

Теплопроводность и детерминированное горение.

Этап 4

Групповой проект

Студенты:

Тагиев Б.А.

Чекалова Л.Р.

Сергеев Т.С.

Саттарова В.В.

Прокошев Н.Е.

Тарусов А.С.

Группа: НФИбд-02-20

2023

Актуальность

Объект и предмет исследования

- Повсеместное использование процессов горения
- Необходимость разработки правил противопожарной безопасности
- Необходимость минимизации ущерба, наносимого горением окружающей среде
- Горение как сложный процесс
- Решение уравнения теплопроводности с помощью явной и неявной разностной схемы
- Изменение параметров горения

Задачи

- Решить одномерное уравнение теплопроводности с помощью явной разностной схемы
- Решить одномерное уравнение теплопроводности с помощью неявной разностной схемы
- Визуализировать теоретическое решение уравнения:

$$T(x, t) = T_0 + \frac{Q_0}{Q} \frac{1}{\sqrt{4\pi\chi t}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\chi t}}$$

- Добавить химическую реакцию в уравнение теплопроводности
- Построить график скорости горения

Уравнения

- Безразмерная температура $\tilde{T} = \frac{cT}{Q}$
- Безразмерная энергия активации $\tilde{E} = \frac{cE}{RQ}$
- Уравнение теплопроводности $c\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - Q\rho \frac{\partial N}{\partial t}$
- Закон Аррениуса для реакции первого порядка для скорости химической реакции $\frac{\partial N}{\partial t} = -\frac{N}{\tau} e^{-\frac{E}{T}}$
- Система уравнений для описания процесса:
$$\begin{cases} \frac{\partial T}{\partial t} = \chi \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \frac{\partial N}{\partial t} \\ \frac{\partial N}{\partial t} = -\frac{N}{\tau} e^{-\frac{E}{T}} \end{cases}$$
- $\chi = \frac{\kappa}{c\rho}$ — коэффициент температуропроводности
- Одномерное уравнение теплопроводности без химических реакций $\frac{\partial T}{\partial t} = \chi \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$

Примечание: знак ~ для безразмерных величин \tilde{T} и \tilde{E} в системе уравнений опущен

Явная и неявная схема

Явная схема

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

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

$$\hat{N}_i = N_i - \Delta N_i, \text{ где } i = 1, 2, \dots, n.$$

Неявная схема Кранка-Николсон

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

$$\text{где } i = 1, 2, \dots, n$$

Код

```
using Plots
using DifferentialEquations

δ(x) = x == 0 ? 0.5 : x > 0 ? 1 : 0 # дельта-функция с использованием тернарного оператора
startcond = x-> δ(x - 0.35) - δ(x - 0.65) # начальное условие
bordrcond = x-> 0. # условие на границе

Nx = 150
Nt = 150
tlimt = 1.0

dx = 1 / Nx
dt = tlimt / Nt

x = [i for i in range(0, length = Nx, step = dx)] # один из способов задать массив с помощью цикла
t = [i for i in range(0, length = Nt, step = dt)]

U = zeros(Nx, Nt)
U[:, 1] = startcond.(x)
U[1, :] = U[Nt, :] = bordrcond.(t)
```

```
for j = 1:Nt-1, i = 2:Nx-1
    χ = 0.003
    h = dx
    U[i, j + 1] = U[i, j] + (χ*dt / h ^ 2)*(U[i - 1, j] - 2 * U[i, j] + U[i + 1, j])
end
```

Явная схема

Неявная схема

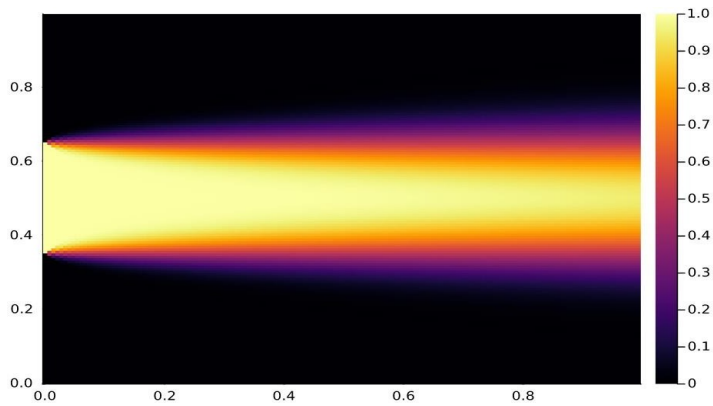
```
for j = 1:Nt - 1, i = 2:Nx - 1
    χ = 0.0001
    h = dx
    U[i, j + 1] = U[i, j] + (χ*dt / h ^ 2 / 2) * (U[i - 1, j + 1] - 2 * U[i, j + 1] + U[i + 1, j + 1])
    U[i, j + 1] += (χ*dt / h ^ 2 / 2) * (U[i - 1, j] - 2 * U[i, j] + U[i + 1, j])
end
```

```
p11 = plot(heatmap(t, x, U))
p12 = plot(t, x, U)

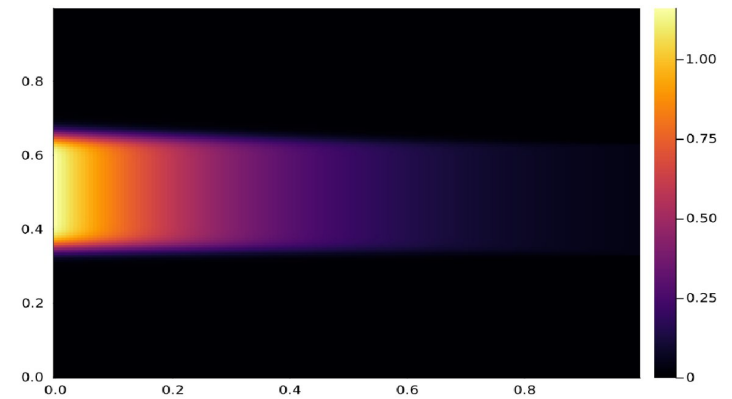
savefig(p11, "out/project/task_1_1.png")
savefig(p12, "out/project/task_1_2.png")
```

Визуализация

Для явной схемы:



Для неявной схемы:



Тепловая карта распространения температуры

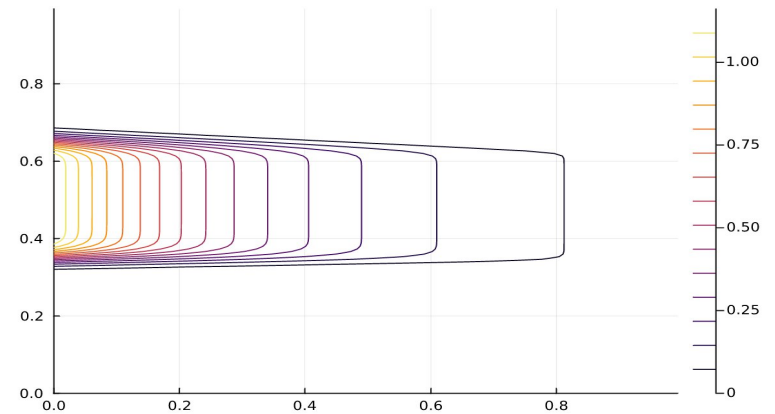
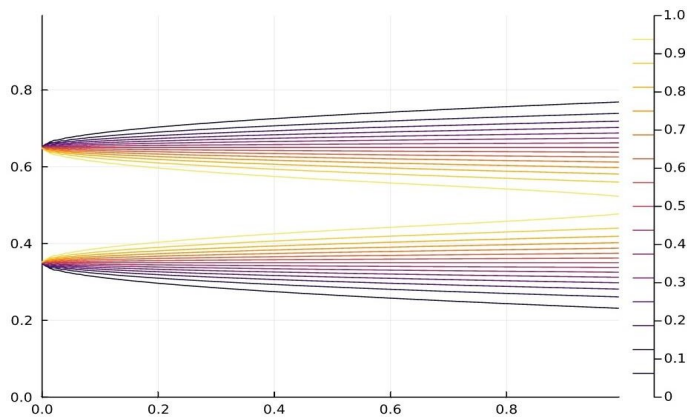


График распространения температуры

Химическая реакция

Параметры горения

```
χ = 0.0005
h = dx
tau = 0.1
E = 5
N[1] = 1
U_ = zeros(150)
for i = 2:149
    for j = 1:149
        dN = -N[i - 1] / tau*dt*exp(-E / U[i, j])
        U[i, j + 1] = U[i, j] + (χ*dt / h ^ 2 / 2) * (U[i - 1, j + 1] - 2 * U[i, j + 1] + U[i + 1, j + 1]) + dN
        U[i, j + 1] += (χ*dt / h ^ 2 / 2) * (U[i - 1, j] - 2 * U[i, j] + U[i + 1, j])
        if j == 145
            N[i] = N[i - 1] + dN # доля прореагировавшего вещества
            U_[i] = U[i, j + 1]
        end
    end
end
N[150] = N[149]

U = zeros(Nx, Nt)
DNN = zeros(Nx)
U[:, 1] = startcond.(x)
U[1, :] = bordrcond.(t)

N_ = zeros(Nx, Nt)
vt = zeros(Nt)
N = [i for i in range(1, stop=0, step = -dx)]

for i=1:Nx
    N_[1, i] = 1
end

tau = 1.8
E = 10.8

I = 0
XX = 0
for i = 1:Nx-1
    if round((N[i]+N[i+1])/2, digits=1) == 0.5
        global XX = x[i]
        global I = i
    end
end

for j = 1:Nt-1
    dN = -N[I]/tau*dt*exp(-E/U[I, j])
    vt[j] = -dN / dt
end
```


Визуализация

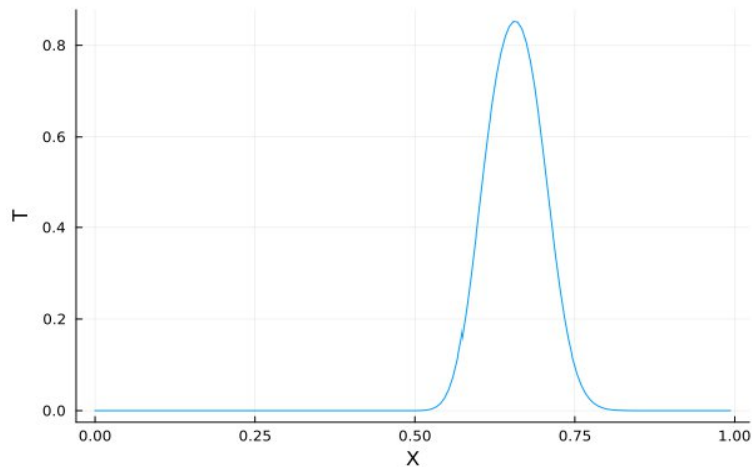


График изменения
температуры

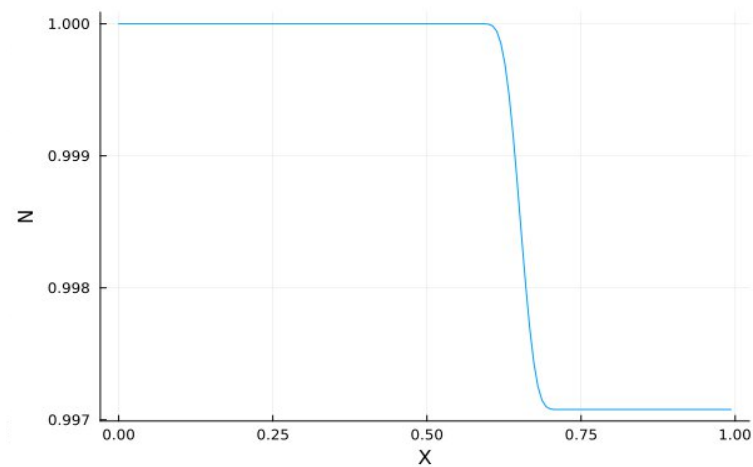


График изменения
количества вещества

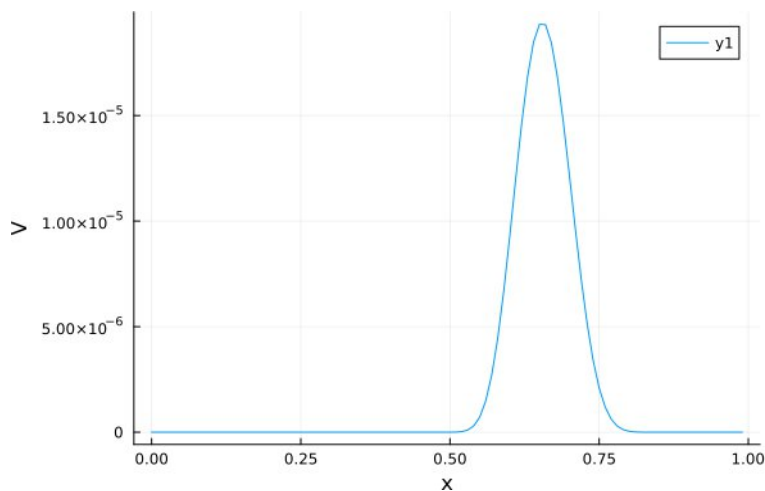


График изменения
скорости горения

Теоретическое решение

- Программа на Julia:

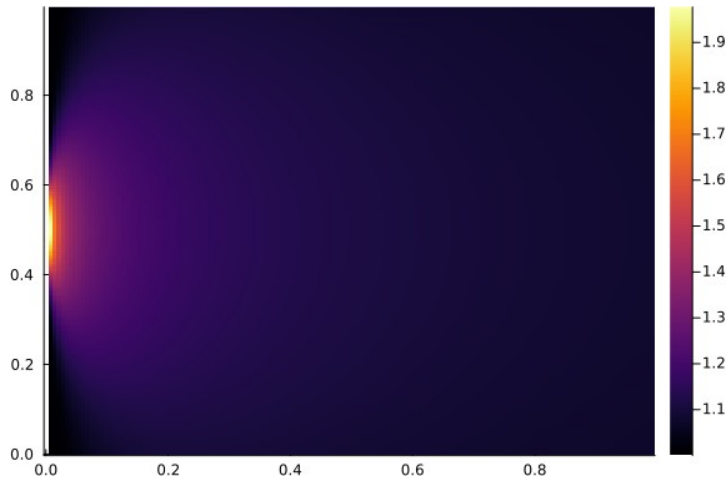
```
Q = 5
Q0 = 1
x0 = 0.5
χ = 0.5
T = zeros(Nx, Nt)
for x_i = 1:length(x)
    for t_i = 1:length(t)
        T[x_i, t_i] = 1 + Q0/Q * 1/sqrt(4*pi*χ*t[t_i])*exp(-(x[x_i]-x0)^2/(4*χ*t[t_i]))
    end
end
end
```

- Программа на Modelica

```
1 model task
2   Real x[150] = {i/150 for i in 1:150};
3   Real x0 = 0.5;
4   Real Chi = 0.0001;
5   Real pi = 3.1416;
6   Real Q0 = 1;
7   Real Q = 5;
8   Real T[150];
9   equation
10  algorithm
11    for i in 1:size(x, 1) loop
12      if time > 0 then
13        T[i] := 1 + Q0/Q*1/sqrt(4*pi*Chi*time)*Modelica.Math.exp(-(x[i]-x0)^2/(4*Chi*time));
14      end if;
15    end for;
16  end task;
```

Визуализация

Julia



Тепловая карта

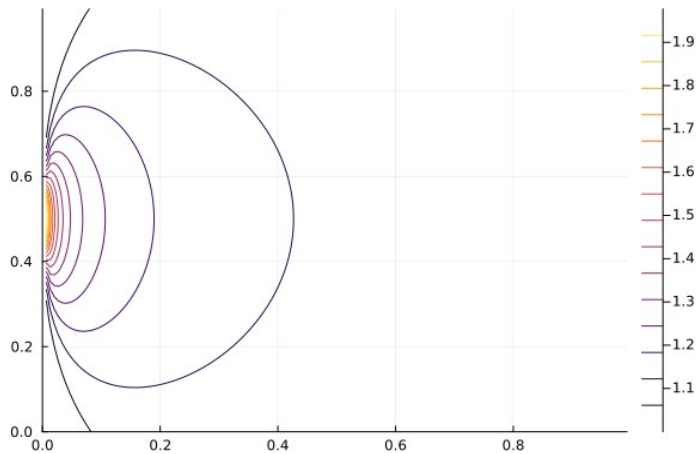


График температуры

Modelica

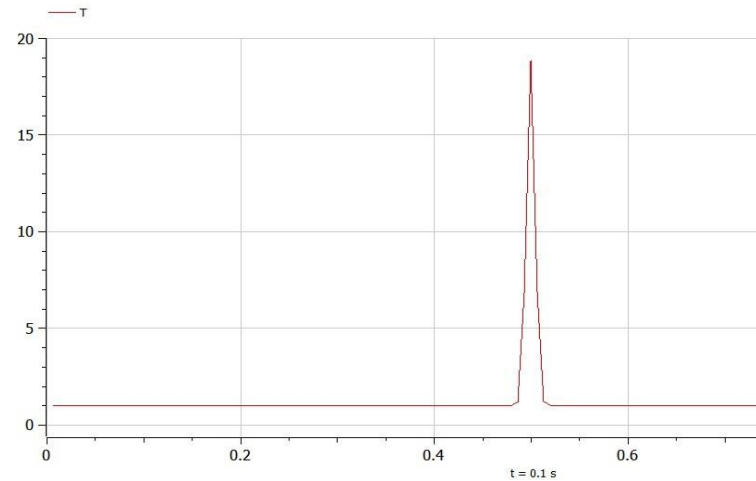


График температуры при $t = 0.1$

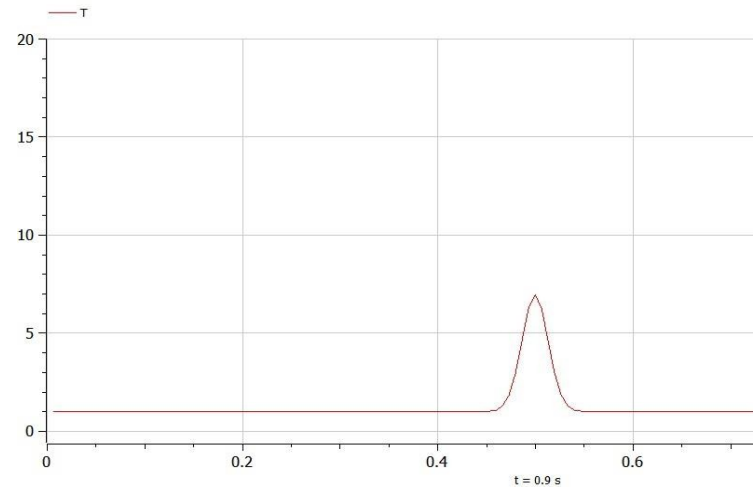


График температуры при $t = 0.9$

Выводы

- Горение - сложный процесс
- Решили уравнения теплопроводности с помощью явной и неявной разностной схемы
- Рассмотрели уравнение теплопроводности без химической реакции и с химической реакцией
- Рассмотрели изменение параметров горения: температуры, количества вещества, скорость
- Визуализировали полученные результаты

Список литературы

- 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.
- Борисова О. А., Лидский Б. В. Устойчивость горения безгазовых систем по отношению к двумерным возмущениям // Химическая физика. 1986. Т. 5, № 6. С. 822–830.
- Максимов Ю. М., Мержанов А. Г. Режимы неустойчивого горения безгазовых систем // Физика горения и взрыва. 1979. Т. 5, № 6. С. 51–58.