фіз.- мат. наук. Львів, 1993. 36 с. 10. Boujot J. Mathematical formulation of fluid-structure interactin problem // M^2AN. 1987. Vol. 21. №2. P. 239-260. 11. Mankenholtz O. Problems with fluid-structure interaction // Comput. Meth. Appl. Sci. Ed. Ch. Hirch. Elsevier Sci. Publ., 1992. P. 25-35.

Стаття надійшла до редколегії 18.02.94

УДК 517.958

О.В.Блажиєвська

АВТОМОДЕЛЬНИЙ РОЗВ"ЯЗОК ЗАДАЧІ ГОРІННЯ СУМІШІ ГАЗІВ

Математичне моделювання процесу горіння реакційноздатних газових сумішей є актуальним для багатьох галузей науки і техніки. Скажімо, моделювання процесу нанесення тонких плівок кремнію, арсеніду галію та інших речовин шляхом хімічного осадження їх з газової фази вимагає розгляду послідовності процесів горіння, термофорезу, адсорбції продуктів реакції на поверхні плівки тощо. Моделюючи кожну стадію процесу, потрібно правильно описати асимптотику еволюції попередньої стадії. Відомо [2], що ефективним методом дослідження аналогічних задач є побудова та аналіз асимптотично стійких автомодельних розв"язків.

Нехай нерухома реакційноздатна суміш газів, яка має температуру T_0 і густину ρ_0, заповнює замкнену трубу. Після підведення тепла до границі $x = 0$ в її околі створюється зона підвищеної температури. Це ініціює хімічну реакцію, внаслідок чого по суміші поширюється хвиля горіння. Якщо полум"я є ламінарним і ефектами примежового шару можна знехтувати, то адекватним є одновимірний опис зміни параметрів уздовж труби.

Дією масових сил нехтуємо. Припустимо, що фронт полум"я рухається набагато повільніше, ніж звукова хвиля. Тоді тиск у трубі практично не залежить від координат, але через те, що труба закрита, тиск монотонно зростає з часом. Додатково припустимо, що швидкість хімічної реакції визначається законом Арреніуса та залежить від температури і концентрації одного лімітуючого компонента. За вказаних припущень замкнена система рівнянь аеротермохімії [1] набуває вигляду:

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\varrho v) = 0; \qquad /1/$$

$$\frac{\partial p}{\partial x} = 0; \qquad /2/$$

$$\varrho\left(\frac{\partial c}{\partial t} + v\frac{\partial c}{\partial x}\right) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\varrho D\frac{\partial c}{\partial x}\right) - \varrho f; \qquad /3/$$

$$\varrho c_p\left(\frac{\partial T}{\partial t} + v\frac{\partial T}{\partial x}\right) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial x}\right) + \frac{\partial p}{\partial t} + q\varrho f; \qquad /4/$$

$$p = \varrho RT\frac{1}{M}. \qquad /5/$$

Тут ϱ, p, v, T – відповідно густина, тиск, швидкість і температура суміші; t – час; x – координата; c – концентрація лімітуючого компонента; M, c_p – молярна маса та ізобарична теплоємність суміші: D, λ – ефективні коефіцієнти дифузії та теплопровідності; q – тепловий ефект реакції;

$$f = Kc\exp(-E/RT),$$

K – передекспоненціальний множник у законі Арреніуса; E – енергія активації; R – молярна газова стала.

Розглянемо для прикладу процес, в основі якого лежить реакція

$$SiCl_4 + 2H_2O \Rightarrow 4HCl + SiO_2. \qquad /6/$$

Нехай суміш є стехіометричною. Тоді хімічна реакція може повністю перевести реагенти у продукти реакції і, отже, компонентний склад суміші повністю визначається концентрацією лімітуючого компонента. Тоді

$$M = \frac{M_1}{5c_0 - 2c},$$

де c_0, M_1 – початкова масова концентрація лімітуючого реагенту $SiCl_4$ та його молярна маса;

$$c_p = c_{p_0}\left[1 + (c - c_0)\delta\right]; \quad c_{p_0} = c_0 c_{p_1} + (1 - c_0)c_{p_2};$$

$$\delta = \frac{1}{c_{p_0}}\left(c_{p_1} + \frac{2M_2}{M_1}c_{p_2} - \frac{4M_3}{M_1}c_{p_3} - \frac{M_4}{M_1}c_{p_4}\right),$$

де M_i, c_{p_i} /$i = 2,3,4$/ – молярні маси та ізобаричні теплоємності відповідно H_2O, HCl, SiO_2; c_{p_0} – початкова теплоємність суміші.

За незалежні змінні оберемо змінні Лагранжа s, t_1, які пов'язані зі змінними Ейлера x, t такими співвідношеннями:

$$s = \int_0^x \varrho(y,t)\,dy; \quad t_1 = t. \qquad /7/$$

припустимо, що теплофізичні коефіцієнти суміші задовольняють умови

$$\lambda = \lambda_0 \left(\frac{\varrho_0}{\varrho}\right)^{\sigma}, \quad \varrho D = \varrho_0 D_0 \left(\frac{\varrho_0}{\varrho}\right)^{\sigma}, \qquad /8/$$

де $1/2 < \sigma < 1$.

Тоді система рівнянь /I/–/5/ набуває вигляду

$$\frac{\partial v}{\partial s} = \frac{\partial}{\partial t_\Lambda}\left(\frac{1}{\varrho}\right); \qquad /9/$$

$$\frac{\partial p}{\partial s} = 0; \qquad /10/$$

$$\frac{\partial c}{\partial t_\Lambda} = D_0 \varrho_0^2 \frac{\partial}{\partial s}\left[\left(\frac{\varrho_0}{\varrho}\right)^{\sigma-1}\frac{\partial c}{\partial s}\right] - f; \qquad /11/$$

$$c_{p_0}\left[1+(c-c_0)\delta\right]\frac{\partial T}{\partial t_\Lambda} = \lambda_0 \varrho_0 \frac{\partial}{\partial s}\left[\left(\frac{\varrho_0}{\varrho}\right)^{\sigma-1}\frac{\partial T}{\partial s}\right] + qf + \frac{1}{\varrho}\frac{\partial p}{\partial t_\Lambda}; \qquad /12/$$

$$p = \varrho R T \frac{1}{M}. \qquad /13/$$

Перейдемо до безрозмірних змінних, прийнявши

$$\beta = \frac{RT_0}{E}, \quad \gamma = \beta \frac{c_{p_0} T_0}{q},$$

$$\tau = \frac{t_\Lambda}{t_*}, \quad \alpha = \frac{s}{\varrho_0 l_*}, \quad \theta = \frac{T - T_0}{\beta T_0}, \quad u = v\sqrt{\frac{c_{p_0}\varrho_0 t_*}{\lambda_0}}, \quad \bar{\varrho} = \frac{\varrho}{\varrho_0}, \quad \bar{p} = \frac{p}{p_0},$$

де T_0 – початкова температура суміші; t_*, l_* – масштаби часу і довжини. Оберемо масштабні множники таким чином:

$$t_* = \gamma \frac{R^2 T_0^2}{\kappa p \delta} \exp\left(\frac{1}{\beta}\right); \quad l_*^2 = \frac{\lambda_0 t_*}{c_{p_0}\varrho_0}.$$

Тоді для визначення безрозмірних величин $c, \theta, u, \bar{\varrho}, \bar{p}$, отримаємо систему рівнянь:

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial \alpha} = 0; \qquad /14/$$

$$\frac{\partial u}{\partial \alpha} = \frac{1}{\sqrt{\gamma}}\frac{\partial}{\partial \tau}\left(\frac{1}{\bar{\varrho}}\right); \qquad /15/$$

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} = Le \frac{\partial}{\partial \alpha}\left(\bar{\varrho}^{\,1-\sigma}\frac{\partial c}{\partial \alpha}\right) - \gamma\varphi; \qquad /16/$$

$$\left[1+\delta(c-c_0)\right]\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial \alpha}\left(\bar{\varrho}^{\,1-\sigma}\frac{\partial \theta}{\partial \alpha}\right) + \varphi + \frac{\mu}{\beta}\frac{1}{\bar{\varrho}}\frac{\partial \bar{p}}{\partial \tau}; \qquad /17/$$

$$\bar{p} = \bar{\varrho}(1+\beta\theta)\frac{M_0}{M}, \qquad /18/$$

де

$$\varphi = c\exp\left(\frac{\theta}{1+\beta\theta}\right); \quad M_0 = \frac{M_1}{3C_0}; \quad \mu = \frac{R}{c_{p_0} M_0};$$

$Le = \dfrac{D_0 \varrho_0 c_{p_0}}{\lambda_0}$ – число Льюїса.

Шукані функції задовольняють початкові умови

$$c = c_0\,, \quad \theta = 0 \quad \text{при} \quad \tau = 0\,. \qquad /19/$$

Граничні умови задачі мають вигляд

$$\left.\frac{\partial c}{\partial \alpha}\right|_{\alpha=0} = 0\,; \quad (\bar{\varrho})^{1-\sigma}\frac{\partial \theta}{\partial \alpha} = \bar{Q}\,, \qquad /20/$$

$$c|_{\alpha=\infty} = c_0\,; \quad \theta|_{\alpha=\infty} = 0, \quad u|_{\alpha=0} = 0.$$

Тут $\bar{Q} = l_* Q(\lambda_0 \beta T_0)^{-1}$; Q – густина теплового потоку через границю. Нехай $Q(\tau) = Q_0 \exp(m\tau)$, $m = const$; $Q_0 = const$.

Побудуємо автомодельний розв"язок задачі /14/–/20/. Врахуємо, що тепловий потік, який підводиться до границі, поступово проникає у глиб середовища. Товщина прогрітого шару неперервно збільшується. На границі цього шару відбувається хімічна реакція. За межами згаданого шару реакція не відбувається, тому у рівняннях /16/–/17/ $\varphi \equiv 0$. У цій області будуємо автомодельний розв"язок типу біжучої хвилі. Уводимо автомодельну змінну $\xi = \alpha - \omega\tau$. Для визначення функцій $c(\xi), \theta(\xi)$ отримуємо рівняння

$$-\omega c'(\xi) = Le\frac{d}{d\xi}\left[(\bar{\varrho})^{1-\sigma}c'(\xi)\right]; \; -\omega\theta'(\xi) = \frac{d}{d\xi}\left[(\bar{\varrho})^{1-\sigma}\theta'(\xi)\right]. \qquad /21/$$

Враховуємо, що на фоні, тобто при $c = c_0$, $\theta = 0$ маємо, що $c'(\xi) = 0$, $\theta'(\xi) = 0$. Тому з /21/ знаходимо

$$(\bar{\varrho})^{1-\sigma}c'(\xi) = \frac{\omega}{Le}(c_0 - c);$$

$$(\bar{\varrho})^{1-\sigma}\theta'(\xi) = -\omega\theta; \quad \bar{\varrho} = (1+\beta\theta)^{-1}\frac{3c_0}{5c_0 - 2c}. \qquad /22/$$

Тут ω – масова безрозмірна швидкість фронту полум"я.

У прогрітому шарі вводимо автомодельну змінну $\eta = \alpha l^{-m\tau}$. Розв"язок шукаємо у вигляді

$$c = c(\eta)\,, \; \theta = \theta(\eta)\,, \; \varrho = l^{n\tau}R(\eta)\,, \; p = e^{n\tau}, \; u = e^{l\tau}U(\eta)\,.$$

Для визначення функцій $c(\eta)$, $\theta(\eta)$, $R(\eta)$ отримуємо рівняння

$$c''(\eta) = -(1-\sigma)\frac{R'(\eta)}{R(\eta)}c'(\eta) + \frac{1}{Le}\left\{\gamma\varphi - m\eta c'(\eta)\right\}\left(\frac{1}{R(\eta)}\right)^{1-\sigma}; \qquad /23/$$

$$\theta''(\eta) = -(1-\sigma)\frac{R'(\eta)}{R(\eta)}\theta'(\eta) - \left\{\varphi + m\eta\left[1+(c-c_0)\delta\right]\theta'(\eta)\right\}\left(\frac{1}{R(\eta)}\right)^{1-\sigma} - \frac{Mn}{\beta}\left(\frac{1}{R}\right)^{2-\sigma}, \qquad /24/$$

$$\frac{1}{R(\eta)} = (1+\beta\theta)\frac{M_0}{M}\,. \qquad /25/$$

Автомодельний розв"язок існує, якщо $n = \frac{2m}{1-\sigma}$, $l = -m\frac{1+\sigma}{1-\sigma}$.
Рівняння /23/–/24/ виконуються в області $0 < \eta < \eta_0$. Параметр η_0 визначає товщину шару, прогрітого в початковий момент часу. Отже, шуканий автомодельний розв"язок задовольняє дещо модифіковані початкові умови. Значення параметра η_0 визначає положення фронту полум"я, а саме: в момент часу τ фронт проходить через точку з масовою координатою $\alpha = \eta_0 e^{m\tau}$. Граничні умови задачі задовольняються точно. Оскільки в кожний скінченний момент часу збурення поширюється в скінченному шарі, а на границі з фоном шукані функції та їхні похідні є неперервними, то умови $\theta|_{\alpha=\infty} = 0$, $c|_{\alpha=\infty} = C_0$ виконуються автоматично. Враховуючи рівняння /22/, а також те, що у прогрітому шарі фронт полум"я рухається з безрозмірною масовою швидкістю $m\eta_0 e^{m\tau}$, одержуємо ще такі дві граничні умови для рівнянь /23/–/24/:

$$c'(\eta_0) = -\frac{m\eta_0}{Le}\left[c(\eta_0) - C_0\right](R(\eta_0))^{\sigma-1},$$

$$\theta'(\eta_0) = -m\eta_0\,\theta(\eta_0)(R(\eta_0))^{\sigma-1}. \qquad /26/$$

Перші дві граничні умови /20/ набувають вигляду

$$c'(0) = 0\,, \quad \theta'(0) = Q_0(R(\eta_0))^{\sigma-1}. \qquad /27/$$

Таким чином, для визначення функцій c, θ одержана крайова задача /23/–/27/ для двох звичайних диференціальних рівнянь другого порядку. Ця задача зводиться відомими методами до задачі Коші, для розв"язування якої існує стандартне програмне забезпечення. Для визначення функції U отримуємо задачу:

$$U'(\eta) = \frac{1}{\sqrt{\gamma}}\left[m\eta\frac{R'(\eta)}{R^2(\eta)} - \frac{n}{R(\eta)}\right], \qquad /28/$$
$$U(0) = 0.$$

Зауважимо, що безрозмірна лінійна швидкість поширення фронту полум"я визначається формулою

$$D = \exp(l\tau)\left[U(\eta) + m\eta_0 R^{-1}(\eta_0)\right],$$

де $l = -m(1+\sigma)(1-\sigma)^{-1} < 0$.
Обчислення виконані за умови, що енергія 4 мДж вкладалась на інтервалі часу 10 с. Одержані результати задовільно узгоджуються з відомими даними теорії горіння. Порівняно з традиційним запропонований підхід дає змогу набагато простіше описати основні властивості системи.

1. А л е к с е е в Б.В., Г р и ш и н А.М. Физическая газодинамика реагирующих сред. М.: Высш. шк., 1985. 2. С а м а р с к и й А.А., Г а л а к т и о н о в В.А., К у р д ю м о в С.П. М и х а й л о в А.П. Режимы с обострением в задачах для квазилинейных параболических уравнений. М.: Наука, 1987.

Стаття надійшла до редколегії 16.06.94

УДК 517.648:517.68

П.С.Венгерський, П.С.Сеньо

ОДИН ІНТЕРВАЛЬНИЙ АЛГОРИТМ ЗНАХОДЖЕННЯ ПОЧАТКОВИХ НАБЛИЖЕНЬ МЕТОДУ НЬЮТОНА

Під час застосування ітераційних методів для розв"язування систем нелінійних рівнянь одним з найскладніших завдань є вибір початкового наближення. Загалом способи знаходження початкового наближення грунтуються на апріорних оцінках. У даній роботі запропонований алгоритм знаходження початкового наближення для точкового методу Ньютона за допомогою одного з інтервальних методів, який гарантує виконання всіх умов збіжності методу.

Нехай $R^n - n$ - мірний дійсний простір. Покажемо зв"язок понять інтервального аналізу і відповідних величин R^n.

1. Основні поняття інтервального аналізу в R^n. Припустимо, що окіл $O(y,\rho)$ в R^n з центром y і радіусом ρ є особливим типом інтервалу, а саме

$$O(y,\rho)=\{x \mid \|x-y\| \le \rho\}=[y-\rho e,\ y+\rho e], \qquad /1/$$

де

$$e=(1,1,\ldots,1)^T.$$

Основні інтервальні поняття тісно зв"язані з нормою

$$\|x\| = max\{|x_i|\} \text{ для } R^n, \qquad /2/$$

де

$$x=(x_1, x_2, x_3, \ldots, x_n).$$

Як відомо з /1/, абсолютна величина інтервалу $[a,b]$ в R визначається так:

$$|[a,b]| = max\{|a|,|b|\}.$$

Аналогічно, для інтервалу $x=[a,b]$ в R^n

$$\omega(x) = \max_{1\le i\le n}\{(b_i-a_i)\} = \|b-a\|.$$