

УДК 519.635

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРИМЕНЕНИЯ ЯВНО-ИТЕРАЦИОННОЙ СХЕМЫ К МОДЕЛИРОВАНИЮ ДОЗВУКОВЫХ РЕАГИРУЮЩИХ ГАЗОВЫХ ПОТОКОВ¹⁾

© 2024 г. Е. Е. Пескова^{1, *}, О. С. Язовцева^{1, **}

¹430005 Саранск, ул. Большевистская, 68,

Национальный исследовательский Мордовский гос. ун-т, Республика Мордовия, Россия

*e-mail: e.peskova@math.mrsu.ru

**e-mail: yaos@math.mrsu.ru

Поступила в редакцию 28.06.2023 г.

Поступила в редакцию 02.09.2023 г.

Поступила в редакцию 20.10.2023 г.

Статья посвящена исследованию возможности применения явно-итерационной схемы ЛИ–М для расчета диссипативных членов к решению задач дозвуковых реагирующих потоков с радикально-цепными реакциями, активными диффузионными процессами, значительной теплопередачей и энергопоглощением. Моделирование подобных течений характеризуется ограничением на шаг интегрирования по времени, связанным, в первую очередь, с преобладанием диффузионных процессов над конвективными и наличием быстрых химических реакций. Математическая модель описана с использованием многокомпонентных уравнений Навье–Стокса. Совокупность разномасштабных процессов в модели обусловила использование принципа расщепления по физическим процессам: химическая кинетика проинтегрирована методом Радо с адаптивным шагом по времени; конвективный поток рассчитывается с использованием потока Русанова и WENO схемы; диссипативные потоки с помощью явно-итерационной схемы ЛИ–М. В результате разработаны численный алгоритм и код для исследования дозвуковых реагирующих течений в осесимметричной геометрии и проведен ряд вычислительных экспериментов. Для тестирования реализованного алгоритма было решено одномерное нестационарное неоднородное уравнение. Показано, что применение схемы ЛИ–М к расчету диссипативной части позволяет избавиться от диффузионного ограничения на шаг интегрирования по времени. Было проведено численное моделирование процесса высокотемпературной конверсии метана в одномерной постановке. Данный процесс характеризуется быстрыми химическими реакциями, значительными локальными изменениями температуры, плотности газа и теплофизических характеристик, что накладывает серьезные ограничения на шаг интегрирования по времени. Показано, что алгоритм позволяет проводить расчеты с шагом, превышающим диффузионные ограничения на шаг по времени. Проведено сравнение расчетов с расчетами по ранее верифицированному алгоритму, показано хорошее совпадение результатов со значительным выигрышем по времени выполнения программы. Проведено численное моделирование течения газа в цилиндрической трубе, полученные результаты верифицированы путем сеточной сходимости. Библ. 29. Фиг.7.

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

DOI: 10.31857/S0044466924020126, EDN: YJAXQP

1. ВВЕДЕНИЕ

Задачи разработки эффективных и высокоточных вычислительных алгоритмов и программ для моделирования многокомпонентных реагирующих газовых течений широко известны и являются актуальными для современной науки и техники. Поскольку реагирующие газовые потоки характеризуются многомасштабностью протекающих физико-химических процессов, возникают жесткие ограничения на шаг интегрирования по времени. Эффективным средством решения задач, включающими в себя столь разномасштабные процессы, является использование устойчивых неявных разностных схем [Lawrence,

¹⁾ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (код проекта № 23-21-00202), <https://rscf.ru/project/23-21-00202/>.

1989, Жалнин, 2022]. Однако нелинейность источниковых членов и теплофизических характеристик газовой смеси приводит к увеличению времени неявного интегрирования. Использование параллельных технологий и распределенных вычислений для явных разностных схем способствует их активному развитию в настоящее время. Основным их недостатком является сохранение устойчивости алгоритма для сложных систем только при крайне малом шаге интегрирования по времени, что затрудняет проведение вычислительных экспериментов. Активно развиваемым подходом к моделированию реагирующих потоков с помощью явных разностных схем, является расщепление многокомпонентной системы уравнений Навье–Стокса на несколько этапов по типам рассматриваемых процессов [Борисов, 2022, Жуков, 2020]. Данные работы ориентированы на исследование сверхзвуковых реагирующих течений. В настоящей статье предложена разработка эффективного алгоритма для дозвуковых газовых потоков, которые актуальны при моделировании процессов в химических реакторах [Снытников, 2021], в гемодинамике [Василевский, 2022], задач гидродинамики в водоемах [Сухинов, 2023].

Численное решение системы уравнений Навье–Стокса при малых числах Маха, дополненной уравнениями для компонент смеси, сопряжено с трудностями, связанными со значительно различающимися временами конвективного переноса и распространения акустических возмущений, с малыми изменениями давления с одновременным изменением в разы скорости потока, с быстрыми скоростями протекания химических процессов, с преобладанием диффузионных процессов над конвективным переносом. Данные трудности широко известны и решаются посредством расщепления уравнений по физическим процессам [Марчук, 1988, Day, 2000]. Решение системы уравнений химической кинетики, как правило, проводят с собственным адаптивным шагом в рамках общего газодинамического шага. Проблемы малого изменения давления в системе решаются с использованием идеи SIMPLE-подобных алгоритмов [Флетчер, 1991, Van Doormaal, 1984, Борисов, 2015], в которых расчет давления выделяется в отдельный шаг и решается уравнение эллиптического типа. Однако, в настоящее время не решена проблема преобладания скорости диссипативных процессов над конвективными, которая возникает по причине активных химических превращений. В силу изменения компонентного состава и температуры смеси возрастают коэффициенты теплопроводности и диффузии с уменьшением общего расчетного шага на порядки. Как следствие, расчет системы уравнений химической кинетики, которая может включать в себя десятки уравнений, и использование схем повышенного порядка аппроксимации при пространственной дискретизации приводят к неприемлемым временам расчета задачи в целом.

Перспективный подход к преодолению ограничения на шаг интегрирования по времени уравнений Навье–Стокса, связанного с диссипативными процессами, описан в цикле работ В. Т. Жукова [Жуков, 2010, Жуков, 2020]. В этих работах предлагается вести расчет с шагом интегрирования по времени, определенным из условия устойчивости явной схемы для гиперболической системы, но расчет диссипативных членов предлагается вести по схеме локальных итераций. Схема основана на явном итерационном процессе, параметрами в котором являются корни многочленов Чебышёва. В отличие от неявных схем она не предполагает дополнительного предобуславливания или расчета необходимого количества итераций, что существенно упрощает ее применение для многофакторных задач. Сохранение достаточно крупного шага по времени при устойчивом счете делает ее эффективнее большинства явных схем при легкости применения к ней параллельных или распределенных вычислений. Данный алгоритм построен для классических уравнений Навье–Стокса для сверхзвуковых течений и успешно прошел валидацию и верификацию [Жуков, 2020] на задачах с известными аналитическими и численными решениями.

Настоящая работа посвящена исследованию возможности применения явно-итерационной схемы ЛИ–М для расчета диссипативных членов [Жуков, 2010] с целью увеличения шага интегрирования по времени к решению задач дозвуковых реагирующих потоков с радикально-цепными реакциями, активными диффузионными процессами, значительной теплопередачей и энергопоглощением.

Вычислительный алгоритм построен на основе ранее разработанного алгоритма для исследования дозвуковых реагирующих потоков, в котором система уравнений Навье–Стокса расщеплялась на химическую кинетику, газодинамические уравнения (включающую конвективные и диссипативные члены) и уравнение для расчета давления [Жалнин, 2017, Gubaydullin, 2021]. Общий расчетный шаг в этом алгоритме определялся величиной диссипативных членов. Согласно алгоритму, предложенному в [Жуков, 2020], газодинамический блок в настоящей работе расщеплен на конвективный и диссипативный этапы, диссипативный этап рассчитывается по явно-итерационной схеме с чебышёвскими параметрами, что позволяет вести расчет с общим шагом по времени, превышающим диффузионные ограничения. Для решения задач кинетики применен метод Радо с адаптивным шагом по времени [Haiger, 1996]. Расчет конвективных членов осуществлен с использованием потоков Русанова [Русанов, 1961] с реконструкцией газодинамических параметров на границах ячеек WENO-схемой [Shu, 1997]. Расчет диссипативного этапа проводится с применением явно-итерационной чебышёвской схемы и включает в себя 3 шага:

диффузионный, вязкий и теплопроводный. Поскольку расчет конвективных потоков проводился без учета давления, на последнем этапе необходимо рассчитать поправку к давлению и скорректировать вектор скорости. Решение эллиптического уравнения для поправки проводится методом Якоби, он является достаточно экономичным, поскольку изменения давления в области незначительны и за начальное приближение принимается давление на предыдущем шаге по времени.

Для подтверждения заявленных свойств схемы ЛИ–М и тестирования построенного алгоритма было решено одномерное неоднородное нестационарное уравнение. Вычислительные эксперименты проводились на задаче конверсии метана в одномерной и осесимметричной геометриях [Лашина, 2023]. Поскольку процесс расщепления метана возможен только под воздействием высоких температур (около 1200°C) и характеризуется быстрыми химическими реакциями, значительным энергопоглощением и преобладанием диффузии, данная задача представляется хорошим кандидатом для валидации и верификации построенного алгоритма.

2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

В настоящей работе для описания математической модели используется модификация уравнений Навье–Стокса в приближении малых чисел Маха, в основе которой лежит модель горения с малыми числами Маха [Rehm, 1978], скорректированная с использованием средств асимптотического анализа в [Majda, 1985]. Использование в модели уравнения для энтальпии смеси позволяет учитывать влияние химических реакций на энергию системы, поскольку энтальпия определяется с учетом энтальпии образования каждого вещества в ходе химической реакции. При достаточно малом числе Маха (в случае решаемых нами задач $M \approx 10^{-3}$) давление p может быть представлено в виде $p = p_0 + \pi$, где p_0 — термодинамическое давление, постоянное в области, π — динамическая составляющая давления, удовлетворяющая условию $\pi / p_0 \sim O(M^2)$. Характер существенно дозвуковых течений ($M \ll 1$) позволяет опустить учет диссипативных членов в уравнении энтальпии, вклад диссипативных сил оценивается величиной второго порядка от числа Маха [Majda, 1985]. Однако даже при таком малом числе Маха, среда не может быть признана несжимаемой, поскольку процесс характеризуется существенными локальными изменениями концентраций и термодинамических характеристик, что является следствием активной генерации радикалов.

Таким образом, система уравнений может быть записана в виде:

$$\frac{\partial \rho Y_m}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho Y_m \vec{v}) - \nabla \cdot \vec{J}_m + R_m, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) - \nabla \pi + \nabla \cdot \bar{\tau}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho h \vec{v}) - \nabla \cdot \vec{q}, \quad (3)$$

Здесь $m = \overline{1, M}$, M — количество компонент в газовой смеси, ρ — плотность смеси, Y_m — массовая доля m -й компоненты смеси, \vec{v} — вектор скорости, h — энтальпия смеси, \vec{J}_m — вектор диффузионного потока, R_m — скорость образования или расхода m -й компоненты смеси, $\bar{\tau}$ — тензор вязких напряжений, \vec{q} — вектор потока тепла.

Для термодинамической составляющей давления записывается уравнение состояния газовой смеси:

$$p_0 = \rho R T \sum_m \frac{Y_m}{M_{wm}}, \quad (4)$$

где T — температура, M_{wm} — молекулярная масса m -й компоненты смеси, R — универсальная газовая постоянная.

Плотность смеси определяется из выражения:

$$\rho = \sum_m \rho Y_m. \quad (5)$$

Вектор диффузионного потока компонента и вектор потока тепла для смеси определяются с использованием модели средних по смеси значений:

$$\vec{J}_m = -\rho D_{m,mix} \nabla Y_m, \quad (6)$$

$$\vec{q} = -\lambda \nabla T - \sum_m h_m \rho D_{m,mix} \nabla Y_m. \quad (7)$$

Тензор вязких напряжений имеет вид:

$$\bar{\tau} = \mu (\nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^T) - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \vec{v}) I, \quad (8)$$

где μ — коэффициент динамической вязкости смеси, I — единичная матрица.

Коэффициенты диффузии, вязкости, теплопроводности являются функциями, зависящими от температуры и концентраций компонент смеси [Stadnichenko, 2016].

Энтальпия реакционной смеси представляется как средневзвешенное энтальпий компонент

$$h(T, Y_m) = \sum_m Y_m h_m(T), \quad h_m = \int_{T_0}^T C_{pm}(T) dT + h_m^0. \quad (9)$$

Здесь h_m^0 — энтальпия образования m -й компоненты при стандартной температуре $T_0 = 298.15$ К, $C_{pm}(T)$ — удельная теплоемкость m -й компоненты при постоянном давлении.

Химические превращения в этой системе уравнений описываются кинетическими схемами химических реакций. Скорость образования или расхода компоненты смеси находится из выражения:

$$R_m = M_{wm} \sum_{n=1}^N \nu_{mn} w_n. \quad (10)$$

Здесь M_{wm} — молекулярная масса компоненты m , стехиометрический коэффициент компоненты m в стадии реакции n , w_n — скорость протекания стадии n , N — количество элементарных стадий.

Для замыкания систему уравнений (1)–(3) необходимо дополнить выражением для нахождения динамической составляющей давления π . Для ее определения по методу проекции [Флетчер, 1991] интегрирование уравнения (2) разделено на два этапа: предварительный расчет вектора скорости без учета динамической составляющей давления; коррекция вектора скорости на учет давления. Из последнего этапа можно получить уравнение Пуассона для динамической составляющей давления. Исследуемые течения в областях активных химических превращений характеризуются значительным изменением объема и, следовательно, плотности, что определяет ненулевое значение дивергенции вектора скорости. Для нахождения условия на дивергенцию вектора скорости используется соотношение для термодинамического давления (4), уравнение неразрывности в недивергентном виде и уравнение (3), записанное относительно температуры. Подробный вывод условия на дивергенцию вектора скорости для модели (1)–(3) представлен в работах [Борисов, 2015, Снытников, 2023]:

$$\begin{aligned} S \equiv \nabla \cdot \vec{v} = & \frac{1}{\rho C_p T} \left(\nabla \cdot \lambda \nabla T + \sum_m \rho D_{m,mix} \nabla Y_m \nabla h_m \right) + \\ & + \frac{1}{\rho} \sum_m \frac{M_w}{M_{wm}} (\nabla \cdot \rho D_{m,mix} \nabla Y_m) + \\ & + \frac{1}{\rho} \sum_m \left(\frac{M_w}{M_{wm}} - \frac{h_m}{C_p T} \right) R_m. \end{aligned} \quad (11)$$

Здесь $C_p(T)$ — теплоемкость смеси при постоянном давлении, $\lambda(T)$ — коэффициент теплопроводности смеси, $D_{m,mix}(T)$ — коэффициент диффузии m -й компоненты смеси, $h_m(T)$ — энтальпия m -й компоненты смеси, M_w — молекулярная масса смеси.

Таким образом, основными уравнениями модели являются (1)–(3), (11).

3. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ

Для исследования возможности использования явно-итерационной схемы с чебышёвскими параметрами [Жуков, 2020] для моделирования реагирующих многокомпонентных потоков с малыми числами Маха будем рассматривать систему уравнений (1)–(3) в цилиндрической системе координат для осесимметрического течения:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial(F^1(U) - H^1(U))}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r(F^2(U) - H^2(U)))}{\partial r} = W(U). \quad (12)$$

Здесь U — результирующий вектор основных переменных среды, $F^k(U) = F^{k,\text{conv}}(U) + F^{k,p}(U)$ — вектор конвективных потоков, $H^k(U) = H^{k,D}(U) + H^{k,\mu}(U) + H^{k,\lambda}(U)$ — вектор диффузионных, вязких и тепловых потоков, $W(U)$ — вектор источниковых членов, отвечающий за химические реакции:

$$U = \begin{pmatrix} \rho Y_m \\ \rho u_z \\ \rho u_r \\ \rho h \end{pmatrix}, F^{1,\text{conv}}(U) = \begin{pmatrix} \rho u_z Y_m \\ \rho u_z^2 \\ \rho u_z u_r \\ \rho h u_z \end{pmatrix}, F^{1,p}(U) = \begin{pmatrix} 0 \\ \pi \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$F^{2,\text{conv}}(U) = \begin{pmatrix} \rho u_r Y_m \\ \rho u_z u_r \\ \rho u_r^2 \\ \rho h u_r \end{pmatrix}, F^{2,p}(U) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \pi \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$H^{1,D}(U) = \begin{pmatrix} J_{mz} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, H^{1,\mu}(U) = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{zz} \\ \tau_{zr} \\ 0 \end{pmatrix}, H^{1,\lambda}(U) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ q_z \end{pmatrix},$$

$$H^{2,D}(U) = \begin{pmatrix} J_{mr} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, H^{2,\mu}(U) = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{rz} \\ \tau_{rr} \\ 0 \end{pmatrix}, H^{2,\lambda}(U) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ q_r \end{pmatrix}, W = \begin{pmatrix} R_m \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix};$$

$$J_{mz} = \rho D_{m,\text{mix}} \frac{\partial Y_m}{\partial z}, J_{mr} = \rho D_{m,\text{mix}} \frac{\partial Y_m}{\partial r},$$

$$q_z = \lambda \frac{\partial T}{\partial z} + \sum_{m=1}^M h_m \rho D_{m,\text{mix}} \frac{\partial Y_m}{\partial z}, q_r = \lambda \frac{\partial T}{\partial r} + \sum_{m=1}^M h_m \rho D_{m,\text{mix}} \frac{\partial Y_m}{\partial r},$$

$$\tau_{zz} = \mu \left(2 \frac{\partial u_z}{\partial z} - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial u_z}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial r u_r}{\partial r} \right) \right), \tau_{zr} = \mu \left(2 \frac{\partial u_r}{\partial r} - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial u_z}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial r u_r}{\partial r} \right) \right),$$

$$\tau_{zr} = \tau_{rz} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z} \right),$$

$m = \overline{1, M}$, M — количество компонент в газовой смеси, u_z , u_r — проекции вектора скорости \vec{u} на оси z и r .

Численный алгоритм для описанной системы будет релизован в рамках метода конечных объемов. Использована равномерная по каждому направлению сетка прямоугольников $\Omega_h = \{z_i = ih_z, r_j = jh_r; i = \overline{1, N_z}, j = \overline{1, N_r}; N_z h_z = L_z, N_r h_r = L_r\}$, $L_{z(r)}$ — размеры расчетной области вдоль осей $\{z, r\}$. В каждой ячейке сетки заданы значения газодинамических параметров и концентраций компонент смеси. Систему уравнений (12) необходимо дополнить граничными условиями, для расчетов представленной модели задаются условия втекания и вытекания потока, условия прилипания с температурой стенок, на оси симметрии задаются условия симметрии.

Интегрированием по ячейкам сетки строится разностная схема:

$$\frac{U^{n+1} - U^n}{\Delta t} + L_h \left(F^{\text{conv}}(U) + F^p(U) - H^D(U) - H^\mu(U) - H^\lambda(U) \right) = W(U). \quad (13)$$

Здесь $L_h F^{\text{conv}}(U)$, $L_h F^p(U)$, $L_h H^D(U)$, $L_h H^\mu(U)$, $L_h H^\lambda(U)$ — сеточные аналоги конвективных, диффузионных, вязких и тепловых потоков, $W(U)$ — дискретный аналог скорости образования или расхода каждой компоненты смеси.

Переход с шага по времени t^n на шаг $t^{n+1} = t^n + \Delta t$ по схеме (13) строится на основе расщепления на решение уравнений химической кинетики, на гиперболическую задачу без учета давления, параболическую задачу и эллиптическую задачу для расчета давления. В свою очередь параболическая задача делится на три этапа: расчет диффузионных, вязких и теплопроводных членов.

Опишем каждый этап построения схемы. Пусть на шаге t^n имеем значения вектора $U^n = (\rho Y_m, \rho u_z, \rho u_r, \rho h)$, $m = \overline{1, M}$. Температуру смеси T находим с использованием метода Ньютона из равенства (9).

Первым этапом интегрирования является решение уравнений химической кинетики:

$$\frac{U^{\text{chem}} - U^n}{\Delta t} = W(U^n). \quad (14)$$

Для решения использован подключаемый модуль RADAU5 [Hairer, 1996], реализующий трехстадийный метод Рунге-Кутты пятого порядка точности с адаптивным шагом по времени. Результатом расчетов является обновленный вектор $U^{\text{chem}} = ((\rho Y_m)^{\text{chem}}, \rho u_z, \rho u_r, \rho h)^T$, $m = \overline{1, M}$, в котором последние три строки остаются неизменными после этого этапа.

На втором этапе проведен расчет конвективных потоков без учета давления.

Данный этап реализован явно с нахождением значений потоков на границе ячейки с использованием потоков Русанова [Русанов, 1961].

$$\frac{U^{\text{conv}} - U^{\text{chem}}}{\Delta t} + L_h F^{\text{conv}}(U^n) = 0. \quad (15)$$

В обновленный вектор $U^{\text{conv}} = ((\rho Y_m)^{\text{conv}}, (\rho u_z)^{\text{conv}}, (\rho u_r)^{\text{conv}}, (\rho h)^{\text{conv}})^T$, $m = \overline{1, M}$, записывается результат расчета.

Здесь

$$L_h F^{\text{conv}}(U^n) = \frac{F_{i+1/2j}^{1,\text{conv}} - F_{i-1/2j}^{1,\text{conv}}}{h_z} + \frac{r_{ij+1/2} \cdot F_{ij+1/2}^{2,\text{conv}} - r_{ij-1/2} \cdot F_{ij-1/2}^{2,\text{conv}}}{r \cdot h_r},$$

$$F_{i+1/2j}^{1,\text{conv}} = 0.5 \left(F_{i+1/2j}^{1,\text{conv}}(U_{i+1/2j}^+) + F_{i+1/2j}^{1,\text{conv}}(U_{i+1/2j}^-) - \alpha_1 (U_{i+1/2j}^+ - U_{i+1/2j}^-) \right),$$

$$F_{ij+1/2}^{2,\text{conv}} = 0.5 \left(F_{ij+1/2}^{2,\text{conv}}(U_{ij+1/2}^+) + F_{ij+1/2}^{2,\text{conv}}(U_{ij+1/2}^-) - \alpha_2 (U_{ij+1/2}^+ - U_{ij+1/2}^-) \right),$$

$$\alpha_1 = \max(|u_{z,i+1/2j}^+|, |u_{z,i+1/2j}^-|),$$

$$\alpha_2 = \max(|u_{r,ij+1/2}^+|, |u_{r,ij+1/2}^-|),$$

где $U_{i+1/2j}^+$, $U_{i+1/2j}^-$ — значения вектора переменных U^{chem} слева и справа от границы между i и $i+1$ ячейками, рассчитываются по WENO схеме 5-го порядка [Shu, 1997].

Третий этап алгоритма — диссипативный.

Он состоит из трех явно-итерационных процедур, примененных последовательно к уравнениям законов сохранения массы, импульса и энтальпии без учета конвективных членов. Каждую из подзадач можно записать в виде:

$$\frac{\partial H}{\partial t} - D_h V = f_h. \quad (16)$$

Для случая решения системы уравнений сохранения массы

$$\begin{aligned} H &= (\rho Y_m)^\top, \quad V = (Y_m)^\top, \\ D_h V &= \left(\nabla \cdot (\rho D_{m,mix} \nabla Y_m) \right)^\top, \\ f_h &= 0, \quad m = \overline{1, M}; \end{aligned}$$

уравнения сохранения импульса:

$$H = (\rho u_z, \rho u_r)^\top, \quad V = (u_z, u_r)^\top, \quad D_h V = \nabla \cdot (\bar{\tau}), \quad f_h = 0;$$

уравнения сохранения энергии:

$$\begin{aligned} H &= \rho h, \quad V = T, \quad D_h V = \nabla \cdot (\lambda \nabla T), \\ f_h &= \nabla \cdot \left(\sum_{m=1}^M h_m \rho D_{m,mix} \nabla Y_m \right). \end{aligned}$$

Здесь ∇ — оператор дивергенции в цилиндрической системе координат.

Для каждой из подзадач применена следующая итерационная процедура ($l = \overline{1, 2p-1}$):

$$H^l = \frac{H^{\text{conv}} + \Delta t b_l H^{l-1} + \Delta t (D_h V^{l-1} + f_h)}{1 + \Delta t b_l}. \quad (17)$$

Алгоритм нахождения итерационных параметров b_l приведен в следующем разделе.

Применив процедуру (17) к уравнениям сохранения массы, где $H^{\text{conv}} = ((\rho Y_m)^{\text{conv}})^\top$, $H^0 = ((\rho Y_m)^n)^\top$, $m = \overline{1, M}$, — векторы, составленные из концентраций компонент газовой смеси, получим вектор

$$H^l = H^{n+1} = ((\rho Y_m)^{n+1})^\top. \quad (18)$$

Из H^{n+1} находим переменные $\rho^{n+1} = \sum_m (\rho Y_m)^{n+1}$, $Y_m^{n+1} = (\rho Y_m)^{n+1} / \rho^{n+1}$, $m = \overline{1, M}$.

После применения процедуры (17) к уравнениям сохранения импульса с $H^{\text{conv}} = ((\rho u_z)^{\text{conv}}, (\rho u_r)^{\text{conv}})^\top$, $H^0 = ((\rho u_z)^n, (\rho u_r)^n)^\top$ получим

$$H^l = H^{n+1} = \left((\rho u_z^*)^{n+1}, (\rho u_r^*)^{n+1} \right)^\top, \quad (19)$$

откуда с помощью H^{n+1} находим $u_z^* = \frac{(\rho u_z^*)^{n+1}}{\rho^{n+1}}$, $u_r^* = \frac{(\rho u_r^*)^{n+1}}{\rho^{n+1}}$. Это значение скорости предварительное, поскольку в расчетах пока не учтено влияние давления.

Применим процедуру (17) к уравнениям сохранения энергии в энтальпийной форме при $H^{\text{conv}} = (\rho h)^{\text{conv}}$, $H^0 = (\rho h)^n$, $f_h = \nabla \cdot \left(\sum_{m=1}^M h_m \rho D_{m,mix} \nabla Y_m \right)$. Значения переменной f_h рассчитаны из значений на временном слое n . В результате получим

$$H^l = H^{n+1} = (\rho h)^{n+1}. \quad (20)$$

С помощью H^{n+1} найдем $h^{n+1} = \frac{(\rho h)^{n+1}}{\rho^{n+1}}$.

Четвертый этап заключается в коррекции вектора скорости и расчете динамической составляющей давления.

Особенностью течений с малыми числами Маха является крайне малое изменение давления при одновременном увеличении скорости в разы за счет химических реакций и диссипативных процессов, поэтому для учета влияния давления на скорость система уравнений (12) решена без учета потока $F^p(U)$. Скорость должна быть скорректирована после вычисления давления согласно выражению, полученному из уравнения сохранения импульса, преобразованного с учетом уравнения неразрывности:

$$\frac{\vec{u}^{n+1} - \vec{u}^*}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho^n} \nabla \pi^{n+1}. \quad (21)$$

Возьмем дивергенцию от обеих частей выражения (21) и, согласно условию на дивергенцию вектора скорости (11), получим уравнение Пуассона для определения динамической составляющей давления π^{n+1} :

$$\nabla \cdot \frac{1}{\rho^n} \nabla \pi^{n+1} = \frac{1}{\Delta t} (\nabla \cdot \vec{u}^* - S^{n+1}). \quad (22)$$

В этом уравнении S^{n+1} рассчитано с использованием параметров на шаге $n + 1$, найденных на предыдущих этапах схемы. Полученное уравнение решается итерационным методом Якоби. Поскольку изменения давления в области незначительны и за начальное приближение принимается давление на предыдущем шаге по времени, достаточно одной-двух итераций данного метода. После нахождения динамической составляющей давления π^{n+1} проводим коррекцию вектора скорости с использованием выражения (21), в результате получаем u_z^{n+1}, u_r^{n+1} .

4. АЛГОРИТМ НАХОЖДЕНИЯ ИТЕРАЦИОННЫХ ПАРАМЕТРОВ

Алгоритм схемы локальных итераций ЛИ–М подробно описан в работах [Жуков, 2010, Жуков, 2020]. В данном разделе приведены расчетные формулы для степени чебышевского многочлена и итерационных параметров.

Схема ЛИ–М является двухслойной по времени, и алгоритм перехода от слоя t^n к слою t^{n+1} — явно-итерационный. Число итераций l определяется из условия устойчивости и рассчитывается для каждого слоя n . В данной работе мы используем схему ЛИ–М точности $O(\Delta t)$.

Степень чебышёвского многочлена p задается формулой:

$$p = \langle 0.25\pi\sqrt{\Delta t\lambda_{\max}} + 1 \rangle, \quad (23)$$

где $\langle s \rangle$ — наименьшее целое, большее или равное s , $\lambda_{\max} = \lambda_{\max}^D + \lambda_{\max}^u + \lambda_{\max}^\lambda$ — сумма значений верхних границ спектров дискретных операторов, отвечающих аппроксимациям процессов диффузионного переноса за счет диффузии, вязкости и теплопроводности. В соответствии с теоремой Гершгорина о кругах [29] величины $\lambda_{\max}^D, \lambda_{\max}^u, \lambda_{\max}^\lambda$ можно рассчитать, вычисляя для каждого узла сетки сумму модулей коэффициентов разностных аппроксимаций диссипативных членов.

Рассчитываем множество нулей многочлена Чебышёва и упорядочиваем их для устойчивости [26]:

$$K_p = \left\{ \cos \frac{2i-1}{2p} \pi, i = \overline{1, p} \right\}. \quad (24)$$

По упорядоченному множеству $\beta_m \in K_p$, $m = \overline{1, p}$, рассчитываем параметры

$$\alpha_m = \frac{\lambda_{\max}}{1 + z_1} (z_1 - \beta_m), \quad m = \overline{1, p}, \quad (25)$$

где корню $\beta_1 = z_1 = \cos \frac{0.5\pi}{p}$ соответствует параметр $a_1 = 0$.

Окончательно набор итерационных параметров состоит из $l = 2p - 1$ чисел $\{b_1, \dots, b_l\} = \{a_p, \dots, a_2, a_p, \dots, a_2, a_1\}$.

5. ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

Настоящий раздел посвящен вычислительным экспериментам для одномерного неоднородного нестационарного уравнения, имеющего аналитическое решение, с целью сопоставления полученных результатов расчетов. Также проиллюстрированы заявленные свойства вычислительного алгоритма: возможность проведения расчетов с шагом, превышающим диффузионные ограничения на шаг по времени. Во второй части раздела представлены расчеты пространственно одномерной задачи дозвукового течения реагирующей газовой смеси с радикальной кинетикой углеводородов. Проведен сравнительный анализ описанного в настоящей статье алгоритма на основе схемы ЛИ–М и разработанного ранее вычислительного алгоритма, верифицированного на экспериментальных данных, численных и аналитических решениях. В третьей части раздела представлены расчеты практической задачи высокотемпературной конверсии метана в осесимметричной геометрии течения, проведена демонстрация сеточной сходимости построенного алгоритма.

5.1. Решение одномерного неоднородного уравнения

Для тестирования алгоритма рассмотрим одномерное неоднородное нестационарное уравнение [Зайцев, 1996, Снытников, 2001]

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u), \quad (26)$$

где $f(u) = -\theta + \gamma e^{-2u}$, имеющее аналитическое решение

$$u(x, t) = \ln \left(\pm \sqrt{\frac{\gamma}{\theta}} + c \cdot \exp(\pm \sqrt{\theta} x - t(\theta \pm \sqrt{\theta})) \right). \quad (27)$$

Выбор данного уравнения обусловлен наличием конвективного и диссипативного переноса, и неоднородной части, схожей с уравнениями химической кинетики. В расчетах принимаем $\theta = 1$, $\gamma = 1$, $x \in [0, 2]$, $t \in [0, 2]$.

Нами проведены расчеты с использованием алгоритма из п. 3 с расщеплением на нелинейную правую часть (выражение (14)), расчет конвективной части (выражение (15)) и расчет диссипативной части (выражение (16)) с отношением $\frac{\Delta t}{h} = 0.1$. Также проведен расчет по схеме без расщепления на конвективную и диссипативную составляющую, последняя рассчитывалась по схеме с центральными разностями. Шаг по времени в данном случае ограничен условием $\frac{\Delta t}{h^2} \leq 0.5$, в расчетах принималось $\frac{\Delta t}{h^2} = 0.2$.

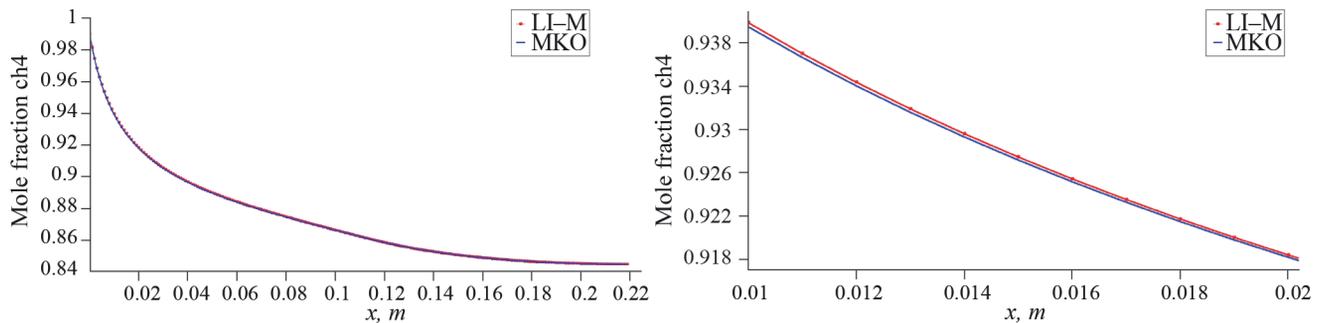
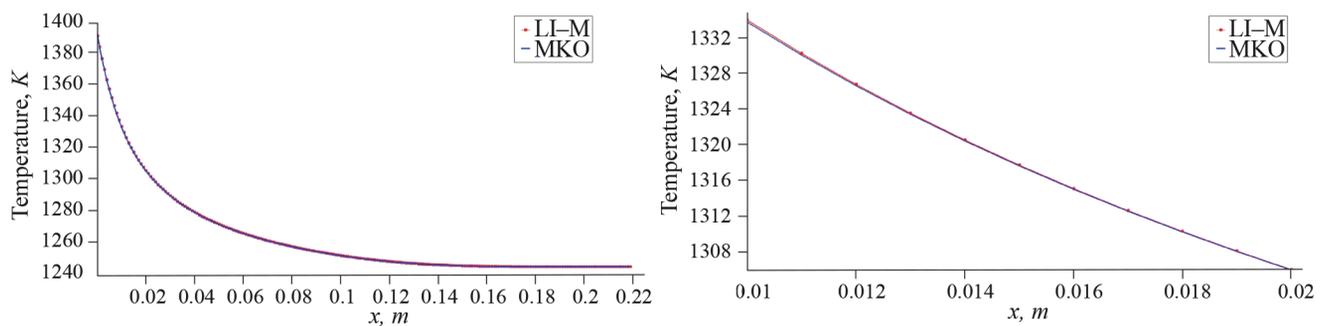
Для сетки размерности $N = 100$, $h = 0.02$ схема ЛИ–М делает 1000 шагов по времени, но на каждом шаге происходит пересчет диссипативного потока $l = 2p - 1$ раз, степень чебышёвского многочлена $p = 4$. На этой же сетке и временном интервале явная схема делает 25000 шагов по времени. Замеряемое расчетное время данной одномерной задачи показало, что алгоритм, основанный на схеме ЛИ–М требует в 20 раз меньше расчетного времени. Максимальное отклонение численного решения по схеме ЛИ–М от точного при $h = 0.02$ составило $\Delta_{\max} = 7.2 \cdot 10^{-4}$. Мы не приводим в этом разделе сопоставления графиков точного решения и расчетов по явной схеме и схеме ЛИ–М, а также на последовательности сгущающихся сеток, поскольку все решения дают результаты с очень малым различием.

5.2. Решение одномерных дозвуковых уравнений Навье–Стокса с радикальной кинетикой углеводородов

С использованием построенного вычислительного алгоритма решены уравнения Навье–Стокса в приближении малых чисел Маха с радикальной кинетикой углеводородов в пространственно-одномерной расчетной области. Очевидно, что вычислительный алгоритм для пространственно одномерной системы естественным образом вытекает из представленной осесимметричной схемы (разд. 3) обнулением члена, отвечающего производной по координате, сонаправленной с цилиндрическим радиусом. Проведено сравнение новых результатов с результатами ранее разработанного кода для исследования дозвуковых реагирующих газовых течений, конвективные и диффузионные потоки в котором рассчитывались без расщепления по явной схеме [Жалнин, 2017]. Алгоритм без расщепления был протестирован в двумерной и осесимметричной постановке на экспериментальных данных и аналитических решениях [Жалнин, 2017, Gubaydullin, 2021], что говорит о правомерности сравнения с ним.

Таблица 1. Сравнение эффективности алгоритмов

	Алгоритм на основе ЛИ–М	Алгоритм на основе МКО [Жалнин, 2017]
Шаг по времени Δt , сек	$0.5 \cdot 10^{-3}$	10^{-4}
Число шагов	2000	10000
Расчетное время, сек	350	1668

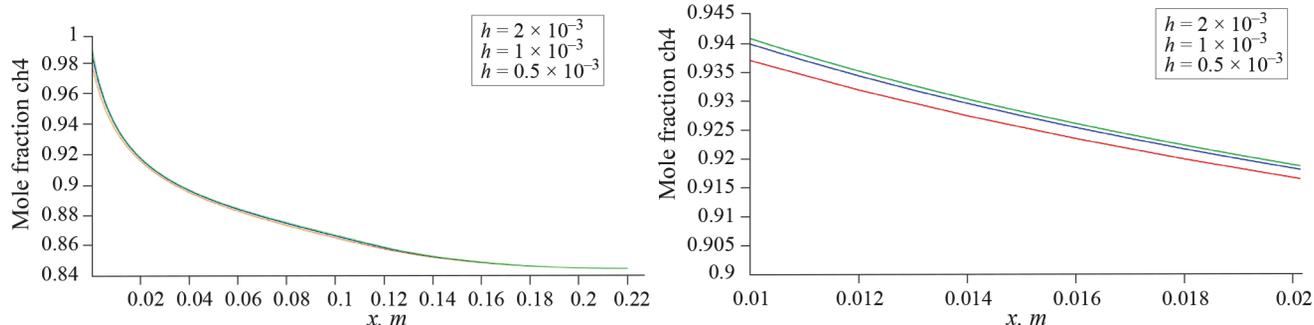
**Фиг. 1.** Распределение метана по длине реактора: красный пунктир – схема ЛИ–М, синяя линия – схема [Жалнин, 2017].**Фиг. 2.** Распределение температуры по длине реактора: красный пунктир – схема ЛИ–М, синяя линия – схема [Жалнин, 2017].

Вычислительные эксперименты проводились в области $\Omega = [0 \text{ м}, 0.22 \text{ м}]$. В начальный момент времени область заполнена метаном (CH_4), скорость 0.1 м/сек, давление 101325 Па. На входе слева подается газ, аналогичный исходной смеси. Справа задано условие вытекания, давление 101325 Па. Варьировались температуры газа на входе и в области. Расчеты проводились до 1 секунды.

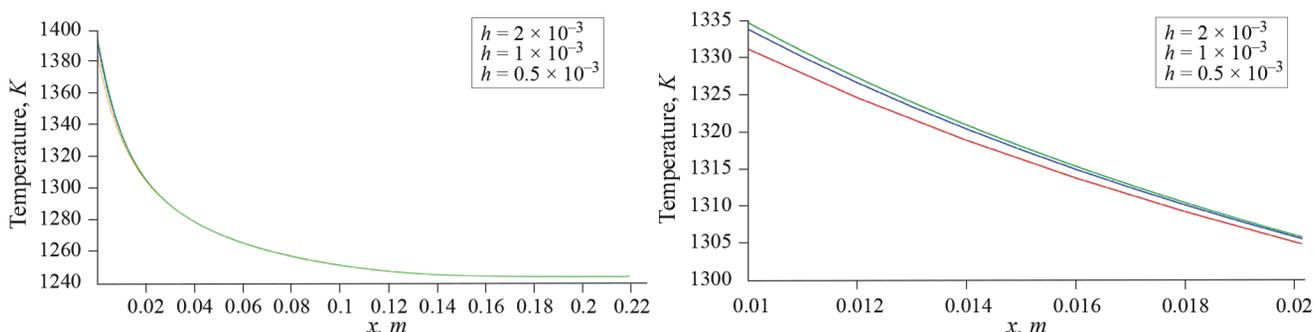
Для описания схемы химических превращений принята радикальная кинетическая схема [Лашина, 2023], включающая $M = 15$ компонент смеси.

В расчетах принимаем равномерную сетку отрезков с шагом $h = 10^{-3}$ м. Шаг интегрирования по времени задавался следующим образом. Для конвективных процессов шаг по времени определяется из условия Куранта–Фридрихса–Леви $\frac{a\tau_{\text{conv}}}{h} \leq 1$. Максимально допустимый шаг для исследуемой задачи в случае отсутствия диссипативных членов определен как $\tau_{\text{conv}} \approx 0.5 \cdot 10^{-2}$ сек, поскольку скорость распространения возмущений приближенно равна $a \approx 0.15$ м/сек. Как известно, на практике значение шага интегрирования зачастую принимается ниже расчетного. Возьмем шаг интегрирования равный

$\Delta t = 0.5 \cdot 10^{-3}$ сек. Диффузионный шаг по времени определяется как $\Delta t_{\text{dif}} = \frac{1}{\lambda_{\text{max}}}$ посредством вычисления верхних границ спектров дискретных операторов, отвечающих аппроксимациям процессов



Фиг. 3. Распределение метана: расчет на сгущающихся сетках.



Фиг. 4. Распределение температуры: расчет на сгущающихся сетках.

диффузионного переноса, вязкости и теплопроводности. В рассматриваемом в настоящей работе диапазоне температур $\Delta t_{\text{dif}} \approx 10^{-4}$ сек.

Ниже представлено сравнение быстродействия алгоритмов на основе ЛИ-М (3–5 итераций для диссипативных членов внутри общего расчетного шага) и метода конечных объемов [Жалнин, 2017] при начальной температуре реакционной смеси 1400 К.

Из табл. 1 следует, что расчет ускорен более, чем в четыре раза, несмотря на высокую трудоемкость решения уравнений химической кинетики.

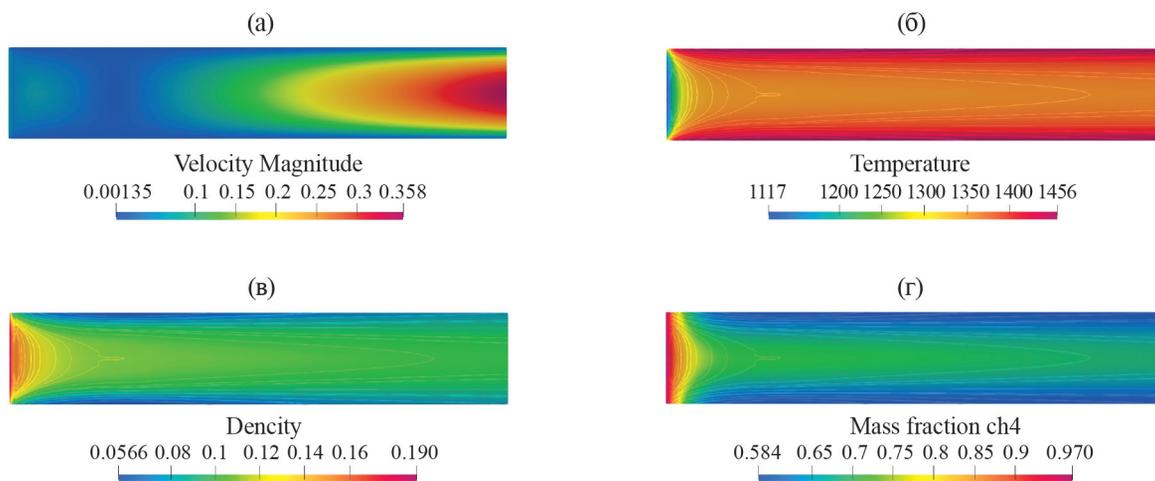
На фиг. 1, 2 представлены профили мольной доли метана и температуры газовой смеси по реактору для двух расчетных схем, справа — фрагменты графиков в области резких изменений газодинамических характеристик и концентраций веществ ($[0.01\text{ м}, 0.02\text{ м}]$). Из графиков очевидна согласованность результатов расчетов различными методами.

Исследование сходимости построенного алгоритма было проведено на последовательности сгущающихся сеток ($h = 0.5 \cdot 10^{-3}$ м, $h = 10^{-3}$ м, $h = 2 \cdot 10^{-3}$ м) с сохранением отношения $\frac{\Delta t}{h} = 0.5$. Результаты

расчетов представлены на фиг. 3, 4. Во всей расчетной области Ω решения практически неразличимы (левый график), поэтому справа выделены фрагменты графиков, где отличия заметны — в области падения температуры и мольной доли метана.

5.3. Моделирование конверсии метана в осесимметричной геометрии

Вычислительные эксперименты проводились в реакторе цилиндрической формы длиной 220 мм, шириной 40 мм. В начальный момент времени область заполнена метаном (CH_4), температура 1073 К, давление 101325 Па. На входе слева по всему диаметру трубы подается метан температурой 1073 К с расходом 40 л/ч. Справа по всему диаметру трубы задано условие вытекания, давление 101325 Па. Температура стенок 1473 К. Данные условия приводят к значительным перепадам температуры, плотности и концентрации в расчетной области в начальные моменты времени. Для описания схемы химических превращений принята схема [Лашина, 2023] с 15 компонентами смеси, как в разделе выше.

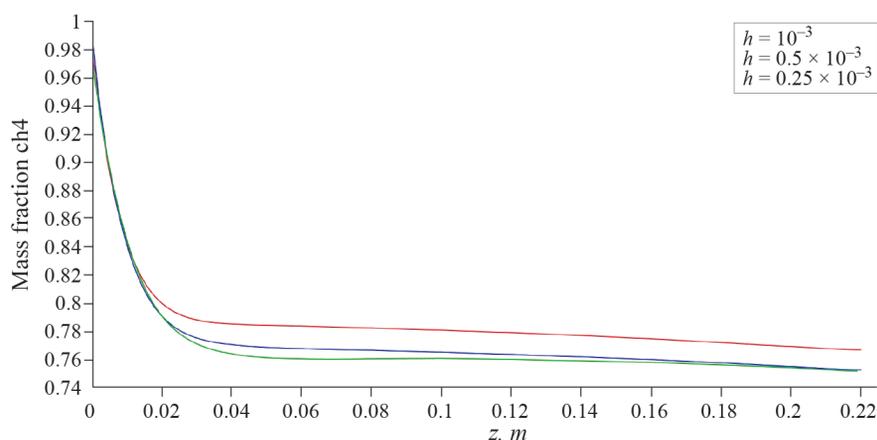


Фиг. 5. Распределение газодинамических характеристик и метана по трубе: (а) скорость; (б) температура; (в) плотность; (г) массовая доля метана.

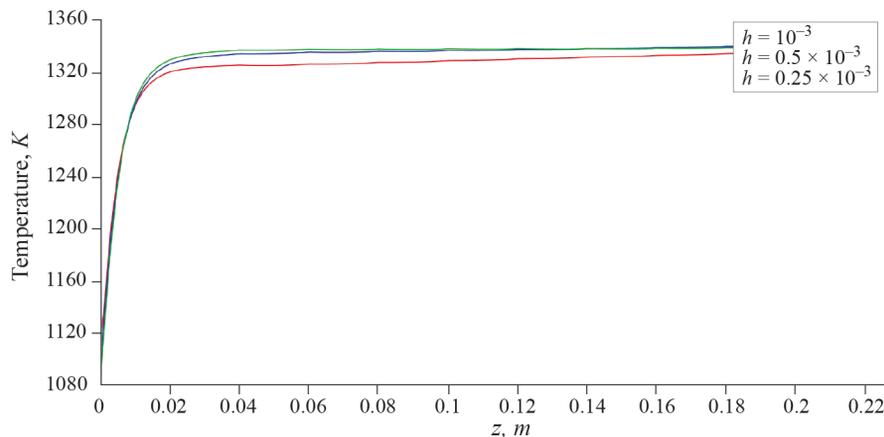
В расчетах принимаем равномерную сетку прямоугольников с шагом $h_z = h_r = 10^{-3}$ м. Поскольку скорость распространения возмущений для данной задачи может превышать 1 м/с, шаг интегрирования по времени возьмем $\Delta t = 10^{-4}$ сек. Отметим, что расчетный диффузионный шаг для данной задачи $\Delta t_{\text{dif}} \approx 10^{-5}$.

На фиг. 5 представлены результаты вычислительного эксперимента в момент времени 0.5 сек. Из графиков видно, что газодинамические параметры внутри области отличаются на порядки, что оказывает влияние на значения коэффициентов диффузии. Скорость смеси (фиг. 5а) теряет свое начальное распределение во второй части трубы, в которой происходит значительное ускорение потока. Около стенок формируется зона активных химических превращений с уменьшением доли метана (фиг. 5г) за счет нагрева стенок реактора (фиг. 5б). В центральной части реактора температура газовой смеси ниже, поскольку здесь происходят эндотермические реакции с поглощением энергии. Поскольку давление в реакторе равно атмосферному, нагрев приводит к разрежению газа с минимальным значением плотности у стенок (фиг. 5в). Максимальные значения плотности наблюдаются у входа газовой смеси, поскольку поступает относительно холодный метан.

Было проведено исследование сходимости на последовательности сгущающихся сеток (220×20 , 440×40 , 880×80) с сохранением отношения $\frac{\Delta t}{h} = 0.1$. Результаты расчетов вдоль оси реактора представлены на фиг. 6, 7. При дальнейшем увеличении количества расчетных ячеек графики неразличимы с сеткой размерности 880×80 . Можно сделать вывод о сеточной сходимости алгоритма для случая осесимметричного течения.



Фиг. 6. Распределение метана: расчет на сгущающихся сетках.



Фиг. 7. Распределение температуры: расчет на сгущающихся сетках.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В статье исследована возможность применения явно-итерационной схемы ЛИ–М для расчета диссипативных членов при исследовании дозвуковых реагирующих газовых потоков с резкими локальными изменениями газодинамических и термодинамических параметров за счет химических реакций и, как следствие, преобладанием диффузионных процессов над конвективными. Для достижения поставленной цели разработаны вычислительный алгоритм и код, проведен ряд вычислительных экспериментов.

Выполнены расчеты одномерного неоднородного нестационарного уравнения, получено хорошее соответствие расчетных и аналитических решений, а также показана возможность избежать диффузионного ограничения на шаг по времени. Алгоритм применен для решения одномерных дозвуковых уравнений Навье–Стокса с радикальной кинетикой углеводородов, получено хорошее согласование с ранее разработанным верифицированным алгоритмом. Проведено моделирование конверсии метана в осесимметричной геометрии течения, получены картины распределения газодинамических характеристик. Расчет на последовательности сгущающихся сеток показал сходимость построенного алгоритма. Сделаны выводы о возможности проведения расчетов системы уравнений Навье–Стокса с дозвуковым характером течения с шагом по времени большим, чем для явного счета процессов диффузии, что значительно сокращает расчетное время даже в присутствии жестких систем уравнений химической кинетики и схем повышенного порядка аппроксимации.

Авторы выражают благодарность В. Н. Снытникову за предоставление экспериментального материала и продуктивное обсуждение результатов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lawrence S. L., Tannehill J. C., Chaussee D. S. Upwind Algorithm for the Parabolized Navier–Stokes Equations // AIAA Journal. 1989. V. 27. N 9. P. 1175–1183.
2. Жалнин Р. В., Масыгин В. Ф., Тишкин В. Ф. Решение двумерных задач газовой динамики с использованием неявной схемы для метода Галеркина с разрывными базисными функциями на неструктурированных треугольных сетках // Сиб. журнал вычисл. матем.. 2022. Т. 25. № 1. С. 19–32.
3. Борисов В. Е., Критский Б. В., Рыков Ю. Г. Программный модуль MCFL–Chem для расчета высокоскоростных течений смеси реагирующих газов // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. 2022. № 21. 40 с.
4. Жуков В. Т., Феодоритова О. Б., Новикова Н. Д., Дубень А. П. Явно-итерационная схема для интегрирования по времени системы уравнений Навье–Стокса // Матем. моделирование. 2020. Т. 32. № 4. С. 57–74.
5. Снытников В. Н., Снытников Вл. Н., Масюк Н. С., Маркелова Т. В., Пармон В. Н. Приборы и техника эксперимента // Combustion Theory and Modelling. 2021. № 3. С. 129–137.
6. Василевский Ю. В., Симаков С. С., Гамилов Т. М., Саламатова В. Ю., Добросердова Т. К., Копытов Г. В., Богданов О. Н., Данилов А. А., Дергачев М. А., Добровольский Д. Д., Косухин О. Н., Ларина Е. В., Мелешкина А. В., Мычка Е. Ю., Харин В. Ю., Чеснокова К. В., Шипилов А. А. Персонализация математических моделей в кардиологии: трудности и перспективы // Компьютерные исследования и моделирование. 2022. Т. 14. № 4. С. 911–930.

7. *Сухинов А. И., Чистяков А. Е., Никитина А. В., Атаян А. М., Литвинов В. Н.* Метод решения сеточных уравнений для задач гидродинамики в плоских областях // Матем. моделирование. 2023. Т. 35. № 3. С. 35–58.
8. *Марчук Г. И.* Методы расщепления. М.: Наука, 1988.
9. *Day M. S., Bell J. B.* Numerical simulation of laminar reacting flows with complex chemistry // Combustion Theory and Modelling. 2000. V. 4. N 4. P. 535–556.
10. *Флетчер К.* Вычислительные методы в динамике жидкости. М.: Мир, 1991.
11. *Van Doormaal J. R., Raithby G. D.* Enhancement of the SIMPLE method for predicting incompressible fluid flow // Heat Transfer. 1984. V. 7. P. 147–163.
12. *Борисов В. Е., Кулешов А. А., Савенков Е. Б., Якуш С. Е.* Программный комплекс TCS3D: вычислительная модель // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. 2015. № 110. 20 с.
13. *Жуков В. Т.* О явных методах численного интегрирования для параболических уравнений // Математическое моделирование. 2010. Т. 22. № 10. С. 127–158.
14. *Жуков В. Т., Новикова Н. Д., Феодоритова О. Б.* Об одном подходе к интегрированию по времени системы уравнений Навье–Стокса // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2020. Т. 60. № 2. С. 267–280.
15. *Жалнин Р. В., Пескова Е. Е., Стадниченко О. А., Тишкин В. Ф.* Моделирование течения многокомпонентного реагирующего газа с использованием алгоритмов высокого порядка точности // Вестн. Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. 2017. Т. 27. № 1. С. 608–617.
16. *Gubaydullin I. M., Zhalnin R. V., Masyagin V. F., Peskova E. E., Tishkin V. F.* Simulation of propane pyrolysis in a flow-through chemical reactor under constant external heating // Mathematical Models and Computer Simulations. 2021. V. 13. N 3. P. 437–444.
17. *Hairer E., Wanner G.* Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems. Springer-Verlag, Berlin, 1996.
18. *Русанов В. В.* Расчет взаимодействия нестационарных ударных волн с препятствиями // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1961. Т. 1. № 2. С. 267–279.
19. *Shu C. W.* Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws // ICASE Report. 1997. № 97–65. P. 79.
20. *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. Т. 31. № 3. С. 288–296.
21. *Rehm R. G., Baum H. R.* The equation of motion for thermally driven, buoyant flows // J. Research NBS. 1978. V. 83. № 3. P. 297–308.
22. *Majda A., Sethian J.* The derivation and numerical solution of the equations for zero Mach number combustion. Combustion Science and Technology. 1986. V. 42. P. 185–205.
23. *Stadnichenko O. A., Snytnikov V. N., Snytnikov V. N., Masyuk N. S.* Mathematical modeling of ethane pyrolysis in a flow reactor with allowance for laser radiation effects // Chemical Engineering Research and Design. 2016. V. 109. P. 405–413.
24. *Борисов В. Е., Кулешов А. А., Савенков Е. Б., Якуш С. Е.* Программный комплекс TCS3D: математическая модель // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. 2015. № 6. 20 с.
25. *Снытников В. Н., Пескова Е. Е., Стояновская О. П.* Модель двухтемпературной среды газ-твердые наночастицы с лазерным пиролизом метана // Математическое моделирование. 2023. Т. 35. № 4. С. 24–50.
26. *Лебедев В. И., Финогенов С. А.* О порядке выбора итерационных параметров в чебышёвском циклическом методе // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1971. Т. 11. № 2. С. 425–438.
27. *Зайцев В. Ф., Полянин А. Д.* Дифференциальные уравнения с частными производными: Справочник. М.: Международный. программа, 1996.
28. *Снытников В. Н., Юрченко Е. М.* Схема расщепления для задач фильтрации газа с химическими реакциями // Вычисл. технологии. 2001. Т. 6. № 5. С. 95–105.
29. *Гантмахер Ф. Р.* Теория матриц. М.: Наука, 1966.