**Проект по курсу "Численные методы"**

**Моделирование распространения тепловой волны активированной химической реакции в неподвижной среде**

*Работу выполнили студенты 4 курса:*

Голчин Роман

Иванов Артем

Кареньков Игорь

Тураев Мехрубон

Беринчик Вадим

*Преподаватель:*

Сегаль А.С.

Санкт-Петербург

2018

В данной работе построена модель активированной химической реакции, фронт которой распространяется в виде бегущей тепловой волны. Проведено численное моделирование одномерного регулярного режима с помощью метода предиктор-корректор. Получены численные модели закритических режимов распространения тепловой волны путем вариации физических параметров задачи.

**Постановка задачи**

Активированные экзотермические химические реакции – реакции, проходящие с выделением тепла, скорость которых сильно увеличивается с температурой. Распространение данной реакции можно представлять в виде бегущей тепловой волны с постоянной скоростью. Фронт волны, в котором происходит реакция, отделяет смесь реагентов с начальной температурой от горячих продуктов выхода реакции. Реакция проходит в адиабатических условиях, все тепло, выделяемое в процессе реакции, идет на нагрев следующего слоя.

Движение волны описывается нестационарными уравнениями диффузии и теплопроводности с нелинейными источниками Аррениусовского типа:

(1)

(2)

где – концентрация исходного реагента, – температура,  
 – скорость реакции как функция концентрации и температуры.

«Активированность» реакции определяется малостью двух безразмерных параметров:  
 .

При малых значениях параметров уравнения теплопроводности и диффузии допускают приближенное асимптотическое решение в виде бегущей волны. Однако, при переходе констант некоторой критической величины волна теряет устойчивость, и могут возникать закритические режимы, включающие колебательный и хаотический режимы распространения волны.

Начальные и граничные условия в одномерном случае заданы следующими соотношениями:

**Метод решения и алгоритм**

Для моделирования одномерного регулярного режима распространения тепловой волны уравнения диффузии и теплопроводности были записаны в виде  
 , где А, B – нелинейные операторы.

(3)

(4)

Полученные уравнения (3), (4) были переписаны с использованием разностной схемы:

(5)

(6)

Получена система из нелинейных уравнений. Она численно решена с помощью метода предиктор-корректор:

предиктор

корректор

Уравнения для решаются независимо. На шаге предиктор для уравнений концентрации и температуры составляются трехдиагональные матрицы, которые решаются методом прогонки. В результате получаются оценки на новые величины . На шаге корректор полученные значения используются в нелинейном операторе для получения финальных значений.

**Результаты**

Начальные распределения концентрации, температуры и скорости реакции в зависимости от координаты:

|  |  |
| --- | --- |
| 1.png | 2.png |
| Рис. 1 | Рис. 2 |

Для моделирования регулярного режима распространения тепловой волны были использованы следующие значения параметров:

D = 7.91e-08 м^2/с

K = 1.60e+06 1/с

E = 80000 Дж/моль

U = 0.000039 м/с

dd = 0.002026 м

dh = 0.002026 м

dr = 0.000146 м

dz = 0.000036 м

L = 0.020 м

steps = 557

dt = 0.93 с

times = 100

Распределения концентрации, температуры и скорости реакции в зависимости от координаты в произвольный момент времени:

|  |  |
| --- | --- |
| 3.png | 4.png |
| Рис. 3 | Рис. 4 |

В данном случае коэффициент диффузии выбран равным м2/с. При этом поля температуры и концентрации оказываются подобны, а система уравнений превращается в автомодельную относительно энергии.

. Получаем уравнение сохранения энергии, его решением является .

Далее коэффициент диффузии постепенно уменьшается до реального значения м2/с. При этом получается колебательный режим скорости реакции.

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| D = м2/с | 5.png | | 6.png | |
|  | | Рис. 5 | | Рис. 6 | |
| D = м2/с | | 7.png | | 8.png | |
|  | | Рис. 7 | | Рис. 8 | |
| D = м2/с | | 9.png | | 10.png | |
|  | | Рис. 9 | | Рис. 10 | |

При увеличении энергии активации с сохранением постоянной скорости волны получается колебательный режим в зоне, где реакция уже произошла.

D = 8.00e-09 м^2/с

K = 2.88e+08 1/с

E = 110000 Дж/моль

U = 0.000028 м/с

dd = 0.000285 м

dh = 0.002816 м

dr = 0.000147 м

dz = 0.000037 м

L = 0.028 м

steps = 765

dt = 1.31 с

times = 100

|  |  |
| --- | --- |
| 11.png | 12.png |
| Рис. 11 | Рис. 12 |

**Выводы**

Построена численная модель активированной химической реакции, фронт которой распространяется в виде бегущей тепловой волны. Ширина зоны подогрева и зоны реакции соответствуют аналитическим исследованиям. Проведено моделирование регулярного режима и получен график бегущей волны фронта реакции. Путем вариации значений физических параметров численно получены колебательный и хаотический режимы. Выявлены зависимости устойчивости решения от параметров.

**Литература**

[1] Зельдович Я.Б., Баренблатт Г.И., Либрович В.Б., Махвиладзе Г.М. Математическая теория горения и взрыва. М.: Наука, 1980.

[2] Рихтмайер Р., Мортон К. Разностные методы решения краевых задач. М., Мир, 1972.

[3] Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. М.: Наука, 1971.