

УДК 519.63

Численное моделирование химически активных дозвуковых потоков под воздействием лазерного излучения*

Пескова Е.Е., Язовцева О.С.

Национальный исследовательский Мордовский государственный университет

Аннотация: Работа посвящена построению вычислительного алгоритма для математической модели дозвукового потока под воздействием лазерного излучения с учетом вязкости, теплопроводности и химических реакций в осесимметричной постановке. При разработке алгоритма применен принцип расщепления по физическим процессам. Для снятия ограничения на шаг интегрирования по времени, связанного с диффузионными процессами, применена схема локальных итераций на основе упорядочивания корней полиномов Чебышева. Алгоритм верифицирован сравнением с результатами работы ранее построенного алгоритма на основе интегро-интерполяционного метода. Выявлена высокая эффективность нового алгоритма при сохранении точности расчетов.

Ключевые слова: схема локальных итераций, дозвуковое течение, лазерное излучение, математическое моделирование, вычислительный алгоритм.

Дозвуковые потоки повсеместно встречаются в технике и природе, этим обусловлен интерес к ним со стороны исследователей в области математического моделирования. Примерами решаемых с использованием математического аппарата задач могут быть: расчет фронта горения в каналах различной формы [1], моделирование гидродинамических волн [2], исследование химических процессов в зернах катализатора [7] и т.д.

Построение вычислительных алгоритмов для исследования дозвуковых газовых потоков под воздействием лазерного излучения с учетом вязкости, теплопроводности и химических реакций является актуальной задачей, которая позволит предсказать поведение системы при различных условиях проведения эксперимента [4, 5]. Как известно, явные вычислительные алгоритмы для задач, сочетающих в себе разномасштабные процессы, требуют шага интегрирования по времени, отвечающего диффузионным ограничениям, и не позволяют проводить серийные расчеты на компьютерах умеренной производительности. Использование неявных схем снимает ограничение на шаг интегрирования по времени, но является трудоемким при наличии большого количества нелинейных источников членов и теплофизических характеристик газовой смеси, нелинейно зависящих от температуры.

Целью настоящей работы является разработка вычислительного алгоритма для моделирования химически активных дозвуковых потоков под воздействием лазерного излучения, суть которого заключается в снятии ограничения на шаг интегрирования по времени, связанного с диссипативными процессами.

Ранее авторами был построен вычислительный алгоритм для решения многокомпонентных уравнений Навье-Стокса в приближении малых чисел Маха с учетом химических реакций, показавший возможность снять диффузионные ограничения

*Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 23-21-002, <https://rscf.ru/project/23-21-00202/>.

на шаг интегрирования по времени [8] посредством использования схемы локальных итераций [7]. Алгоритм прошел валидацию и верификацию посредством сравнения с аналитическими решениями и другими пакетами программ. В настоящей работе математическая модель дополнена учетом лазерного излучения, направленного соосно с газовым потоком посредством включения источников члена в уравнение энтальпии смеси и ОДУ для интенсивности излучения [8].

В основе вычислительного алгоритма лежит принцип расщепления по физическим процессам. Для этого внутри одного шага по времени решаются следующие задачи:

1. Задача Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений: расчет динамики концентраций веществ в процессе химических превращений проводится трехстадийным неявным методом Рунге-Кутты пятого порядка точности [9].

2. Задача Коши для обыкновенного дифференциального уравнения: расчет интенсивности лазерного излучения вдоль направления газового потока проводится трехстадийным неявным методом Рунге-Кутты пятого порядка точности.

3. Гиперболическая задача: конвективные потоки вычислены с помощью потоков Русанова с модификацией стабилизирующего члена.

4. Параболическая задача: расчет диффузионных потоков реализован с использованием метода локальных итераций на основе упорядочивания корней многочленов Чебышева [7].

5. Эллиптическая задача: динамическая составляющая давления находится посредством решения уравнения Пуассона методом Якоби.

Вычислительные эксперименты проводились в осесимметричной геометрии течения на примере процесса неокислительной конверсии метана [10]. Исследование сходимости и устойчивости вычислительного алгоритма проведено на сгущающихся сетках. За счет применения метода локальных итераций для расчета диффузионных потоков выявлено более высокое быстродействие настоящего алгоритма в сравнении с алгоритмом на основе интегро-интерполяционного метода [5]. Параллельная реализация с использованием технологии MPI позволяет проводить серийные расчеты за приемлемое время. Результатом работы программной реализации являются картины распределения веществ и температурного поля по осесимметричной трубе в процессе неокислительной конверсии метана.

Литература

1. Yakush S., Semenov O., Alexeev M. Premixed Propane–AirFlame Propagation in a NarrowChannel with Obstacles // *Energies*. 2023. V. 16. DOI: 10.3390/en16031516.
2. Sukhinov A.I., Chistyakov A.E., Timofeeva E.F. et al. Mathematical model for calculating coastal wave processes // *Mathematical Models and Computer Simulations*. 2013. V. 5. P. 122–129. DOI: 10.1134/S2070048213020087.
3. Gubaydullin I.M., Peskova E.E., Yazovtseva O.S., Zagoruiko A.N. Numerical Simulation of Oxidative Regeneration of a Spherical Catalyst Grain // *Mathematical Models and Computer Simulations*. 2023. V. 15. P. 485–495. DOI: 10.1134/S2070048223030079.
4. Пескова Е.Е., Снытников В.Н., Жалнин Р.В. Вычислительный алгоритм для изучения внутренних ламинарных потоков многокомпонентного газа с

- разномасштабными химическими процессами // Компьютерные исследования и моделирование. 2023. Т.15, №5. С. 1169–1187.
5. Пескова Е.Е., Снытников В.Н. Численное исследование конверсии метановых смесей под воздействием лазерного излучения // Журнал Средневолжского математического общества. 2023. Т. 25, № 3. С. 159–173.
 6. Peskova E.E., Yazovtseva O.S. Application of the Explicitly Iterative Scheme to Simulating Subsonic Reacting Gas Flows // Computational Mathematics and Mathematical Physics. 2024. V. 64, №2. P. 326–339.
 7. Zhukov V.T., Novikova N.D., Feodoritova O.B. An Approach to Time Integration of the Navier–Stokes Equations // Comput. Math. and Math. Phys. 2020. V. 60. P. 272–285. DOI: 10.1134/S0965542520020128.
 8. Snytnikov V.I.N., Snytnikov V.N., Masyuk N.S., Markelova T.V. The Absorption of CO₂ Laser Radiation by Ethylene in Mixtures with Methane // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2020. V. 253. 107119. 1–6.
 9. Hairer E., Wanner G. Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems. Springer-Verlag, Berlin, 1996.
 10. 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. С. 288–296.

MSC 65L20

Numerical simulation of chemically active subsonic flows under the influence of laser radiation

E.E. Peskova, O.S. Yazovtseva

National Research Mordovia State University

Abstract: The work is devoted to the construction of a computational algorithm for a mathematical model of subsonic flow under the influence of laser radiation, taking into account viscosity, thermal conductivity and chemical reactions in an axisymmetric formulation. The principle of splitting by physical processes was applied to develop the algorithm. The scheme of local iterations based on the ordering of the Chebyshev polynomials' roots is applied to remove the restriction on the time integration step associated with diffusion processes. The algorithm is verified by comparison with the results of the previously constructed algorithm based on the integro-interpolation method. The high efficiency of the new algorithm has been revealed while maintaining the accuracy of calculations.

Keywords: local iteration scheme, subsonic flow, laser radiation, mathematical modeling, computational algorithm.

References

1. Yakush S., Semenov O., Alexeev M. Premixed Propane–Air Flame Propagation in a Narrow Channel with Obstacles // *Energies*. 2023. V. 16. DOI: 10.3390/en16031516.
2. Sukhinov A.I., Chistyakov A.E., Timofeeva E.F. et al. Mathematical model for calculating coastal wave processes // *Mathematical Models and Computer Simulations*. 2013. V. 5. P. 122–129. DOI: 10.1134/S2070048213020087.
3. Gubaydullin I.M., Peskova E.E., Yazovtseva O.S., Zagoruiko A.N. Numerical Simulation of Oxidative Regeneration of a Spherical Catalyst Grain // *Mathematical Models and Computer Simulations*. 2023. V. 15. P. 485–495. DOI: 10.1134/S2070048223030079.
4. Peskova E.E., Snytnikov V.N., Zhalnin R.V. The computational algorithm for studying internal laminar flows of a multicomponent gas with different-scale chemical processes // *Computer Research and Modeling*. 2023. Vol. 15, No. 5. P. 1169–1187. DOI: 10.20537/2076-7633-2023-15-5-1169-1187.
5. Peskova E.E., Snytnikov V.N. Numerical Study of Methane Mixtures' Conversion Under the Influence of Laser Radiation // *Zhurnal Srednevolzhskogo matematicheskogo obshchestva*. 2023. V. 25, No. 3. P. 159–173. DOI: <https://doi.org/10.15507/2079-6900.25.202303.159-173>
6. Peskova E.E., Yazovtseva O.S. Application of the Explicitly Iterative Scheme to Simulating Subsonic Reacting Gas Flows // *Computational Mathematics and Mathematical Physics*. 2024. V. 64, № 2. P. 326–339.

7. Zhukov V.T., Novikova N.D., Feodoritova O.B. An Approach to Time Integration of the Navier–Stokes Equations // Computational Mathematics and Mathematical Physics. 2020. V. 60. P. 272–285. DOI: 10.1134/S0965542520020128.
8. Snytnikov V.I.N., Snytnikov V.N., Masyuk N.S., Markelova T.V. The Absorption of CO₂ Laser Radiation by Ethylene in Mixtures with Methane // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2020. V. 253. 107119. 1–6.
9. Hairer E., Wanner G. Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems. Springer-Verlag, Berlin, 1996.
10. Lashina E.A., Peskova E.E., Snytnikov V.N. Mathematical Modelling of the Dynamics of Thermal Conversion of Methane-Ethane Mixtures in a Wide Temperature Range // Chemistry for Sustainable Development. 2023. Vol. 31, No. 3. P. 278–286. DOI: 10.15372/CSD2023467