

# РОССИЙСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ДРУЖБЫ НАРОДОВ

Факультет физико-математических и естественных наук

## Теплопроводность и детерминированное горение. Этап 4 групповой проект

Дисциплина : Математическое моделирование

Студенты: Тагиев Б.А.

Чекалова Л.Р.

Сергеев Т.С.

Саттарова В.В.

Прокошев Н.Е.

Тарусов А.С.

Группа: НФИбд-02-20

МОСКВА

2023 г.

## Оглавление

Введение.....	3
Актуальность.....	3
Объект и предмет исследования.....	3
Задачи.....	3
Математические сведения.....	4
Уравнения.....	4
Явная и неявная разностные схемы.....	5
Шаблоны разностных схем.....	5
Реализация.....	7
Уравнение теплопроводности без химической реакции для явной и неявной разностной схемы.....	7
Химическая реакция.....	11
Теоретическое решение.....	13
Выводы.....	15
Список литературы.....	15

## Введение

### Актуальность

Актуальность темы выражается в повсеместном использовании процессов горения, например, в быту и промышленности. В связи с этим возникает потребность в изучении этих процессов для разработки и усовершенствования системы правил пожарной безопасности, а также для создания методов минимизации ущерба, наносимого горением окружающей среде.

### Объект и предмет исследования

Объектом исследования является горение как сложный процесс. Предметами исследования являются решение уравнения теплопроводности с помощью явной и неявной разностной схемы, а также рассмотрение процесса горения при изменении параметров.

### Задачи

Перед собой мы ставили следующие задачи:

- Решение одномерного уравнения теплопроводности с использованием явной разностной схемы
- Решение одномерного уравнения теплопроводности с использованием неявной разностной схемы Кранка-Николсон
- Визуализация теоретического решения уравнения теплопроводности на неограниченной прямой в случае, если в начальный момент в точке  $x = x_0$  мгновенно выделяется количество тепла  $Q_0$

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

- Добавление химической реакции в уравнение теплопроводности
- Построение графика скорости горения

## Математические сведения

### Уравнения

Рассмотрим среду с учетом теплопроводности, в которой возможна экзотермическая (с выделением тепла) химическая реакция, численно решая некоторую систему дифференциальных уравнений.

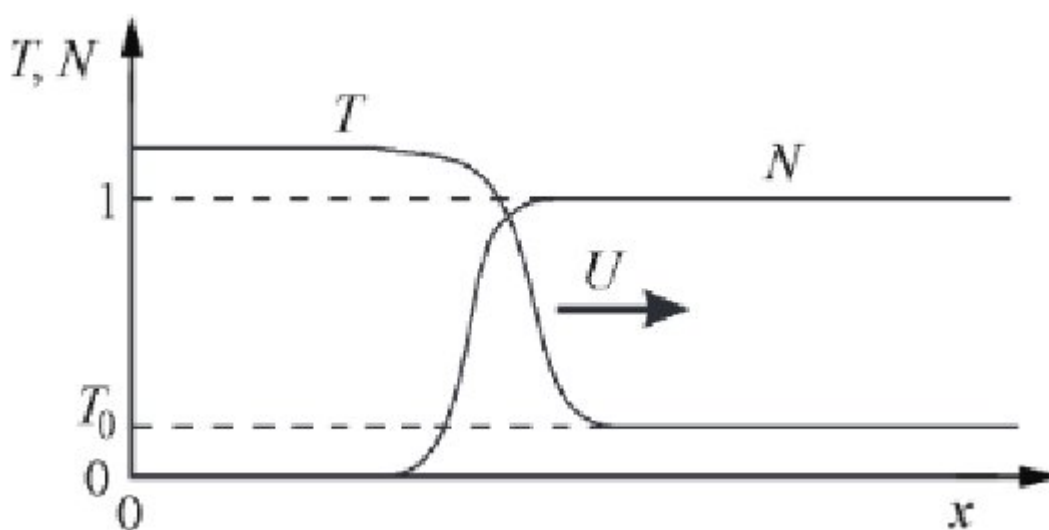
Допустим, что скорость химической реакции будет расти при увеличении температуры. В такой системе допускается переход тепла из разогретой области в новые слои, тем самым ускоряя в них реакцию. Некоторые условия позволяют процессу распространяться неограниченно далеко. В первом приближении для моделирования волны горения ограничимся системой с постоянными коэффициентами теплоемкости и теплопроводности. Будем моделировать химическую реакцию простейшим способом: вещество вида  $A$  переходит в  $B$  экзотермически. Воспользуемся законом Аррениуса для реакции первого порядка для скорости химической реакции

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

Где  $N$  – доля вещества, которое еще не прореагировало из  $A$ , меняющаяся от 1 – исходное вещество, до 0 – все вещество прореагировало,  $E$  – энергия активации химической реакции,  $\tau$  – характерное время перераспределения энергии,  $T$  – температура в данной точке. В одномерном случае надо добавить еще уравнение теплопроводности с дополнительным членом, отвечающим за энергосодержание:

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

Где  $\rho$  – плотность,  $c$  – удельная теплоемкость,  $k$  – коэффициент теплопроводности,  $Q$  – удельное энергосодержание при химической реакции. В этой системе уравнений возможен режим в виде самостоятельно распространяющейся волны горения. На рисунке 1 показан пример волны, распространяющейся вдоль  $x$  со скоростью  $U$  ( $T_0$  – температура перед волной горения).



Поделим уравнение теплопроводности  $\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \rho Q \frac{\partial N}{\partial t}$  на  $Q\rho$  и перейдем к безразмерной температуре  $\tilde{T} = \frac{cT}{Q}$  и энергии активации  $\tilde{E} = \frac{cE}{RQ}$  и получаем уравнение Аррениуса для реакции первого порядка  $\frac{\partial N}{\partial t} = -\frac{N}{\tau} e^{-E/RT}$ .

Получив систему уравнений 
$$\begin{cases} \frac{\partial T}{\partial t} = \chi \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \frac{\partial N}{\partial t} \\ \frac{\partial N}{\partial t} = -\frac{N}{\tau} e^{-\frac{E}{T}} \end{cases}, \text{ где } \chi = \frac{\kappa}{c\rho} - \text{коэффициент}$$

температуры теплопроводности. Знак  $\sim$  для безразмерных  $T$  и  $E$  опущен для упрощения восприятия.

Безразмерные температура и энергия активации теперь измеряются в энергетических единицах, равных энергии, выделяющейся в узле при полном выгорании вещества.

Таким образом, из закона сохранения энергии следует, что в волне горения температура всегда должна подниматься на единицу от начальной температуры среды  $T_0$ . Получившаяся система более наглядно и просто описывает явление горения, и в дальнейшем мы будем использовать именно ее.

### Явная и неявная разностные схемы

Явная разностная схема для уравнения теплопроводности выглядит следующим образом

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

$$\begin{aligned} \hat{T}_i &= T_i + \frac{\chi \Delta t}{h^2} (T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}) - \Delta N_i \\ \hat{N}_i &= N_i - \Delta N_i \quad \text{где } n = 1, 2, \dots, n \end{aligned}$$

Используя эту разностную схему, можно численно решать изначальную систему дифференциальных уравнений для безразмерных величин.

Кроме явных разностных схем существуют также неявные разностные схемы для уравнения теплопроводности, уравнение Кранка – Николсон

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

где  $i = 1, 2, \dots, n$

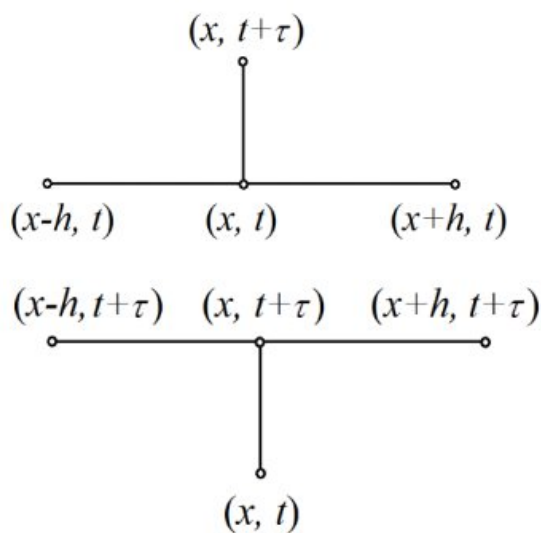
Важными критериями, которые учитываются при выборе, являются следующие:

1. количество переменных
2. порядок аппроксимации
3. устойчивость схемы.

У неявной разностной схемы больше преимуществ, чем у явной, а именно, более высокий порядок аппроксимации по времени и всегда устойчива, нет ограничений на шаг аппроксимации.

### Шаблоны разностных схем

Рассмотрим три шаблона следующих схем: явной разностной схемы и двух неявных разностных схем, одна из которых называется схемой Кранка – Николсон.



$$\frac{\hat{T}_i - T_i}{\Delta t} = \chi \frac{(\delta^2 T)_i}{h^2}$$

$$\varepsilon = O[\Delta t] + O[h^2]$$

явная схема,

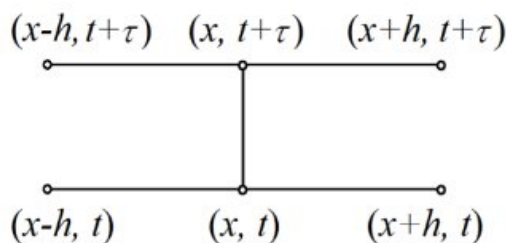
устойчива, если  $\chi \frac{\Delta t}{h^2} \leq \frac{1}{2}$

$$\frac{\hat{T}_i - T_i}{\Delta t} = \chi \frac{(\delta^2 \hat{T})_i}{h^2}$$

$$\varepsilon = O[\Delta t] + O[h^2]$$

неявная схема,

всегда устойчива



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

$$\varepsilon = O[(\Delta t)^2] + O[h^2]$$

неявная схема Кранка-Николсон,

всегда устойчива

На схемах по вертикали отражены изменения в слоях по времени, а по горизонтали – изменения в слоях по координате. В разностных уравнениях присутствует разностная аппроксимация второй производной:  $\delta^2 T = T_{i-1} - 2T_i + T_{i+1}$ . При разностной аппроксимации имеется также остаточный член, отражающий порядок аппроксимации по времени и координате. Порядок аппроксимации характеризует погрешность аппроксимации схемы и отражает ошибку численного решения.

Устойчивость разностной схемы означает, что малые возмущения  $\chi$  в начальных данных и правой части разностной схемы приводят к равномерно малому по  $t$  изменению решения.

По явной схеме видно, что в уравнении 1 неизвестная, аппроксимация по времени первого порядка, по координате второго порядка, а для устойчивости схемы необходимо, выполнение условия:  $\frac{\chi \Delta t}{h^2} \leq \frac{1}{2}$

По неявной схеме видно, что в уравнении 3 неизвестных, аппроксимация по времени первого порядка, по координате второго порядка, а также то, что она абсолютно устойчива, то есть не зависит от выбранного шага.

По неявной схеме Кранка – Николсон видно, что в уравнении 3 неизвестных, аппроксимация по времени второго порядка, по координате второго порядка, а также то, что она абсолютно устойчива.

В связи с этим для вычислений будет использована неявная схема Кранка – Николсон.

## Реализация

### Уравнение теплопроводности без химической реакции для явной и неявной разностной схемы

Напишем программу на Julia, которая решит уравнение теплопроводности с помощью явной разностной схемы. Воспользуемся дельта-функцией, чтобы задать начальные условия, а в цикле будем применять явную разностную схему для нахождения температуры на новом слое по времени на основе температуры в узлах текущего временного слоя.

```
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
tlimit = 1.0

dx = 1 / Nx
dt = tlimit / 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)]

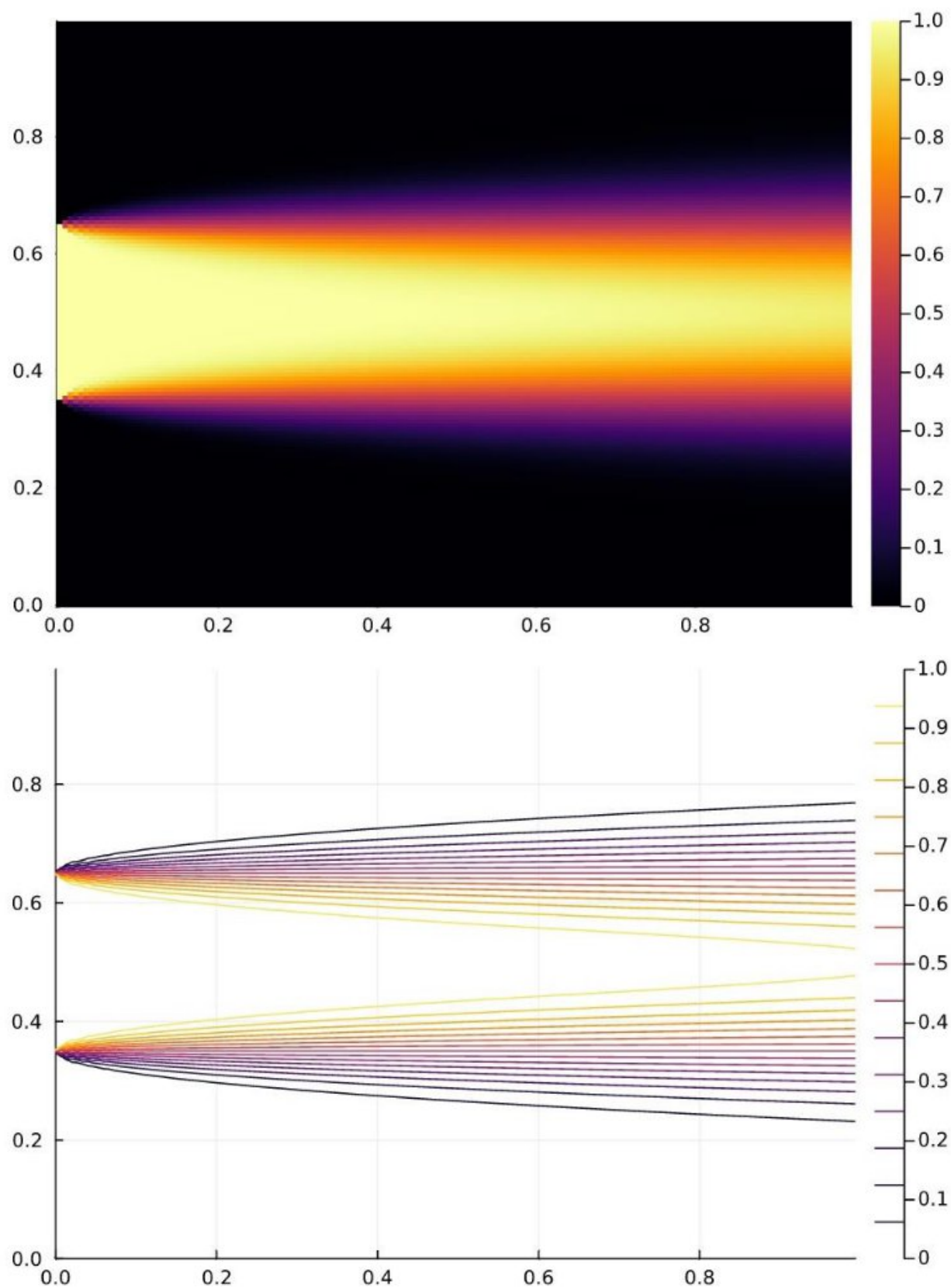
U = zeros(Nx, Nt)
U[:, 1] = startcond.(x)
U[1, :] = U[Nt, :] = bordrcond.(t)

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

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")
```

Выводим результаты в виде тепловой карты и графика распространения температуры.



Мы видим, что температура сначала высокая, а потом постепенно снижается.



Далее модифицируем программу, чтобы решать уравнение с помощью неявной разностной схемы Кранка-Николсон, то есть температура на новом временном слое вычисляется как на основе температуры в узлах нового временного слоя, так и на основе температуры в узлах текущего временного слоя.

```
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)]

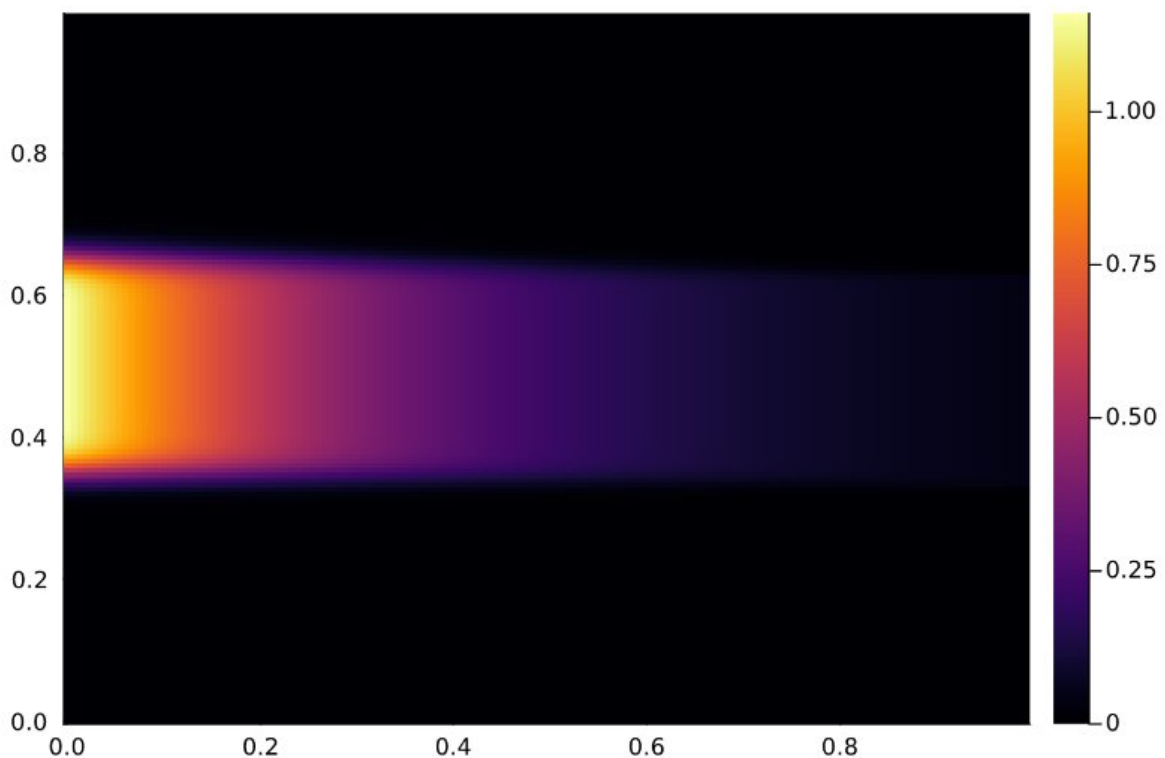
U = zeros(Nx, Nt)
U[:, 1] = startcond.(x)
U[1, :] = U[Nt, :] = bordrcond.(t)

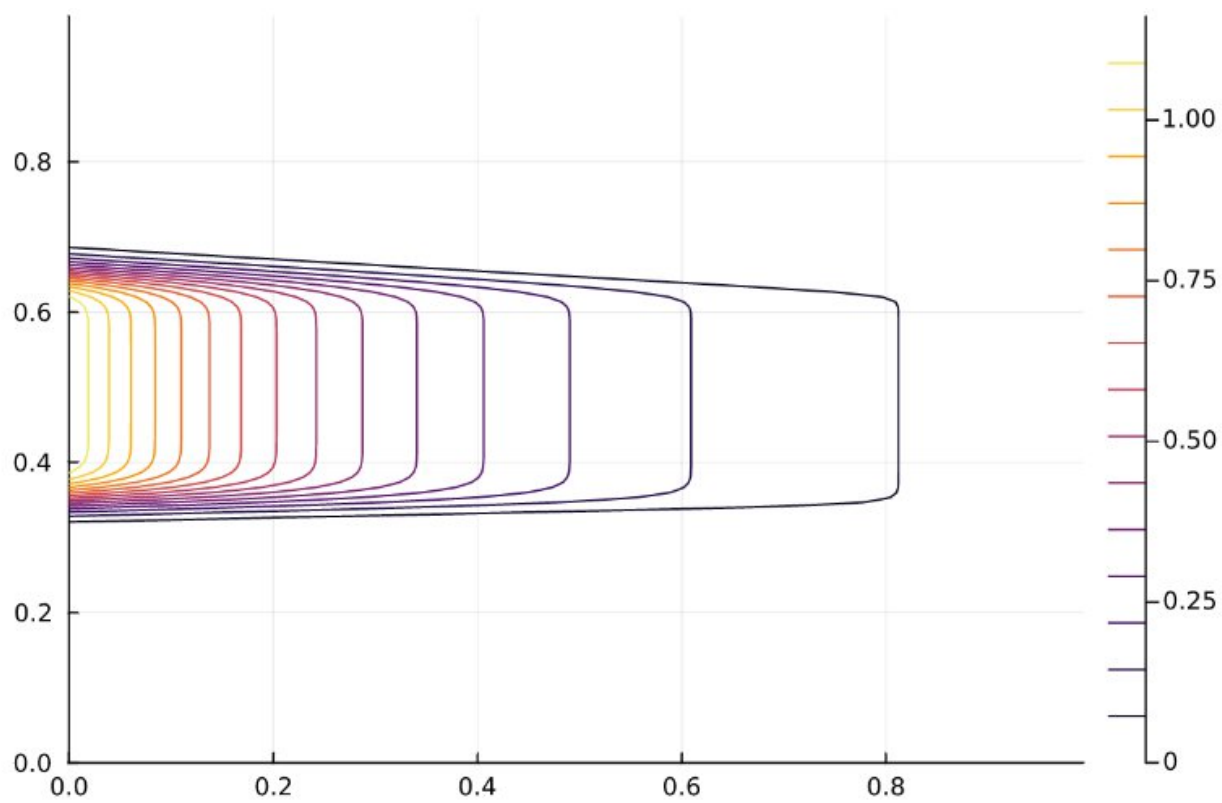
for j = 1:Nt - 1, i = 2:Nx - 1
    χ = 0.0001
    h = dx
    U[i, j + 1] = U[i, j] + (χ*dt / h ^ 2 / 2) * (U[i - 1, j + 1] - 2 * U[i, j + 1] + U[i + 1, j + 1])
    U[i, j + 1] += (χ*dt / h ^ 2 / 2) * (U[i - 1, j] - 2 * U[i, j] + U[i + 1, j])
end

print(U)
p = plot(heatmap(t, x, U))

savefig(p, "out/project/task_2.png")
```

Получаем тепловую карту и график распределения температуры.





Здесь мы наблюдаем постепенное понижение температуры так же, как и в явной схеме.

## Химическая реакция

Напишем программу, решающую уравнение теплопроводности с химической реакцией. Для этого мы добавим изменение температуры за счет энергосвободения в химических реакциях за шаг по времени ( $\Delta N_i$ , которое выводится из закона Аррениуса для реакции первого порядка).

```
using Plots
using DifferentialEquations

δ(x) = x == 0 ? 0.5 : x > 0 ? 1 : 0 # дельта-функция с использованием тернарного оператора
startcond = x-> δ(x - 0.45) - δ(x - 0.55) # начальное условие
bordrcond = x-> 0. # условие на границе

Nx = 150
Nt = 150
tlmt = 2.0 #20

dx = 1 / Nx
dt = tlmt / Nt

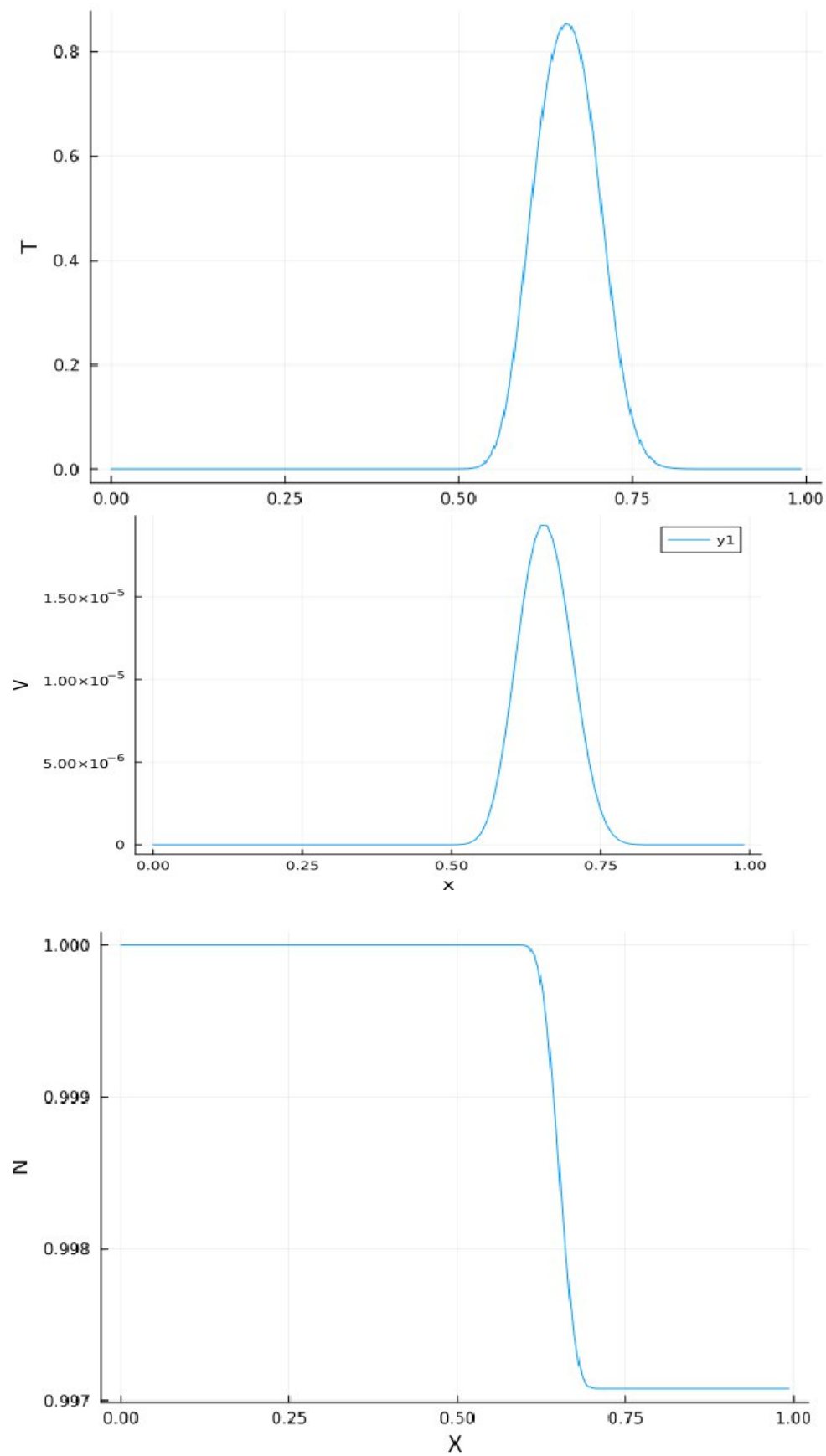
x = [i for i in range(0, length = Nx, step = dx)] # один из способов задать массив с помощью цикла
t = [i for i in range(0, length = Nt, step = dt)]

N = zeros(150)
U = zeros(Nx, Nt)
U[:, 1] = startcond.(x)
U[1, :] = U[Nt, :] = bordrcond.(t)

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]
p41 = plot(x, U_, xlabel = "X", ylabel = "T", legend=false)
p42 = plot(x, N, xlabel = "X", ylabel = "N", legend=false)
p43 = plot(heatmap(t, x, U))

savefig(p41, "out/project/task_4_U.png")
savefig(p42, "out/project/task_4_N.png")
```

Получим график изменения температуры и график изменения количества вещества. Первым у нас представлен график изменения температуры, после – график изменения скорости горения. На третьем графике представлен график изменения количества вещества.



Мы видим, как возрастает температура, одновременно с этим происходит уменьшение количества вещества. Потом температура снижается до нуля и вещество прекращает горение, его количество прекращает уменьшаться.

## Теоретическое решение

Напишем программу, описывающую теоретическое решение уравнения теплопроводности на неограниченной прямой для случая, когда в начальный момент в точке  $x = x_0$  мгновенно выделяется количество тепла  $Q_0$ . Такое решение имеет вид

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

```
using Plots
using DifferentialEquations

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)]

Q = 5
Q0 = 1
x0 = 0.5
chi = 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*chi*t[t_i])*exp(-(x[x_i]-x0)^2/(4*chi*t[t_i]))
    end
end

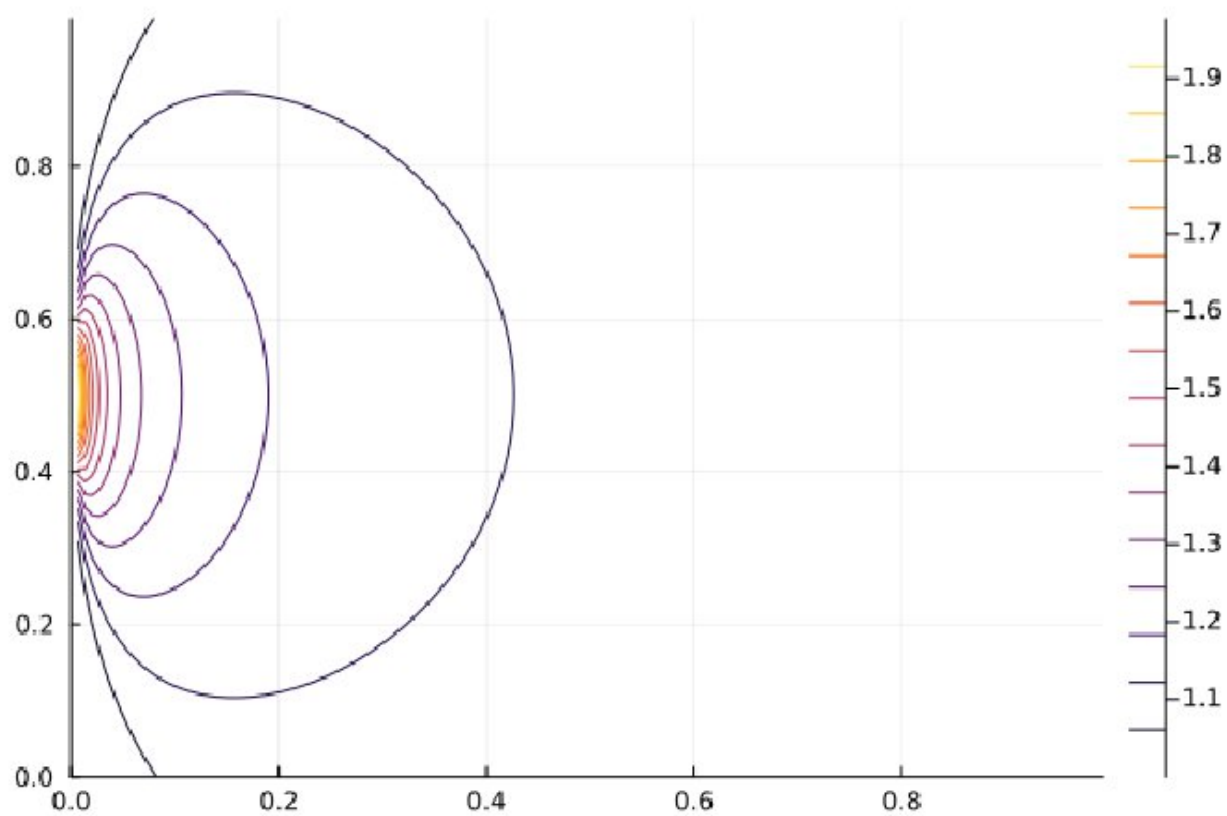
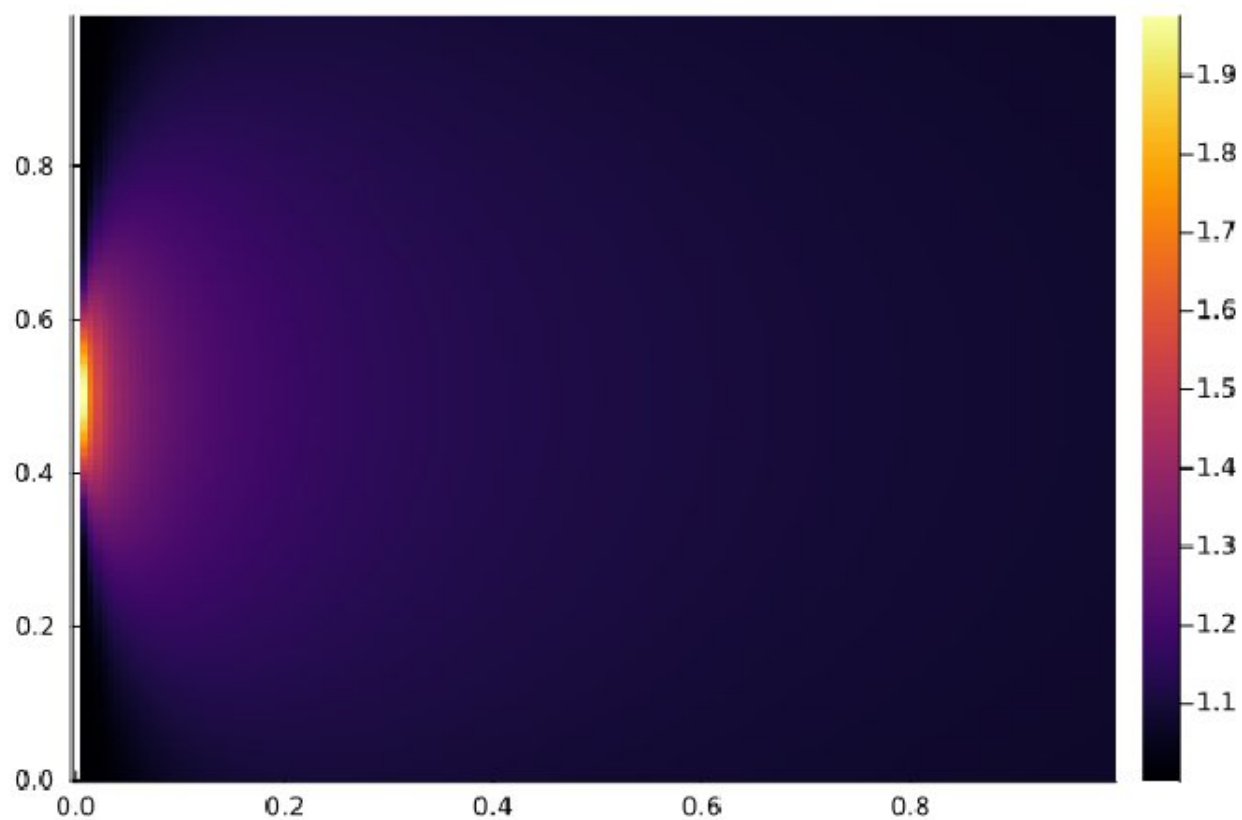
p31 = plot(heatmap(t, x, T))
p32 = plot(t, x, T)

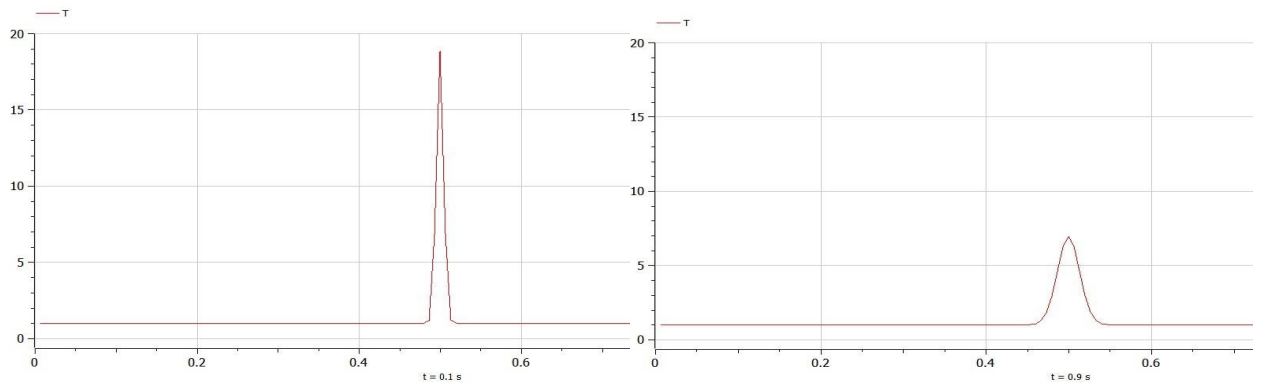
savefig(p31, "out/project/task_3_1.png")
savefig(p32, "out/project/task_3_2.png")
```

Также реализация 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;
```

Результат также представляем в виде тепловой карты и графика распределения температуры (графики получены из кода на Julia).





Последние 2 графика (реализованы на OpenModelica) у нас это в момент времени  $t = 0,1$  слева и  $t = 0,9$  справа. Из-за того, что в точке  $x_0$  мгновенно выделяется некоторое количество тепла, в начальный момент времени мы наблюдаем высокие температуры, которые затем начинают стремительно снижаться.

## Выводы

Мы выполнили все поставленные задачи, решили уравнение теплопроводности разными способами и визуализировали полученные результаты, отдельно рассмотрев изменения некоторых параметров, таких как температура, количество вещества, скорость.

## Список литературы

1. 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. // ISBN 978-5-94356-933-3
2. Борисова О. А., Лидский Б. В. Устойчивость горения безгазовых систем по отношению к двумерным возмущениям // Химическая физика. 1986. Т. 5, № 6. С. 822–830.
3. Максимов Ю. М., Мержанов А. Г. Режимы неустойчивого горения безгазовых систем // Физика горения и взрыва. 1979. Т. 5, № 6. С. 51–58.