



## Вычислительные алгоритмы для моделирования двухфазных сред с химическими реакциями и лазерным излучением<sup>1</sup>

Пескова Е.Е.

Национальный исследовательский Мордовский государственный университет, Саранск

Разработка малотоннажных установок для конверсии природного газа в непредельные углеводороды является актуальной проблемой современных химических технологий. Одним из основных этапов разработки является математическое моделирование физико-химических процессов в среде, позволяющее достаточно точно изучить основные характеристики и динамические эффекты в реакторе. Настоящий доклад посвящен разработке вычислительных алгоритмов для исследования процессов конверсии природного газа с лазерным излучением и каталитическими наночастицами в трубчатом реакторе.

Математическая модель представляет собой уравнения переноса массы газовых компонент смеси, уравнения переноса каждой фракции частиц, уравнение переноса импульса, уравнение для энтропии газа и частиц, уравнение для переноса лазерного излучения, эллиптическое уравнение для давления [1]. Система уравнений записана в цилиндрической системе координат и представляет

собой трехмерную задачу, сведенную к осесимметричной форме. Модель содержит некоторые особенности: числа Маха достаточно малы (порядка 0.001), при этом газ не может быть признан несжимаемым, поскольку активно протекающие в некоторых областях реактора химические реакции приводят к резким изменениям объема и температуры, что влечет отличие дивергенции вектора скорости от нуля. К особенностям течения также можно отнести сочетание разномасштабных процессов: быстрых химических реакций и диссипативных процессов.

Разработка эффективных вычислительных алгоритмов для моделирования подобных процессов является нетривиальной задачей. Явные схемы, отвечающие потребностям высокопроизводительных вычислений, требуют крайне малого шага по времени, а неявные схемы теряют свою эффективность за счет существенной нелинейности правой части системы. В настоящей работе используется алгоритм расщепления по физическим процессам [2] как эффективное средство решения задач, учитывающих процессы разной природы. Интегрирование уравнений химической кинетики, уравнения для интенсивности излучения, уравнения для температуры частиц проведено с использова-

<sup>1</sup>Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-21-00202, <https://rscf.ru/project/23-21-00202/>

нием неявного трехстадийного метода семейства Рунге–Кутты пятого порядка точности [3]. Расчет конвективных потоков проведен с использованием потоков Русанова [4] и WENO-схем [5]. Расчет диссипативных потоков проведен по схеме с центральными разностями. Давление в области рассчитывается итерационным методом Якоби.

Поскольку решаемая система уравнений представляет собой смешанную задачу из уравнений параболического и эллиптического типа, шаг интегрирования по времени определяется диффузионными членами, что зачастую определяет большие значения времени расчетов практических задач. Для обхода этой сложности для интегрирования диссипативных членов нами был исследован метод локальных итераций, итерационные параметры для которого вычисляются через упорядочение корней полиномов Чебышева [6]. Таким образом, нам удалось избавиться от ограничения на шаг интегрирования по времени, связанного с диссипативными процессами. Вычислительные эксперименты показали сходимость построенного алгоритма. При проведении сравнительного анализа с алгоритмом, в котором диффузионные потоки рассчитываются по схеме с центральными разностями, получено увеличение шага интегрирования

по времени и уменьшение времени счета более чем в двадцать раз.

На основе разработанного алгоритма проведено исследование осесимметричного течения газа и наночастиц в нагретой трубе с химическими реакциями и лазерным излучением. Получены картины распределения основных компонент смеси и газодинамические характеристики.

## Список литературы

- [1] *Snytnikov V.N., Peskova E.E., Stoyanovskaya O.P.* Mathematical Model of a Two-Temperature Medium of Gas-Solid Nanoparticles with Laser Methane Pyrolysis // *Mathematical Models and Computer Simulations*. 2023. V. 15. № 5. P. 877 -- 893.
- [2] *Марчук Г.И.* Методы расщепления // М.: Наука. 1988.
- [3] *Hairer E., Wanner G.* Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems // Berlin: Springer-Verlag. 1996.
- [4] *Русанов В.В.* Расчет взаимодействия нестационарных ударных волн с препятствиями // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 1961. Т. 1. № 2. С. 267--279.
- [5] *Shu C.W.* Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws // *ICASE Report*. 1997. № 97-65. P. 79.
- [6] *Жуков В.Т., Новикова Н.Д., Феодоритова О.Б.* Об одном подходе к интегрированию по времени системы уравнений Навье–Стокса // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 2020. Т. 60. № 2. С. 267–280.