

Теплопроводность, детерминированное горение

Этап №1

Махорин И. С.

24 февраля 2024

Российский университет дружбы народов, Москва, Россия

Информация

- Махорин Иван Сергеевич
- Шаповалова Диана Дмитриевна
- Егорова Юлия Владимировна
- Павлова Варвара Юрьевна
- Лебединец Татьяна Александровна
- Великоднева Евгения Владимировна



Вводная часть

- Изучить методы математического моделирования на примере теплопроводности и детерминированного горения.

- Исследовать влияние E на режим горения. При каком минимальном значении E возникает пульсирующий режим?
- Написать программу, решающую одномерное уравнение теплопроводности с адиабатическими граничными условиями, используя явную разностную схему. Исследовать поведение численного решения при различных значениях $\chi\Delta t/h^2$.
- Написать программу, решающую одномерное уравнение теплопроводности с адиабатическими граничными условиями, используя неявную разностную схему.

- Горение представляет собой феномен природы, являющийся интересным объектом для научного исследования. Несмотря на комплексность и разнообразие физико-химических процессов, лежащих в его основе, многие из его характеристик могут быть описаны с использованием простых моделей. Для того чтобы произошло горение, необходимы определенные условия, такие как теплопроводность среды и возможность экзотермической реакции, скорость которой зависит от температуры.
- Детерминированное горение - это процесс горения, который подчиняется определенным законам физики и химии. В отличие от случайного горения, его характеристики можно предсказать с высокой точностью. Этот тип горения применяется, например, при моделировании работы двигателей внутреннего сгорания.

Обычное стационарное горение, при котором скорость распространения зоны активного горения или реакции (фронт пламени) не зависит от времени, может стать неустойчивым. Возникают быстрые периоды горения, сменяющиеся пассивными периодами.

В двумерном случае фронт горения может искривляться и состоять из нескольких зон активного горения, движущихся вдоль фронта и вглубь материала. Эти зоны могут взаимодействовать, периодически исчезать и появляться снова.

Основная часть

Закон Аррениуса для реакции первого порядка

Вещество вида A переходит в B , при этом выделяется тепло. Для скорости XP воспользуемся законом Аррениуса для реакции первого порядка:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\frac{N}{\tau} e^{-E/RT}$$

(1.1)

- N — доля непрореагировавшего вещества A , меняющаяся от 1 — исходное состояние, до 0 — все прореагировало,
- E — энергия активации XP
- τ — характерное время перераспределения энергии
- T — температура в данной точке

Одномерный случай

В одномерном случае необходимо добавить уравнение теплопроводности с дополнительным членом, отвечающим за энергосвечение:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \rho Q \frac{\partial N}{\partial t}$$

(1.2)

- ρ — плотность
- c — удельная теплоемкость
- κ — коэффициент теплопроводности
- Q — удельное энергосвечение при XP

Одномерный случай

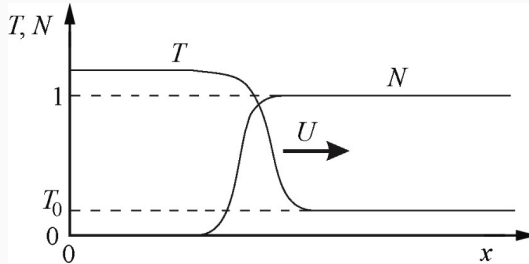


Рис. 1: Профили температуры и исходного компонента в стационарной волне горения

Система уравнений для безразмерных величин

Поделив уравнение теплопроводности на ρQ и перейдя к безразмерным температуре $\tilde{T} = cT/Q$ и энергии активации $\tilde{E} = cE/(RQ)$ получим систему уравнений:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \chi \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \frac{\partial N}{\partial t}$$

(2.1)

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\frac{N}{\tau} - e^{-E/T}$$

(2.2)

- $\chi = \kappa/\rho c$
- χ - коэффициент температуропроводности

Одномерный случай

- Первый режим — скорость распространения волны постоянна, а профили температуры и концентрации переносятся вдоль оси X не деформируясь.
- Второй режим — скорость волны переменная, и горение распространяется в виде чередующихся вспышек и угасаний. От значения параметра E , зависит какой режим реализуется.

Существует критическое значение безразмерной энергии активации E^* . При $E < E^*$ — стационарное горение, а при $E > E^*$ — пульсирующее. Теоретически можно показать, что при $T_0 \ll 1$ критическое значение $E^* = 6,56$. При увеличении начальной температуры T_0 критическое значение E^* возрастает.

Двумерный случай

Для моделирования волны горения в двумерном случае в уравнение:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \chi \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \frac{\partial N}{\partial t}$$

(2.1)

нужно добавить перенос тепла по второй координате $-\chi \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}$

Кроме стационарного и пульсирующего режимов для этой двухмерной системы возможен третий режим распространения волны горения — спиновый.

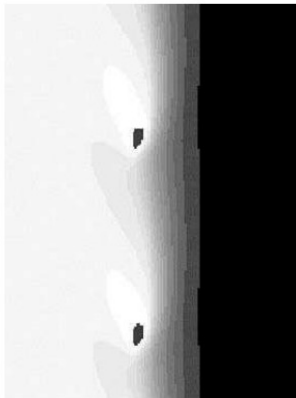


Рис. 2: Характерный пример численного моделирования спиновое режима горения

Рассмотрим численные методы решения одномерного уравнения теплопроводности без химических реакций:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \chi \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

(3.1)

Для этого в уравнении теплопроводности заменим частные производные на разностные:

$$\frac{\hat{T}_i - T_i}{\Delta t} = \chi \frac{\frac{T_{i+1} - T_i}{h} - \frac{T_i - T_{i-1}}{h}}{h} = \chi \frac{(T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}))}{h^2}, \quad (3.2)$$

Теперь учитываем , добавим изменение безразмерной температуры за счёт энерговыведения в химических реакциях за шаг по времени:

$$\begin{aligned}\Delta N_i &= -\frac{N_i}{\tau} e^{-E/T_i} \Delta t, \\ \hat{T}_i &= T_i + \frac{\chi \Delta t}{h^2} (T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}) - \Delta N_i, \\ \hat{N}_i &= N_i - \Delta N_i,\end{aligned}, (3.3)$$

$$i = 1, 2, \dots, n$$

Неявная схема:



$$\frac{\hat{T}_i - T_i}{\Delta t} = \chi \frac{(\delta^2 \hat{T})_i}{h^2}, \quad e = O[\Delta t] + O[h^2], \quad (3.4)$$

Неявная схема Кранка-Николсон:



$$\frac{\hat{T}_i - T_i}{\Delta t} = \chi \frac{(\delta^2 T)_i + (\delta^2 \hat{T})_i}{2h^2}, \quad e = O[(\Delta t)^2] + O[h^2], \quad (3.5)$$

Преобразовав выражение, получим следующую систему уравнений:

$$\hat{T}_{i-1} - (2 + \frac{2h^2}{\chi\Delta t})\hat{T}_i + \hat{T}_{i+1} = -T_{i-1} + (2 - \frac{2h^2}{\chi\Delta t})T_i - T_{i+1}, \quad (3.6)$$

Заключительная часть

На данном этапе мы рассмотрели, что такое теплопроводность и детерминированное горение, что они из себя представляют и что в себе сочетают. Так же мы познакомились с основными понятиями, которые используются при изучении и построении уравнений и моделей теплопроводности и детерминированного горения.

- Моделирование физических процессов и явлений на ПК / Д. А. Медведев, А. Л. Куперштох, Э. Р. Прууэл [и др.]. – Новосибирск : Новосиб. гос. ун-т, 2010. – 101 с. – ISBN 978-5-94356-933-3.