УДК 519.6:536.2

ВАРИАЦИОННЙ МЕТОД ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫХ АДАПТАЦИЙ В МОДЕЛИРОВАНИИ САМОРАСПРОСТРАНЯЮЩЕГОСЯ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СИНТЕЗА

Булатов И. И. Черезов Н.П.

Научный руководитель: Член-корреспондент РАН Алымов М. И.

Научный консультант: кан.тех.наук. Черезов Н. П.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения им. А.Г. Мержанова Российской академии наук

E-mail: stanok.3000.str@yandex.ru

Введение

Моделирования физических процессов всегда остается важным научным этапом для прогнозирования и исследования каких-либо явлений или процессов. Одним из способов построения моделей является дифференциальные уравнения в частных производных. Классическим подходом решения дифференциальных уравнений в частных производных являются конечно-разностные методы [1]. Данный численный метод хорош своей простой, однако можно рассмотреть и другой подход, когда узлы в сетках динамичны и располагаются оптимальным образом т.е., решается задача оптимизации. В рамках данной статьи будет рассмотрено моделирование самораспространяющегося высокотемпературного синтеза твердых материалов в обезразмеренном виде используя преобразование Франк-Каменецкого [3].

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = \left(\frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2}\right) + (1-\eta)\cdot epx\left(\frac{T}{1+\beta T}\right) \tag{1}$$

$$\frac{d\eta}{d\tau} = \gamma(1-\eta)\cdot epx\left(\frac{T}{1+\beta T}\right) \tag{2}$$

Данный процесс состоит из двух уравнений: (1) уравнение теплопроводности, (2) уравнение кинетики. Начальные и граничные условия [2]:

$$\begin{aligned} &\tau = 0:\ T = T_{in}, \eta = 0; \\ &\tau > 0: \xi = 0:\ \frac{\partial T}{\partial \xi} = 0; \\ &\tau > 0: \xi = L_\xi:\ \frac{\partial T}{\partial \xi} = 0. \end{aligned} \tag{3}$$

Основная часть

Основополагающая идея для решения данной системы дифференциальных уравнений является построение функционала ошибок, которая обуславливается прямым и обратным проходом на один шаг по времени и сравнение текущей функции с исходной функцией на данном временном шаге. Далее данный функционал ошибок минимизируется градиентным методом за счет варьирования узлов сетки по координате. Для данной дискретной функции на следующем шаге применяется построение интерполяционного сплайна.

Разобьём пространство $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, $\Omega = \bigcup_i \Omega_i \mid \forall\, i, k \in \mathbb{N},\ k > 0 : \Omega_i \cap \Omega_{i+k} \equiv \emptyset$. Пусть $\omega_{ij} \in \Omega_i \Leftrightarrow \omega_{ij} = \omega(\tau_i, \xi_j) \Rightarrow \forall i \in \mathbb{N}, j \in \mathbb{N}, \omega_{ij} \in \mathbb{R}^2, \mid \omega_{ij} \le \omega_{ij+1}$ тогда измеримо.

Разложим в ряд Тейлора функцию T по времени на один шаг

$$T_{i+1j} = T_{ij} + \frac{\partial T_{ij}}{\partial \tau}\Delta\tau + O(\Delta\tau^2)$$

Разложим в ряд Тейлора по времени сделав обратный шаг

$$\tilde{T}_{ij} = T_{i+1j} - \frac{\partial T_{i+1j}}{\partial \tau}\Delta\tau + O(\Delta\tau^2)$$

Далее получим разность между текущей функцией и начальной

$$\begin{gathered}\tilde{T}_{ij} = T_{ij} + \frac{\partial T_{ij}}{\partial \tau}\Delta\tau - \frac{\partial T_{i+1j}}{\partial \tau}\Delta\tau \Leftrightarrow \\ T_{ij} - \tilde{T}_{ij} = \left(\frac{\partial T_{i+1j}}{\partial \tau} - \frac{\partial T_{ij}}{\partial \tau}\right)\Delta\tau\end{gathered} \tag{4}$$

Квадрат разность между текущей и начальной функцией на i-ом шаге и является функционалом ошибок.

$$P_i = \sum_{j=1}^{n}\left(\left(\frac{\partial T_{i+1j}}{\partial \tau} - \frac{\partial T_{ij}}{\partial \tau}\right)\Delta\tau\right)^2$$

Ниже представлены производные первого и второго порядка функций в конечных разностях с произвольным шагом, это обусловлено варьированием узлов для минимизации ошибки

$$\frac{\partial T}{\partial \omega} \approx \frac{T_{ij+1} - T_{ij}}{\omega_{ij+1} - \omega_{ij}}$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial \omega^2} \approx \frac{T_{ij+1} - T_{ij}}{(\omega_{ij+1} - \omega_{ij}) \cdot (\omega_{ij+1} - \omega_{ij-1})} - \frac{T_{ij} - T_{ij-1}}{(\omega_{ij} - \omega_{ij-1}) \cdot (\omega_{ij+1} - \omega_{ij-1})}$$

Для минимизации функционала ошибок мы воспользуемся классическим градиентным методом, где λ_{ij}- является коэффициентом сходимости, данный коэффициент должен соблюдать условие Липшица.

$$\omega_{ij} = \omega_{ij} - \lambda_{ij}\frac{\partial P_i}{\partial \omega_{ij}}$$

Выводы

Данный метод позволяет получить более точные приближенное решение нежели классическая конечно-разностная схема при одинаковом количестве узлов, это будет особенно заметно у явлений с большими градиентными полями. Однако стоит отметить, что такой подход требует большего числа операций.

Список литературы

1. А.А. Самарский. Введение в теорию разностных схем. Главная редакция физико-математической литературы изд-ва «Наука», М., 1971.
2. Seplyarskii, B.S., Ivleva, T.P. & Alymov, M.I. Macrokinetic Analysis of Passivation of Pyrophoric Powders. Dokl Phys Chem. 2018. 478, 23–26. https://doi.org/10.1134/S0012501618010062
3. Франк-Каменецкий Д. А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. – М.: Наука, 1987. – 502с.