

УДК 519.63

О применении явно-итерационной схемы ЛИ-М к моделированию дозвуковых реагирующих газовых потоков*

Пескова Е.Е., Язовцева О.С., Макарова Е.Ю.

Национальный исследовательский Мордовский государственный университет

Аннотация: В работе разработан алгоритм на основе явно-итерационной схемы ЛИ-М интегрирования диссипативных членов для математической модели дозвукового течения многокомпонентных реагирующих газовых потоков, в основу которой положены уравнения Навье-Стокса. Модель построена с учетом взаимной диффузии газов, их вязкости, теплопроводности и химических реакций. Вычислительный алгоритм в силу высокой жесткости системы базируется на принципе расщепления по физическим процессам: различные методы решения использованы для интегрирования уравнений химической кинетики, конвективных потоков, диссипативных членов и давления. Сравнительный анализ показал эффективность разработанного алгоритма по сравнению с алгоритмом, основанным на интегро-интерполяционном методе, в котором диссипативные члены рассчитываются по схеме с центральными разностями.

Ключевые слова: математическое моделирование, уравнения Навье-Стокса, расщепление по физическим процессам, чебышёвская явно-итерационная схема, конверсия метана.

В настоящее время актуальным вопросом является разработка кодов для исследования промышленных химических процессов. Существующие комплексы громоздки и дорогостоящи, кроме того, в настоящей геополитической ситуации использование иностранного программного обеспечения зачастую невозможно. Разрабатываемые коды должны отвечать определенным требованиям: для проведения серийных расчетов результат должен быть получен за короткое время, для практической значимости вычисления должны отвечать заданной точности, при этом программа должна удовлетворять ограничениям по объему и занимаемой памяти. Для выполнения требований в основу программы должен быть положен эффективный вычислительный алгоритм. Известной проблемой численного моделирования химических процессов является потребность в учёте разномасштабных явлений в рамках одной модели, что приводит к необходимости решения жёстких систем уравнений. Быстродействие алгоритма может быть достигнуто за счет использования специализированных методов расчета для каждой части математической модели, отвечающей различным физическим процессам. Подобный подход носит название «принцип расщепления по физическим процессам» [1].

Настоящая работа посвящена построению вычислительного алгоритма для моделирования многокомпонентных дозвуковых газодинамических потоков с учётом диффузии, вязкости, теплопроводности и химических реакций. Вычислительный алгоритм построен на основе расщепления по физическим процессам: различные методы решения использованы для интегрирования уравнений химической кинетики,

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-21-00202, <https://rscf.ru/project/23-21-00202/>.

конвективных потоков, диссипативных членов и давления. В качестве объекта исследования выбран процесс высокотемпературной конверсии метана с радикальноцепными реакциями и учетом энергопоглощения вследствие эндотермического характера реакций [2].

Для интегрирования уравнений химической кинетики применен трехстадийный метод Рунге-Кутты пятого порядка точности, известный также как метод РАДО [3]. Этот метод хорошо зарекомендовал себя для решения систем уравнений, описывающих детализированные химические превращения [3]. Расчет процессов конвективного переноса проведен с использованием потоков Русанова [5].

Наибольшие затруднения с точки зрения вычислительного алгоритма вызывают расчеты, связанные с диссипативными процессами. Диссипативные члены и динамика давления рассчитаны с использованием метода локальных итераций, основанного на явном итерационном процессе с параметрами, отвечающими корням многочленов Чебышева [6]. Вычисления проводятся в три этапа: отдельно вычисляются диффузионные потоки, вязкость и процессы теплопроводности. На последнем этапе осуществлен перерасчет вектора скорости, связанный с динамической составляющей давления.

Для оценки эффективности алгоритма было проведено сравнение нового разработанного алгоритма с построенным на основе интегро-интерполяционного метода, в котором диссипативные потоки вычисляются по схеме с центральными разностями [7]. Сравнительный анализ показал значительное ускорение расчетов. Это связано со снятием ограничения на шаг интегрирования диссипативных процессов.

Помимо очевидного преимущества во времени расчета предлагаемый подход обладает еще одним достоинством – в силу использования явной схемы алгоритм достаточно просто адаптировать под распределенные вычисления, что несомненно будет востребовано при решении трехмерных задач.

Полученный результат свидетельствует о правомерности применения предложенного подхода для задач моделирования дозвуковых реагирующих газовых потоков, в том числе и с учетом дополнительных источников энергии, например, лазерного излучения.

Литература

1. Марчук Г.И. Методы расщепления. М.: Наука, 1988.
2. Лашина Е.А., Пескова Е.Е., Снытников В.Н. Математическое моделирование нестационарной температурной конверсии метан-этановых смесей в широком диапазоне температур // Химия в интересах устойчивого развития, 2023. № 3.
3. Hairer E., Wanner G. Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems. Springer-Verlag, Berlin, 1996.
4. Yazovtseva O.S., Gubaydullin I.M., Peskova E.E., Sukharev L.A., Zagoruiko A.N. Computer Simulation of Coke Sediments Burning from the Whole Cylindrical Catalyst Grain // Mathematics. 2023. Vol. 11. No.3. 669 p. DOI: 10.3390/math11030669.
5. Русанов В.В. Расчет взаимодействия нестационарных ударных волн с препятствиями // Журнал вычислительной математики и математической физики, 1961. Т.1. № 2. С. 267-279.

6. Жуков В.Т. О явных методах численного интегрирования для параболических уравнений // Математическое моделирование, 2010. Т.22. № 10. С. 127-158.
7. Жалнин Р.В., Пескова Е.Е., Стадниченко О.А., Тишкин В.Ф. Моделирование течения многокомпонентного реагирующего газа с использованием алгоритмов высокого порядка точности // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки, 2017. Т. 27. № 1. С. 608-617.

MSC 65L20

On the application of the explicit-iterative LI-M scheme to the modeling of subsonic reacting gas flows

E.E. Peskova, O.S. Yazovtseva, E.Yu. Makarova

National Research Mordovia State University

Abstract: The paper develops an algorithm based on the explicit iterative scheme of the Li-M integration of dissipative terms for a mathematical model of the subsonic multicomponent reacting gas flow. It is based on the Navier-Stokes equations. The model is constructed taking into account the mutual diffusion of gases, their viscosity, thermal conductivity and chemical reactions. The computational algorithm is based on the principle of splitting by physical processes due to the high stiffness of the system: various solution methods are used to integrate the equations of chemical kinetics, convective flows, dissipative terms and pressure. Comparative analysis has shown the effectiveness of the developed algorithm in comparison with the algorithm based on the integro-interpolation method, in which the dissipative terms are calculated according to the scheme with central differences.

Keywords: mathematical modeling, Navier-Stokes equations, splitting by physical processes, Chebyshev explicit-iterative scheme, methane conversion.

References

1. Marchuk G.I. Splitting methods. M.: Nauka, 1988.
2. Lashina E.A., Peskova E.E., Snytnikov V.N. Mathematical modeling of unsteady temperature conversion of methane-ethane mixtures in a wide temperature range // Chemistry in the interests of sustainable development. 2023. No 3.
3. Hairer E., Wanner G. Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems. Springer-Verlag, Berlin, 1996.
4. Yazovtseva O.S., Gubaydullin I.M., Peskova E.E., Sukharev L.A., Zagoruiko A.N. Computer Simulation of Coke Sediments Burning from the Whole Cylindrical Catalyst Grain // Mathematics. 2023. Vol. 11. No. 3. 669 p. DOI: 10.3390/math11030669.
5. Rusanov V.V. Calculation of the interaction of unsteady shock waves with obstacles // Journal of Computational Mathematics and Mathematical Physics, 1961. Vol. 1. No. 2. P. 267-279.
6. Zhukov V.T. On explicit numerical integration methods for parabolic equations // Mathematical modeling, 2010. Vol. 22. No.10. C. 127-158.
7. Zhalnin R.V., Peskova E.E., Stadnichenko O.A., Tishkin V.F. Modeling of multicomponent reacting gas flow using high-order accuracy algorithms // Bulletin of the Udmurt University. Mathematics. Mechanics. Computer science, 2017. Vol.27. No.1. C. 608-617.