Теплопроводность, детерминированное горение

Этап №1

Кузнецова С.В.

21 марта 2025

Российский университет дружбы народов, Москва, Россия

Докладчики

- Кузнецова София Вадимовна
- Цвелёв Сергей Андреевич
- Скандарова Полина Юрьевна
- Шулуужук Айраана Вячеславовна
- Поляков Глеб Сергеевич
- Замбалова Дина Владимировна

Вводная часть

Цели проекта

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

Задачи проекта

- Написать программу, решающую одномерное уравнение теплопроводности с адиабатическими граничными условиями, используя явную разностную схему. Исследовать поведение численного решения при различных значениях $\chi \Delta t / h2$.
- Исследовать влияние E на режим горения. При каком минимальном значении E возникает пульсирующий режим?
- По профилю $N(x)$ рассчитать положение фронта. Достаточно точным и простым способом является нахождение координаты с $N = 0,5$. Предлагается воспользоваться линейной интерполяцией между двумя соседними точками. Построить график скорости горения от координаты фронта.

Определение

- Горение — это яркий и сложный природный процесс, который можно описать с помощью относительно простых моделей.
- Детерминированное горение - это процесс горения, который подчиняется определенным законам физики и химии.
- Теплопроводность — это передача тепла в веществе от горячих участков к холодным за счет взаимодействия частиц.

Основная часть

Закон Аррениуса для реакции первого порядка

Будем моделировать простейшим образом: вещество вида A переходит в B, при этом выделяется тепло. Для скорости воспользуемся законом Аррениуса для реакции первого порядка:

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

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

Одномерный случай

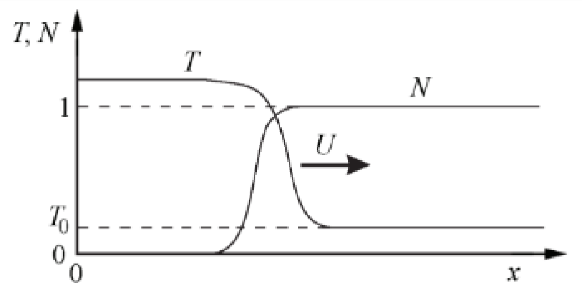
В одномерном случае необходимо добавить уравнение теплопроводности с дополнительным членом, отвечающим за энерговыделение:

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

- ρ — плотность,
- c — удельная теплоемкость.
- κ — коэффициент теплопроводности.
- Q — удельное энерговыделение при .

Одномерный случай

В этой системе уравнений возможен режим в виде самостоятельно распространяющейся волны горения:



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

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \chi \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \frac{\partial N}{\partial t},$$
$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\frac{N}{\tau} e^{-E/T},$$

χ = κ/ρc называется коэффициентом температуропроводности.

Из имеющихся в системе уравнений и трех параметров наиболее интересна безразмерная энергия активации E, равная отношению энергии активации к теплоте реакции. Именно этот параметр определяет режим волны горения, а остальные параметры τ и χ только масштабируют явление во времени и в пространстве.

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.

Двумерный случай

Для моделирования волны горения в двумерном случае в уравнение:

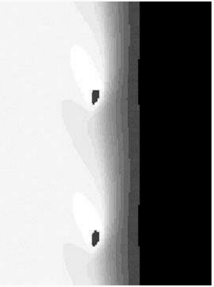
$$\frac{\partial T}{\partial t} = \chi \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \frac{\partial N}{\partial t},$$

Нужно добавить перенос тепла по второй координате:

$$\chi \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}.$$

Спиновое горение

Кроме стационарного и пульсирующего режимов для этой двухмерной системы возможен третий режим распространения волны горения — спиновый. При этом фронт состоит из нескольких зон горения, распространяющихся по винтовой линии вдоль цилиндра.



Явная разностная схема

Рассмотрим численные методы решения одномерного уравнения теплопроводности без химических реакций:

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

Для этого в уравнении теплопроводности заменим частные производные на разностные:

$$\frac{\hat{T}_i - T_i}{\Delta t} = \chi \frac{\frac{T_{i+1} - T_i}{h} - \frac{T_i - T_{i_1}}{h}}{h} = \chi \frac{(T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1})}{h^2}$$

Теперь, чтобы учесть , добавим к прошлой формуле изменение безразмерной температуры за счет энерговыделения в химических реакциях за шаг по времени:

$$\Delta N_i = -\frac{N_i}{\tau}\, e^{-E/T_i}\, \Delta t,$$

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

$$\hat{N}_i = N_i - \Delta N_i,$$

$i = 1, 2, ..., n$

Неявные разностные схемы

Явная схема, устойчива:

1. 

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

Неявная схема, всегда устойчива:

2. 

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

Неявная схема Кранка-Николсон, всегда устойчива:

3. 

1/2

1/2

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

Преобразовав выражение для третьей схемы, получим систему n уравнений:

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

Заключительная часть

Результаты

Мы рассмотрели понятия теплопроводности и горения (детерминированного в том числе). Мы познакомились с понятиями, используемыми при изучении и построении уравнений теплопроводности и детерминированного горения.

Источники

Медведев Д. А., Куперштох А. Л., Прууэл Э. Р., Сатонкина Н. П., Карпов Д. И. Моделирование физических процессов и явлений на ПК: Учеб. пособие / Новосибирск: Новосиб. гос. ун-т., 2010. — 101 с.

Спасибо за внимание!