом выбора A в (2.10) можно без ограничения общности положить $\xi_0 = 0$. Тогда

$$z(\xi) = A_1 + (\theta_0 - A_1)\exp(-\gamma\xi) \tag{2.11}$$
$$\varphi(\xi) = A_1 - {}_s \quad \text{при } z < \theta_0$$
$$z(\xi) = \theta_s + [(\theta_0 - \theta_s) + (\theta_s - A_1)(1-\gamma^{-2})^{-1}]\exp(-\gamma\xi) -$$
$$- (\theta_s - A_1)(1-\gamma^{-2})^{-1}\exp(-\xi\gamma^{-1}),$$
$$\varphi(\xi) = (A_1 - \theta_s)\exp(-\xi\gamma^{-1}) \quad \text{при } z(\xi) > \theta_0$$

При этом величина A_1 — свободный параметр. Из физического требования $0 \leqslant y(r,t) \leqslant 1$ следует условие

$$l \geqslant \sqrt{2}\pi(1/2 + k), \quad \gamma^{-2} \geqslant 2 \tag{2.12}$$

Таким образом, при данном k можно построить решение в виде (1.4), где ξ и $f(r)$ определяются в (2.10), только для сосудов, для которых справедливо соотношение (2.12).

Отметим, что решение, подобное (2.10) и (2.11), может быть построено и для сосудов других форм, при этом функции $u(r)$ и величины γ будут соответственно собственными функциями и числами задачи (S — поверхность сосуда)

$$\Delta u = -\gamma^2 u, \quad u|_S = 0$$

При $t \to \infty$ распределение температуры в сосуде становится однородным: $\theta(r, +\infty) = \theta_S$; $y(r, +\infty) = 0$, что согласуется с физическим смыслом задачи.

Аналогично можно построить решение задачи при условии теплоизолированности сосуда: $\nabla\theta \cdot \nabla S = 0$. При этом функция $u(r)$ и величина γ должны соответствовать собственным функциям и значениям задачи

$$\Delta u = -\gamma^2 u, \quad \nabla u \cdot \nabla S = 0$$

В заключение отметим, что решения вида (1.4) могут быть построены и для других задач теории горения конденсированных веществ, отвечающих более сложной кинетике, например

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} = \Delta\theta + \sum_{j=1}^{N} A_j \prod_{i=1}^{N} y_i^{\beta_{ij}} \Phi_j(\theta) \quad \left(\sum_{i=1}^{N} \beta_{ij} = 1\right)$$

$$\frac{\partial y_i}{\partial t} = \sum_{j=1}^{N} B_j \prod_{i=1}^{N} y_i^{\beta_{ij}} \Phi_j(\theta), \quad i = 1, 2, \ldots, N$$

где A_i, B_i и β_{ij} — постоянные, N — количество реагентов, участвующих в реакции.

Поступила 10 VII 1976

ЛИТЕРАТУРА

1. *Новожилов Б. В.* Скорость распространения фронта экзотермической реакции в конденсированной фазе. Докл. АН СССР, 1961, т. 141, № 1.
2. *Хайкин Б. И., Мержанов А. Г.* К теории теплового распространения фронта химической реакции. Физика горения взрыва, 1966, № 3.
3. *Ваганов Д. А., Худяев С. И.* Об одной стационарной задаче теории горения. Физика горения взрыва, 1969, № 2.
4. *Алдушин А. П.* К вопросу о стационарном распространении фронта экзотермической реакции в конденсированной среде. ПМТФ, 1974, № 3.
5. *Берман В. С., Рязанцев Ю. С.* Асимптотический анализ распространения фронта экзотермической одноступенчатой реакции *n*-го порядка в конденсированной среде. Физика горения взрыва, 1975, № 2.