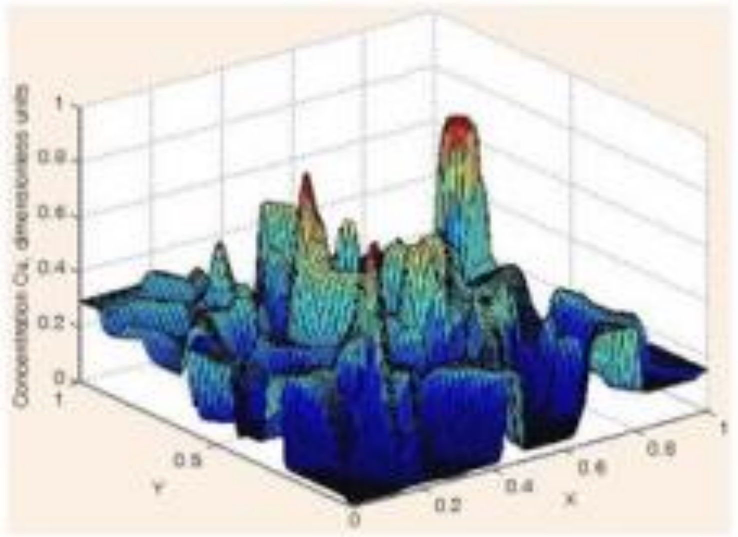


Комп'ютерне моделювання задач прикладної математики

Моделювання дифузійних процесів

Лекція 13

Моделювання дифузійних процесів

У розділі розглядаються ключові питання щодо побудови моделей дифузійних процесів. Наводяться основні чисельні методи розв'язання рівнянь у частинних похідних та визначаються межі їх застосованості. На наочному прикладі моделювання поширення тепла у прямокутній пластинці показані основні прийоми програмної реалізації наведених у розділі алгоритмів.

Дифузія

- Дифузія — один із ступенів численних технологічних процесів фізичної хімії (адсорбції, сушки, екстрагування, брикетування з в'яжучими речовинами, тощо). Дифузія відбувається в газах, рідинах і твердих тілах. Механізм дифузії в цих речовинах істотно різний. Дифузія що відбувається внаслідок теплового руху атомів, молекул, — молекулярна дифузія. Дифундувати можуть як частинки сторонніх речовин (домішок), нерівномірно розподілених у середовищі, так і частинки самої речовини середовища. У останньому випадку процес називається самодифузією. Термодифузія — це дифузія під дією градієнта температури в об'ємі тіла, бародифузія — під дією градієнта тиску або гравітаційного поля. Перенесення заряджених частинок під дією зовнішнього електричного поля — електродифузія. У рухомому середовищі може виникати конвекційна дифузія, при вихровому русі газу або рідини — турбулентна дифузія.

- Наслідком дифузії є переміщення часток із областей, де їхня концентрація висока, в області, де їхня концентрація низька, тобто вирівнювання концентрації часток у термодинамічній системі, встановлення рівноваги за складом.

Рівняння дифузії

- **Рівняння дифузії** являє собою окремий вид диференціального рівняння в часткових похідних. Буває нестаціонарним і стаціонарним.
- В сенсі інтерпретації при вирішенні *рівняння дифузії* мова йде про знаходження залежності концентрації речовини (або інших об'єктів) від просторових координат і часу, причому заданий коефіцієнт (в загальному випадку також залежить від просторових координат і часу), що характеризує проникність середовища для дифузії.
- При вирішенні *рівняння теплопровідності* мова йде про знаходження залежності температури середовища від просторових координат і часу, причому установлено теплоємність і теплопровідність середовища (також в загальному випадку неоднорідність).
- У загальному випадку можна сказати, що темп дифузії пропорційний швидкості молекул (яка, в свою чергу, пропорційна температурі і обернено пропорційна масі молекул), а також пропорційний площі перерізу зразка.

Математичний опис

Динамічна змінна

$$n = n(\mathbf{r}, t),\ \mathbf{r} = \{x,y,z\}$$

Дифузійний потік

Дифузійним потоком або густиною дифузійного потоку *j* називають кількість речовини, що проходить через одиницю площі за одиницю часу. Ця величина дорівнює

$$\mathbf{j} = -D(n)\nabla n(\mathbf{r})$$

тобто, потік пропорційний градієнту концентрації (перший закон Фіка). Знак мінус показує, що дифузія відбувається у напрямку, протилежному до зростання градієнту. Величина D(n) називається коефіцієнтом дифузії, і є мірою дії середовища на частинки. Фізичний сенс коефіцієнта дифузії: це кількість речовини, що проходить через ділянку в 1 $м^2$ при градієнті концентрації речовини у 1 моль/$м^3$ на метр.

Математичний опис

Рівняння дифузії

З рівняння неперервності (яке можна розуміти як закон збереження кількості частинок) можна вивести рівняння дифузії

$$\frac{\partial n(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} + div\,\boldsymbol{j} = 0$$

а використавши вираз для густини потоку, $\mathbf{j} = -D(n)\nabla n(\mathbf{r})$, можна отримати феноменологічне рівняння дифузії

$$\frac{\partial n(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = div\,D(n(\boldsymbol{r},t))\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)$$

у випадку незмінного D=const перетворюється на другий закон Фіка:

$$\frac{\partial n(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = D\Delta n(\boldsymbol{r},t) + f(\boldsymbol{r},t)$$

де $\Delta = \mathrm{div}\nabla$ — оператор Лапласа

$f(r,t)$ — інтенсивність джерел речовини $n(\mathbf{r},t)$

$\nabla = (\partial x, \partial y, \partial z)$ — оператор набла

$\Delta = \nabla^2 = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$ — оператор Лапласа.

Постановка задачі

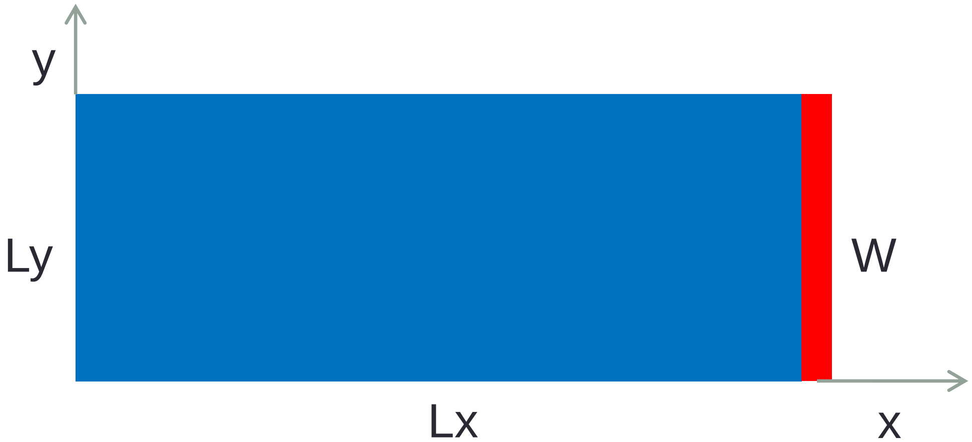
Дано

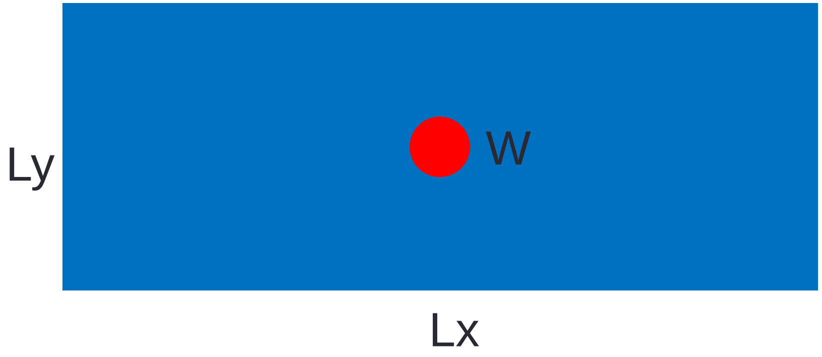
- Прямокутна пластина зі сталим коефіцієнтом температуропровідності *D*.
- Задано початковий розподіл температури $T = T(x, y)$, потужність W_i та координати (x_i, y_i) джерел тепла.

Задача

Проаналізувати зміну температури різних точок пластини з часом.

Постановка задачі





Рівняння теплопровідності

$$\frac{\partial T(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = D\Delta T(\boldsymbol{r},t)$$

Температура поверхні

$T = T(x,y,t)$

Початкові умови

$T(x,y,t=0) = T_0(x,y)$

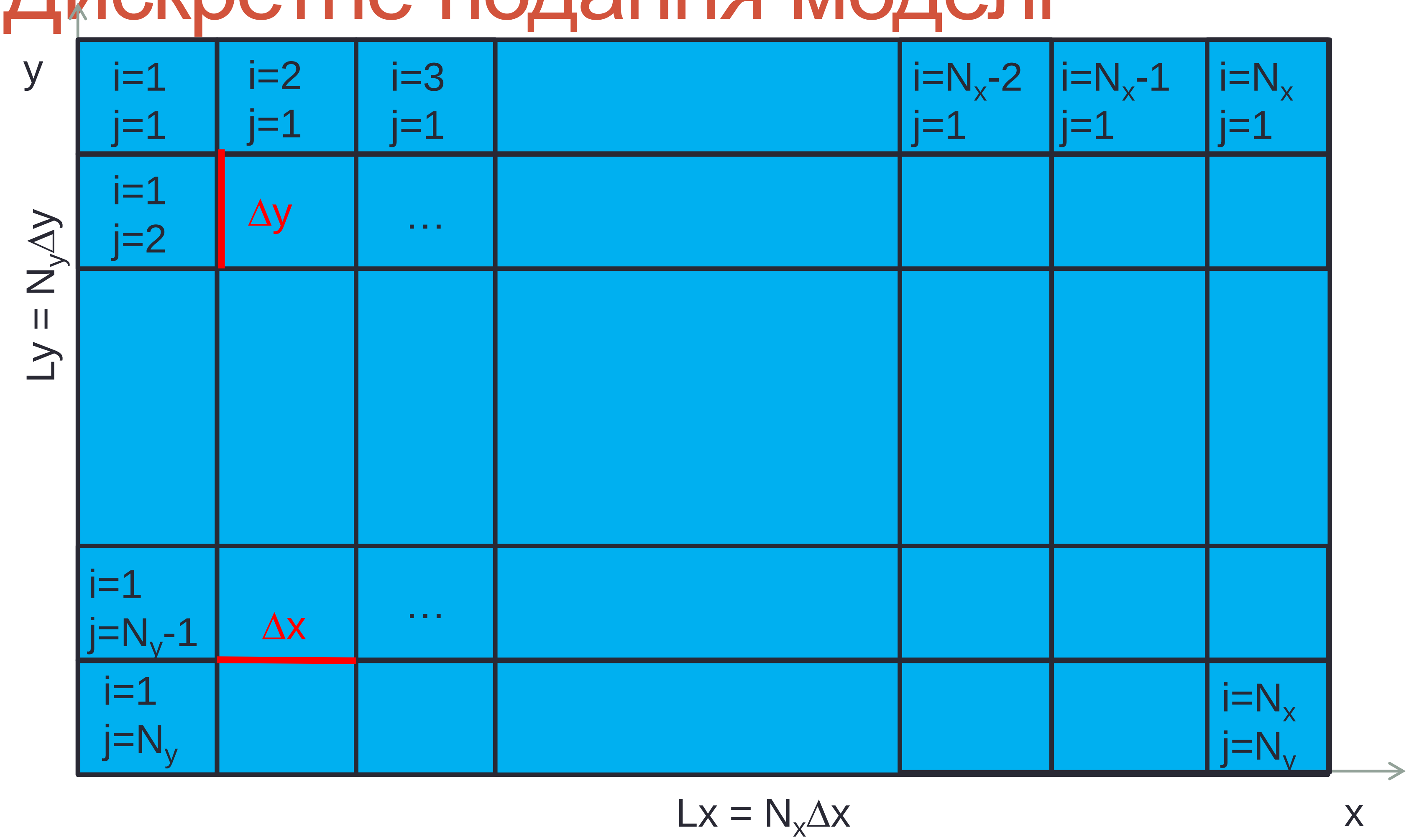
Граничні умови

- фіксовані
- періодичні
- ….

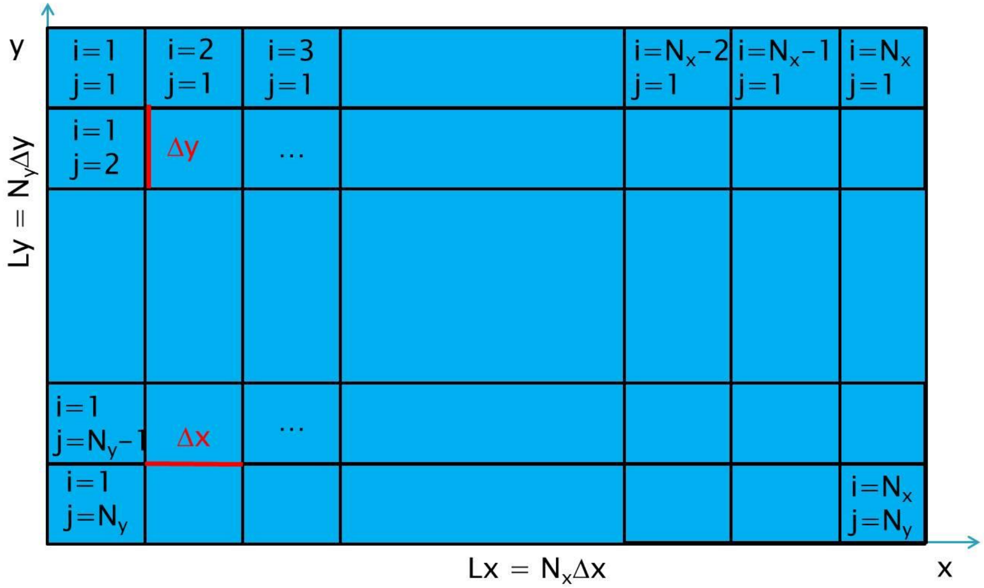
Потужність джерела тепла

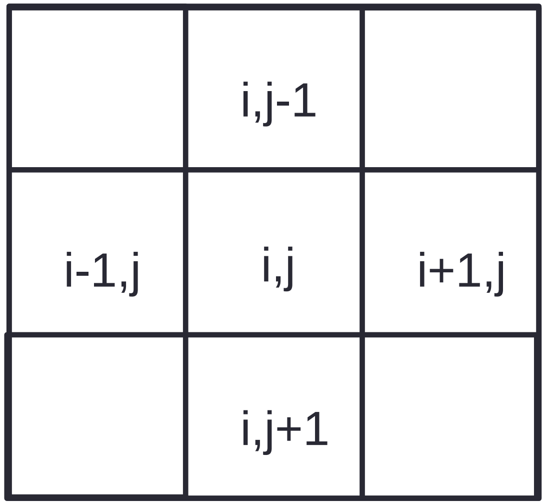
- $W(x,y,t)$ – змінна у часі
- $W(x,y)$ – не змінна у часі

Дискретне подання моделі



Дискретне подання операторів





Рівняння теплопровідності

$$\frac{\partial T(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = D\Delta T(\boldsymbol{r},t)$$

Перехід до дискретного простору

$$T(x,y) = T(i,j)$$

Огляд числових методів розв’язання параболічних рівнянь

- Функції, неперервні у просторі й часі, можна замінити векторами, компоненти яких визначаються лише у дискретних точках простору і часу.
- Дифузійне рівняння у континуальній формі

$$\frac{\partial u(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = D\Delta u(\boldsymbol{r},t)$$

- Перехід до дискретного простору

$$u_{i,j}^{n} = u(\boldsymbol{r},t), \qquad n = \Delta t \ldots N \times \Delta t$$

- Точність і стійкість чисельного розв’язку рівнянь у частинних похідних залежать від характерних часових масштабів процесів, які описуються цими рівняннями. Тому у загальному випадку перед застосуванням різницевого методу до рівнянь у частинних похідних важливо встановити деякі істотні фізичні властиво- сті таких рівнянь.

Огляд числових методів розв’язання параболічних рівнянь

Явний метод першого порядку точності — найпростіший шлях розв’язання рівняння дифузії за часом, аналогічний методу Ейлера для звичайних диференціальних рівнянь. У момент часу $t = 0$ початкові умови визначають залежну змінну на просторовій сітці $\{x_j\}$ (x_j — координата j-го вузла просторової сітки). Розглянемо одновимірний випадок (ланцюжок із N вузлів, розміщених на відстані Δ, в кожному з яких визна чена змінна u). Нам необхідно проінтегрувати рівняння

$$\frac{\partial u}{\partial t} - D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$$

у межах кроку за часом Δt. Просторовий оператор $\partial^2/\partial x^2$ — друга похідна за простором, яка за аналогією до другої похідної за часом визначається так:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}u_j^n \approx \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\Delta^2}$$

де Δ — крок за простором, $u_j^n = u(t_n, x_j)$. У такому випадку u_j^{n+1} знаходиться з різницевого рівняння

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{\mathrm{D}\Delta t}{\Delta^2}\left(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n\right), \qquad \Delta t \le \frac{1}{2}\frac{\Delta^2}{D}$$

Огляд числових методів розв’язання параболічних рівнянь

Неявний Метод Кранка - Нікольсона

Усереднюючи просторовий дифузійний член за часом, отримуємо неявну схему

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{\mathrm{D}\Delta t}{2\Delta^2}\left(u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}\right) + \frac{\mathrm{D}\Delta t}{2\Delta^2}\left(u_{j+1}^{n} - 2u_j^{n} + u_{j-1}^{n}\right)$$

Метод є безумовно стійким. Крім того, він має точність другого порядку як за часовим, так і за просторовим кроком і завдяки цим перевагам широко застосовується. Однак точність і стійкість схеми були отримані ціною ускладнення системи рівнянь для визначення величин u_j^{n+1}. Нові значення u_j^{n+1} визначені неявно, що потребує додаткового розв’язання матричного рівняння на кожному кроці за часом.

Метод «з переступом»

$$u_j^{n+1} = u_j^{n-1} + 2\frac{\mathrm{D}\Delta t}{\Delta^2}\left(u_{j+1}^{n} - 2u_j^{n} + u_{j-1}^{n}\right)$$

Огляд числових методів розв'язання параболічних рівнянь

Метод Дюфора - Франкеля

$$u_j^{n+1} = u_j^{n-1} + 2\frac{\mathrm{D}\Delta t}{\Delta^2}\left(u_{j+1}^n - \left[u_j^{n+1} + u_j^{n-1}\right] + u_{j-1}^n\right)$$

Використовуючи нескладні перетворення, можна знайти явний вираз для функції u_j^{n+1} у кожному вузлі сітки

$$u_j^{n+1} = \left(\frac{1-\alpha}{1+\alpha}\right)u_j^{n-1} + \frac{\alpha}{1+\alpha}\left(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n\right)$$

де

$$\alpha = 2\frac{D\Delta t}{\Delta^2}$$

Наведена явна схема є стійкою. Зрозуміло, що поданий метод має великі можливості, але необхідно відзначити, що для великих кроків за часом різницева схема призводить до коливань, хоча і незростаючих.

Дискретне рівняння теплопровідності

	i,j−1	
i−1,j	i,j	i+1,j
	i,j+1	

Рівняння теплопровідності

$$\frac{\partial T(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = D\Delta T(\boldsymbol{r},t)$$

Перехід до дискретного простору

$$T(x,y) = T(i,j)$$

Оператор Лапласа

$$\Delta T(x,y) = \Delta T(i,j) = \left(\frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}}{(\Delta_x)^2} + \frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{\left(\Delta_y\right)^2}\right)$$

Рівняння теплопровідності

$$T_{i,j}(t+\Delta t) = T(i,j) + \left(D_x\frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}}{(\Delta_x)^2} + D_y\frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{\left(\Delta_y\right)^2}\right)\Delta t + W_{i,j}\Delta t$$

$$T_{i,j=0} - ?$$

$$T_{i,j=Ny+1} - ?$$

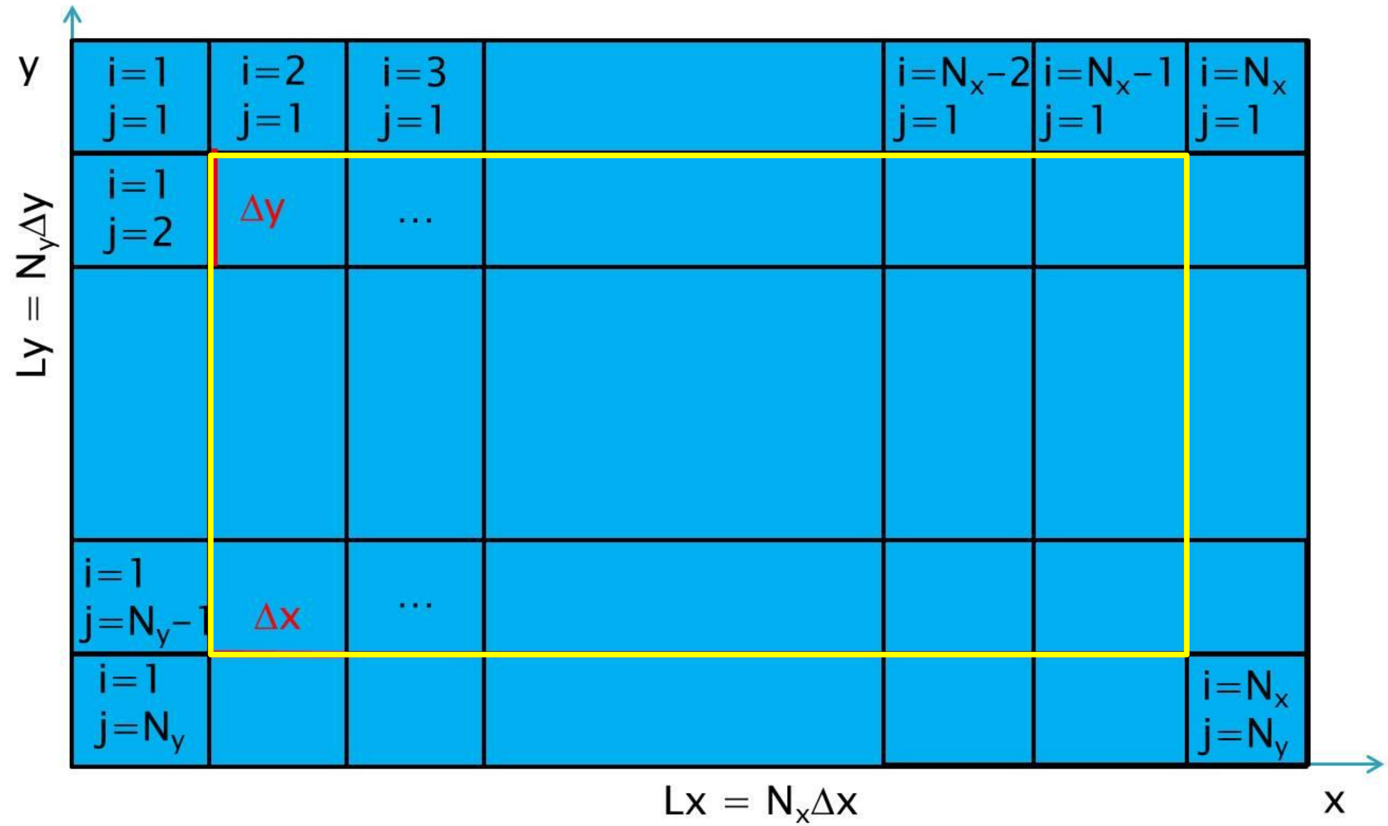
$$T_{i=0,j} - ?$$

$$T_{i=Nx+1,j} - ?$$

Граничні умови

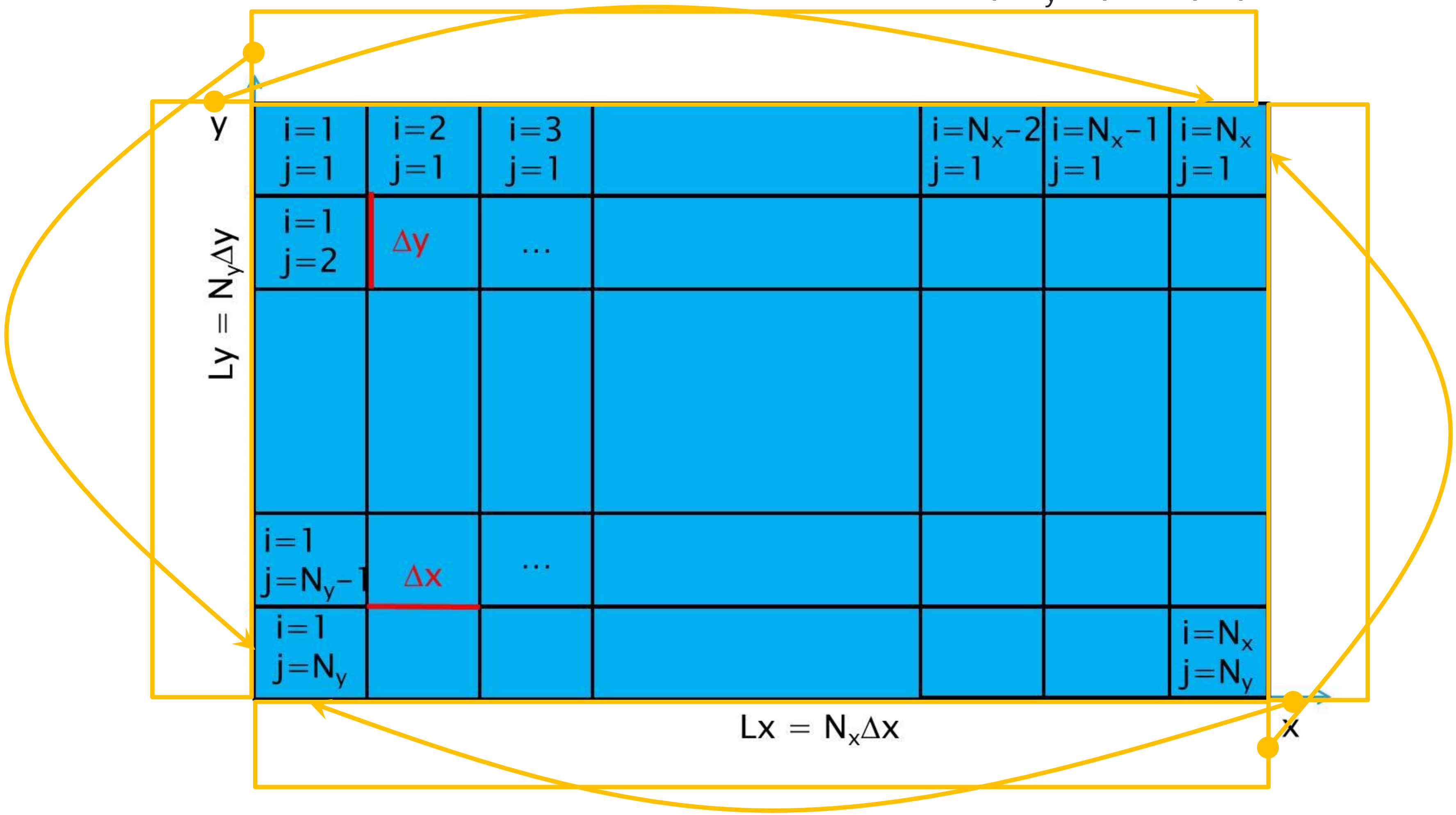
Фіксовані:

$\forall j\ T(1,j) = \forall j\ T(N_x,j) = \forall i\ T(i,1) = \forall i\ T(i,N_y) = T_c$



Граничні умови

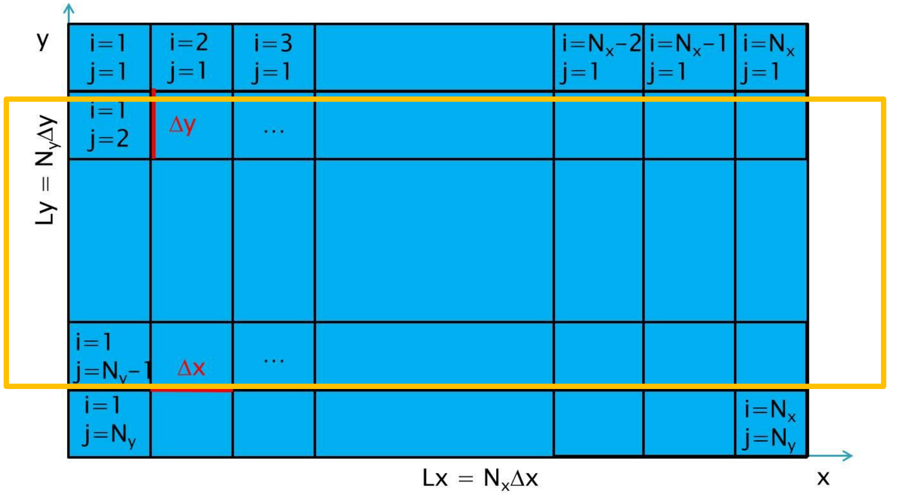
Періодичні:
$\forall j\ T(0,j) = T(N_x,j);$
$\forall j\ T(N_x+1,j) = T(1,j)$
$\forall i\ T(i,0) = T(i,N_y)$
$\forall i\ T(i,N_y+1) = T(i,1)$

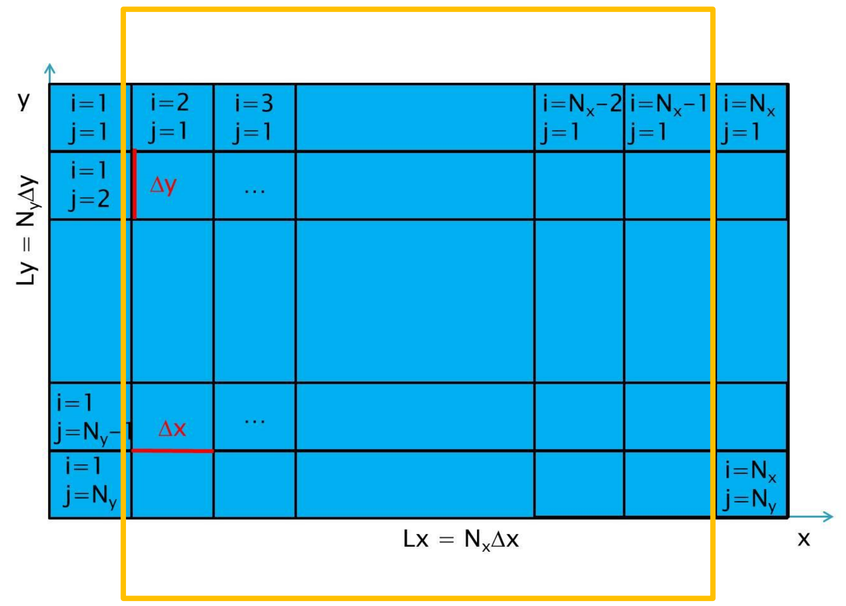


Граничні умови

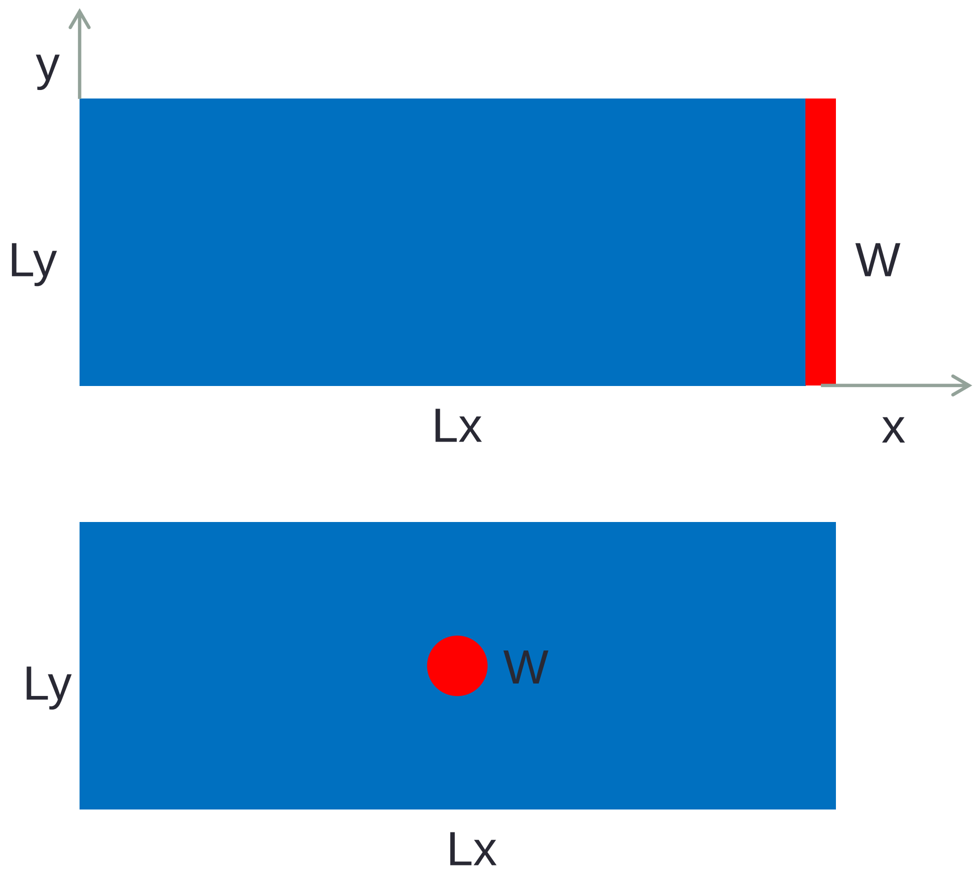
Змішані

	i,j-1	
i-1,j	i,j	i+1,j
	i,j+1	





Постановка задачі



Рівняння теплопровідності

$$\frac{\partial T(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = D\Delta T(\boldsymbol{r},t)$$

Температура поверхні

$T = T(x,y,t)$

Початкові умови

$T(x,y,t=0) = T_0(x,y)$

Граничні умови

- фіксовані
- періодичні
- ….

Потужність джерела тепла

- $W(x,y,t)$ – змінна у часі
- $W(x,y)$ – не змінна у часі

Дискретне рівняння теплопровідності

	i,j−1	
i−1,j	i,j	i+1,j
	i,j+1	

Рівняння теплопровідності

$$\frac{\partial T(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = D\Delta T(\boldsymbol{r},t)$$

Перехід до дискретного простору

$$T(x,y) = T(i,j)$$

Оператор Лапласа

$$\Delta T(x,y) = \Delta T(i,j) = \left(\frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}}{(\Delta_x)^2} + \frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{\left(\Delta_y\right)^2}\right)$$

Рівняння теплопровідності

$$T_{i,j}(t+\Delta t) = T(i,j) + \left(D_x\frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}}{(\Delta_x)^2} + D_y\frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{\left(\Delta_y\right)^2}\right)\Delta t + W_{i,j}\Delta t$$

Алгоритм

- Розбиваємо континуальний простір поля пластини на однакові домени розміром $\Delta\times\Delta$ та вважаємо, що температура вздовж окремого домена є сталою величиною.
- Задаємо коефіцієнт дифузії D (у неоднорідному випадку — окремо вздовж кожного виміру x та y : D_x *та* D_y . Задаємо початковий розподіл температури Ti,j (t = 0) (де i, j визначають координати окремого домена на гратці). Встановлюємо координати і потужності джерел тепла Wi,j. Задаємо t = 0.
- Запускаємо цикл за t. Шляхом послідовного перебору всіх вузлів гратки (окремих доменів) за допомогою різницевої схеми перераховуємо температури доменів на наступному кроці за часом. На цьому етапі створюємо два цикли за i та за j і перераховуємо температуру кожного домена за формулою обраного методу.
- Виводимо поточний розподіл температури на екран, зафарбовуючи елементи так, що різним температурам відповідають різні кольори.
- Збільшуємо час на крок Δt.
- Якщо цикл за t закінчився — вихід із програми

Приклад розв’язку

Рисунок — Поширення тепла у тонкій пластині, межі якої підтримуються при сталій температурі

Приклад розв'язку

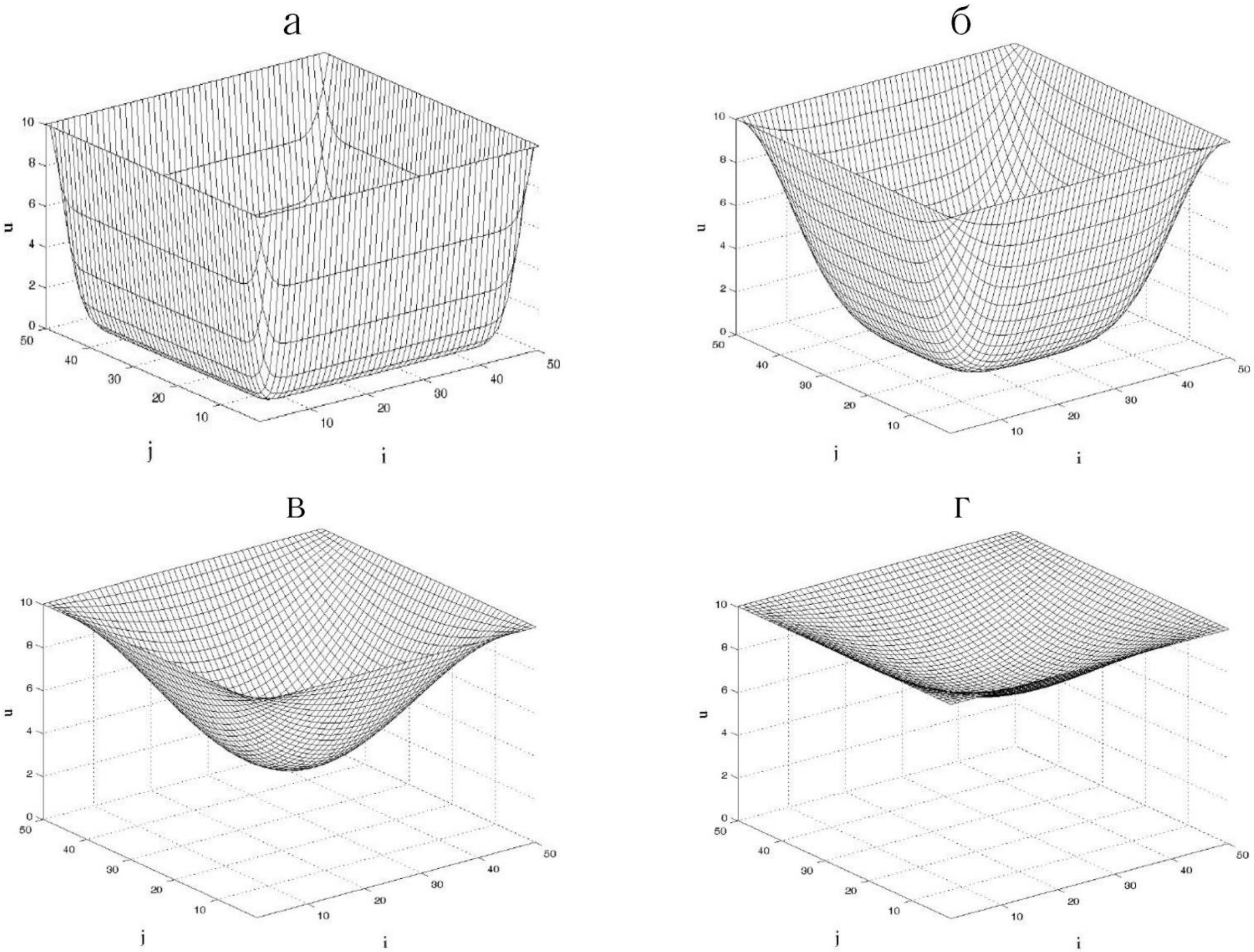
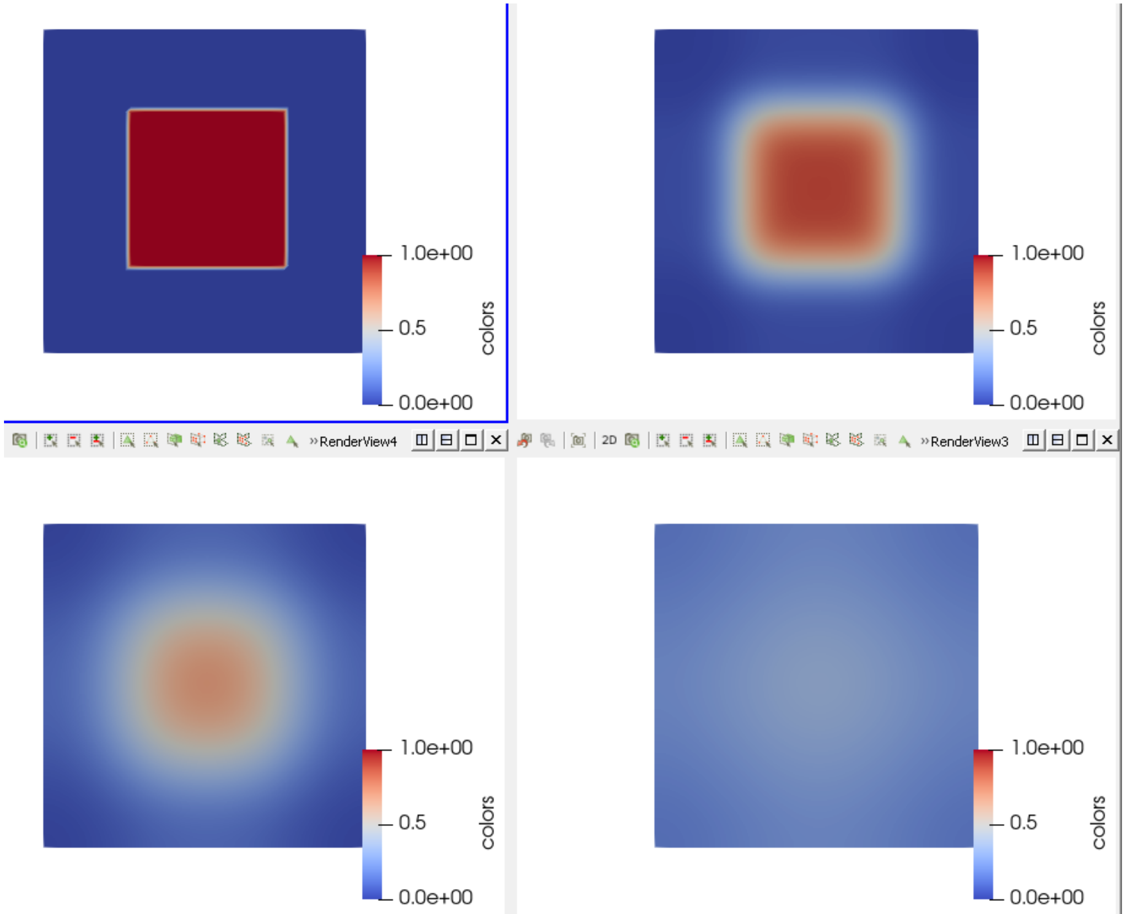
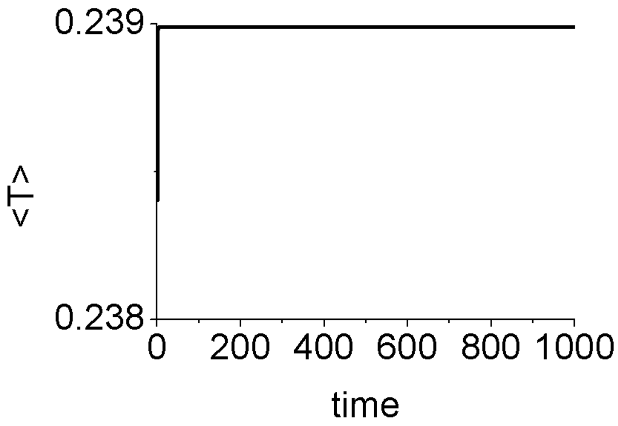


Рисунок — Розподіл температури у полі пластини у різні моменти часу: а) t = 1; б) t = 10; в) t = 50; г) t = 100

Приклад розв’язку

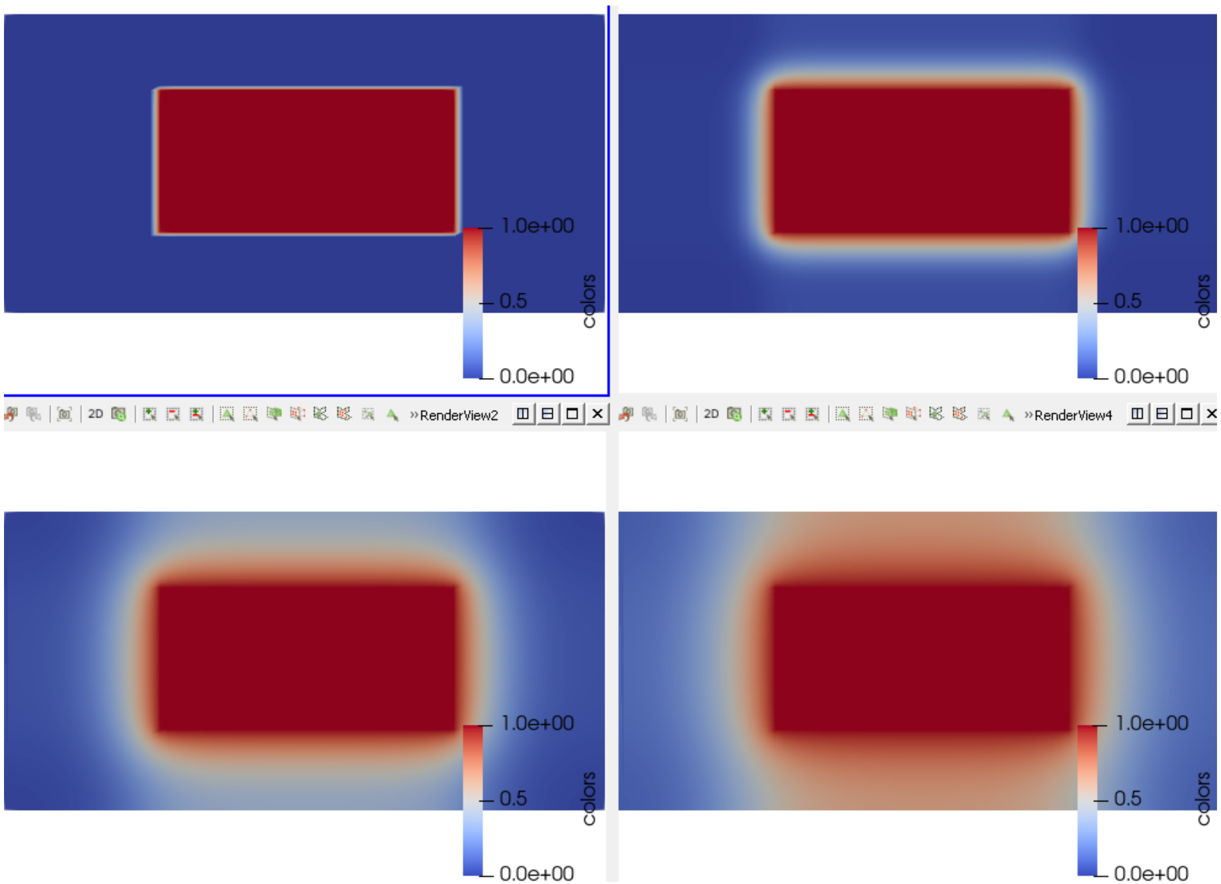
$$\frac{\partial T(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \nabla^2 T$$

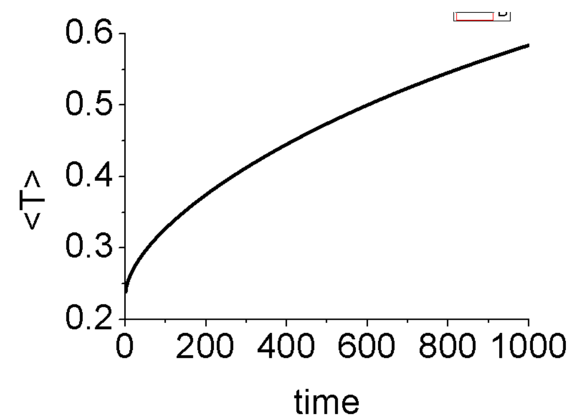




Приклад розв'язку

$$\frac{\partial T(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \nabla^2 T + W(\mathbf{r})$$





ДЯКУЮ ЗА УВАГУ