

УДК 519.63

Разработка и реализация вычислительного алгоритма для моделирования реагирующих газовых потоков*

Тиньгаева Н.А., Пескова Е.Е.

Национальный исследовательский Мордовский государственный университет

Аннотация: Работа посвящена построению вычислительного алгоритма для исследования химически реагирующих дозвуковых вязких потоков. Для описания течений используется многокомпонентная система уравнений Навье-Стокса в приближении малых чисел Маха, дополненная системой уравнений химической кинетики. Алгоритм для данной модели разработан на основе метода расщепления по физическим процессам. Шаг по времени выбирается из условия устойчивости для гиперболической части системы за счет проведения итераций внутри одного шага по времени для расчета диффузии, вязкости, теплопроводности и динамической составляющей давления. Проведенные расчеты на последовательности сгущающихся сеток показали сходимость алгоритма.

Ключевые слова: дозвуковое течение, химически активные потоки, вычислительный алгоритм.

Разработка вычислительных алгоритмов для дозвуковых многокомпонентных течений с учетом вязкости, теплопроводности и химических превращений в настоящее время является актуальным направлением вычислительной математики. В первую очередь это связано со сложностью их построения – процессы, обязательные к описанию, сложны и многофакторны, они обладают существенно различающимися характерными временами. Зачастую такие течения описываются уравнениями Навье-Стокса с различными модификациями [1, 2]. Для решения систем успешно апробирована практика построения вычислительных алгоритмов на основе расщепления по физическим процессам [3]. Шаг интегрирования по времени в данных схемах определяется, как правило, из условия устойчивости для параболической части уравнений.

При повышении температуры газовых потоков и включении в расчеты радикально-цепных химических реакций коэффициенты диффузии и теплопроводности существенно возрастают. Это накладывает серьезные ограничения на временной шаг при интегрировании уравнений и приводит к значительному увеличению времени, необходимого для численного моделирования практических задач.

В настоящей работе разработан алгоритм, расчет в котором ведется с шагом по времени, ограниченным условием устойчивости для гиперболической части задачи, а для расчета параболической части, включающей процессы диффузии, вязкости и теплопроводности, используется итерационный процесс внутри общего расчетного шага. Численный алгоритм в рамках одного шага по времени разбивается на решение уравнений химической кинетики, решение гиперболической части уравнений, решение параболической части, решение уравнения эллиптического типа для нахождения давления.

Для тестирования построенного алгоритма решена задача конверсии метана в

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

двумерной постановке. Проведены расчеты на последовательности сгущающихся сеток, показавшие устойчивость построенного алгоритма. Проведено сравнение результатов расчетов построенного алгоритма с ранее разработанным, в котором шаг по времени рассчитывается исходя из условия устойчивости явной схемы для решения уравнений параболического типа [4]. Получено хорошее совпадение результатов расчетов при более высокой скорости работы нового алгоритма, предлагаемого в данной работе.

Литература

1. Day M.S., Bell J.B. Numerical simulation of laminar reacting flows with complex chemistry // *Combustion Theory and Modelling*. 2000. Vol. 4, No. 4. P. 535–556.
2. Borisov V.E., Yakush S.E., Sysoeva E.Ya. Numerical Simulation of Cellular Flame Propagation in Narrow Gaps // *Mathematical Models and Computer Simulations*. 2022. Vol. 14. P. 755–770.
3. Марчук Г.И. Методы расщепления. М.: Наука, 1988.
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.

MSC 65L20

Development and implementation of a computational algorithm for modeling reactive gas flows

E.E. Peskova, N.A. Tingaeva

National Research Mordovia State University

Abstract: The work is devoted to the construction of a computational algorithm for the study of chemically reacting subsonic viscous flows. A multicomponent system of Navier-Stokes equations with the Low Mach numbers approximation is used to describe the flows. It is supplemented by a system of chemical kinetics equations. The algorithm for this model has been developed based on the method of splitting by physical processes. The time step is selected from the stability condition for the hyperbolic part of the system by iterating within one time step to calculate diffusion, viscosity, thermal conductivity and the dynamic component of pressure. The calculations performed on a sequence of thickening grids showed the convergence of the algorithm.

Keywords: subsonic flow, chemically active flows, computational algorithm.

References

1. Day M.S., Bell J.B. Numerical simulation of laminar reacting flows with complex chemistry // *Combustion Theory and Modelling*. 2000. Vol. 4, No. 4. P. 535–556.
2. Borisov V.E., Yakush S.E., Sysoeva E.Ya. Numerical Simulation of Cellular Flame Propagation in Narrow Gaps // *Mathematical Models and Computer Simulations*. 2022. Vol. 14. P. 755–770.
3. Marchuk G.I. *Metody rasshchepleniya*. M.: Nauka, 1988.
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.