РОССИЙСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ДРУЖБЫ НАРОДОВ

Факультет физико-математических и естественных наук

Теплопроводность и детерминированное горение. Этап 2

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

1. Явная разностная схема

Прежде чем решать систему уравнений горения, рассмотрим численные методы решения одномерного уравнения теплопроводности без химических реакций.

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \chi \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

Для этого в уравнении теплопроводности заменим частные производные на разностные. Для сетки с постоянным шагом получаем соотношение, связывающее температуру в узле на новом шаге по времени с температурой в узлах текущего временного слоя.

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

Здесь $\hat{T}_i$ — новая температура в узле. Проделав эту процедуру для каждого узла, мы «явно» найдем температуру на новом слое по времени. Такая разностная схема называется явной. Метод требует два массива для хранения старой и новой температур, устойчив при условии $\chi \frac{\Delta t}{h^2} < \frac{1}{2}$, на практике значения $\chi \frac{\Delta t}{h^2} \leq \frac{2}{5}$ вполне достаточно. Для вычисления температуры в крайних точках предлагается использовать адиабатические граничные условия: $\frac{T_2 - T_0}{2h} = 0$ и $\frac{T_{n+1} - T_{n-1}}{2h} = 0$, что эквивалентно условиям $T_0 = T_2$, $T_{n+1} = T_{n-1}$. Теперь, чтобы учесть химическую реакцию, добавим к полученному соотношению изменение безразмерной температуры за счет энерговыделения в химических реакциях за шаг по времени

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

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

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

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

2. Неявные разностные схемы

Различия между явными и неявными схемами

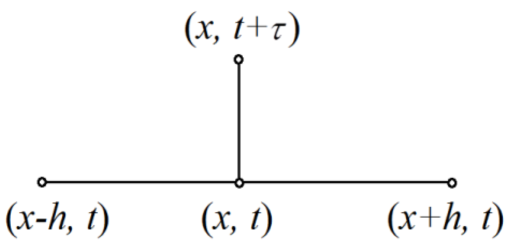
Кроме явных разностных схем существуют также неявные разностные схемы для уравнения теплопроводности. В таблице приведены основные отличия этих схем.

Виды схем	Явная разностная схема	Неявная разностная схема
Описание	Есть уравнение, есть 1 неизвестная, по уравнению можно найти неизвестную	Есть уравнение с 3 связанными неизвестными и некоторыми известными значениями
Преимущества и недостатки		
Количество неизвестных	+ 1 неизвестная в уравнении	- Несколько неизвестных в уравнении
Порядок аппроксимации	- низкий порядок аппроксимации по времени	+ более высокий порядок аппроксимации по времени
Устойчивость	- устойчива, при ограничении на шаг аппроксимации	+ всегда устойчива, нет ограничений на шаг аппроксимации

Важными критериями, которые учитываются при выборе, являются следующие: количество переменных, порядок аппроксимации и устойчивость схемы. По таблице видно, что у неявной разностной схемы больше преимуществ, чем у явной.

Шаблоны разностных схем

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

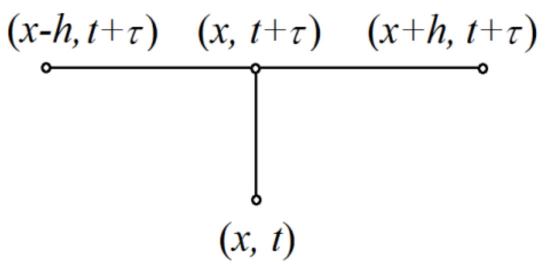


$$\frac{\hat{T}_i - T_i}{\Delta t} = \chi \frac{(\delta^2 T)_i}{h^2}$$

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

явная схема,

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

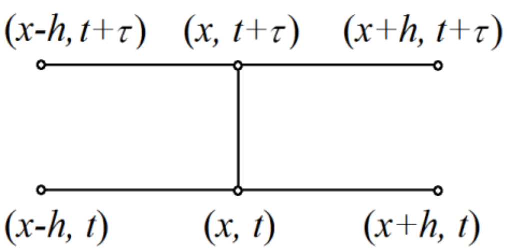


$$\frac{\hat{T}_i - T_i}{\Delta t} = \chi \frac{(\delta^2 \hat{T})_i}{h^2}$$

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

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: $(\delta^2 T)_i = T_{i-1} - 2T_i + T_{i+1}$. 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.

Вывод системы уравнений

Для вычисления неизвестных переменных: температуру в каждом узле на новом слое по времени, – необходимо решить систему *n* уравнений относительно *n* + 2 неизвестных $\hat{T}_i$на новом временном слое. Преобразовав изначальное разностное уравнение для неявной схемы Кранка – Николсон, получаем формулу для создания системы уравнений.

1. $\frac{\hat{T}_i - T_i}{\Delta t} = \chi \frac{(\delta^2 T)_i + (\delta^2 \hat{T})_i}{2h^2}$
2. $\frac{\hat{T}_i}{\Delta t} - \frac{T_i}{\Delta t} = \frac{\chi(T_{i-1} - 2T_i + T_{i+1})}{2h^2} + \frac{\chi(\hat{T}_{i-1} - 2\hat{T}_i + \hat{T}_{i+1})}{2h^2}$
3. $\frac{2h^2\hat{T}_i}{\chi\Delta t} - \frac{2h^2 T_i}{\chi\Delta t} = (T_{i-1} - 2T_i + T_{i+1}) + (\hat{T}_{i-1} - 2\hat{T}_i + \hat{T}_{i+1})$
4. $0 = \left(\hat{T}_{i-1} - \left(2 + \frac{2h^2}{\chi\Delta t}\right)\hat{T}_i + \hat{T}_{i+1}\right) + (T_{i-1} - (2 + \frac{2h^2}{\chi\Delta t})T_i + T_{i+1})$
5. $\hat{T}_{i-1} - \left(2 + \frac{2h^2}{\chi\Delta t}\right)\hat{T}_i + \hat{T}_{i+1} = -T_{i-1} + \left(2 - \frac{2h^2}{\chi\Delta t}\right)T_i - T_{i+1}$

Недостающие неизвестные $\hat{T}_0$ и $\hat{T}_{n+1}$ (граничные температуры на новом слое) выбираются в соответствии с граничными условиями.

3. Метод прогонки

При решении физических или математических задач часто приходится прибегать к системе линейных уравнений. В универсальных алгоритмах решения системы из N уравнений число арифметических операций растет пропорционально N^2, что неприемлемо много.

Однако существуют частные случаи. Например, для диагональных систем, в которых все ненулевые элементы расположены на главной и соседних диагоналях, число арифметических операций в алгоритме может расти пропорционально N. Для таких случаев существуют отдельный алгоритм — метод прогонки.

Пусть есть система линейных уравнений в каноническом виде:

$$a_i x_{i-1} + b_i x_i + c_i x_{i+1} = d_i, \text{где } i = 1,2, \dots, n;\ a_1 = c_n = 0$$

3.1

Решение сводится к двум циклам расчетов по рекуррентным формулам: прямому и обратному ходу прогонки. Для данной системы прямой ход сводится к исключению неизвестных x_{i-1}.

Первые два уравнения системы **3.1** имеют вид:

$$b_1 x_1 + c_1 x_2 = d_1$$

3.2

$$a_2 x_1 + b_2 x_2 + c_2 x_3 = d_2$$

3.3

Уравнение **3.2** можно переписать в виде:

$$x_1 = \frac{d_1 - c_1 x_2}{b_1} = A_2 x_2 + B_2$$

3.4

$$A_2 = -\frac{c_1}{b_1}, B_2 = \frac{d_1}{b_1},$$

3.5

Подставим x_1 в уравнение **3.3**. Получим связь между x_2 и x_3 в виде $x_2 = A_3 x_3 + B_3$. Аналогично, подставляя $x_{i-1} = A_i x_i + B_i$ в очередное уравнение системы **3.1** получим: $a(A_i x_i + B_i) + b_i x_i + c_i x_{i+1} = d_i$. Выразим x_i через x_{i+1}:

$$x_i = -\frac{c_i}{a_i A_i + b_i} x_{i+1} + \frac{d_i - a_i B_i}{a_i A_i + b_i}$$

3.6

Уравнение **3.6** можно переписать в виде:

$$x_i = A_{i+1} x_{i+1} + B_{i+1}, i = n, n-1, \dots, 1$$

3.7

$$A_{i+1} = -\frac{c_i}{b_i - a_i A_i}, B_{i+1} = \frac{d_i - a_i B_i}{b_i - a_i A_i}$$

3.8

Мы имеем рекуррентные формулы для вычисления коэффициентов A_i и B_i (прямой ход прогонки), а затем рекуррентно вычисляем неизвестные x_i обратным ходом прогонки (по формулам **3.7**).Чтобы начать прямую прогонку, нужно сначала вычислить A_2 и B_2 из **3.5**.

Одним из частных случаев (например, если для уравнения теплопроводности заданы граничные условия $T_1 = \varphi$) является граничное условие $x_1 = \varphi$ вместо первого уравнения системы **3.1**, то есть к $a_1 = 0$ добавляются еще и $c_1 = 0$, $b_1 = 1$ и $d_1 = \varphi$.

Для адиабатических граничных условий поток тепла $q = -k\frac{\partial T}{\partial x}$ на границе равен нулю. Соответствующая разностная формула имеет вид $q = -k\frac{T_2 - T_1}{h} = 0$. При этом $T_2 - T_1 = 0$ и коэффициенты в первом уравнении системы **3.1** равны: $b_1 = 1$, $c_1 = -1$, $d_1 = 0$. В обоих случаях можно начать вычисления сразу по формуле **3.8**, полагая для простоты $A_1 = 0$, $B_1 = 0$.

На правой границе граничные условия тоже могут быть разными. Если $x_n = \psi$, то обратный ход прогонки начинается сразу по рекуррентным формулам **3.7**. В случае адиабатических граничных условий в качестве последнего уравнения используется условие равенства теплового потока нулю $T_n - T_{n-1} = 0$, т.е. $x_n - x_{n-1} = 0$. Кроме того, после прямого хода прогонки $x_{n-1} = A_n x_n + B_n$. Сначала решаем систему из этих двух уравнений и находим $x_{n-1} = x_n = \frac{B_n}{(1-A_n)}$.

Прогонка требует всего $3N$ ячеек памяти и $9N$ арифметических операций, что весьма эффективно. Если выполнено условие преобладания диагональных элементов $|b_i| \geq |a_i| + |c_i|$ (причем хотя бы для одного i имеет место неравенство), то в формулах прямого хода **3.8** не возникает деления на нуль, и поэтому исходная система **3.1** имеет единственное решение.

4. 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. Хакимзянов Г. С., Черный С. Г. Методы вычислений: В 4 ч.: Учеб. пособие / Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 2007. Ч. 3: Численные методы решения задач для уравнений параболического и эллиптического типов. 160 с. / ISBN 978-5-94356-612-7