Теплопроводность, детерминированное горение

Этап № 1

Содержание

Список иллюстраций

Список таблиц

1 Цель работы

Изучить методы математического моделирования на примере теплопроводности и детерминированного горения.

2 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.**

3 Определения

- **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.**

4 Основная часть

4.1 Размерная система уравнений

4.1.1 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.

4.2 Размерная система уравнений

4.2.1 Одномерный случай

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

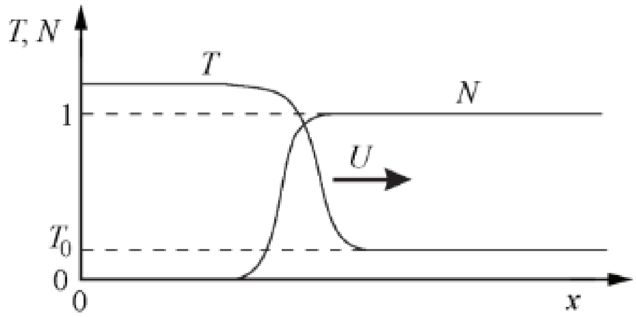
$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \rho Q \frac{\partial N}{\partial t}$$

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

4.3 Размерная система уравнений

4.3.1 Одномерный случай

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



4.4 Система уравнений для безразмерных величин

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 = □/□c 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.

4.5 Различные режимы горения

4.5.1 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.

4.6 Различные режимы горения

4.6.1 Двумерный случай

Для моделирования волны горения в двумерном случае в уравнение:

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

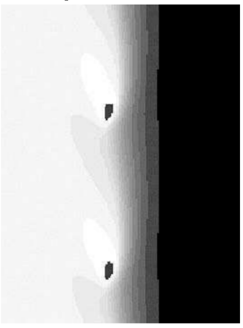
Нужно добавить перенос тепла по второй координате:

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

4.7 Различные режимы горения

4.7.1 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.



4.8 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:

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

4.9 Явная разностная схема

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

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

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

4.10 Неявные разностные схемы

Явная схема, устойчива:

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

Неявная схема, всегда устойчива:

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

Неявная схема Кранка-Николсон, всегда устойчива:

3. 

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

4.11 Неявные разностные схемы

Преобразовав выражение для третьей схемы, получим систему n уравнений:

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

5 Заключительная часть

5.1 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.

5.2 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.