

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 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.

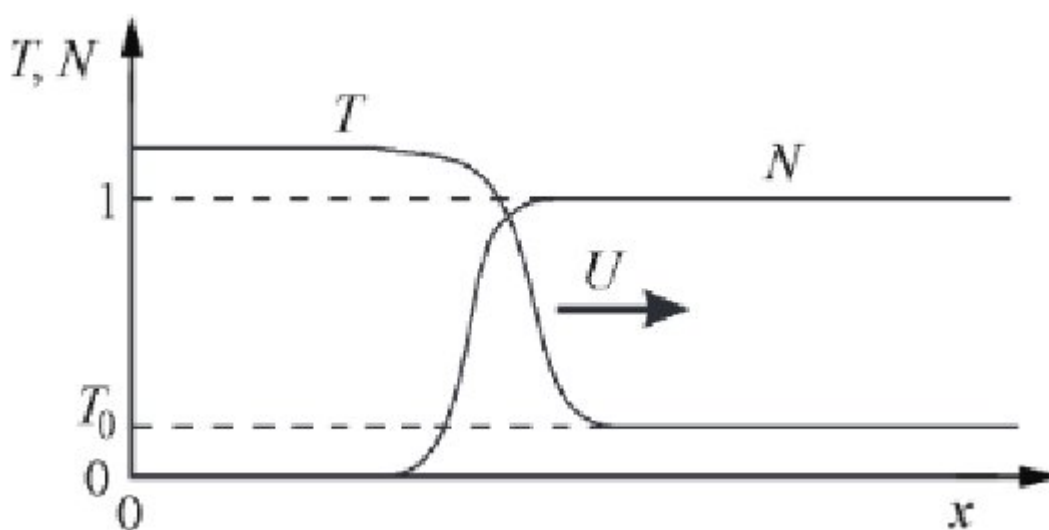
Допустим, что скорость химической реакции будет расти при увеличении температуры. В такой системе допускается переход тепла из разогретой области в новые слои, тем самым ускоряя в них реакцию. Некоторые условия позволяют процессу распространяться неограниченно далеко. В первом приближении для моделирования 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, τ – характерное время перераспределения энергии, T – температура в данной точке. В одномерном случае надо добавить еще уравнение теплопроводности с дополнительным членом, отвечающим за энергосвободное:

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

Где ρ – плотность, c – удельная теплоемкость, k – коэффициент теплопроводности, Q – удельное энергосвободное 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 $i = 1, 2, \dots, n$

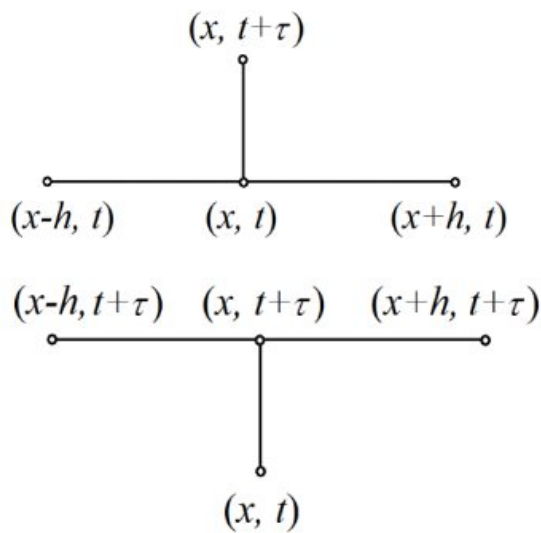
Важными критериями, которые учитываются при выборе, являются следующие:

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,

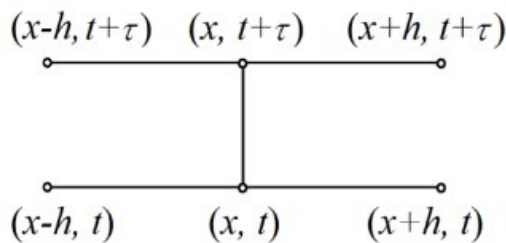
устойчива, если $\chi \frac{\Delta t}{h^2} \leq \frac{1}{2}$

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

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

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 x 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)]

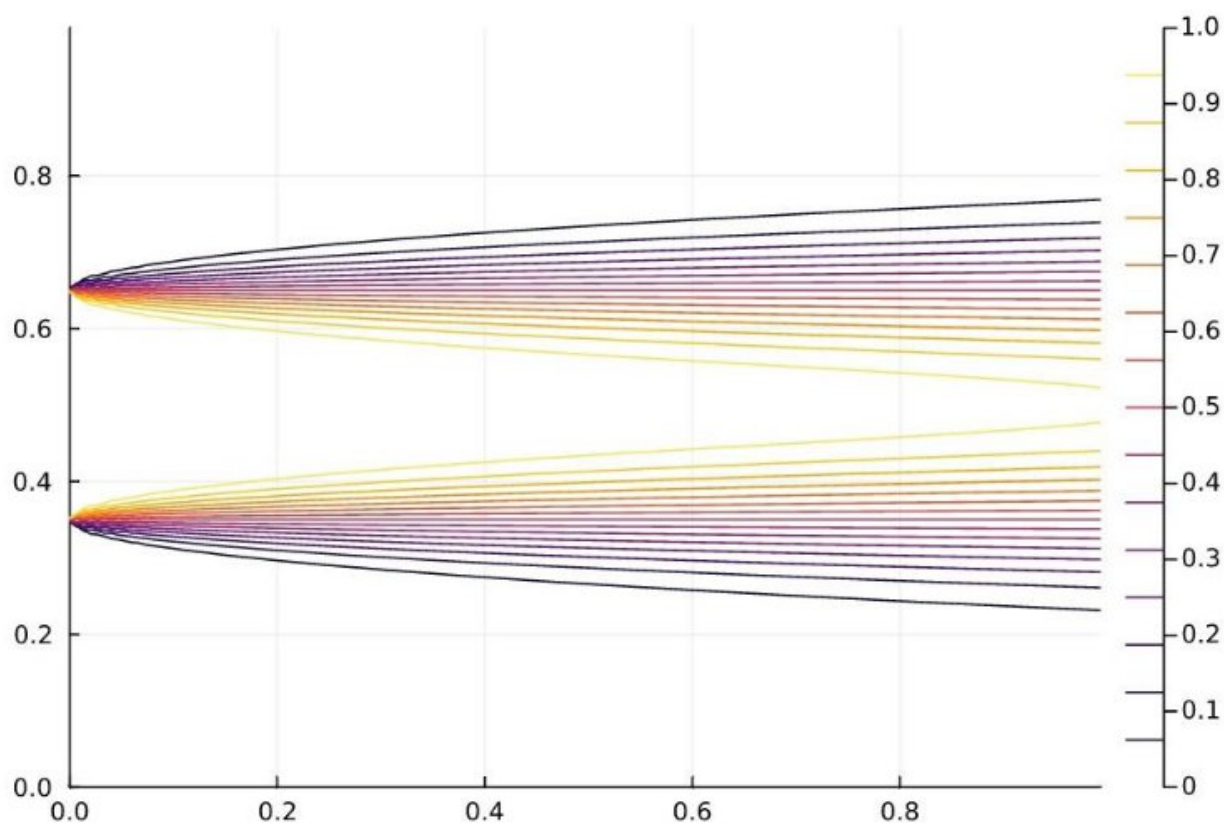
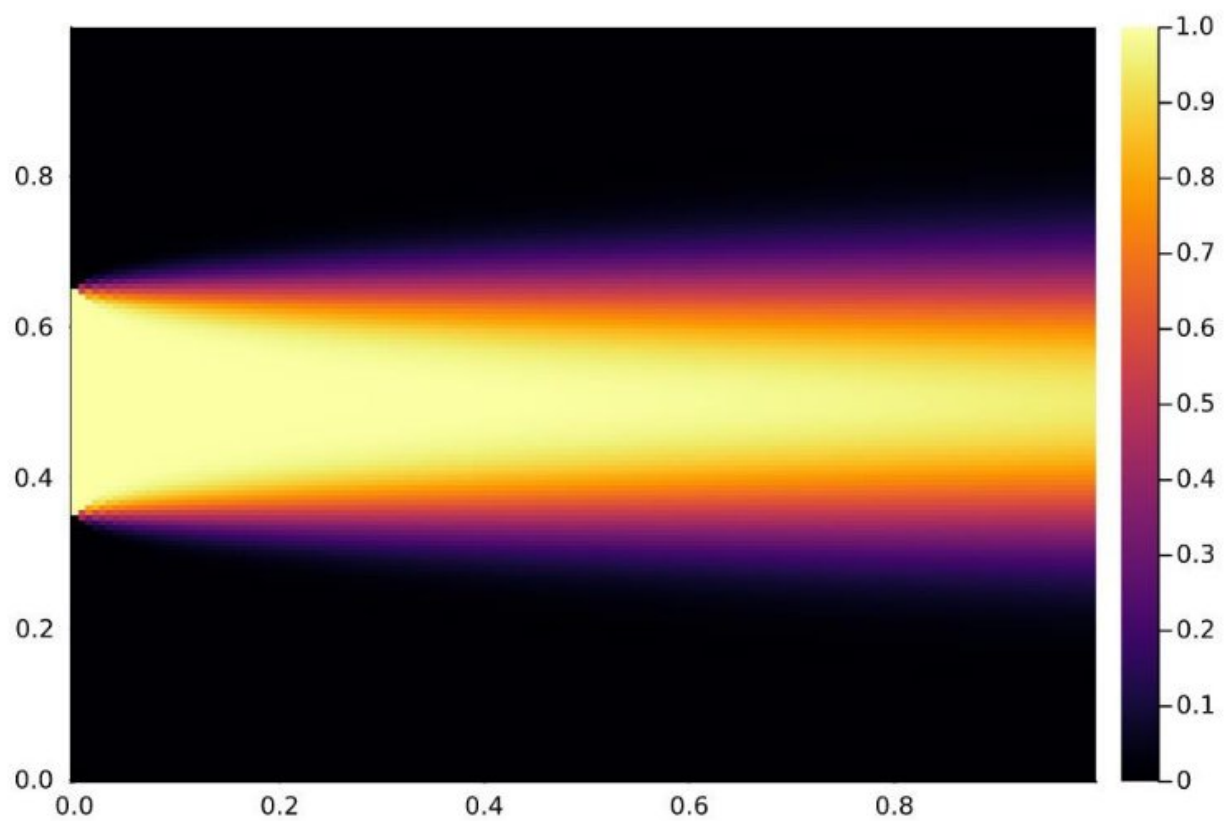
U = zeros(Nx, Nt)
U[:, 1] = startcond.(x)
U[1, :] = U[Nt, :] = bordrcond.(t)

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)]

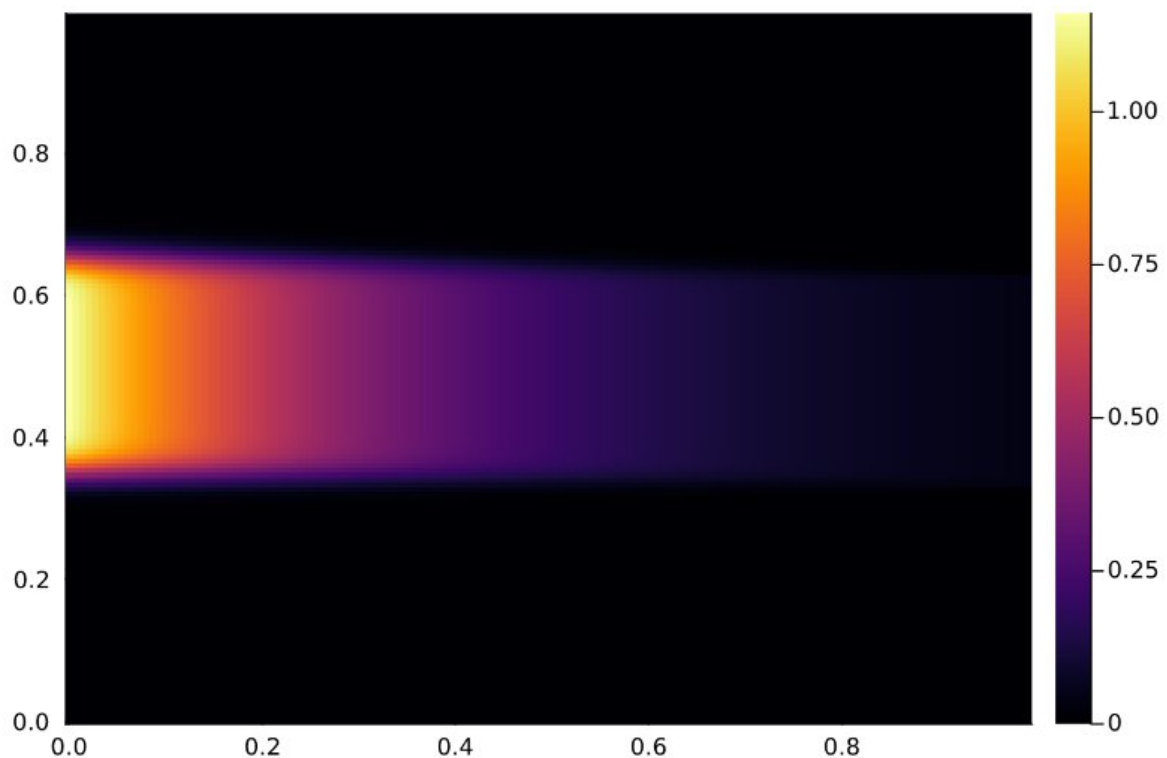
U = zeros(Nx, Nt)
U[:, 1] = startcond.(x)
U[1, :] = U[Nt, :] = bordrcond.(t)

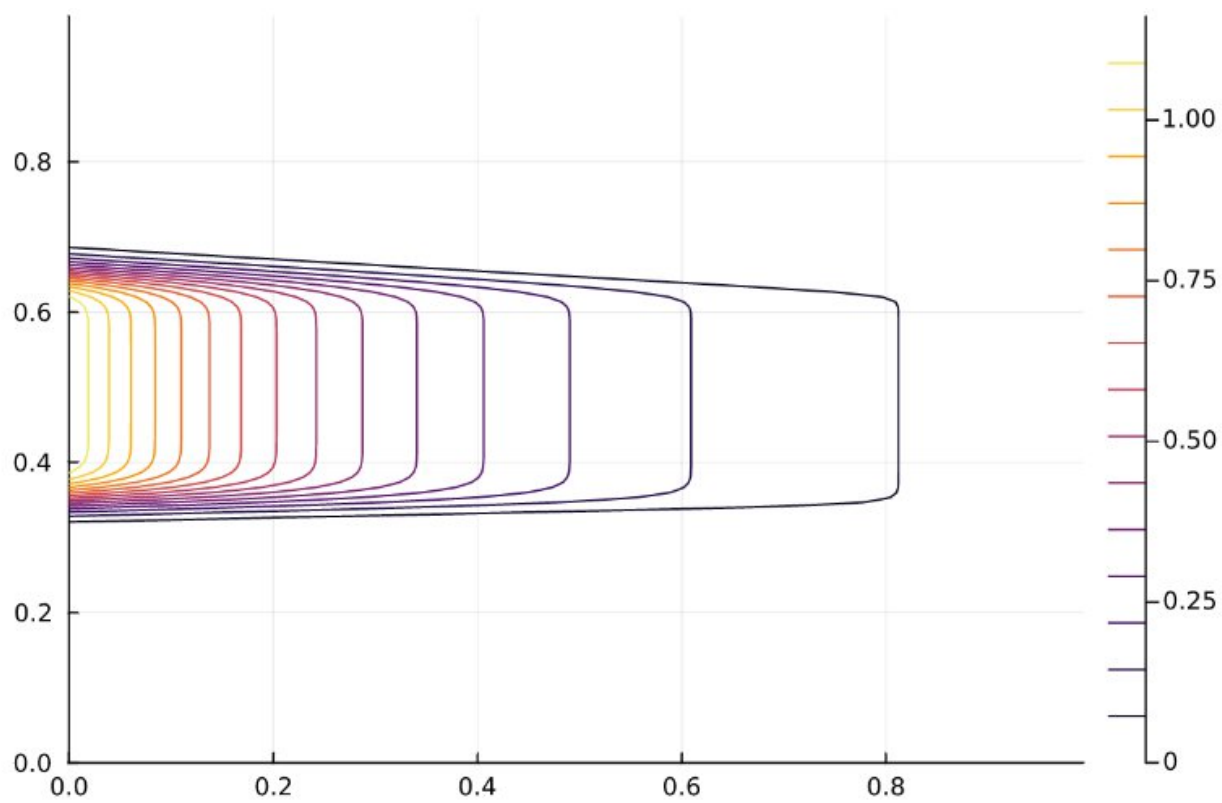
for j = 1:Nt - 1, i = 2:Nx - 1
    χ = 0.0001
    h = dx
    U[i, j + 1] = U[i, j] + (χ*dt / h ^ 2 / 2) * (U[i - 1, j + 1] - 2 * U[i, j + 1] + U[i + 1, j + 1])
    U[i, j + 1] += (χ*dt / h ^ 2 / 2) * (U[i - 1, j] - 2 * U[i, j] + U[i + 1, j])
end

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 энергосыделения в химических реакциях за шаг по времени (ΔN_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

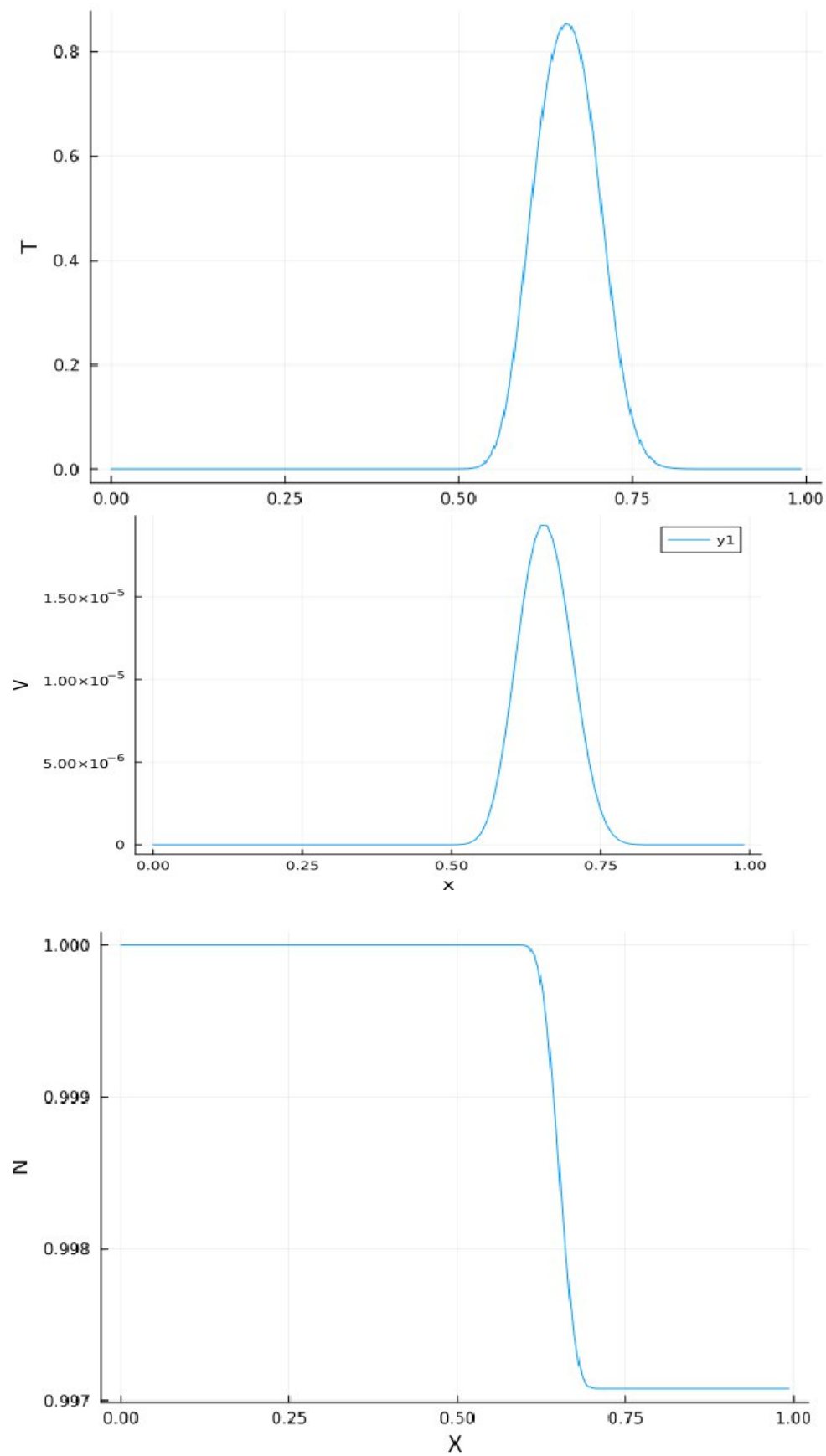
x = [i for i in range(0, length = Nx, step = dx)] # один из способов задать массив с помощью цикла
t = [i for i in range(0, length = Nt, step = dt)]

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
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

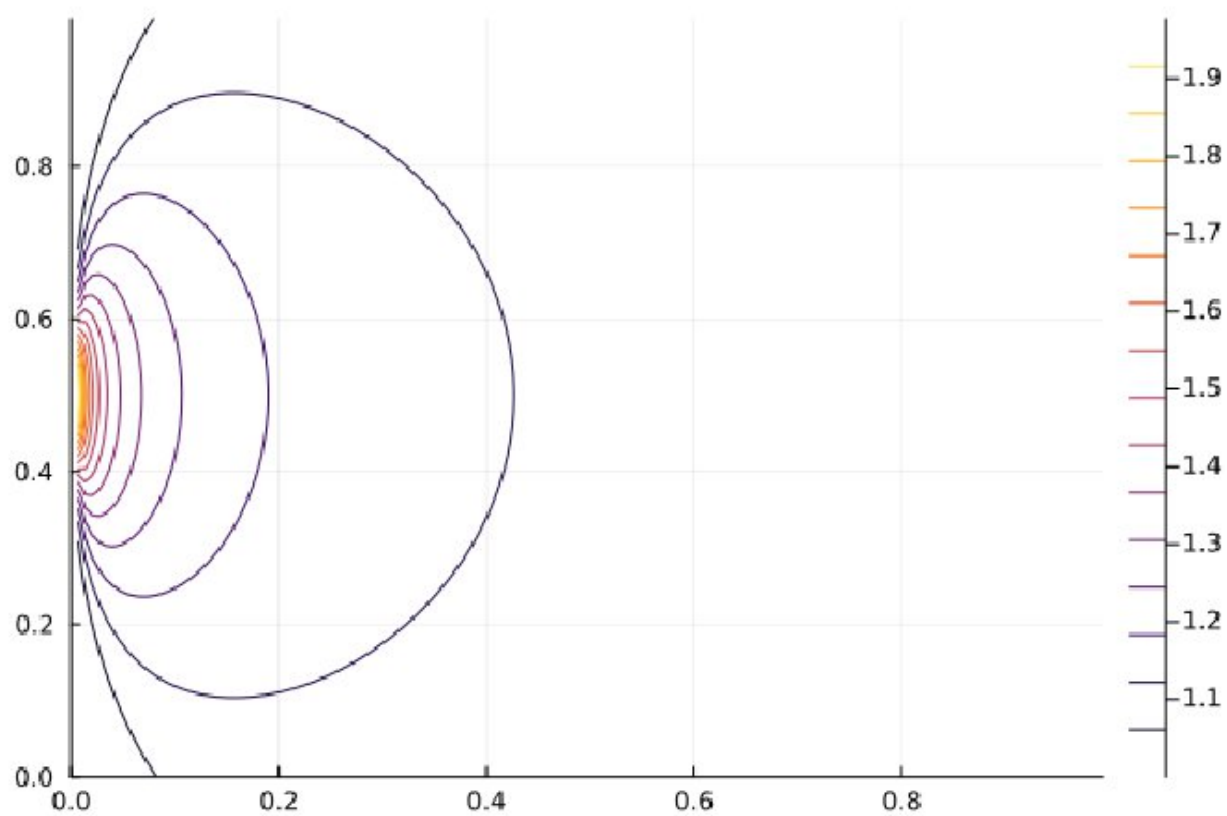
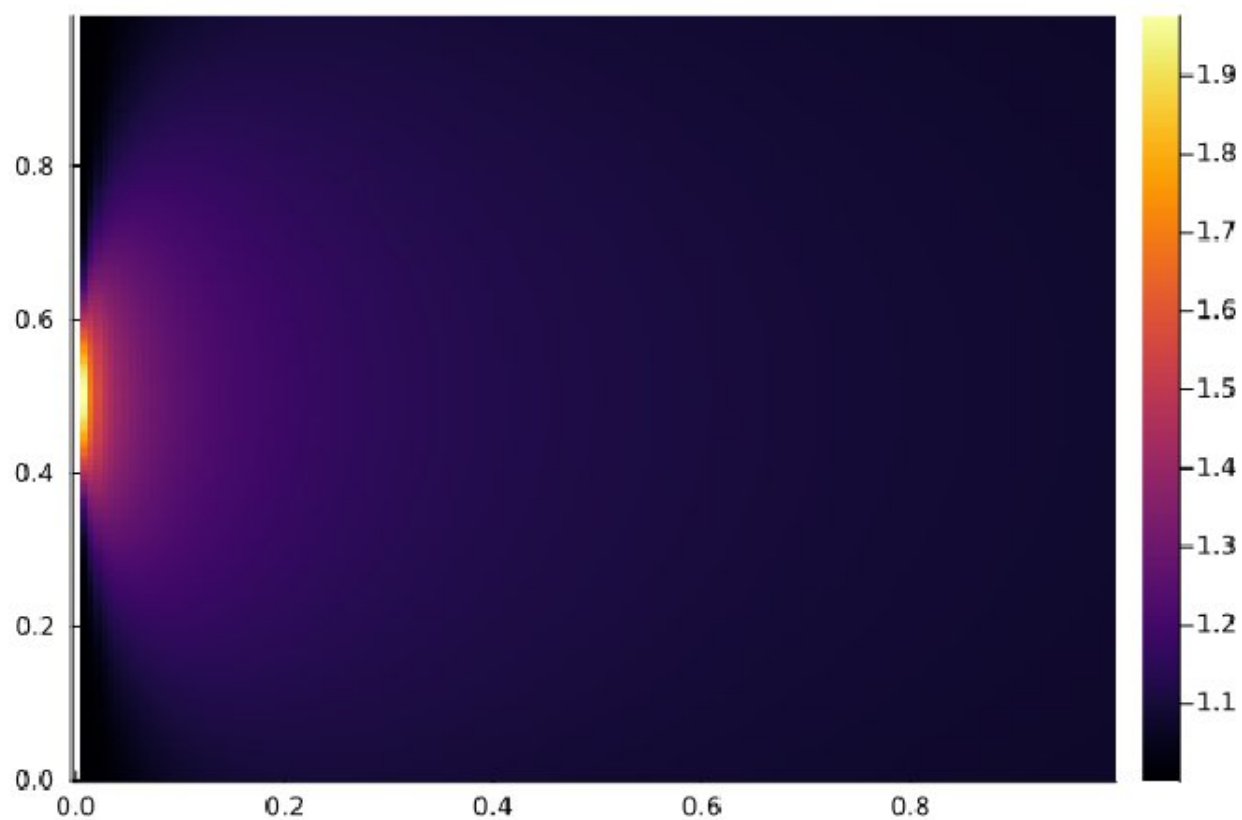
p31 = plot(heatmap(t, x, T))
p32 = plot(t, x, T)

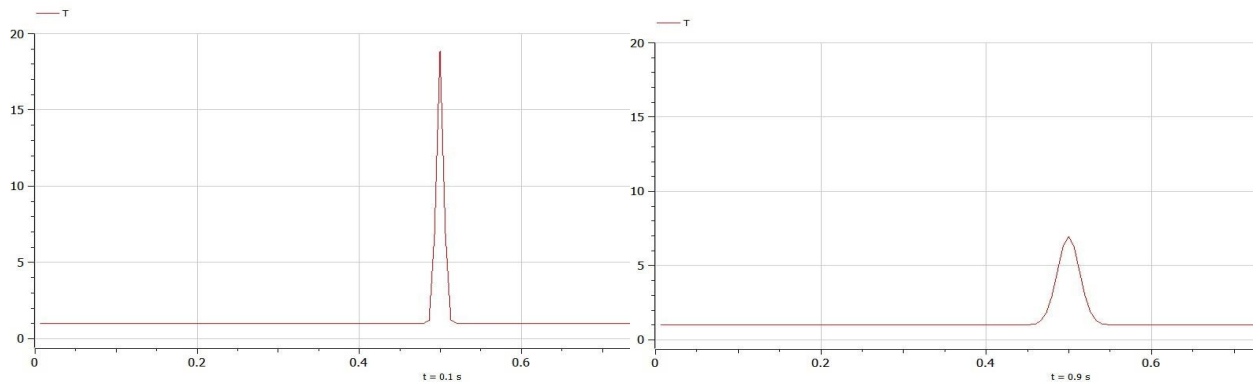
savefig(p31, "out/project/task_3_1.png")
savefig(p32, "out/project/task_3_2.png")
```

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.