|  |  |
| --- | --- |
| Изображение выглядит как логотип  Автоматически созданное описание | **Министерство науки и высшего образования Российской Федерации**  **Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение**  **высшего образования**  **«Московский государственный технический университет**  **имени Н.Э. Баумана**  **(национальный исследовательский университет)»**  **(МГТУ им. Н.Э. Баумана)** |

ФАКУЛЬТЕТ\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_Фундаментальные науки\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

КАФЕДРА \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_Физика\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

**РАСЧЕТНО-ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА**

***К КУРСОВОЙ РАБОТЕ***

***НА ТЕМУ:***

***Расчет пространственно-временного распределения концентрации растворителя в тонком слое краски***

Студент \_\_\_\_Коберник Т.Н.\_\_\_ **\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_**\_\_\_\_\_\_

(Подпись, дата) (И.О.Фамилия)

\_\_\_\_ФН4-81Б**\_\_\_\_\_\_\_**

(Группа)

Руководитель курсовой работы **\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_**

(Подпись, дата) (И.О.Фамилия)

Консультант **\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_**

(Подпись, дата) (И.О.Фамилия)

*2023 г.*

**Оглавление**

[1. Постановка задачи 3](#_Toc132934600)

[2. Теоретическая часть 4](#_Toc132934601)

[3. Результаты 9](#_Toc132934602)

[4. Выводы 14](#_Toc132934603)

[5. Приложение 15](#_Toc132934604)

# 1. Постановка задачи

Прямоугольная подложка пропитана краской. Процесс (высыхания краски) выделение молекул растворителя в первом приближении можно описать следующей одномерной краевой задачей для уравнения диффузии:

В данном случае толщина краски (h) во много раз меньше других линейных размеров ( и мкм) образца, что позволяет рассматривать одномерную задачу.

– пространственно-временное распределение конценрации растворителя в краске,

- толщина краски,

– начальная концентрация молекул растворителя в материале, 1 мол/

– эффективный коэффициент диффузии молекул растворителя в материале,

– эффективный коэффициент десорбции молекул растворителя с поверхности материала,

- эффективный коэффициент размножения молекул растворителя в материале

**Задание №1**.   час.

**Задание №2.** Рассчитать плотность потока молекул вдоль оси симметрии задачи.

## **2. Теоретическая часть**

При исследовании нелинейных диффузионных процессов необходимо учитывать зависимость коэффициента диффузии от пространственной координаты. В таком случае поведение системы будет описываться уравнением:

Для решения данной дифференциальной задачи будем использовать неявный метод.

Введем в области равномерную сетку с шагом h по координате и шагом по времени:

Для подобного уравнения можно записать разностную схему, линейную относительно коэффициента . Пускай , тогда для временного слоя n:

Получим разностную схему для уравнения (1):

где

Из уравнения (2) получим разностную схему для неявного метода:

Для разрешения разностной схемы (4) воспользуемся методом прогонки. В рамках этого метода получают СЛАУ в количестве пространственных точек. Имеем СЛАУ вида

(5)

Перезапишем в матричном виде:

Таким образом, система задается трехдиагональной матрицей. Предполагается, что .

Пускай

Решение задачи проводится в два этапа. Первый этап – прямая прогонка, в рамках которого расходятся коэффициенты прогонки , .

Т. к.

Подставим во 2-ое уравнение системы (5) вместо

Получим

Где

Для номера :

Второй этап - обратная прогонка, заключающаяся в вычислении через Для этого сначала находим , из системы

Исключая , находим .

Далее зная коэффициенты последовательно вычисляются .

В рамках поставленной задачи данный метод претерпевает изменения и СЛАУ определяется в терминах искомой функции, а правая часть зависит от самой функции, потому СЛАУ записывается через рекуррентное соотношение общего вида:

, где

Пускай

Подставим (7) в (6) и получим выражения для коэффициентов прогонки:

Сравнивая полученное выражение с

Теперь дополним схему в соответствии с начальными и граничными условиями. Начальное условие задает значения функции на нулевом временном слое:

С помощью первого граничного условия определим выражения для начальных коэффициентов прогонки, с помощью второго – значения функции на правой границе на каждом временном слое, необходимые для запуска алгоритма обратной прогонки.

Для аппроксимации первой производной функции воспользуемся разностной схемой второго порядка точности:

Подставим эти разностные схемы в граничные условия:

Таким образом первое и последнее уравнение нашей системы примут вид:

Тогда систему (6) на временном слое можно представить в виде матрицы:

Вернем матрице трёхдиагональный вид, необходимый для реализации метода прогонки. Для этого сложим первую строку со второй, а последнюю с предпоследней (после домножения на соответствующие коэффициенты). Получим матрицы:

Из первой строки:

Т.к. , то начальные коэффициенты прогонки:

Из последней строки:

Т.к. , то

Откуда найдем последние элементы строки:

# 3. Практическая часть

В результате моделирования была получения следующее пространственно-временное распределение концентрации растворителя в краске:

Изображение выглядит как диаграмма

Автоматически созданное описаниеИзображение выглядит как диаграмма

Автоматически созданное описание

*Рис.1. Трехмерная визуализация решения уравнения диффузии*

Рассмотрим сечения функции на некоторых временных слоях.

Изображение выглядит как диаграмма

Автоматически созданное описание

*Рис.2. График искомой функции при T=10*

Изображение выглядит как диаграмма

Автоматически созданное описание

*Рис.3. График искомой функции при T=100*

Изображение выглядит как диаграмма

Автоматически созданное описание

*Рис.4. График искомой функции при T=1000*

Плотность потока

Для оценки плотности потока молекул вдоль оси симметрии задачи рассмотрим концентрацию растворителя на верхнем пространственном слое . Концентрация оторвавшихся от поверхности молекул будет характеризоваться коэффициентом десорбции и составит . Она будет постоянная для любой точки на поверхности прямоугольной подложки.

Введем вдоль оси 3 датчика молекул: на высоте мкм, мкм, мкм от поверхности краски.

Оценим поток аналитически. Разобьем поверхность на элементарных площадок c площадью каждая. Пускай в некоторый момент времени на случайной площадке происходит десорбция молекулы. И далее она совершает движение в случайном направлении. Задачу будем считать изотропной, и все направления движения равновероятными. Всего с конкретной площадки вылетит молекул.

При больших каждую площадку можно считать точечным источникам молекул. Пускай расстояние от точки отрыва молекул до источника d. Рассмотрим однородную сферу радиуса d, на которую может попасть молекула. Количество молекул, попадающих на эту сферу из различных направлений . Тогда количество молекул, попадающих на датчик малой площади равняется . Таким образом, получим приблизительное значение потока молекул в зависимости от времени:

Изображение выглядит как диаграмма

Автоматически созданное описание

*Рис. 5. Разброс точек отрыва молекулы по плоскости подложки в момент времени t=0*

Изображение выглядит как диаграмма

Автоматически созданное описание

*Рис. 6. Плотность потока молекул через датчик на высоте мкм*

Изображение выглядит как диаграмма

Автоматически созданное описание

*Рис.7. Плотность потока молекул через датчик на высоте мкм*

Изображение выглядит как диаграмма

Автоматически созданное описание

*Рис.8. Плотность потока молекул через датчик на высоте мкм*

# 4. Выводы

В ходе выполнения работы было решено нелинейное одномерное уравнение диффузии с помощью неявного метода. В результате была получено пространственно-временное распределение концентрации растворителя в краске. По графику видно, что с течением времени концентрация плавно спадает, что свидетельствует об испарении краски. При чем резкий спад концентрации наблюдается на краях пространственного отрезка. Это можно связать с ускоренным испарением вещества на поверхности, граничащей с воздухом, и с впитыванием краски в подложку (при x близком к 0). Это поведение четко прослеживается на представленных сечениях функции в различных временных слоях.

При анализе плотности потока молекул на оси симметрии заметно, как уменьшается испарение краски с течением времени. Это связано с уменьшением концентрации растворителя на поверхностном слое и, следовательно, с уменьшением вероятности десорбции. Так же видно, как падает величина потока с увеличением расстояния от датчика до поверхности.

Таким образом, метод прогонки показал свою эффективность при решении нелинейных прикладных задач. Явный же метод, не обладающий абсолютной устойчивостью, может давать некорректные результаты, поэтому в рамках данной модели, поведение которой сложно предсказать, он не был использован.

**5. Приложение**

Код использованной программы:

**import** numpy **as** np

**from** matplotlib **import** pyplot **as** plt

**import** plotly.graph\_objects **as** go

**import** math

**import** random

l = 100 *# 0<x<100 в дано записано как h*

Tf = 1000

D0 = 0.01 *# D0\*(2 + cos(pi \* x / (2h)))*

k = 0.01

betta\_const = 10 \*\* (-6)

*# for implicit method*

h\_i = 0.1

tau\_i = 1

N\_i = int(round(Tf / tau\_i))

M\_i = int(round(l / h\_i))

**def** graphic(x,t,u):

fig = go.Figure(go.Surface(

x=x,

y=t,

z=u))

fig.show()

**def** D(h, m):

**return** D0 \* (2 + np.cos((np.pi \* (m \* h)) / (2 \* l)))

**def** a(h, m):

**if** m == 0:

**return** D(h, m)

**else**:

**return** 0.5 \* (D(h, m) + D(h, m-1))

**def** implicit(h\_i, tau\_i, N\_i, M\_i):

A = np.zeros(M\_i, dtype=float)

B = np.zeros(M\_i, dtype=float)

K = np.zeros(M\_i, dtype=float)

F = np.zeros(M\_i, dtype=float)

u = np.zeros([N\_i, M\_i], dtype=float)

**for** m **in** range(M\_i):

A[m] = tau\_i \* a(h\_i, m+1) / h\_i \*\* 2

B[m] = - (1 + tau\_i \* (a(h\_i, m+1) + a(h\_i, m)) / (h\_i \*\* 2))

K[m] = tau\_i \* a(h\_i, m) / (h\_i \*\* 2)

**for** m **in** range(M\_i): *# заполняем нулевой временной слой в соответствие с ну*

u[0][m] = 3 - 2 \* m \* h\_i / l

**for** n **in** range(N\_i-1):

**for** m **in** range(1, M\_i - 1):

F[m] = - u[n][m] - betta\_const \* tau\_i \* u[n][m]

k00 = - 9 \* D0 / (2 \* h\_i) - k *#B0*

k01 = 6 \* D0 / h\_i *#K0*

k02 = - 3 \* D0 / (2 \* h\_i) *#Q0*

B[0] = k00 - A[1] \* k02 / K[1]

K[0] = k01 - B[1] \* k02 / K[1]

F[0] = - F[1] \* k02 / K[1]

kn0 = D0 / h\_i *#Dh*

kn1 = - 4 \* D0 / h\_i *#Ah*

kn2 = 3 \* D0 / h\_i + k *#Qh*

A[-1] = kn1 - kn0 \* B[-2] / A[-2]

B[-1] = kn2 - kn0 \* K[-2] / A[-2]

F[-1] = - kn0 \* F[-2] / A[-2]

u[n + 1] = solve(lower=A, diag=B, upper=K, f=F, n=M\_i)

**return** u

**def** solve(lower, diag, upper, f, n):

alpha = np.zeros(n + 1)

beta = np.zeros(n + 1)

alpha[1] = -upper[0] / diag[0]

beta[1] = f[0] / diag[0]

**for** i **in** range(0, n):

denominator = lower[i] \* alpha[i] + diag[i]

alpha[i + 1] = -upper[i] / denominator

beta[i + 1] = (f[i] - lower[i] \* beta[i]) / denominator

u = np.zeros(n)

u[n - 1] = beta[n]

**for** i **in** range(n - 2, -1, -1):

u[i] = alpha[i + 1] \* u[i + 1] + beta[i + 1]

**return** u

**def** generate\_for\_t(H1, H2, t, iters, detector\_height, I):

c\_tmp = I[t][-1]

ds = 0.001

Ns = 0

detector\_x = H1 / 2

detector\_y = H2 / 2

**for** \_ **in** range(iters):

r\_x, r\_y = random.uniform(0, 1) \* H1, random.uniform(0, 1) \* H2

d = math.sqrt((detector\_x-r\_x)\*\*2+(detector\_y-r\_y)\*\*2+(detector\_height)\*\*2)

Ns += c\_tmp \* k / (4 \* np.pi \* d\*\*2) \* (H1 \* H2 / iters)

**return** Ns

I = implicit(h\_i, tau\_i, N\_i, M\_i)

NNN = []

**for** t **in** range(1000):

NNN.append(generate\_for\_t(1, 5, t, 10000, 10, I))

plt.plot([t **for** t **in** range(1000)], NNN)

plt.xlabel("t, c")

plt.ylabel("J, моль/мкм²•с")

plt.show()

*#plot*

x\_i = np.linspace(0, l, M\_i)

t\_i = np.linspace(0, Tf, N\_i)

X\_i, T\_i = np.meshgrid(x\_i, t\_i)

graphic(x\_i, t\_i, I)

fig2 = plt.figure(1, figsize=[11, 10])

fig2.suptitle('Implicit', x=0.45, y=0.98)

ax5 = fig2.add\_subplot(221, projection='3d')

ax5.plot\_surface(T\_i, X\_i, I, rcount=1, color='blue', alpha=0.3)

ax5.set\_xlabel('t, ч')

ax5.set\_ylabel('h, мкм')

ax5.set\_zlabel('C(x,t)')

ax5.set\_zlim([0, 3])

ax5.view\_init(25, 55)

ax6 = fig2.add\_subplot(222)

ax6.plot(x\_i, I[10], 'k')

ax6.set\_xlabel('t, ч')

ax6.set\_ylabel('C(x,10)')

ax6.set\_ylim([0, 3])

ax6.grid()

ax7 = fig2.add\_subplot(223)

ax7.plot(x\_i, I[100], 'k')

ax7.set\_xlabel('t, ч')

ax7.set\_ylabel('C(x,100)')

ax7.set\_ylim([0, 3])

ax7.grid()

ax8 = fig2.add\_subplot(224)

ax8.plot(x\_i, I[999], 'k')

ax8.set\_xlabel('t, ч')

ax8.set\_ylabel('C(x,1000)')

ax8.set\_ylim([0, 3])

ax8.grid()

fig2.tight\_layout()

fig2.savefig('result(implicit).png', dpi=750)

plt.show()

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации**

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение**

**высшего образования**

**«Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана**

**(национальный исследовательский университет)»**

**(МГТУ им. Н.Э. Баумана)**

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

(Индекс)

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

(И.О.Фамилия)

« \_\_\_\_\_ » \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ 20 \_\_\_\_ г.

**ЗАДАНИЕ**

**на выполнение курсовой работы**

по дисциплине \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ «Вычислительная физика»\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Студент группы \_\_\_\_\_ФН4-81Б\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_Коберник Татьяна Николаевна\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

(Фамилия, имя, отчество)

Тема курсовой работы \_«Расчет пространственно-временного распределения концентрации растворителя в тонком слое краски»\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Направленность КР (учебная, исследовательская, практическая, производственная, др.)

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_учебная\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Источник тематики (кафедра, предприятие, НИР) \_\_\_\_\_кафедра\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

График выполнения работы: 25% к \_\_\_ нед., 50% к \_\_\_ нед., 75% к \_\_ нед., 100% к \_\_\_ нед.

***Задание*** \_\_\_Решить нелинейное уравнение диффузии с помощью вычислительных методов\_

***Оформление курсовой работы:***

Расчетно-пояснительная записка на \_\_\_19\_\_ листах формата А4.

Дата выдачи задания « \_\_\_ » \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

**Руководитель курсовой работы**  \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

(Подпись, дата) (И.О.Фамилия)

**Студент \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_**

(Подпись, дата) (И.О.Фамилия)

Примечание: Задание оформляется в двух экземплярах: один выдается студенту, второй хранится на кафедре.