



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«МОСКОВСКИЙ АВИАЦИОННЫЙ ИНСТИТУТ  
(национальный исследовательский университет)»

---

Институт (Филиал) № 8 «Компьютерные науки и прикладная математика» Кафедра 806  
Группа М8О-207М-23 Направление подготовки 01.03.02 «Прикладная математика и  
информатика»

---

Профиль Информатика

---

Квалификация: бакалавр

---

## ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА МАГИСТРА

на тему: Численное моделирование течения струй газа с неравновесным  
химическим процессом

Автор ВКРм: Садаков Александр Александрович ( )

Руководитель: Демидова Ольга Львовна ( )

Консультант: — ( )

Консультант: — ( )

Рецензент: — ( )

**К защите допустить**

Заведующий кафедрой № 806 Крылов Сергей Сергеевич ( )

\_\_\_\_ мая 2025 года

## РЕФЕРАТ

Научно-исследовательская работа состоит из 62 страниц, 27 рисунков, 3 таблиц, 42 использованных источников, 1 приложения.

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ, МЕТОД КРАНКА-НИКОЛСОНА, ЖЁСТКИЕ СИСТЕМЫ, ХИМИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА, ТУРБУЛЕНТНОСТЬ, ВЯЗКОСТЬ, РЕЙНОЛЬДС

Объектом исследования является моделирование турбулентных течений.

Цель работы — разработка программы для моделирования уравнений газовой динамики в турбулентных и ламинарных потоках.

Значительный прогресс в понимании природы и свойств турбулентности произошёл в последние десятилетия благодаря успехам теории динамических систем, позволившим понять как хаотическое поведение возникает в детерминированных системах.

Также развитие численных методов решения систем дифференциальных уравнений и увеличение расчётных мощностей современных компьютеров позволяют применять различные современные модели турбулентности и усовершенствовать их на основании результатов численных экспериментов.

В процессе работы были созданы отдельные модули для решения задач химической кинетики, моделирования ламинарных и турбулентных потоков и генерации отчётов решения/моделирования. Так же были созданы модули для графического отображения результатов и взаимодействия с пользователем.

В качестве основного решателя используется схема Кранка-Николсона, решающая систему уравнений итеративно. На каждой итерации отдельно решается система дифференциальных уравнений для моделирования горения химических компонент с использованием явной схемы Рунге-Кутты 4-го порядка.

В дальнейшем результаты работы можно использовать для научных расчётов и моделирования физических процессов течения струй.

## СОДЕРЖАНИЕ

|  |    |
|--|----|
| ТЕРМИНЫ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ . . . . .                                      | 5  |
| ПЕРЕЧЕНЬ СОКРАЩЕНИЙ И ОБОЗНАЧЕНИЙ . . . . .                          | 7  |
| ВВЕДЕНИЕ . . . . .   | 9  |
| 1 АКТУАЛЬНОСТЬ ТЕМЫ . . . . .  | 11 |
| 2 ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ РАБОТЫ . . . . .                                     | 13 |
| 2.1 Цель работы . . . . .  | 13 |
| 2.2 Задачи проекта . . . . .   | 13 |
| 2.3 Научная новизна и практическая значимость работы . . . . .       | 15 |
| 3 ПРОГРАММЫ И БИБЛИОТЕКИ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ<br>ТЕЧЕНИЙ . . . . .      | 17 |
| 3.1 Коммерческие CFD-пакеты . . . . .                                | 17 |
| 3.2 Открытые и научно-ориентированные программы . . . . .            | 18 |
| 3.3 Сравнительный анализ . . . . .                                   | 19 |
| 3.4 Отдельные программы для решения ОДУ и СДУ . . . . .              | 20 |
| 3.5 Общие выводы . . . . .   | 21 |
| 4 ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ . . . . .             | 22 |
| 4.1 Постановка задачи . . . . .                                      | 22 |
| 4.2 Параболизация уравнений . . . . .                                | 26 |
| 4.3 Турбулентность . . . . .   | 29 |
| 4.4 Схемы дифференцирования . . . . .                                | 31 |
| 4.5 Химическая модель . . . . .                                      | 31 |
| 4.6 Дифференциальные уравнения . . . . .                             | 34 |
| 5 МЕТОДИКА РАСЧЁТА И ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ . . . . .                | 37 |
| 5.1 Общие алгоритмы и структуры . . . . .                            | 37 |
| 5.2 Графический пользовательский интерфейс . . . . .                 | 41 |
| 5.3 Парсер химических уравнений . . . . .                            | 42 |
| 5.4 Реализация методов решения СДУ . . . . .                         | 43 |
| 5.5 Схема Кранка-Николсона . . . . .                                 | 43 |
| 5.6 Ввод данных по профилю . . . . .                                 | 45 |
| 5.7 Турбулентность . . . . .   | 46 |
| 6 ТЕСТИРОВАНИЕ И ВЕРИФИКАЦИЯ ЧИСЛЕННОЙ МОДЕЛИ . . . . .              | 48 |
| 6.1 Зависимость точности решения от шага дискретизации . . . . .     | 48 |
| 6.2 Сравнение полной и параболизированной систем уравнений . . . . . | 50 |

|  |   |    |
|--|---|----|
| 6.3  | Зависимость времени расчёта от шага дискретизации . . . . . | 51 |
| 6.4  | Прочие примеры . . . . .                                    | 52 |
| ЗАКЛЮЧЕНИЕ . . . . .                       |   | 56 |
| СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ . . . . . |   | 58 |
| ПРИЛОЖЕНИЕ А Исходный код . . . . .        |   | 62 |

## ТЕРМИНЫ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ

В настоящей научно-исследовательской работе применяют следующие термины с соответствующими определениями:

Жёсткая система — ОДУ, численное решение которого явными методами является неудовлетворительным из-за резкого увеличения числа вычислений или из-за резкого возрастания погрешности при недостаточно малом шаге

Методы Рунге-Кутты — большой класс численных методов решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений и их систем

Условие химического равновесия — равенство полных химических потенциалов исходных веществ и продуктов

Химическая кинетика — раздел физической химии, изучающий закономерности протекания химических реакций во времени, зависимости этих закономерностей от внешних условий, а также механизмы химических превращений

Критерий Рейнольдса — отношение инерционных сил к вязким, определяющее этапы перехода от ламинарных течений к турбулентным

Турбулентность — сложное, неупорядоченное во времени и пространстве поведение диссипативной среды (или поля), детали которого не могут быть воспроизведены на больших интервалах времени при сколь угодно точном задании начальных и граничных условий

Ламинарный поток — упорядоченное течение жидкости или газа, при котором жидкость или газ перемещается как бы слоями, параллельными направлению течения

Турбулентная вязкость — мера сопротивления течению, вызванного турбулентными флуктуациями

Число Прандтля — характеристика влияния свойств жидкости на интенсивность теплообмена, являющаяся критерием подобия температурного и скоростного полей, а также описывает свойства теплоносителя

Число Шмидта — отношение коэффициентов кинематической вязкости и диффузии, описывающее относительную роль молекулярных процессов переноса количества движения и переноса массы примеси диффузией

Число Льюиса — соотношение между интенсивностями переноса массы компонента диффузией и переноса теплоты теплопроводностью, пользующееся для характеристики потоков жидкости, в которых

одновременно происходит тепломассообмен

Неравновесный химический процесс — реакция, скорость которой определяется кинетикой, а не термодинамическим равновесием

Скорость химической реакции — изменение концентрации реагентов или продуктов во времени

Сетка (расчётная область) — дискретное представление пространства, на котором решаются уравнения

Ламинарное горение — режим горения без турбулентных пульсаций

Турбулентное горение — горение, осложнённое турбулентным перемешиванием

Параболизированные уравнения Навье-Стокса — упрощённая система уравнений, в которой пренебрегают обратными течениями, сохраняя только доминирующее направление потока

Струйное течение — течение газа, истекающего из сопла или отверстия в окружающую среду

Пограничный слой — тонкая область у поверхности, где вязкие эффекты существенны

Верификация — проверка корректности реализации численного метода

Валидация — сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными

## ПЕРЕЧЕНЬ СОКРАЩЕНИЙ И ОБОЗНАЧЕНИЙ

В настоящей научно-исследовательской работе применяют следующие сокращения и обозначения:

ДУ — дифференциальное уравнение

ПО — программное обеспечение

ОДУ — обыкновенное дифференциальное уравнение

СДУ — система дифференциальных уравнений

СНУ — система нелинейных уравнений

САУ — система алгебраических уравнений

СЛАУ — система линейных алгебраических уравнений

$\rho$  — плотность,  $\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$

$t$  — время, с

$P$  — давление, Па

$U$  — осевая потока, м/с

$V$  — радиальная скорость, м/с

$W$  — тангенциальная скорость, м/с

$T$  — температура, К

$V_{\text{об}}$  — объём, м<sup>3</sup>

$R$  — универсальная газовая постоянная,  $\frac{\text{Дж}}{\text{К} \cdot \text{моль}}$

$U_E$  — внутренняя энергия,  $\frac{\text{Дж}}{\text{кг}}$

$J$  — энтальпия, Дж

$\mu$  — вязкость, Дж

$Pr$  — число Прандтля

$Sc$  — число Шмидта

$Le$  — число Льюиса

$\mu_{\Sigma}$  — молекулярный вес смеси, Дж

$G$  — потенциал Гиббса,  $\frac{\text{Дж}}{\text{кг}}$

$N$  — число компонент смеси

$\alpha$  — интенсивность закрутки

$\gamma_i$  — мольно-массовая концентрация  $i$ -го компонента,  $\frac{\text{моль}}{\text{кг}}$

$\mu_i$  — химический потенциал  $i$ -го компонента,  $\frac{\text{Дж}}{\text{моль}}$

$N_R$  — число реакций

$W_i$  — скорость образования  $i$ -го компонента,  $\frac{\text{моль}}{\text{м}^3 \cdot \text{с}}$

$\nu^{(r)}$  — стехиометрические коэффициенты

$x, y, \psi$  — координаты, м

$h_i$  — индивидуальная энтальпия  $i$ -го компонента, Дж

$\alpha$  — вес неявной схемы

$R_{\text{стр}}$  — радиус струи, м

$L$  — продольный шаг разностной схемы, м

$H$  — поперечный шаг разностной схемы, м

$W^{(r)}$  — скорости  $r$ -ой химической реакции,  $\frac{\text{моль}}{\text{м}^3 \cdot \text{с}}$

$q^{(r)}$  — молекулярность  $r$ -ой элементарной реакции



## ВВЕДЕНИЕ

При всём разнообразии теплоэнергетических устройств процесс сжигания топлива происходит практически по единой схеме, которую можно иллюстрировать на примере газового факела. Для рассматриваемого течения характерно наличие двух разделённых до некоторого момента многокомпонентных потоков газа с разными физическими (температура, скорость) и химическими (молекулярный вес, концентрации компонентов) свойствами, причем потоки могут состоять не только из топлива и окислителя в чистом виде, но и представлять готовую горючую смесь или продукты сгорания. Скорости потоков могут быть дозвуковыми (энергетические установки) и сверхзвуковыми (реактивные двигатели), а сам процесс истечения может быть ламинарным или турбулентным в зависимости от конкретных параметров горелки.

Задачу моделирования течения спутных струй с газовой смесью можно условно разделить на 2 подзадачи: моделирование течения потока и моделирование горения химических компонент. Первая подзадача связана с решением уравнений Навье–Стокса или их упрощённых аналогов, учитывающих турбулентность, сжимаемость и другие физические эффекты. Вторая подзадача требует описания кинетики химических реакций, включая процессы диссоциации, рекомбинации и горения, которые часто протекают в условиях значительного отклонения от термодинамического равновесия.

Современные вычислительные методы и алгоритмы позволяют проводить комплексное моделирование таких течений, однако остаются открытыми вопросы, связанные с повышением точности, устойчивости и эффективности расчётов. В данной работе рассматриваются подходы к численному моделированию неравновесных химических процессов в струйных течениях, а также анализируются их преимущества и ограничения.

В рамках данной работы была разработана программа для численного моделирования течений газа, учитывающая как ламинарные, так и турбулентные режимы. Программа основана на решении усреднённых уравнений Навье–Стокса с использованием моделей турбулентности (например,  $k - \epsilon$ ,  $SST$  и так далее), а также включает модуль расчёта химических реакций в приближении конечной скорости. Для верификации алгоритма проведено сравнение с экспериментальными данными для

различных конфигураций струй, включая случаи с закритическими давлениями и высокоскоростными течениями. Результаты демонстрируют хорошее соответствие расчётных и экспериментальных распределений температуры, концентраций компонент и скорости потока. Помимо этого был реализован отдельный модуль для работы с СДУ при помощи множества методов семейства Рунге-Кутты. В работе реализовано 18 явных методов до 6 порядка точности, 9 вложенных, включая схему Дормана-Принса 4-5 порядка, 19 неявных до 6 порядка. Для решения СНУ при итерировании в неявных схемах используются схемы первого порядка (простой итерации, Зейделя) и второго порядка (метод Ньютона), причём для обращения матрицы применялся метод LU-разложения. Для дифференцирования функции при построении матрицы Якоби для метода Ньютона использовались формулы с 4 порядком точности. При необходимости можно использовать формулы с меньшим порядком.

Разработанный программный комплекс позволяет проводить расчёты с приемлемой точностью при умеренных вычислительных затратах, что делает его применимым как для научных исследований, так и для инженерных расчётов. Дальнейшее развитие работы может быть связано с внедрением более детальных моделей турбулентности, учётом радиационного теплообмена и оптимизацией вычислительных алгоритмов для расчёта сложных химических кинетик.

## 1 АКТУАЛЬНОСТЬ ТЕМЫ

Турбулентность остается одним из наиболее сложных объектов исследования механики жидкости и газа. За почти столетнюю историю ее изучения предложены десятки различных подходов, почти всегда отражающие наиболее активно развиваемые перспективные направления математики и физики соответствующего периода времени. Статистическая физика и теория вероятности, теория размерности, математический анализ и прямые численные методы, теория динамических систем, теория фракталов - вот далеко не полный перечень областей науки, которые давали основные идеи исследователям турбулентности. Примером турбулентности могут выступать самые обычные потоки воздуха, обтекающие объект, представленные на рисунке 1. Поток воздуха при варьирующихся параметрах ведёт себя по-разному.

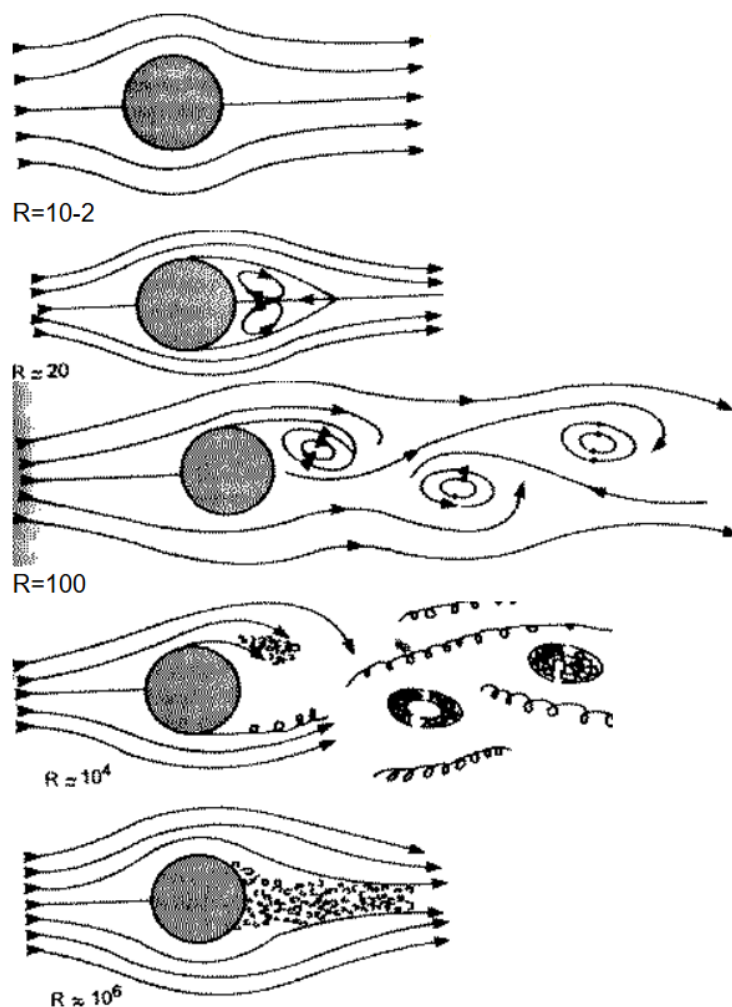


Рисунок 1 – Примеры турбулентных потоков при разном критерии Рейнольдса

В качестве объекта исследования выбраны течения свободных струй газа, которые наблюдаются в энергетических установках таких как реактивные двигатели, камеры сгорания промышленных печей, горелочные устройства, испытательные стенды и т. д.. На рисунке 2 изображена примерная схема таких установок.

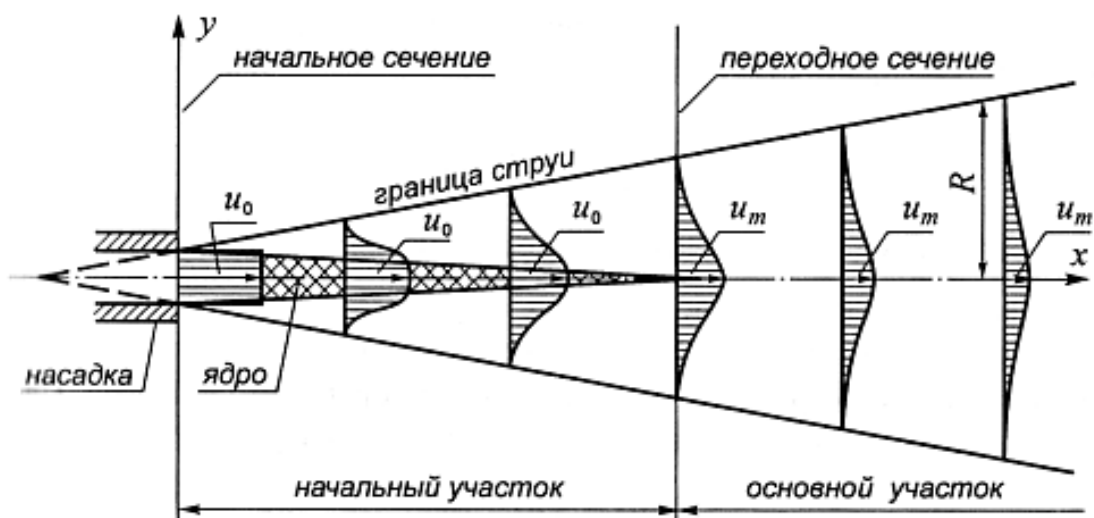


Рисунок 2 – Объект исследования

В связи с исключительной практической важностью надёжного расчётного предсказания характеристик сложных турбулентных течений для многих областей науки и техники (большинство представляющих интерес течений являются турбулентными), построению таких моделей, разработке методов расчета и проведению численных исследований различных течений на их основе посвящено огромное число работ.

## **2 ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ РАБОТЫ**

Численное моделирование течения струй газа с неравновесными химическими процессами представляет собой сложную многопараметрическую задачу, требующую комплексного подхода к описанию как гидродинамики потока, так и кинетики химических реакций. Актуальность данной темы обусловлена её практическим значением для аэрокосмической индустрии, энергетики, двигателестроения и других областей, где важны точные прогнозы характеристик газодинамических и химических процессов.

### **2.1 Цель работы**

Основной целью данной работы является разработка численной модели и программного обеспечения для расчёта течения реактивных струй газа с учётом неравновесной химической кинетики, а также верификация модели на основе сравнения с экспериментальными данными.

Конкретные аспекты, на которые направлено исследование:

- моделирование ламинарных и турбулентных течений с химическими реакциями;
- учёт неравновесных процессов (диссоциация, рекомбинация, горение);
- обеспечение приемлемой точности расчётов при разумных вычислительных затратах;
- проверка адекватности модели путём сопоставления с известными экспериментальными и численными данными.

Отдельно можно выделить цель сравнения работы полной системы уравнений Навье-Стокса и их параболизированной версии по точности и вычислительным затратам.

### **2.2 Задачи проекта**

Для достижения поставленной цели в работе решаются следующие задачи (Рис. 3):

- а) Анализ существующих математических моделей:
  - 1) Обзор уравнений Навье–Стокса и их модификаций для описания течений с химическими реакциями;

- 2) Изучение моделей турбулентности ( $k - \epsilon$ ,  $SST$  и т.д.), применимых для расчёта реактивных струй;
  - 3) Анализ кинетических схем для описания неравновесных химических процессов;
- б) Разработка численного алгоритма:
- 1) Построение дискретной схемы для решения системы уравнений газовой динамики с химическими источниками;
  - 2) Реализация методов расчёта турбулентного перемешивания и химических реакций;
  - 3) Оптимизация вычислительных процедур для снижения ресурсоёмкости;
- в) Создание программного обеспечения:
- 1) Разработка программы на основе выбранных математических моделей;
  - 2) Обеспечение возможности моделирования как ламинарных, так и турбулентных режимов течения;
  - 3) Реализация визуализации результатов (поля скорости, температуры, концентрации компонент);
  - 4) Разработка графического пользовательского интерфейса для удобной работы с данными;
- г) Верификация и валидация модели:
- 1) Проведение тестовых расчётов для стандартных конфигураций (например, ламинарное и турбулентное истечение струи);
  - 2) Сравнение численных результатов с экспериментальными данными и решениями других авторов;
  - 3) Оценка точности и устойчивости разработанного алгоритма;
- д) Анализ результатов и выводы:
- 1) Исследование влияния различных факторов (скорость истечения, состав смеси, температура) на структуру течения;
  - 2) Определение границ применимости модели;
  - 3) Формулировка рекомендаций для дальнейшего развития.

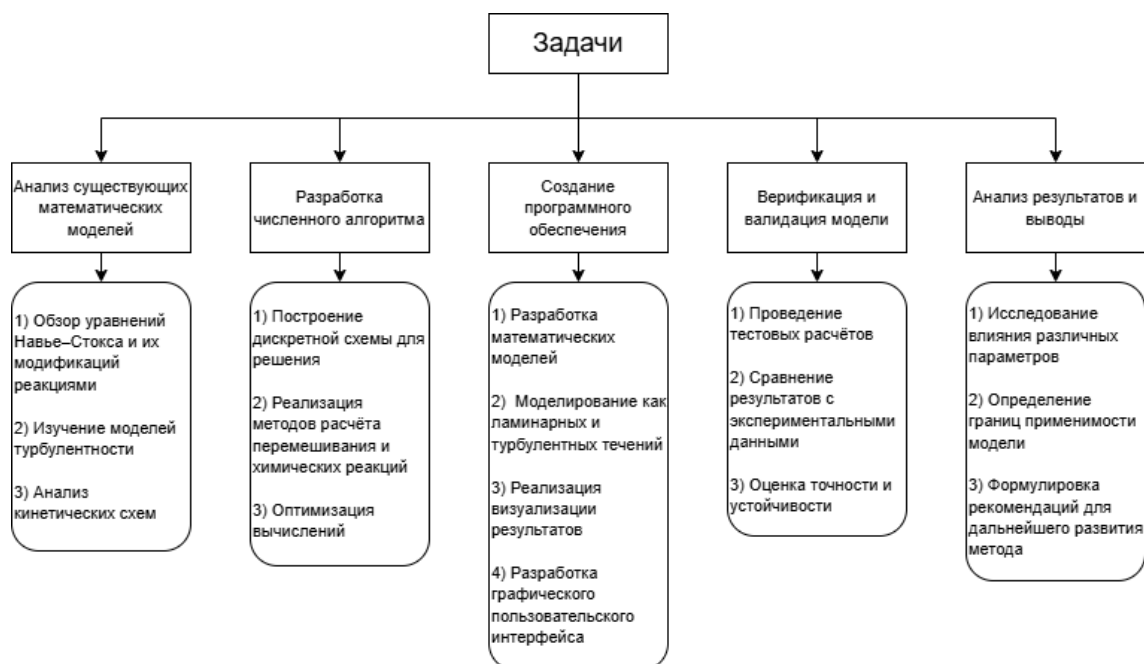


Рисунок 3 – Задачи проекта

При выполнении работы были использованы лишь некоторые модели турбулентности, однако существует возможность добавления и таких моделей, как  $k - \epsilon$  или  $SST$  при дальнейшем развитии.

### 2.3 Научная новизна и практическая значимость работы

Научная новизна исследования заключается в следующем:

- разработана комплексная модель, сочетающая методы расчёта турбулентных течений и неравновесной химической кинетики;
- реализована гибкая система визуализации многопараметрических данных;
- предложены оптимизированные алгоритмы, позволяющие проводить расчёты с приемлемой точностью без чрезмерных вычислительных затрат;
- проведена верификация модели на широком наборе тестовых случаев, включая высокоскоростные и химически реагирующие течения;
- установлены критерии применимости параболизированной модели для течений с химическими реакциями;
- выявлена зависимость погрешности расчёта от степени детализации химического механизма;

- проведено сравнение точности параболизированной системы уравнений и полного Навье-Стокса на широком наборе тестовых случаев.

Результаты работы, при дальнейшем развитии, могут быть использованы:

- при проектировании реактивных двигателей и сопловых аппаратов;
- в задачах моделирования горения и смесеобразования в энергетических установках;
- в научных исследованиях, связанных с неравновесными газодинамическими процессами.

Перспективы дальнейшего развития:

- расширение модели на многофазные течения;
- интеграция с методами машинного обучения;
- разработка облачной версии вычислительного комплекса.

Таким образом, данная работа направлена на создание инструмента для численного моделирования сложных газодинамических процессов, что позволит улучшить понимание физики течений с химическими реакциями и оптимизировать инженерные расчёты.



### 3 ПРОГРАММЫ И БИБЛИОТЕКИ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕЧЕНИЙ

Численное моделирование течений реактивных струй с неравновесной химией требует применения специализированного программного обеспечения, способного учитывать как газодинамические, так и химико-кинетические процессы. В настоящее время существует ряд коммерческих и открытых пакетов, решающих подобные задачи с различной степенью точности и эффективности. В данном разделе проводится анализ наиболее распространённых программ, рассматриваются их преимущества и ограничения.

#### 3.1 Коммерческие CFD-пакеты

##### *ANSYS Fluent*

Один из самых популярных коммерческих CFD-пакетов, предоставляющий широкие возможности для моделирования турбулентных и химически реагирующих течений.

Плюсы:

- поддержка различных моделей турбулентности (RANS, LES, DES);
- встроенные базы данных химических реакций и механизмов горения;
- удобный графический интерфейс и интеграция с системами CAD/CAE;
- хорошая документация и техническая поддержка.

Минусы:

- платная лицензия;
- ограниченная гибкость в настройке пользовательских химических моделей;
- значительные вычислительные затраты при расчёте сложных кинетических схем.

##### *COMSOL Multiphysics*

Универсальная платформа для многодисциплинарного моделирования, включая химически реагирующие течения.

Плюсы:

- возможность совмещения гидродинамики с другими физическими

процессами (теплопередача, электродинамика);

- гибкость в задании пользовательских уравнений и граничных условий;
- визуализация результатов в реальном времени.

Минусы:

- менее оптимизирован для высокоскоростных течений по сравнению с узкоспециализированными CFD-пакетами;
- ограниченные возможности для моделирования сложной турбулентности;
- требует больших ресурсов при расчёте 3D-моделей.

*STAR-CCM+*

Мощный CFD-инструмент, разработанный Siemens, с акцентом на промышленные приложения.

Плюсы:

- эффективные алгоритмы для расчёта турбулентных и химически реагирующих потоков;
- автоматизированное построение сеток и адаптация расчётной области;
- поддержка высокопроизводительных вычислений (HPC).

Минусы:

- сложность освоения для новых пользователей;
- высокие требования к вычислительным ресурсам;
- ограниченные возможности кастомизации химических моделей.

## **3.2 Открытые и научно-ориентированные программы**

*OpenFOAM*

Открытая CFD-платформа, широко используемая в научных исследованиях.

Плюсы:

- полная свобода модификации кода и реализации пользовательских моделей;
- большое количество готовых решателей для химически реагирующих течений;
- бесплатность и поддержка сообщества.

Минусы:

- сложность настройки и отсутствие удобного графического интерфейса;
- требует глубоких знаний численных методов и программирования;
- менее оптимизирован для промышленных расчётов по сравнению с коммерческими аналогами.

#### *Cantera*

Библиотека для расчёта химической кинетики и термодинамики, часто используемая совместно с CFD-кодами.

Плюсы:

- широкий набор готовых механизмов химических реакций;
- интеграция с Python и другими языками программирования;
- эффективные алгоритмы расчёта равновесных и неравновесных процессов.

Минусы:

- не включает полноценные инструменты для гидродинамического моделирования;
- требует дополнительной разработки для сопряжения с CFD-решателями.

#### *SU2*

Открытый пакет для моделирования многодисциплинарных задач, включая аэродинамику и горение.

Плюсы:

- оптимизирован для задач аэрокосмической тематики;
- поддержка адаптивных сеток и параллельных вычислений;
- активное развитие и открытый исходный код.

Минусы:

- ограниченные возможности для моделирования сложной химической кинетики;
- меньшее количество документации по сравнению с коммерческими аналогами.

### **3.3 Сравнительный анализ**

В таблице 1 представлен сравнительный анализ перечисленных программ по основным критериям.

Таблица 1 – Таблица сравнения ПО

| Критерий           | ANSYS Fluent | COMSOL    | OpenFOAM      | Cantera       | SU2       |
|--------------------|--------------|-----------|---------------|---------------|-----------|
| Точность расчётов  | Высокая      | Средняя   | Высокая       | Высокая       | Высокая   |
| Гибкость           | Средняя      | Высокая   | Очень высокая | Очень высокая | Средняя   |
| Производительность | Высокая      | Средняя   | Средняя       | Высокая       | Высокая   |
| Стоимость          | Платно       | Платно    | Бесплатно     | Бесплатно     | Бесплатно |
| Химические модели  | Широкие      | Умеренные | Широкие       | Очень широкие | Умеренные |

### 3.4 Отдельные программы для решения ОДУ и СДУ

Моделирование неравновесного химического процесса можно представить в виде решения СДУ с начальными условиями. Саму задачу по моделированию течения можно, соответственно, разделить на 2 подзадачи: для течения и для горения. Таким образом, можно использовать одну из программ из предыдущего подраздела отдельно для течений и какую-либо из следующих для решения СДУ химической кинетики. Такой подход может дать более точное решение, хоть и принуждает пользователя использовать сразу несколько ПО и реализовать какие-либо ”переходники” между ними.

Программ для решения ОДУ достаточно много [1; 2; 3; 4; 5]. На рисунке 4 приведены некоторые популярные программы и библиотеки для решения ДУ.



Рисунок 4 – Программы и библиотеки

Преимущества отдельного подхода:

- специализация программного обеспечения,
- гибкость выбора моделей,

- возможность распределить вычисления на разные потоки.

Основные технические сложности:

- согласование данных требует разработки интерфейсов,
- проблемы устойчивости.

### 3.5 Общие выводы

Для промышленных расчётов с жёсткими требованиями к точности и поддержке целесообразно использовать *ANSYS Fluent* или *STAR-CCM+*. В научных исследованиях, где важна гибкость и кастомизация, предпочтительнее *OpenFOAM* в сочетании с *Cantera*. *SU2* подходит для задач, где основное внимание уделено аэродинамике, а химия играет второстепенную роль.

В данной работе в качестве основы была выбрана реализация собственного решателя из-за его открытости, гибкости и возможности интеграции с пользовательскими моделями химической кинетики. Это позволяет реализовать расчёт неравновесных процессов с высокой степенью контроля над алгоритмами.

## 4 ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Моделирование течения струй газа с неравновесными химическими процессами требует строгого математического описания, объединяющего уравнения гидродинамики и кинетики реакций. В данном разделе излагаются теоретические основы, положенные в основу численного алгоритма, и приводится полная математическая постановка задачи.

Ключевой особенностью рассматриваемых процессов является взаимное влияние газодинамики и химических превращений. Турбулентное перемешивание определяет скорость доставки реагентов, в то время как выделение тепла в реакциях существенно меняет структуру течения.

Особое внимание уделяется параболизированной постановке уравнений Навье-Стокса, позволяющей существенно снизить вычислительные затраты при сохранении приемлемой точности для инженерных расчетов. Приводятся критерии применимости такого подхода и анализ возникающих погрешностей.

Данный раздел служит теоретическим фундаментом для последующего изложения вычислительного алгоритма и результатов моделирования, обеспечивая строгую связь между физической постановкой задачи и её программной реализацией.

### 4.1 Постановка задачи

Итак, рассмотрим течение гомогенной смеси газов, содержащей  $N$  компонент, заполняющих один и тот же объём. Компоненты газовой смеси характеризуются собственным молекулярным весом  $\mu_i$ , плотностью  $\rho_i$ , парциальным давлением  $P_i$ , скоростью  $v_i$  и внутренней энергией  $e_i$ . Плотность смеси  $\rho$ , давление  $P$ , мольно-массовые концентрации компонентов  $C_i$  и молекулярный вес смеси  $\mu_\Sigma$  определяется следующим образом:

$$\begin{aligned}
\rho &= \sum_{i=1}^N \rho_i, \\
P &= \sum_{i=1}^N P_i, \\
\vec{V} &= \frac{1}{\rho} \sum_{i=1}^N \rho_i \vec{v}_i, \\
C_i &= \frac{\rho_i}{\rho \mu_i}, \\
\mu_\Sigma &= \left( \sum_{i=1}^N C_i \right)^{-1}.
\end{aligned} \tag{1}$$

Обозначим через  $\vec{I}_i = \rho_i(\vec{v}_i - \vec{V})$  вектор плотности потока массы  $i$ -го компонента, причем для вектора потока диффузии справедливо

$$\sum_{i=1}^N \vec{I}_i = 0. \tag{2}$$

Относительно газовых компонентов, сделаем следующее предположение. Будем считать, что поступательные, вращательные и колебательные степени свободы молекул находятся в равновесии [6]. Для расчета термодинамических свойств газовых компонент можно с большой степенью точности пользоваться зависимостями индивидуальных энтальпий от температуры. Тогда справедливо:

$$\begin{aligned}
e_i(T) &= C_i(h_i^0 + h_i(T)), \\
P_i &= \rho_i R T \mu_i^{-1}, \\
P &= \rho R T \mu_\Sigma^{-1},
\end{aligned} \tag{3}$$

где  $h_i(T)$  — индивидуальная энтальпия компонента.

Изменение параметров спутной реагирующей струи может быть описано с помощью системы уравнений газовой динамики, которая представляет собой выраженные в дифференциальной форме законы сохранения массы, импульса, энергии и отдельных компонентов [7; 8; 9; 10; 11; 12; 13; 14; 15]. Имеем:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{V}) &= 0, \\
\frac{\partial \rho \vec{V}}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{V} * \vec{V}) &= \rho \vec{F} - \operatorname{grad}(P) + \operatorname{div}(\hat{\tau}), \\
\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{V} * E) &= \rho \vec{F} \vec{V} + \operatorname{div}(\hat{\tau} \vec{V}) - \operatorname{div}(P \vec{V}) - \operatorname{div}(\vec{q}) - \rho Q, \\
\frac{\partial C_i}{\partial t} + \operatorname{div}(C_i \vec{V}) &= \operatorname{div}(\vec{I}_i) + W_i^*, i = 1, \dots, N, \\
E &= \sum_{i=1}^N e_i = \frac{\vec{V}^2}{2} - \frac{P}{\rho}, \\
P &= \rho R T \mu_{\Sigma}^{-1}.
\end{aligned} \tag{4}$$

Здесь  $\vec{F}$  — вектор внешних сил,  $Q$  — приток лучистой энергии,  $W_i^*$  — скорость образования  $i$ -ой компоненты в результате протекания химических реакций,  $\hat{\tau}$  — тензор вязких напряжений,  $\vec{q}$  — вектор плотности теплового потока.

Выпишем систему уравнений, описывающую стационарное турбулентное движение многокомпонентного реагирующего газа, например, в цилиндрической системе координат  $(x, y, \phi)$ , где  $\frac{\partial f}{\partial \phi} = 0$ :



$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial x}(\rho U y^\nu) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho V y^\nu) = 0, \\
& \rho U \frac{\partial U}{\partial x} + \rho V \frac{\partial U}{\partial y} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{4}{3} \left( \frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial U}{\partial x} \right) - \frac{1}{y^\nu} \frac{\partial}{\partial y} (y^\nu \mu \frac{\partial U}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial V}{\partial x} \right) - \\
& \quad - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial V}{\partial y} \right) - \frac{2}{3} \nu \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{V}{y} \right) + \nu \frac{\mu}{y} \frac{\partial V}{\partial x}, \\
& \rho U \frac{\partial V}{\partial x} + \rho V \frac{\partial V}{\partial y} = -\frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial V}{\partial x} \right) + \frac{4}{3} \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial V}{\partial y} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial U}{\partial x} \right) + \\
& \quad + \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial U}{\partial y} \right) - \frac{2}{3} \nu \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{V}{y} \right) + 2\nu \mu \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{V}{y} \right) + \nu \rho \frac{W^2}{y}, \\
& \rho U \frac{\partial W}{\partial x} + \rho V \frac{\partial W}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial W}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{W}{y} \right) + 2\mu \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{W}{y} \right) - \rho \frac{VW}{y}, \text{ при } \nu = 1, \\
& \rho U \frac{\partial J}{\partial x} + \rho V \frac{\partial J}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\mu}{Pr} \frac{\partial J}{\partial x} \right) + \frac{1}{y^\nu} \frac{\partial}{\partial y} \left( y^\nu \frac{\mu}{Pr} \frac{\partial J}{\partial y} \right) + \left( \frac{4}{3} - \frac{1}{Pr} \right) \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu U \frac{\partial U}{\partial x} \right) + \\
& + \left( 1 - \frac{1}{Pr} \right) \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu W \frac{\partial W}{\partial x} \right) + \left( 1 - \frac{1}{Pr} \right) \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu V \frac{\partial V}{\partial x} \right) + \left( 1 - \frac{1}{Pr} \right) \frac{1}{y^\nu} \frac{\partial}{\partial y} \left( y^\nu \mu U \frac{\partial U}{\partial y} \right) + \\
& + \left( \frac{4}{3} - \frac{1}{Pr} \right) \frac{1}{y^\nu} \frac{\partial}{\partial y} \left( y^\nu \mu V \frac{\partial V}{\partial y} \right) + \left( 1 - \frac{1}{Pr} \right) \frac{1}{y^\nu} \frac{\partial}{\partial y} \left( y^\nu \mu W \frac{\partial W}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu V \frac{\partial U}{\partial y} \right) + \\
& + \frac{1}{y^\nu} \frac{\partial}{\partial y} \left( y^\nu \mu U \frac{\partial V}{\partial x} \right) - \frac{2}{3} \nu \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{y^\nu} \mu U V \right) - \frac{2}{3} \nu \frac{1}{y^\nu} \frac{\partial}{\partial y} (\mu V^2) - \\
& - \nu \frac{1}{y^\nu} \frac{\partial}{\partial y} (\mu W^2) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu U \frac{\partial V}{\partial y} \right) - \frac{2}{3} \frac{1}{y^\nu} \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu V y^\nu \frac{\partial U}{\partial x} \right) - \\
& - \left( 1 - \frac{1}{Le} \right) \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\mu}{Pr} \sum_{i=1}^N h_i(T) \frac{\partial C_i}{\partial x} \right) - \left( 1 - \frac{1}{Le} \right) \frac{1}{y^\nu} \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\mu}{Pr} y^\nu \sum_{i=1}^N h_i(T) \frac{\partial C_i}{\partial y} \right) - \rho Q, \\
& \rho U \frac{\partial C_i}{\partial x} + \rho V \frac{\partial C_i}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\mu}{Sc} \frac{\partial C_i}{\partial x} \right) + \frac{1}{y^\nu} \frac{\partial}{\partial y} \left( y^\nu \frac{\mu}{Sc} \frac{\partial C_i}{\partial y} \right) + W_i^*, i = 1, \dots, N, \\
& J = \sum_{i=1}^N h_i(T) C_i + \frac{1}{2} (U^2 + V^2 + W^2), \\
& P = \rho R T \mu_\Sigma^{-1}.
\end{aligned}$$

(5)

Здесь  $Pr$ ,  $Sc$  и  $Le$  — эффективные числа Прандтля, Шмидта и Льюиса, которые определяются следующим образом:

$$\begin{aligned}
Pr &= \frac{\mu C_p}{\lambda}, \\
Sc &= \frac{\mu}{\rho D}, \\
Le &= \frac{\rho D C_p}{\lambda} = \frac{Pr}{Sc}.
\end{aligned}$$

(6)

Система (5) представляет собой систему полных уравнений Навье-Стокса, дополненных уравнениями сохранения энергии и массы каждой компоненты. Для того, чтобы система уравнений, связывающая  $N + 6$  неизвестных функций  $U, V, W, \rho, P, T, C_i, i = 1, \dots, N$ , была замкнута, систему необходимо дополнить соответствующей моделью для вычисления эффективной вязкости. В силу того, что система (5) относится к уравнениям эллиптического типа, для однозначного определения решения этих уравнений нужно сформулировать граничные условия для каждой из искомых функций на плоскостях, ограничивающих область течения, в которой ищется решение, т.е., сформулировать краевую задачу.

## 4.2 Параболизация уравнений

Для моделирования струйных стационарных вязких течений наряду с системой полных уравнений Навье-Стокса, относящихся к эллиптическому типу, часто используют системы, состоящие из уравнений параболического типа. Изменение типа уравнений существенно упрощает математическую задачу — краевую задачу сводит к задаче Коши и позволяет вместо метода установления, применяющегося для решения уравнений полной системы уравнений Навье-Стокса, воспользоваться маршевым методом пошагового интегрирования уравнений сохранения. Отметим некоторые особенности моделей, предназначенных для описания вязких течений с, преимущественным направлением потока: приближения пограничного слоя, приближения узкого канала и модели, основанной на параболизированных уравнениях Навье-Стокса [16; 17; 18; 19; 20; 21].

Цилиндрическая или декартова системы координат не являются единственно возможными системами для записи уравнений Навье-Стокса [15; 22; 23; 24; 25; 26; 27]. По сравнению с другими системами можно провести лишь единичные примеры использования таких координат для струйных течений. Гораздо чаще используются координаты, непосредственно связанные с характером изменения зависимых переменных в расчетной области, например, координаты Мизеса  $(x, \psi)$ , где  $\psi$  — функция тока.

Координаты Мизеса  $(x, \psi)$  определены следующим образом:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \psi}{\partial x} &= -\rho V \left( \frac{y}{\psi} \right)^\nu, \\ \frac{\partial \psi}{\partial y} &= \rho V \left( \frac{y}{\psi} \right)^\nu.\end{aligned}\tag{7}$$

Формально параболизация полной системы уравнений Навье-Стокса сводится к отбрасыванию вторых производных по координате, совпадающей с основным направлением движения. Прделаем это преобразование:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x} (\rho U y^\nu) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho V y^\nu) &= 0, \\ \rho U \frac{\partial U}{\partial x} + \rho V \frac{\partial U}{\partial y} &= -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{1}{y^\nu} \frac{\partial}{\partial y} \left( y^\nu \mu \frac{\partial U}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial V}{\partial x} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial V}{\partial y} \right) - \\ &\quad - \frac{2}{3} \nu \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{V}{y} \right) + \nu \frac{\mu}{y} \frac{\partial V}{\partial x}, \\ \rho U \frac{\partial V}{\partial x} + \rho V \frac{\partial V}{\partial y} &= -\frac{\partial P}{\partial y} + \frac{4}{3} \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial V}{\partial y} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial U}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial U}{\partial y} \right) - \\ &\quad - \frac{2}{3} \nu \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{V}{y} \right) + 2\nu \mu \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{V}{y} \right), \\ \rho U \frac{\partial W}{\partial x} + \rho V \frac{\partial W}{\partial y} &= \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial W}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{W}{y} \right) + 2\mu \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{W}{y} \right) - \\ &\quad - \rho \frac{V \cdot W}{y}, \text{ при } \nu = 1, \\ \rho U \frac{\partial J}{\partial x} + \rho V \frac{\partial J}{\partial y} &= \frac{1}{y^\nu} \frac{\partial}{\partial y} \left( y^\nu \frac{\mu}{Pr} \frac{\partial J}{\partial y} \right) + \left( 1 - \frac{1}{Pr} \right) \frac{1}{y^\nu} \frac{\partial}{\partial y} \left( y^\nu \mu U \frac{\partial U}{\partial y} \right) + \\ &\quad + \left( \frac{4}{3} - \frac{1}{Pr} \right) \frac{1}{y^\nu} \frac{\partial}{\partial y} \left( y^\nu \mu V \frac{\partial V}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu V \frac{\partial U}{\partial y} \right) + \frac{1}{y^\nu} \frac{\partial}{\partial y} \left( y^\nu \mu U \frac{\partial V}{\partial x} \right) - \\ &\quad - \frac{2}{3} \nu \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{y^\nu} \mu U V \right) - \frac{2}{3} \nu \frac{1}{y^\nu} \frac{\partial}{\partial y} (\mu V^2) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu U \frac{\partial V}{\partial y} \right) - \\ &\quad - \frac{2}{3} \frac{1}{y^\nu} \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu V y^\nu \frac{\partial U}{\partial x} \right) - \left( 1 - \frac{1}{Le} \right) \frac{1}{y^\nu} \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\mu}{Pr} y^\nu \sum_{i=1}^N h_i(T) \frac{\partial C_i}{\partial y} \right) - \rho Q, \\ \rho U \frac{\partial C_i}{\partial x} + \rho V \frac{\partial C_i}{\partial y} &= \frac{1}{y^\nu} \frac{\partial}{\partial y} \left( y^\nu \frac{\mu}{Sc} \frac{\partial C_i}{\partial y} \right) + W_i^*, \quad i = 1, \dots, N, \\ J &= \sum_{i=1}^N h_i(T) C_i + \frac{1}{2} (U^2 + V^2 + W^2), \\ P &= \rho R T \mu_\Sigma^{-1}.\end{aligned}\tag{8}$$

Систему уравнений (8), записанную в координатах  $(x, y)$  преобразуем в координаты Мизеса и распишем их в виде отдельных уравнений по каждой переменной:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{\rho U y^\nu} \right) = \left( \frac{1}{\psi} \right)^\nu \frac{\partial}{\partial \psi} \left( \frac{V}{U} \right), \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial U}{\partial x} = & -\frac{1}{\rho U} \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{V}{U} \left( \frac{1}{\psi} \right)^\nu \frac{\partial P}{\partial \psi} + \left( \frac{1}{\psi} \right)^\nu \frac{\partial}{\partial \psi} \left( \mu \rho U \left( \frac{y^2}{\psi} \right)^\nu \frac{\partial U}{\partial \psi} \right) + \\ & + \left( \frac{y}{\psi} \right)^\nu \frac{\partial}{\partial \psi} \left( \mu \frac{\partial V}{\partial x} \right) - \left( \frac{y}{\psi} \right)^\nu \frac{\partial}{\partial \psi} \left( \mu \rho V \left( \frac{y}{\psi} \right)^\nu \frac{\partial V}{\partial \psi} \right) - \\ & - \frac{2}{3} \frac{1}{\rho U} \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \rho U \left( \frac{y}{\psi} \right)^\nu \frac{\partial V}{\partial \psi} \right) - \frac{2}{3} \nu \frac{1}{\rho U} \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{V}{y} \right) + \\ & + \frac{2}{3} \frac{V}{U} \left( \frac{y}{\psi} \right)^\nu \frac{\partial}{\partial \psi} \left( \mu \rho U \left( \frac{y}{\psi} \right)^\nu \frac{\partial V}{\partial \psi} \right) + \frac{2}{3} \nu \frac{V}{U} \left( \frac{y}{\psi} \right)^\nu \frac{\partial}{\partial \psi} \left( \mu \frac{V}{y} \right) + \\ & + \nu \frac{1}{\rho U} \frac{\mu}{y} \frac{\partial V}{\partial x} - \nu \frac{\mu V}{U} \left( \frac{1}{\psi} \right)^\nu \frac{\partial V}{\partial \psi}, \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial V}{\partial x} = & - \left( \frac{y}{\psi} \right)^\nu \frac{\partial P}{\partial \psi} + \frac{4}{3} \left( \frac{y}{\psi} \right)^\nu \frac{\partial}{\partial \psi} \left( \mu \rho U \left( \frac{y}{\psi} \right)^\nu \frac{\partial V}{\partial \psi} \right) - \\ & - \frac{2}{3} \left( \frac{y}{\psi} \right)^\nu \frac{\partial}{\partial \psi} \left( \mu \frac{\partial U}{\partial x} \right) + \frac{2}{3} \left( \frac{y}{\psi} \right)^\nu \frac{\partial}{\partial \psi} \left( \mu \rho V \left( \frac{y}{\psi} \right)^\nu \frac{\partial V}{\partial \psi} \right) + \\ & + \frac{1}{\rho U} \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \rho U \left( \frac{y}{\psi} \right)^\nu \frac{\partial U}{\partial \psi} \right) - \frac{V}{U} \left( \frac{y}{\psi} \right)^\nu \frac{\partial}{\partial \psi} \left( \mu \rho U \left( \frac{y}{\psi} \right)^\nu \frac{\partial U}{\partial \psi} \right) - \\ & - \frac{2}{3} \nu \left( \frac{y}{\psi} \right)^\nu \frac{\partial}{\partial \psi} \left( \mu \frac{V}{y} \right) + 2\nu \mu \left( \frac{y}{\psi} \right)^\nu \frac{\partial}{\partial \psi} \left( \frac{V}{y} \right), \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial W}{\partial x} = & -\frac{V}{U} \frac{W}{y} + \left( \frac{1}{\psi} \right)^\nu \frac{\partial}{\partial \psi} \left( \mu \rho U \left( \frac{y}{\psi} \right)^\nu \frac{\partial W}{\partial \psi} \right) + \left( \frac{y}{\psi} \right)^\nu \frac{\partial}{\partial \psi} \left( \mu \frac{W}{y} \right) + \\ & + 2\mu \left( \frac{y}{\psi} \right)^\nu \frac{\partial}{\partial \psi} \left( \frac{W}{y} \right), \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial J}{\partial x} = & \left(\frac{1}{\psi}\right)^\nu \frac{\partial}{\partial \psi} \left( \frac{\mu}{Pr} \rho U \left(\frac{y^2}{\psi}\right)^\nu \frac{\partial J}{\partial \psi} \right) + \left(\frac{1}{\psi}\right)^\nu \left(1 - \frac{1}{Pr}\right) \frac{\partial}{\partial \psi} \left( \mu \rho U^2 \left(\frac{y^2}{\psi}\right)^\nu \frac{\partial U}{\partial \psi} \right) \\
& + \left(\frac{1}{\psi}\right)^\nu \left(\frac{4}{3} - \frac{1}{Pr}\right) \frac{\partial}{\partial \psi} \left( \mu \rho UV \left(\frac{y^2}{\psi}\right)^\nu \frac{\partial V}{\partial \psi} \right) + \frac{1}{\rho U} \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \rho UV \left(\frac{y}{\psi}\right)^\nu \frac{\partial U}{\partial \psi} \right) \\
& - \frac{V}{U} \left(\frac{y}{\psi}\right)^\nu \frac{\partial}{\partial \psi} \left( \mu \rho UV \left(\frac{y}{\psi}\right)^\nu \frac{\partial U}{\partial \psi} \right) + \left(\frac{1}{\psi}\right)^\nu \frac{\partial}{\partial \psi} \left( y^\nu \mu U \left(\frac{y}{\psi}\right)^\nu \frac{\partial V}{\partial x} \right) \\
& - \left(\frac{1}{\psi}\right)^\nu \frac{\partial}{\partial \psi} \left( \mu \rho UV \left(\frac{y^2}{\psi}\right)^\nu \frac{\partial V}{\partial \psi} \right) - \frac{2}{3} \frac{1}{\rho U} \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \rho U^2 \left(\frac{y}{\psi}\right)^\nu \frac{\partial V}{\partial \psi} \right) \\
& - \frac{2}{3} \nu \left[ \frac{1}{\rho U} \frac{\partial}{\partial x} \left( \left(\frac{1}{y}\right)^\nu \mu UV \right) - \frac{V}{U} \left(\frac{y}{\psi}\right)^\nu \frac{\partial}{\partial \psi} \left( \left(\frac{1}{y}\right)^\nu \mu UV \right) + \left(\frac{1}{\psi}\right)^\nu \frac{\partial}{\partial \psi} (\mu V^2) \right] \\
& - \frac{2}{3} \left(\frac{1}{\psi}\right)^\nu \frac{\partial}{\partial \psi} \left( y^\nu \mu V \frac{\partial U}{\partial x} \right) + \frac{2}{3} \frac{V}{U} \left(\frac{y}{\psi}\right)^\nu \frac{\partial}{\partial \psi} \left( \mu \rho U^2 \left(\frac{y}{\psi}\right)^\nu \frac{\partial V}{\partial \psi} \right) \\
& + \frac{2}{3} \left(\frac{1}{\psi}\right)^\nu \frac{\partial}{\partial \psi} \left( \mu \rho V^2 \left(\frac{y}{\psi}\right)^\nu \frac{\partial U}{\partial \psi} \right) \\
& - \left(1 - \frac{1}{Le}\right) \left(\frac{1}{\psi}\right)^\nu \frac{\partial}{\partial \psi} \left( \frac{\mu}{Pr} \rho U \left(\frac{y^2}{\psi}\right)^\nu \sum_{i=1}^N h_i(T) \frac{\partial C_i}{\partial \psi} \right) - \frac{Q}{U},
\end{aligned} \tag{13}$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial x} = \left(\frac{1}{\psi}\right)^\nu \frac{\partial}{\partial \psi} \left( \frac{\mu}{Sc} \rho U \left(\frac{y^2}{\psi}\right)^\nu \frac{\partial C_i}{\partial \psi} \right) + \frac{1}{\rho U} W_i^*, \quad i = 1, \dots, N, \tag{14}$$

$$J = \sum_{i=1}^N h_i(T) C_i + \frac{1}{2} (U^2 + V^2 + W^2), \tag{15}$$

$$P = \rho R T \mu_\Sigma^{-1}. \tag{16}$$

Система уравнений (9-16) всё ещё не является замкнутой. Для того, чтобы её можно было использовать для расчётов, нужно дополнить её моделью турбулентности для вычисления эффективной вязкости.

### 4.3 Турбулентность

Турбулентное течение представляет собой сложный нестационарный процесс, характеризующийся хаотическими пульсациями скорости и давления. В реактивных струях турбулентность возникает вследствие градиентов скорости на границе истекающей струи и окружающей среды, а также из-за сдвиговых течений и химических реакций, изменяющих

локальные свойства потока.

Ключевой особенностью турбулентных течений является их много масштабность. Интегральный масштаб турбулентности, определяющий размер наиболее энергонасыщенных вихрей, может превышать микроскопический масштаб на несколько порядков. Эта особенность количественно описывается числом Рейнольдса, представляющим отношение инерционных сил к вязким.

Современные подходы к моделированию турбулентности можно разделить на три основных направления. Прямое численное моделирование (DNS) предполагает решение полных уравнений Навье-Стокса без каких-либо упрощений, что требует чрезвычайно мелких расчетных сеток и ограничено течениями с умеренными числами Рейнольдса.

Метод крупных вихрей (LES) предлагает компромиссное решение, непосредственно разрешая крупномасштабные вихревые структуры и моделируя влияние мелкомасштабных пульсаций. Этот подход обеспечивает хороший баланс между точностью и вычислительными затратами.

Наиболее распространенным в инженерной практике остается подход, основанный на осреднении по Рейнольдсу (RANS). В этом случае решаются уравнения для осредненных величин, а влияние турбулентных пульсаций учитывается с помощью специальных моделей.

Альтернативой служит модель  $k - \omega$ , сочетающая преимущества двух подходов и лучше описывающая течения с отрывом. Для сложных случаев, требующих повышенной точности, применяются гибридные методы (DES, DDES), комбинирующие достоинства RANS и LES подходов.

Моделирование турбулентного горения сопряжено с рядом фундаментальных сложностей. Нелинейность химических источников членов и необходимость учета флуктуаций состава требуют специальных подходов. На практике часто применяют модель ламинарного пламени или метод функции плотности вероятности, позволяющие адекватно описать взаимодействие химических и турбулентных процессов.

Турбулентность существенно влияет на процесс горения, усиливая перемешивание реагентов и увеличивая эффективную площадь фронта пламени. Это приводит к заметному изменению скорости горения по сравнению с ламинарным случаем.

#### 4.4 Схемы дифференцирования

В общем случае, уравнения по каждому параметру системы имеют следующий вид:

$$\frac{\partial d}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial y} \left( A \frac{\partial f}{\partial y} \right) + B \frac{\partial f}{\partial y} + C f + D \quad (17)$$

Производные, в свою очередь, можно аппроксимировать по следующим схемам [28; 29]:

$$\frac{\partial f}{\partial x} \longrightarrow \frac{f_{n+1}^m - f_{n-1}^m}{2L}, \quad (18)$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} \longrightarrow \frac{f_n^{m+1} - f_n^{m-1}}{2H}, \quad (19)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( A \frac{\partial f}{\partial x} \right) \longrightarrow \frac{1}{L} \left( A_{n+1}^m \frac{f_{n+1}^m - f_n^m}{L} - A_{n-1}^m \frac{f_n^m - f_{n-1}^m}{L} \right), \quad (20)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left( A \frac{\partial f}{\partial y} \right) \longrightarrow \frac{1}{H} \left( A_n^{m+1} \frac{f_n^{m+1} - f_n^m}{H} - A_n^{m-1} \frac{f_n^m - f_n^{m-1}}{H} \right), \quad (21)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left( A \frac{\partial f}{\partial x} \right) \longrightarrow \frac{1}{2H} \left( A_n^{m+1} \frac{f_{n+1}^{m+1} - f_{n-1}^{m+1}}{2L} - A_n^{m-1} \frac{f_{n+1}^{m-1} - f_{n-1}^{m-1}}{2L} \right), \quad (22)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( A \frac{\partial f}{\partial y} \right) \longrightarrow \frac{1}{2L} \left( A_{n+1}^m \frac{f_{n+1}^{m+1} - f_{n+1}^{m-1}}{2H} - A_{n-1}^m \frac{f_{n-1}^{m+1} - f_{n-1}^{m-1}}{2H} \right). \quad (23)$$

#### 4.5 Химическая модель

Для описания химической реакции необходимо знать закономерности её протекания во времени, а именно, скорость и механизм. Скорость и механизм химических превращений изучает раздел химии — химическая кинетика [30; 31; 32].

Будем рассматривать многокомпонентную систему переменного состава из  $N$  веществ, в которой протекает  $N_R$  реакций вида:

$$\sum_{i=1}^N \overrightarrow{\nu_i^{(r)}} M_i \xrightleftharpoons[W^{(r)}]{\overleftarrow{W^{(r)}}} \sum_{i=1}^N \overleftarrow{\nu_i^{(r)}} M_i,$$

$$\overleftarrow{q^{(r)}} = \sum_{i=1}^N \overleftarrow{\nu_i^{(r)}}, \quad (24)$$

$$r = 1, \dots, N_R,$$

$$i = 1, \dots, N$$

Здесь  $r$  — порядковый номер реакции,  $i$  — порядковый номер вещества,  $\overleftarrow{\nu_i^{(r)}}$  — стехиометрические коэффициенты (коэффициенты, стоящие перед молекулами веществ в химических уравнениях),  $\overleftarrow{q^{(r)}}$  — молекулярность соответствующих элементарных реакций (число частиц, которые участвуют в элементарном акте химического взаимодействия).

В записи каждой реакции фигурирует  $W^{(r)}$  — скорость химической реакции. Она прямо пропорциональна произведению объёмных концентраций участвующих в ней компонентов и так называемой константы скорости реакции  $\overleftarrow{K^r}(T)$ , зависящей от температуры (в общем случае и от давления).

Общий вид формул скоростей химических реакций:

$$\overleftarrow{W^r} = \overleftarrow{K^r}(T) \prod_i (\rho \gamma_i)^{\overleftarrow{\nu^r}} \quad (25)$$

Константы скорости реакции  $\overleftarrow{K^r}(T)$  рассчитываются для прямого и обратного хода реакции по следующим формулам:

$$\overrightarrow{K^r}(T) = AT^n \exp\left(-\frac{E}{T}\right) \quad (26)$$

$$\overleftarrow{K^r}(T) = \overrightarrow{K^r}(T) \exp\left(\sum_{i=1}^N (\overrightarrow{\nu_i^{(r)}} - \overleftarrow{\nu_i^{(r)}}) \left(\frac{G_i^0(T)}{RT} + \ln \frac{RT}{p_0}\right)\right) \quad (27)$$

Здесь  $A, n, E$  — Аррениусовские константы,  $r = 1, \dots, N_R$  — порядковый номер реакции,  $G_i^0(T)$  — стандартный молярный потенциал Гиббса. Для вычисления  $G_i^0(T)$  используются полиномиальные



аппроксимационные формулы:

$$G_i^0(T) = \Delta_f H^0(T_0) - [H^0(T_0) - H^0(0)] - T\Phi(T_0), \quad (28)$$

где  $H^0(0)$  — стандартная энтальпия при абсолютном нуле,  $H^0(T_0)$  — стандартная энтальпия при  $T_0$ . Для задания  $\Phi^0(T)$  применяют полиномы.

$$\Phi^0(T) = \phi_0 + \phi_{ln} \ln x + \phi_{-2}x^{-2} + \phi_{-1}x^{-1} + \phi_1x + \phi_2x^2 + \phi_3x^3 \quad (29)$$

Здесь  $\phi_0, \phi_{ln}, \phi_{-2}, \dots, \phi_3$  — числовые коэффициенты, индивидуальные для каждого вещества.

Используя скорости  $W^{(r)}$ , можно составить уравнения изменения мольно-массовых концентраций по времени, имеющих следующий вид:

$$\begin{cases} \rho \frac{d\gamma_i}{dt} = W_i(\rho, T, \gamma_1, \dots, \gamma_N) \\ \gamma_i(t_0) = \gamma_i^0, \\ i = 1, \dots, N \end{cases} \quad (30)$$

где  $W_i$  — скорость образования  $i$ -го вещества. Вычисляется  $W_i$  по формуле (31):

$$W_i = \sum_{r=1}^{N_R} (\overrightarrow{\nu_i^{(r)}} - \overleftarrow{\nu_i^{(r)}})(\overrightarrow{W^{(r)}} - \overleftarrow{W^{(r)}}) \quad (31)$$

В формулах (30) помимо  $\gamma_i$  фигурируют плотность  $\rho$  и температура  $T$ . Их значения могут быть как константами по времени вычисления, так и переменными. В работе реализовано моделирование случая, когда плотность меняется по закону (32), а температура константна, и случая, когда температура меняется, а плотность считается константой.

$$\rho = \frac{P}{RT \sum_{i=1}^N \gamma_i} \quad (32)$$

Второй случай, связанный с изменением температуры немного сложнее в реализации, так как температуру приходится находить итерационными методами из уравнения (33).

$$U_E = \sum_{i=1}^N (G_i^0(T) - T \frac{\partial G_i^0(T)}{\partial T} - RT) \gamma_i, \quad (33)$$

где  $U_E$  — полная внутренняя энергия системы, которая считается перед решением и сохраняется постоянной до конца расчётов. Если представить данное уравнение в виде (34), то можно использовать, к примеру, метод Ньютона для поиска корня уравнения.

$$F(T) = U_E - \sum_{i=1}^N (G_i^0(T) - T \frac{\partial G_i^0(T)}{\partial T} - RT) \gamma_i \quad (34)$$

Так как  $U_E$ , является константой, то решение  $F(T) = 0$  будет соответствовать значению температуры на следующем шаге интегрирования.

#### 4.6 Дифференциальные уравнения

При использовании прямого численного моделирования течения, требуется на каждой итерации отдельно считать шаг по уравнениям химической кинетики. Для этого химическую модель можно представить в виде СДУ, для решения которой можно использовать маршевые методы семейства Рунге-Кутты [33; 34].

Задача горения сводится к решению ДУ произвольного порядка. Общий вид такой задачи представлен в примере (35).

$$\begin{cases} y^{(n)} = f(x, y, y', y'', \dots, y^{(n-1)}) \\ y(x_0) = y_0 \\ y'(x_0) = y_1 \\ y''(x_0) = y_2 \\ \dots \\ y^{(n-1)}(x_0) = y_{n-1} \end{cases} \quad (35)$$

Данное уравнение произвольного порядка  $n$  может быть преобразовано в систему из  $n$  ДУ первого порядка путём замены переменных. Пример (36) демонстрирует преобразование задачи Коши второго порядка в систему из 2-х уравнений первого порядка, путём замены  $y'$  на  $z$ :

$$\begin{cases} z' = f(x, y, y', y'') \\ y' = z \\ y(x_0) = y_0 \\ z(x_0) = y_1 \end{cases} \quad (36)$$

Для решения жёстких и нежёстких задач [35; 36] можно использовать различные семейства методов. В данной работе для моделирования химической кинетики отдельно используются явный метод Рунге-Кутты 6-го порядка и неявный метод Гаусса 6-го порядка. Все эти методы представлены в виде таблиц Бутчера [37; 38].

Для более жёстких задач метод Рунге-Кутты 4-го порядка может быть недостаточно точным. Иногда приходится сильно уменьшать шаг интегрирования для того, чтобы решение было устойчивым. Другой путь — использование методов более высоких порядков, например метода Рунге-Кутты 6-го порядка. Схема данного метода представлена на рисунке 5.

$$\left\{ \begin{array}{l} y_{k+1} = y_k + \Delta y_k \\ \Delta y_k = \frac{7}{90}(K_1^k + K_6^k) + \frac{16}{45}(K_2^k + K_5^k) - \\ - \frac{1}{3}K_3^k + \frac{7}{15}K_4^k \\ K_1^k = hf(x_k, y_k) \\ K_2^k = hf(x_k + \frac{1}{4}h, y_k + \frac{1}{4}K_1^k) \\ K_3^k = hf(x_k + \frac{1}{2}h, y_k + \frac{1}{2}K_1^k) \\ K_4^k = hf(x_k + \frac{1}{2}h, y_k + \frac{1}{7}K_1^k + \frac{2}{7}K_2^k + \\ + \frac{1}{14}K_3^k) \\ K_5^k = hf(x_k + \frac{3}{4}h, y_k + \frac{3}{8}K_1^k - \frac{1}{2}K_3^k + \\ + \frac{7}{8}K_4^k) \\ K_6^k = hf(x_k + h, y_k - \frac{4}{7}K_1^k + \frac{12}{7}K_2^k - \\ - \frac{2}{7}K_3^k - K_4^k + \frac{8}{7}K_5^k) \end{array} \right.$$

|               |                |                 |                |                |                 |                |
|---------------|----------------|-----------------|----------------|----------------|-----------------|----------------|
| 0             | 0              | 0               | 0              | 0              | 0               | 0              |
| $\frac{1}{4}$ | $\frac{1}{4}$  | 0               | 0              | 0              | 0               | 0              |
| $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{2}$  | 0               | 0              | 0              | 0               | 0              |
| $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{7}$  | $\frac{2}{7}$   | $\frac{1}{14}$ | 0              | 0               | 0              |
| $\frac{3}{4}$ | $\frac{3}{8}$  | 0               | $-\frac{1}{2}$ | $\frac{7}{8}$  | 0               | 0              |
| 1             | $-\frac{4}{7}$ | $\frac{12}{7}$  | $-\frac{2}{7}$ | -1             | 7               | 0              |
| 0             | $\frac{7}{90}$ | $\frac{16}{45}$ | $-\frac{1}{3}$ | $\frac{7}{15}$ | $\frac{16}{45}$ | $\frac{7}{90}$ |

Рисунок 5 – Схема Рунге-Кутты 6-го порядка

Все явные методы относятся к классу условно устойчивых методов [39; 40]. Точность решения условно устойчивых методов сильно зависит от

размера шага, поэтому у каждого из них есть свой критерий устойчивости. В зависимости от требований к устойчивости можно взять для решения либо явную, либо не явную схему. На рисунке 6 изображена общая схема неявной схемы.

$$\left\{ \begin{array}{l} y_{k+1} = y_k + \frac{5}{18}hK_1 + \frac{4}{9}hK_2 + \frac{5}{18}hK_3 \\ K_1 = f(x_k + (\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{15}}{10})h, y_k + \frac{5}{36}hK_1 + (\frac{2}{9} - \frac{\sqrt{15}}{15})hK_2 + (\frac{5}{36} - \frac{\sqrt{15}}{30})hK_3) \\ K_2 = f(x_k + \frac{1}{2}h, y_k + (\frac{5}{36} + \frac{\sqrt{15}}{24})hK_1 + \frac{2}{9}hK_2 + (\frac{5}{36} - \frac{\sqrt{15}}{24})hK_3) \\ K_3 = f(x_k + (\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{15}}{10})h, y_k + (\frac{5}{36} + \frac{\sqrt{15}}{30})hK_1 + (\frac{2}{9} + \frac{\sqrt{15}}{15})hK_2 + \frac{5}{36}hK_3) \end{array} \right.$$

|                                      |                                       |                                      |                                       |
|--------------------------------------|---------------------------------------|--------------------------------------|---------------------------------------|
| $\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{15}}{10}$ | $\frac{5}{36}$                        | $\frac{2}{9} - \frac{\sqrt{15}}{15}$ | $\frac{5}{36} - \frac{\sqrt{15}}{30}$ |
| $\frac{1}{2}$                        | $\frac{5}{36} + \frac{\sqrt{15}}{24}$ | $\frac{2}{9}$                        | $\frac{5}{36} - \frac{\sqrt{15}}{24}$ |
| $\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{15}}{10}$ | $\frac{5}{36} + \frac{\sqrt{15}}{30}$ | $\frac{2}{9} + \frac{\sqrt{15}}{15}$ | $\frac{5}{36}$                        |
| 0                                    | $\frac{5}{18}$                        | $\frac{4}{9}$                        | $\frac{5}{18}$                        |

Рисунок 6 – Схема Гаусса 6-го порядка

Неявные методы хоть и обладают большей устойчивостью, но проигрывают по времени вычисления даже при большем размере шага. Поэтому целесообразно использовать сначала явную схему для проверки её применимости.

## 5 МЕТОДИКА РАСЧЁТА И ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ

### 5.1 Общие алгоритмы и структуры

В данном подразделе перечислены основные алгоритмы и структуры, которые использовались в остальных модулях. Сюда вошли алгоритмы LU-разложения матрицы, QR алгоритм нахождения собственных чисел матрицы, алгоритмы дифференцирования с разным порядком точности и так далее. Для работы с таблицами Бутчера и алгоритмами решения СНУ был реализован собственный класс матрицы с базовой матричной алгеброй. Для комфортной работы с конечно-разностной схемой были написаны структуры для перевода величин из физических в профильные, функции для компактного вычисления больших множителей и так далее.

#### *LU алгоритм*

LU-разложение матрицы [41]  $A$  представляет собой разложение матрицы  $A$  в произведение нижней и верхней треугольных матриц, т.е.  $A = LU$ , где  $L$  — нижняя треугольная матрица на диагонали которой стоят единицы,  $U$  — верхняя треугольная матрица. LU-разложение может быть использовано при решении систем линейных алгебраических уравнений вида  $Ax = b$ . Полученное LU-разложение может быть так же использовано для вычисления определителя матрицы по формуле.

$$\det(A) = \det(L)\det(U) = \left(\prod_{i=1}^n L_{ii}\right)\left(\prod_{i=1}^n U_{ii}\right) = \prod_{i=1}^n U_{ii}, \quad (37)$$

где  $n$  — размер квадратной матрицы.

Для нахождения обратной матрицы из задачи  $AX = E$ , где  $A$  — исходная матрица,  $X$  — обратная матрица,  $E$  — единичная матрица, составляется  $n$  систем уравнений:

$$AX_i = e_i, i = 1, \dots, n, \quad (38)$$

где  $X_i$  — вектор-столбец обратной матрицы с индексом  $i$ ,  $e_i$  — вектор-столбец единичной матрицы с индексом  $i$ .

Нахождение обратной матрицы сводится к решению  $n$  уравнений с одной матрицей и разными правыми частями.

#### *Метод Гаусса*

Метод Гаусса — это прямой численный метод решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) вида:

$$Ax = b, \quad (39)$$

где  $A$  — матрица коэффициентов размера  $n \times n$ ,  $x$  — вектор неизвестных,  $b$  — вектор правых частей.

Цель метода: преобразовать исходную систему к треугольному виду (прямой ход), а затем найти неизвестные обратной подстановкой (обратный ход).

При сравнении производительности методов Гаусса с выбором главного элемента и LU-разложения для решения системы вида 39, было установлено, что метод Гаусса обладает лучшей устойчивостью и скоростью решения. LU-разложение матрицы используется для нахождения обратной матрицы при вычислении Якобиана в части решения химической кинетики.

#### *Дифференцирование*

Для численного дифференцирования была разработана функция, получающая в качестве аргументов функцию для дифференцирования, точку, в которой необходимо продифференцировать функцию и схему дифференцирования:

$$y' = \frac{a_1 y_{i-n+1} + a_2 y_{i-n+2} + \dots + a_{2n-1} y_{i+n-1}}{ch^p} \quad (40)$$

где  $n$  — количество точек аппроксимации.

При таком представлении все схемы можно реализовать при помощи одномерного массива коэффициентов.

$$[a_1, a_2, \dots, a_{2n-1}, c, p]$$

где  $a_i$  — коэффициенты для точек,  $c$  — коэффициент перед шагом в знаменателе,  $p$  — степень шага. Такой подход позволяет быстро дополнять текущий набор схем новыми. Помимо этого избегается дублирование одинакового кода. Так, например, вторая 4-х точечная схема

$$y'_i = \frac{-11y_i + 18y_{i+1} - 9y_{i+2} + 2y_{i+3}}{6h} \quad (41)$$

может быть представлена в следующем виде:

$$[0, 0, 0, -11, 18, -9, 2, 6, 1]$$

#### *Общие упрощения и оптимизации по коду*

Для просчёта прогоночных коэффициентов трёхдиагональной матрицы требуется достаточно много слагаемых, содержащих сразу несколько множителей. Для улучшения написания кода было реализовано несколько вспомогательных лямбда-функций. Рисунки 7, 8 показывает листинг, содержащий код таких функций.

```

1      auto comp = [&] (const std::vector<uint64_t> &numerator, const
std::vector<uint64_t> &denominator, uint64_t n, uint64_t m) ->
double {
2          double ans = 1.0;
3          for (uint64_t i : numerator) {
4              ans *= i == Y ? std::pow(f[i](n, m), nu) : f[i](n, m);
5          }
6          for (uint64_t i : denominator) {
7              ans /= i == Y ? std::pow(f[i](n, m), nu) : f[i](n, m);
8          }
9          return ans;
10     };
11     auto compAlpha = [&] (const std::vector<uint64_t> &numerator,
const std::vector<uint64_t> &denominator, uint64_t n, uint64_t m
) -> double {
12         return (1.0 - alpha) * comp(numerator, denominator, n - 1,
m) + alpha * comp(numerator, denominator, n, m);
13     };
14     auto compd = [&] (char firstDiff, const std::vector<uint64_t> &
num1, const std::vector<uint64_t> &denum1, uint64_t n, uint64_t
m) -> double {
15         double ans = 0.0;
16         if (firstDiff == 'x') {
17             ans = 1.0 / (2 * L) * (comp(num1, denum1, n + 1, m) -
comp(num1, denum1, n - 1, m));
18         }
19         if (firstDiff == 'y') {
20             if (m == 0) {
21                 ans = 1.0 / H * (comp(num1, denum1, n, m + 1) -
comp(num1, denum1, n, m));
22             } else if (m == f[0].size().m - 1) {
23                 ans = 1.0 / H * (comp(num1, denum1, n, m) - comp(
num1, denum1, n, m - 1));
24             } else {
25                 ans = 1.0 / (2 * H) * (comp(num1, denum1, n, m + 1)
- comp(num1, denum1, n, m - 1));
26             }
27         }
28         return ans;
29     };

```

Рисунок 7 – Код вспомогательных функций



```

1      auto compdd = [&] (char firstDiff, const std::vector<uint64_t>
&num1, const std::vector<uint64_t> &denum1, char secondDiff,
const std::vector<uint64_t> &num2, const std::vector<uint64_t> &
denum2, uint64_t n, uint64_t m) -> double {
2          double ans = 0.0;
3          if (firstDiff == 'x' && secondDiff == 'x') {
4              ans = 1.0 / L * (comp(num1, denum1, n + 1, m) * (comp(
num2, denum2, n + 1, m) - comp(num2, denum2, n, m)) / L - comp(
num1, denum1, n - 1, m) * (comp(num2, denum2, n, m) - comp(num2,
denum2, n - 1, m)) / L);
5          }
6          if (firstDiff == 'x' && secondDiff == 'y') {
7              ans = 1.0 / (2 * L) * (comp(num1, denum1, n + 1, m) * (
comp(num2, denum2, n + 1, m + 1) - comp(num2, denum2, n + 1, m -
1)) / (2 * H) - comp(num1, denum1, n - 1, m) * (comp(num2,
denum2, n - 1, m + 1) - comp(num2, denum2, n - 1, m - 1)) / (2 *
H));
8          }
9          if (firstDiff == 'y' && secondDiff == 'x') {
10             ans = 1.0 / (2 * H) * (comp(num1, denum1, n, m + 1) * (
comp(num2, denum2, n + 1, m + 1) - comp(num2, denum2, n - 1, m +
1)) / (2 * L) - comp(num1, denum1, n, m - 1) * (comp(num2,
denum2, n + 1, m - 1) - comp(num2, denum2, n - 1, m - 1)) / (2 *
L));
11         }
12         if (firstDiff == 'y' && secondDiff == 'y') {
13             ans = 1.0 / H * (comp(num1, denum1, n, m + 1) * (comp(
num2, denum2, n, m + 1) - comp(num2, denum2, n, m)) / H - comp(
num1, denum1, n, m - 1) * (comp(num2, denum2, n, m) - comp(num2,
denum2, n, m - 1)) / H);
14         }
15         return ans;
16     };

```

Рисунок 8 – Код вспомогательных функций

## 5.2 Графический пользовательский интерфейс

Для ввода задачи была реализована специальная форма с использованием библиотеки *OpenGL*. Её внешний вид представлен на рисунке 9.

Ввод начальных условий происходит посредством чтения их из файла,

форму можно использовать для выбора необходимого файла с набором данных, отображения результатов вычисления, проигрывания анимации, а также анализа точности, производительности и изменению значений переменных на протяжении всего расчёта. По окончании вычислений, все результаты сохраняются в отдельный файл, поэтому решать тестовые наборы достаточно один раз (если не планируется их дальнейшее изменение).

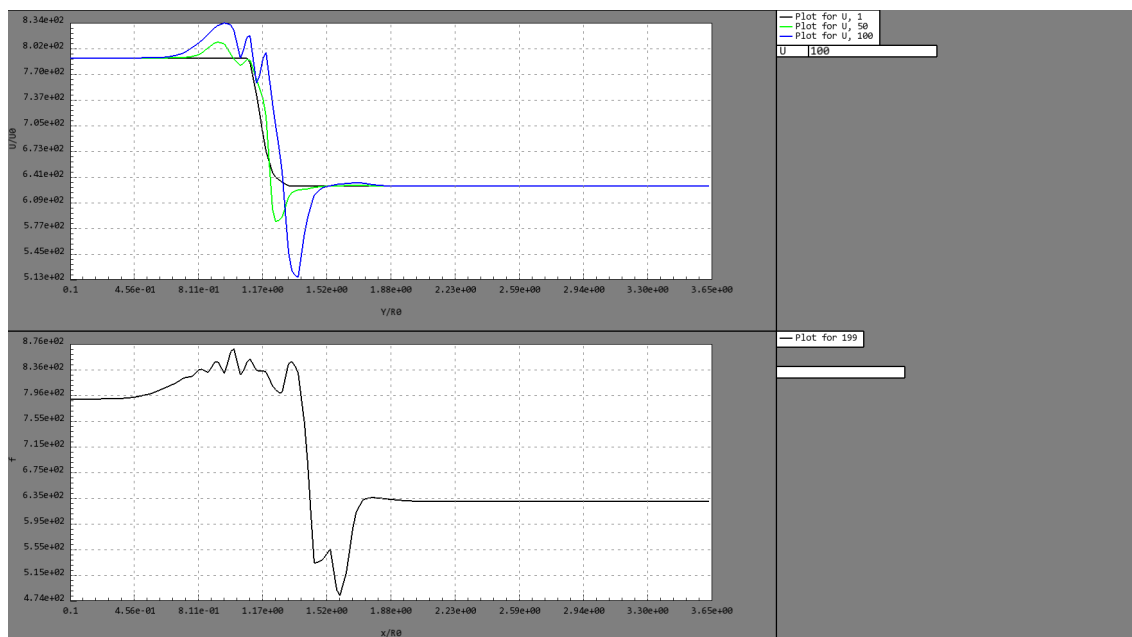


Рисунок 9 – Вид интерфейса для ввода анализа решения

После ввода задачи и экспериментальных данных (при наличии), начальных условий и границ интегрирования требуется выбрать метод решения.

### 5.3 Парсер химических уравнений

Химические уравнения обычно записываются в виде



где  $Sub_i$  — некоторые вещества. Помимо формул, для моделирования реакций нужно знать термодинамические свойства веществ и Аррениусовские константы скоростей для каждой реакции [6].

На основе этих данных формируется СДУ, порядок которой равен числу веществ, участвующих в реакциях [30]. Подробнее про это расписано в предыдущем разделе.

## 5.4 Реализация методов решения СДУ

Как уже говорилось выше, все методы семейства Рунге-Кутты можно представить в виде таблиц Бутчера [38]. В связи с этим появилась идея реализовать алгоритм, принимающий в качестве аргументов задачу и таблицу Бутчера и возвращающий решение в виде таблицы с координатами. Благодаря этому алгоритму добавлять новые методы не вызывает никаких сложностей. Используемые методы перечислены на рисунке 10. Всего в данной работе используется 62 схемы со 2 по 6 порядок точности. Для решения задач горения используются явная схема Рунге-Кутты и неявная схема Гаусса. Обе схемы 6-го порядка точности.

### Явные

- ☐ Классические методы Рунге-Кутты (15 схем)
- ☐ Вложенные методы Рунге-Кутты (9 схем)
- ☐ Многошаговые методы Адамса (4 схемы)
- ☐ Многошаговые методы Адамса в режиме предиктор-корректор (4 схемы)

### Неявные

- ☐ Методы Гаусса (3 схемы)
- ☐ Методы Радо (3 схемы)
- ☐ Методы Лобатто (12 схем)
- ☐ Диагональные методы (4 схемы)
- ☐ Многошаговые методы Адамса (4 схемы)
- ☐ Многошаговые методы Куртиса (4 схемы)

Рисунок 10 – Методы решения

По желанию пользователя можно добавить другой метод при помощи специального конструктора.

## 5.5 Схема Кранка-Николсона

Для аппроксимации исходной системы уравнений [42] при моделировании течения спутных струй выбран неявный шеститочечный шаблон типа Кранка-Николсона с весами. На рисунке 11 демонстрируется проблема использования чисто явной или чисто неявной схемы. Решение полученной системы нелинейных алгебраических уравнений определяется методом Гаусса.

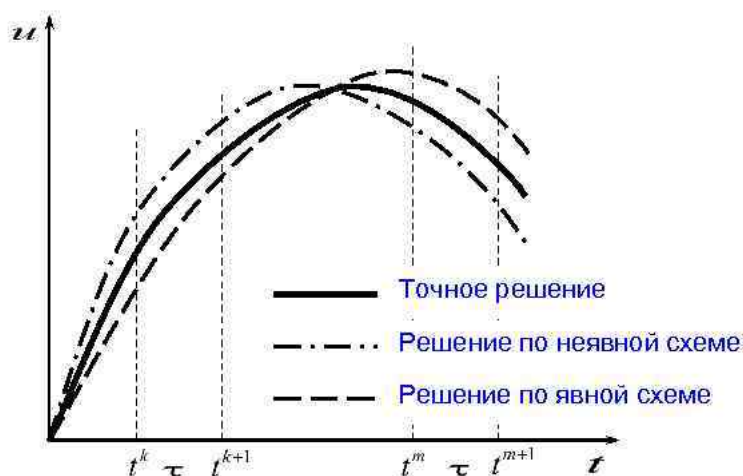


Рисунок 11 – Неявно-явные схемы с весами. Схема Кранка-Николсона

К методам численного интегрирования уравнений обычно предъявляется ряд требований, выполнение которых желательно для создания эффективных программ расчета параметров течения. Это — сочетание скорости счета с достаточной точностью, применение сквозного метода без выделения характерных особенностей в разных зонах течения на основе устойчивой разностной схемы, и, наконец, универсальность по отношению к разным типам течений. Перечисленными свойствами обладает маршевый метод интегрирования с применением неявной разностной схемы на шеститочечном шаблоне типа Кранка-Николсона с весами. Он обладает вторым порядком точности по поперечной координате и первым или вторым порядком, в зависимости от параметра численной схемы, по продольной координате и относится к наиболее часто применяемым методам для решения задач параболизированного типа.

Решение каждой итерации происходит по следующей схеме:

- в качестве приближённого решения берётся предыдущий слой;
- для каждого параметра уравнений ( $U, V, W, J, T, \rho, P, C_i, i = 1, \dots, N$ ) строится трёхдиагональная матрица вида

$$A^m f_{n+1}^{m+1} + B^m f_{n+1}^m + C^m f_{n+1}^{m-1} = D^m \quad (43)$$

по заданной системе уравнений;

- матрица-система решается методом Гаусса, решение записывается в следующий слой;
- для достижения устойчивости решения, данная процедура

повторяется 5 раз.

## **5.6 Ввод данных по профилю**

Для корректного моделирования струйных течений необходимо точное задание начальных профилей параметров потока на входе в расчетную область. В работе используется ступенчатый профиль.

Ввод данных происходит посредством чтения таблицы профильных величин из тестового файла и чтения нулевых значений для перевода из профильных величин в физические. Сами по себе профильные величины позволяют уменьшить вероятность возникновения ошибки при вычислении больших значений, а значит — повысить стабильность схемы, что будет продемонстрировано в следующем разделе во время тестирования.

Стоит отметить, что данный приём используется для параболизированной системы уравнений. Для полной системы Навье-Стокса при прямом вычислении все переменные записываются сразу в физических величинах.

Таблица 2 – Таблица профильных величин

| Y     | U     | V     | W     | T     | P     |
|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| 0.100 | 1.000 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | 1.000 |
| 0.200 | 1.000 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | 1.000 |
| 0.300 | 1.000 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | 1.000 |
| 0.400 | 1.000 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | 1.000 |
| 0.500 | 1.000 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | 1.000 |
| 0.600 | 1.000 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | 1.000 |
| 0.700 | 1.000 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | 1.000 |
| 0.800 | 1.000 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | 1.000 |
| 0.900 | 1.000 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | 1.000 |
| 1.000 | 1.000 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | 0.455 |
| 1.100 | 1.000 | 0.000 | 0.000 | 1.000 | 0.182 |
| 1.200 | 0.820 | 0.000 | 0.000 | 0.740 | 0.036 |
| 1.300 | 0.797 | 0.000 | 0.000 | 0.433 | 0.036 |
| 1.400 | 0.797 | 0.000 | 0.000 | 0.433 | 0.036 |
| 1.500 | 0.797 | 0.000 | 0.000 | 0.433 | 0.045 |
| 1.600 | 0.797 | 0.000 | 0.000 | 0.433 | 0.054 |
| 1.700 | 0.797 | 0.000 | 0.000 | 0.433 | 0.061 |
| 1.800 | 0.797 | 0.000 | 0.000 | 0.433 | 0.061 |
| 1.900 | 0.797 | 0.000 | 0.000 | 0.433 | 0.061 |

Для ввода концентраций химических компонент используется отдельная таблица с идентичным форматом.

## 5.7 Турбулентность

В данной работе реализованы 3 модели турбулентности.

Для замыкания параболизированной системы уравнений (9-16) при описании характеристик сверхзвуковой неизобарической струи в [11] рекомендуется использовать модификацию формулы Прандтля при числах  $Pr = Sc = 0,07$ :

$$\mu_T = 0.014\rho U_0 \Delta y_{1/2} (\Delta U_m)^n \left[ \left| 1 - m \right| \frac{\Delta y_{1/2}}{y^*} + \left( 1 + \frac{\Delta y_{1/2}}{y^*} \right) \right], \quad (44)$$

где

$$\begin{aligned}
\Delta U_m &= \frac{U_m - U_H}{U_0 - U_H}, \\
n &= 0.5 - 0.3 \sqrt{\frac{m}{1-m}}, \\
m &= \frac{U_H}{U_0}, \\
\Delta y_{1/2} &= y|_{\Delta J=0.2} - y|_{\Delta J=0.8}, \\
y^* &= y|_{\Delta J=0.5}, \\
\Delta \bar{U} &= \frac{U - U_H}{U_0 - U_H}.
\end{aligned} \tag{45}$$

Типичным примером демонстрации распределения газодинамических параметров служит расчёт течения изобарической изотермической одиночной струи. Коэффициент турбулентной вязкости, как и при построении точного решения, следует определить по формуле Прандтля [84]:

$$\mu_T = \rho l^2 \left| \frac{\partial U}{\partial y} \right|, \tag{46}$$

где  $l = 0.11 y_a$ ,  $y_a$  — ширина слоя смешения.

Другой пример посвящен расчету характеристик дозвукового течения коаксиальных ( $W = 0$ ) турбулентных неизотермических струй. Исследование основных закономерностей процесса смешения таких струй выполнено в [1] на основе обработки экспериментальных данных. Влияние турбулентной вязкости учитывалось по модели, предложенной в [2]:

$$\mu_T = 0.0135 \rho U_m \sqrt{0.07 + \left(1 - \frac{U_b}{U_m}\right)^2} y_{1/2}, \tag{47}$$

где  $U_b$  — скорость на внешней границе слоя смешения, а  $U_m$  — скорость на внутренней границе слоя смешения, причем

$$y_{1/2} = \frac{1}{2}(\rho_b U_b + \rho_m U_m) \tag{48}$$

В дальнейшем, в работу можно добавить реализацию моделей  $SST$  или  $k - \epsilon$ .

## 6 ТЕСТИРОВАНИЕ И ВЕРИФИКАЦИЯ ЧИСЛЕННОЙ МОДЕЛИ

В данном разделе представлены результаты тестирования разработанного численного алгоритма. Основное внимание уделено исследованию точности и производительности метода в зависимости от параметров дискретизации, а также сравнению полной и параболизированной постановок уравнений. Для сравнения точности были выбраны расчёты из [23].

### 6.1 Зависимость точности решения от шага дискретизации

Сравнение проводилось для трёх случаев  $H_1 = 0.0150$ ,  $H_2 = 0.0075$ ,  $H_3 = 0.0037$ . Результаты проверялись по значениям переменной  $U$ . Входные данные сохранены в файле `test7.py` на GitHub репозитории проекта (ссылка в приложении).

Для анализа влияния шага дискретизации на точность решения была рассмотрена модельная задача о ламинарной струе с химическими реакциями. Исследование проводилось при различных значениях шага по пространству  $\Delta x, \Delta y$  и времени  $\Delta t$ . Как видно из рисунках 12, 13, 14, 15, 16, 17, уменьшение шага приводит к монотонному снижению погрешности до некоторого предельного значения.

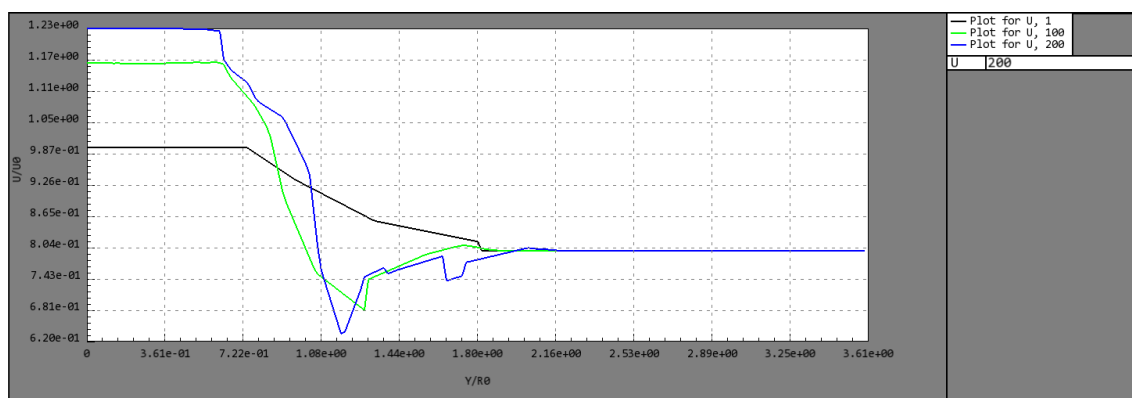


Рисунок 12 – Значение шага 0.015, параболизированная система



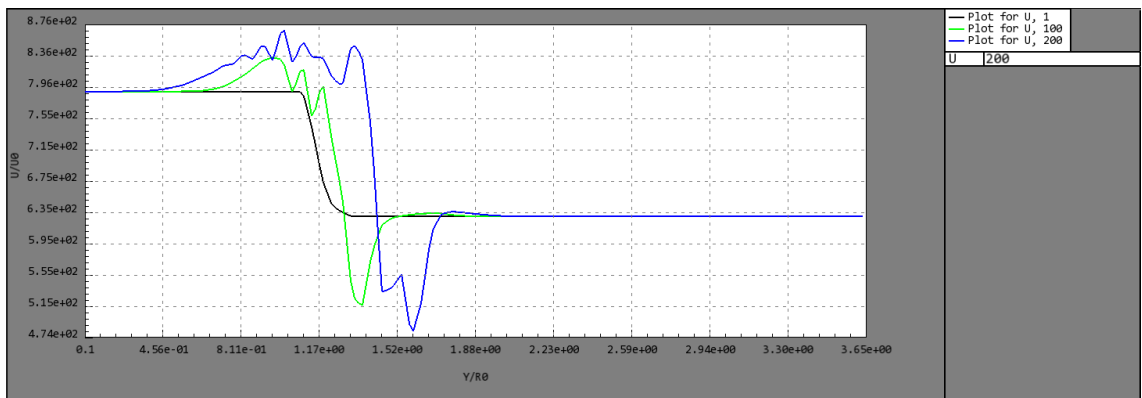


Рисунок 13 – Значение шага 0.015, полная система

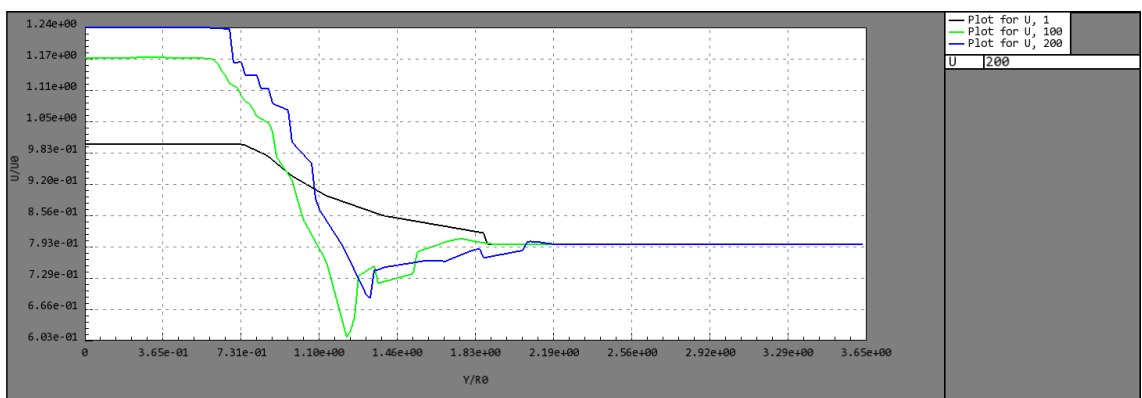


Рисунок 14 – Значение шага 0.0075, параболизированная система

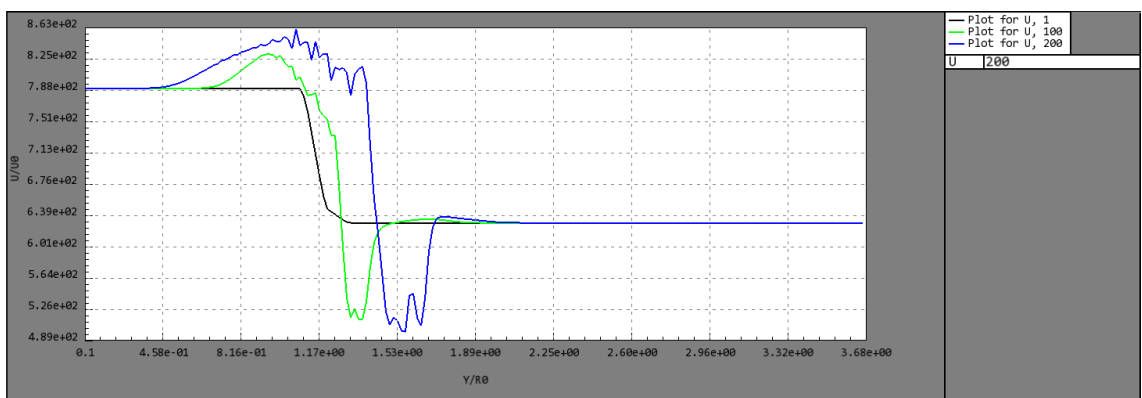


Рисунок 15 – Значение шага 0.0075, полная система

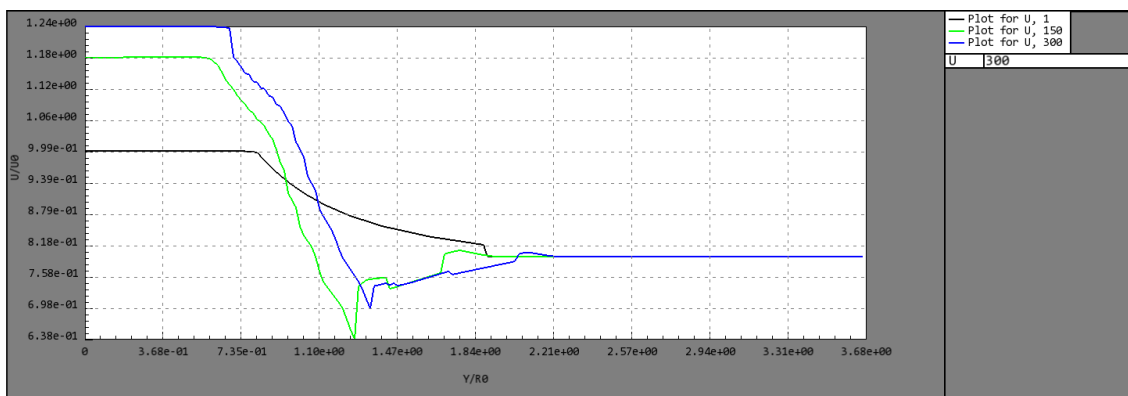


Рисунок 16 – Значение шага 0.0037, параболизированная система

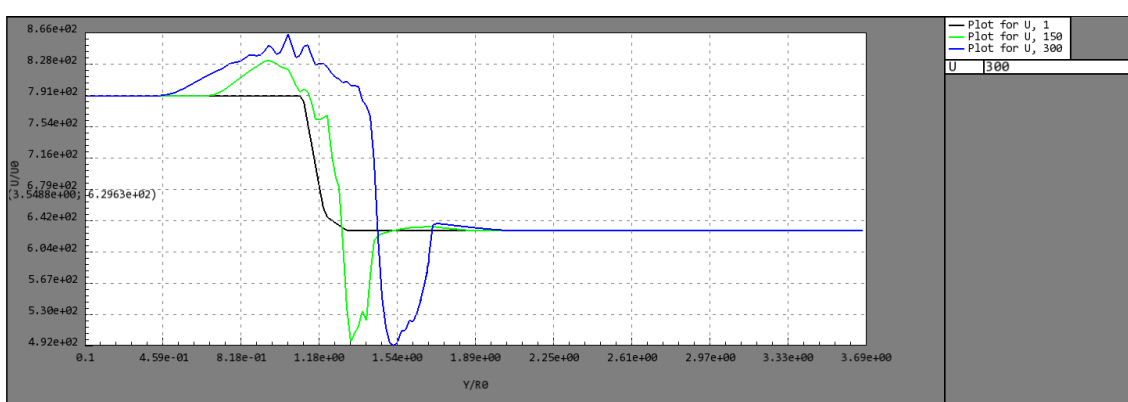


Рисунок 17 – Значение шага 0.0037, полная система

Наблюдаются две характерные области:

- При  $H > 0.007L$  доминирует погрешность аппроксимации
- При  $H < 0.003$  основную роль играют ошибки округления

Оптимальным с точки зрения точности и вычислительных затрат оказался шаг  $H \approx 0.003$ .

## 6.2 Сравнение полной и параболизированной систем уравнений

Для оценки адекватности параболизированной постановки проведено сравнение с полной системой уравнений Навье-Стокса на тестовой задаче о турбулентной струе. Основные результаты представлены в таблице 3.

Наибольшие расхождения (до 12%) наблюдаются в зоне обратных течений, где параболизированная постановка менее точна. Однако для основной зоны струи различия не превышают 5%.

Таблица 3 – Сравнение характеристик течения для разных постановок

| Параметр             | Полная система | Параболизованная |
|----------------------|----------------|------------------|
| Длина факела, м      | 1.25           | 1.31             |
| Макс. температура, К | 2150           | 2095             |
| Время расчёта, с     | 347.9          | 125.6            |

### 6.3 Зависимость времени расчёта от шага дискретизации

Производительность алгоритма исследовалась на сетках различной плотности. Результаты представлены на рисунке 18.

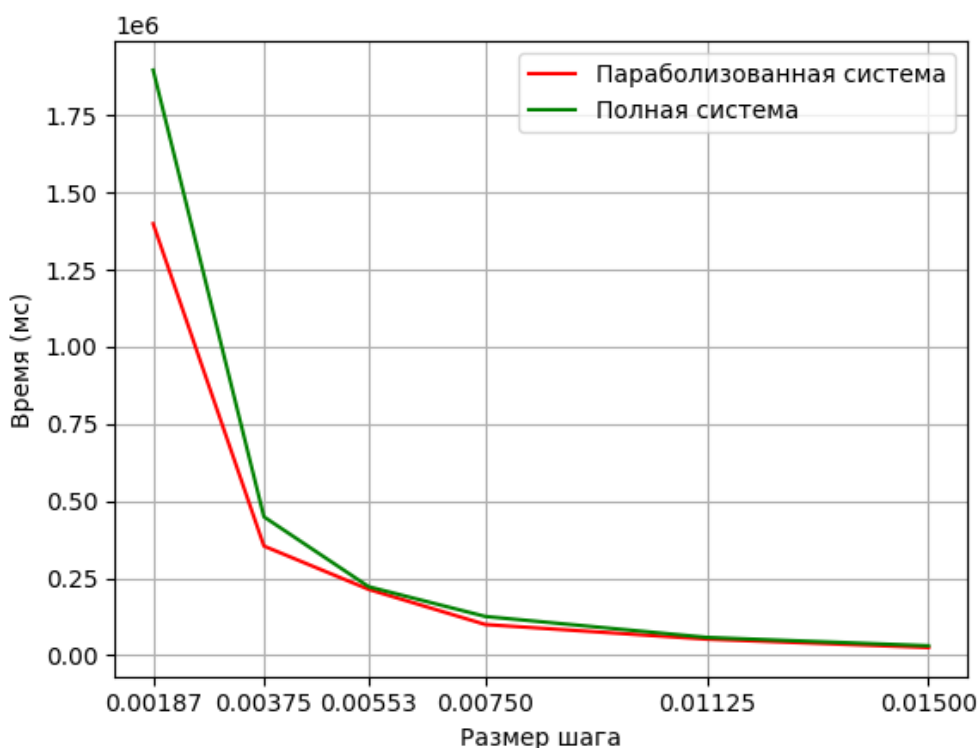


Рисунок 18 – Зависимость времени расчёта от размера шага

Зависимость времени расчёта  $T$  от размера шага  $H$  хорошо аппроксимируется степенной функцией:

$$T(N) = aN^b \quad (49)$$

где  $b \approx 1.8$  для параболизованной и  $b \approx 2.1$  для полной системы. Уменьшение показателя степени связано с эффективностью маршевого алгоритма.

## 6.4 Прочие примеры

Для демонстрации изменения различных переменных были выбраны следующие начальные данные и размеры шагов (Рис. 19). Данный формат используется для всех тестовых случаев.

```
1      #R0
2      0.01
3      #конечный расчёт  $X - n \cdot R_0$ 
4      100
5      #конечный расчёт  $Y - n \cdot R_0$ 
6      370
7      #размер сетки
8      200 500
9      #размер профиля
10     37
11     #путь к базе данных для хим. кинетики
12     ../../test/ChemicTest/bufermm1.txt
13     #значения внутри
14     5
15     U 790
16     T 237
17     P 50290
18     MU 0.18e-4
19     Y 1
20     #количество переменных с ненулевым профилем
21     6
22     Y      U      V      W      T      P
23     0.100  1.000  0.000  0.000  1.000  1.000
24     0.200  1.000  0.000  0.000  1.000  1.000
25     0.300  1.000  0.000  0.000  1.000  1.000
26     0.400  1.000  0.000  0.000  1.000  1.000
27     0.500  1.000  0.000  0.000  1.000  1.000
28     0.600  1.000  0.000  0.000  1.000  1.000
29     0.700  1.000  0.000  0.000  1.000  1.000
30     0.800  1.000  0.000  0.000  1.000  1.000
31     0.900  1.000  0.000  0.000  1.000  1.000
32     1.000  1.000  0.000  0.000  1.000  0.455
```

Рисунок 19 – Формат входных файлов

Результаты отображены на рисунках 20,21,22,23,24,25,26. Как можно заметить, даже при мелком шаге в расчётах присутствуют некоторые неточности и скачки. Это может быть вызвано неточной моделью турбулентности или издержками параболизации. В дальнейшем можно реализовать более точные модели и заняться более детальной оптимизацией.

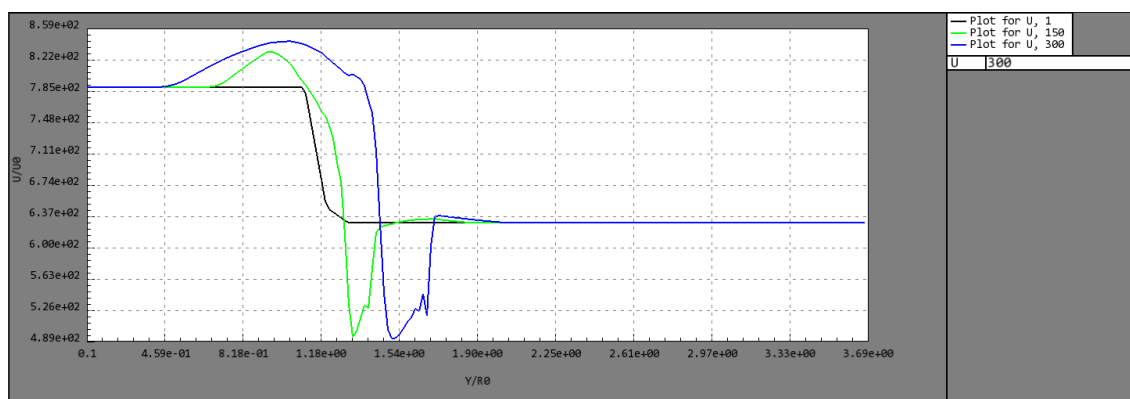


Рисунок 20 – Значения скорости  $U$

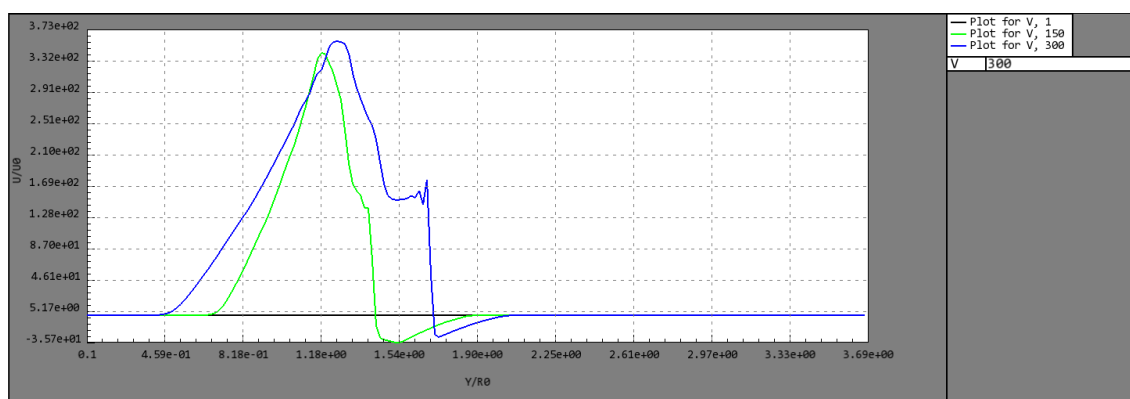


Рисунок 21 – Значения скорости  $V$

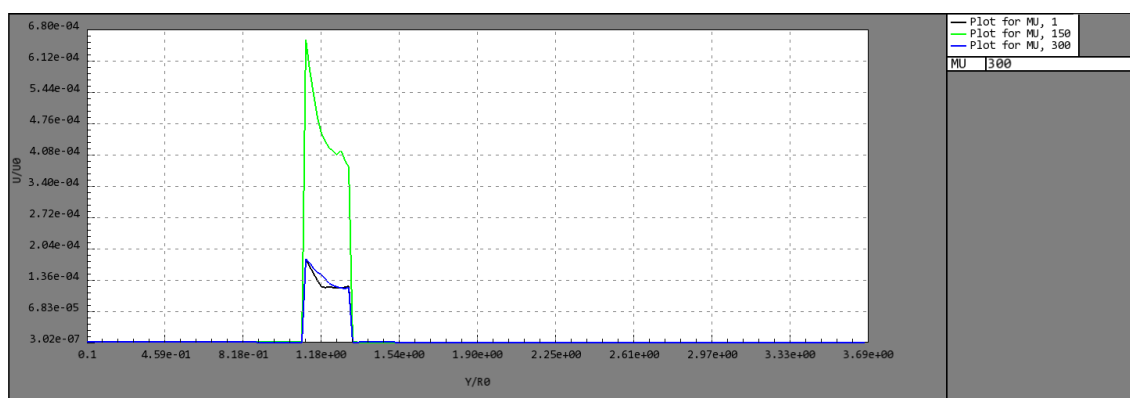


Рисунок 22 – Значения вязкости  $\mu$

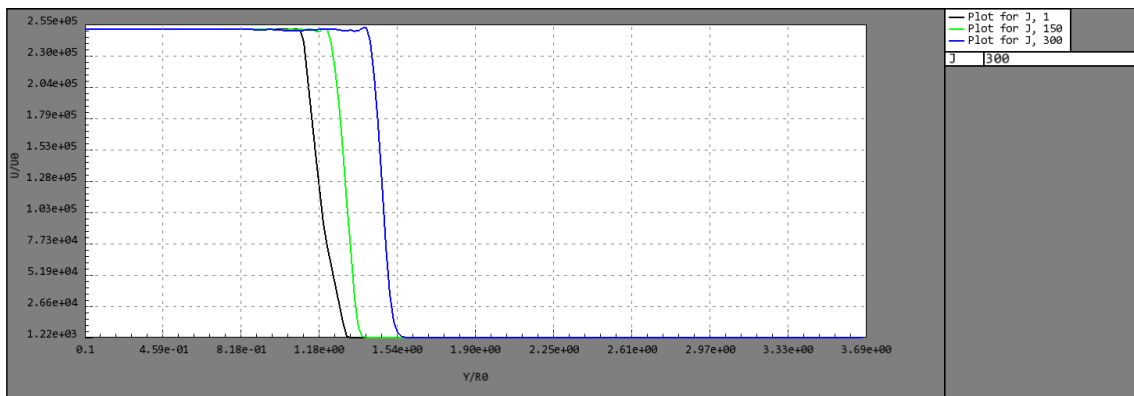


Рисунок 23 – Значения энтальпии  $J$

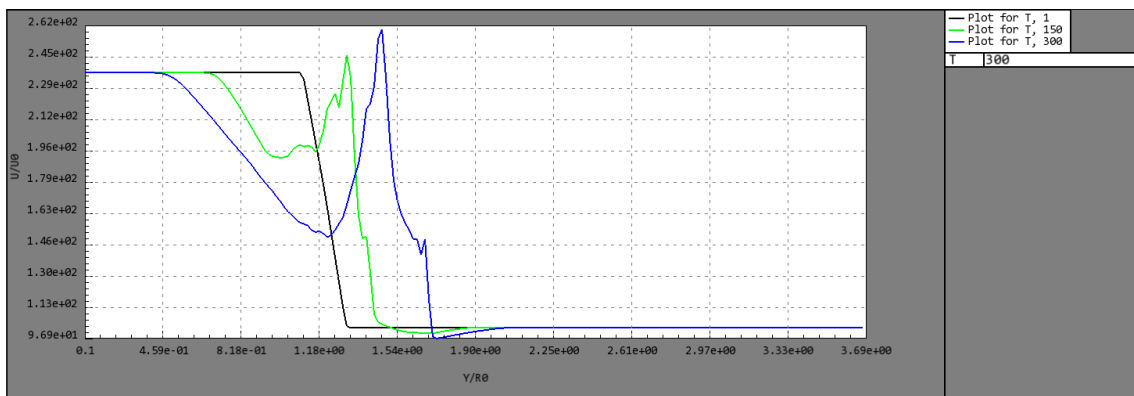


Рисунок 24 – Значения температуры  $T$

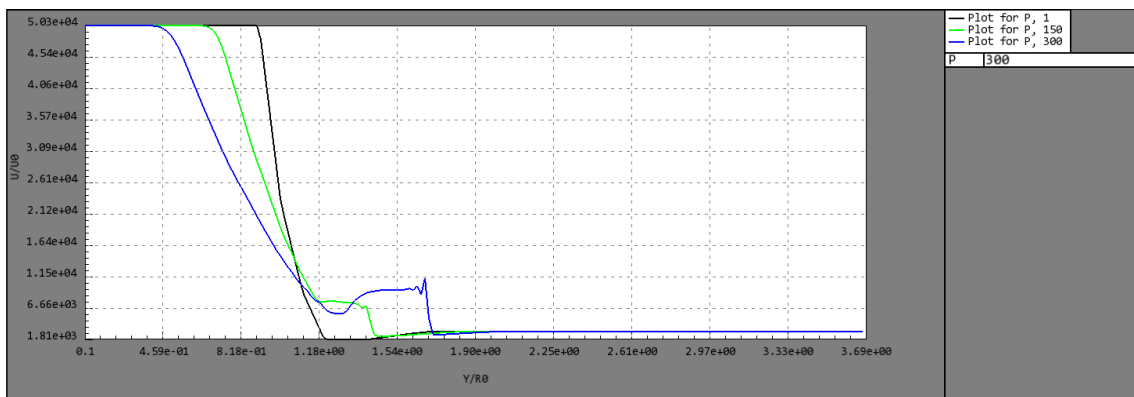


Рисунок 25 – Значения давления  $P$

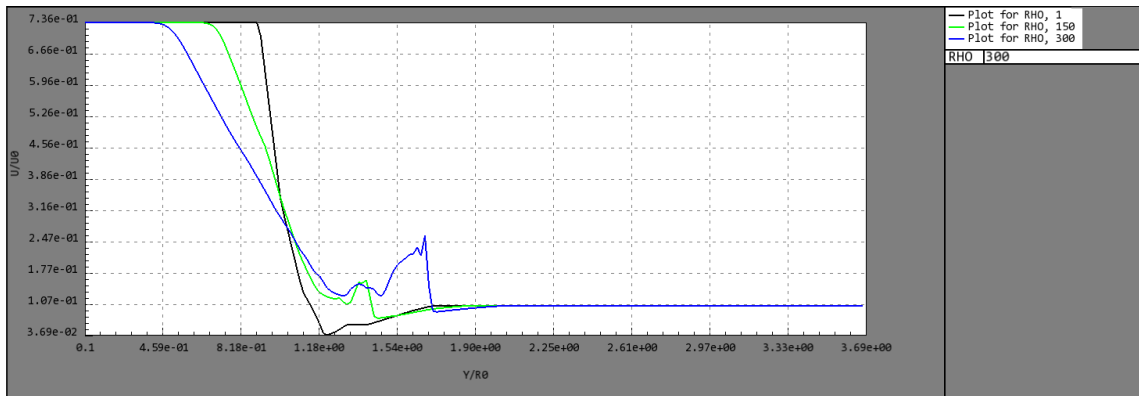


Рисунок 26 – Значения плотности  $\rho$

Проведенные тесты показали:

- Параболизированная постановка обеспечивает разумный компромисс между точностью и производительностью
- Оптимальный шаг дискретизации составляет  $\Delta x \approx 0.03L$
- Время расчёта растет почти квадратично с увеличением числа узлов (уменьшением шага)

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе проведено исследование численного моделирования течения струй газа с неравновесными химическими процессами. Разработана математическая модель и программный комплекс, позволяющий рассчитывать как ламинарные, так и турбулентные режимы течения с учетом химических реакций. Основные результаты работы заключаются в следующем:

- 1) Разработана и реализована параболизированная модель струйных течений, позволяющая существенно сократить вычислительные затраты при сохранении приемлемой точности расчетов. Показано, что в области развитого течения ( $x/d > 10$ ) погрешность модели не превышает 5 – 8% по сравнению с полной системой уравнений Навье-Стокса и экспериментальными данными.
- 2) Создано программное обеспечение, дополненное модулями для расчета химической кинетики. Программа обеспечивает:
  - 1) Моделирование многослойных струйных течений
  - 2) Учет сложных механизмов химических реакций
  - 3) Визуализацию полей скорости, температуры и концентраций
- 3) Проведена верификация модели на ряде тестовых случаев, включая:
  - 1) Сравнение с экспериментальными данными по структуре турбулентных струй
  - 2) Анализ чувствительности к параметрам турбулентности и химической кинетики
  - 3) Оценку погрешностей в различных областях течения
- 4) Выявлены границы применимости параболизированного подхода:
  - 1) Модель дает хорошие результаты для дальнего поля струи ( $x/d > 10$ )
  - 2) Требуется осторожного применения в зонах с обратными течениями
  - 3) Эффективна для инженерных расчетов при ограниченных ресурсах
- 5) Разработан пользовательский интерфейс для отображения результатов в удобном виде

Отдельно стоит уделить внимание модулю для работы с СДУ при



помощи множества методов семейства Рунге-Кутты. В работе реализовано 62 схемы со 2 по 6 порядок точности. Из них 18 явных со 2 по 6 порядок точности, 9 вложенных, включая схему Дормана-Принса 4(5) порядка, 22 неявных, в том числе схемы Радо, Гаусса и Лобатто для полных и неполных матриц. Помимо этого, протестирован один L-стабильный диагональный метод. Для неявных схем используются схемы решения САУ первого порядка (простой итерации, Зейделя) и второго порядка (метод Ньютона), причём для обращения матрицы применялся метод LU-разложения. Для дифференцирования функции при построении матрицы Якоби для метода Ньютона использовались формулы с 4 порядком точности. При необходимости можно использовать формулы с меньшим порядком.

Перспективы дальнейших исследований:

- Внедрение более точных моделей турбулентного горения
- Учет радиационного теплообмена
- Оптимизация вычислительных алгоритмов для работы с большими химическими механизмами
- Разработка гибридных методов, сочетающих параболизированный подход с полным CFD-моделированием в критических областях

Практическая значимость работы заключается в создании инструмента для инженерных расчетов реактивных струй, который может быть использован при проектировании двигательных установок, систем сгорания и других устройств, где важны точные прогнозы параметров течения с химическими реакциями.

Таким образом, проведенное исследование демонстрирует возможность эффективного моделирования сложных неравновесных процессов в струйных течениях при разумных вычислительных затратах, что открывает перспективы для дальнейшего совершенствования методов численного анализа в этой области.

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Wikipedia. MATLAB. — 2022. — URL: <https://ru.wikipedia.org/wiki/MATLAB> (дата обращения 21.05.2023).
2. Wikipedia. SMath Studio. — 2022. — URL: [https://ru.wikipedia.org/wiki/SMath\\_Studio](https://ru.wikipedia.org/wiki/SMath_Studio) (дата обращения 21.05.2023).
3. Wikipedia. GNU Scientific Library. — 2023. — URL: [https://ru.wikipedia.org/wiki/GNU\\_Scientific\\_Library](https://ru.wikipedia.org/wiki/GNU_Scientific_Library) (дата обращения 21.05.2023).
4. Castillo J. A. D. S. DotNumerics. — 2016. — URL: <http://www.dotnumerics.com/> (дата обращения 21.05.2023).
5. Wikipedia. WolframAlpha. — 2023. — URL: <https://ru.wikipedia.org/wiki/WolframAlpha> (дата обращения 21.05.2023).
6. Гурвич Л. В. Вейц И. В. Медведев В. А. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Т. 1. — Наука, 01.1978. — С. 328. — DOI: 10.1007/978-3-662-09947-6.
7. Авдудевский В. С. Ашратов Э. А. Иванов А. В. Пирумов У. Г. Сверхзвуковые неизобарические струи газа. Т. 1. — Машиностроение, 1985. — С. 248. — ISBN 5-217-00103-8.
8. Гиршфельдер Дж. Кертис Ч. Б. Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. Т. 1. — Изд. иностр, 1961. — С. 930.
9. Зверев И. Н. С. Н. Н. Газодинамика горения. — МГУ, 1987. — С. 307.
10. Иевлев В. М. Турбулентное движение высокотемпературных сплошных сред. — Наука, 1975. — С. 255.
11. Котляр Я. М. Совершенный В. Д. С. Д. С. Методы и задачи тепломассообмена. — Машиностроение, 1987. — С. 309.
12. Лапин Ю. В. Турбулентный пограничный слой в сверхзвуковых потоках газа. — Наука, 1982. — С. 300.
13. Пирумов У. Г. Обратная задача теории сопла. — Машиностроение, 1988. — С. 240.
14. Тимошенко В. И. Сверхзвуковые течения вязкого газа. — Киев. Наукова Думка, 1987. — С. 180.
15. Вильямс Ф. А. Теория горения. — М., Наука, 1971. — С. 615.

16. Бондарев Е. Н. Л. И. Д. Распространение недорасширенной струи в спутном потоке. Т. 14. — Изв. АН СССР, сер. Механ. жидк. и газа, 1974. — С. 74—78.
17. Гиневский А. С. Иоселевич В. А. К. А. В. Методы расчета турбулентного пограничного слоя. — М. ВИНТИ, сер. Механ. жидк. и газа, 1985. — С. 155—303.
18. Гупта А. Лилли Д. С. Н. Закрученные потоки. — М., Мир, 1987. — С. 588.
19. Шецк Дж. Турбулентное течение. Процессы вдува и перемешивания. — М., Мир, 1984. — С. 241.
20. Шлихтинг Г. Теория пограничного слоя. — М., Наука, 1974. — С. 711.
21. Spalding D. B. A general computer program for two-dimensional parabolic phenomena GENMIX. — London, Pergamon Press, 1977. — С. 320.
22. Баев В. К. Головичев В. И. Третьяков П. К. Горение в сверхзвуковом потоке. — Новосибирск, Наука, 1984. — С. 300.
23. Борги Р. Модели для численных расчетов турбулентного горения. — в кн. Методы расчета турбулентных течений. М., Мир, 1984. — С. 399—455.
24. Джонс У. Модели турбулентных течений с переменной плотностью и горением. — в кн. Методы расчета турбулентных течений. М., Мир, 1984. — С. 349—399.
25. Иевлев В. М. Турбулентное движение высокотемпературных сплошных сред. — М., Наука, 1975. — С. 255.
26. Иевлев В. М. С. Э. Е. Турбулентность газов, жидкостей и плазмы. — М., МИФИ, 1983. — С. 137.
27. Котляр Я. М. Совершенный В. Д. С. Д. С. Методы и задачи тепломассообмена. — М., Машиностроение, 1987. — С. 309.
28. Wikipedia. Дифференцирование. — 2023. — URL: <https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%94%D0%B8%D1%84%D1%84%D0%B5%D1%80%D0%B5%D0%BD%D1%86%D0%B8%D1%80%D0%BE%D0%B2%D0%B0%D0%BD%D0%B8%D0%B5> (дата обращения 21.05.2023).

29. Галанин М. П. Ходжаева С. Р. Методы решения жестких обыкновенных дифференциальных уравнений. Результаты тестовых расчетов : Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. — Москва, 2013. — eprint: [https://keldysh.ru/papers/2013/prep2013\\_98.pdf](https://keldysh.ru/papers/2013/prep2013_98.pdf). — URL: <https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2013-98>.

30. Булатов П. Е. Белов А. А. Калиткин Н. Н. Расчет химической кинетики явными схемами с геометрически-адаптивным выбором шага // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. — 2018. — С. 32.

31. Гидаспов В. Ю. Северина Н. С. Некоторые задачи физической газовой динамики. Т. 8. — Издательство МАИ, 01.2016. — С. 79. — ISBN 9785703523230. — DOI: 10.1007/978-3-540-78862-1.

32. Гидаспов В. Ю. Северина Н. С. Элементарные модели и вычислительные алгоритмы физической газовой динамики. Термодинамика и химическая кинетика. Т. 8. — Издательство Вузовская книга, 01.2014. — С. 84. — ISBN 9785703523230. — DOI: 10.1007/978-3-540-78862-1.

33. Фалейчик Б. В. Одношаговые методы численного решения задачи Коши. Т. 8. — Минск : БГУ, 01.2010. — С. 42. — ISBN 9785703523230. — DOI: 10.1007/978-3-540-78862-1.

34. Авдюшев В. А. Численные методы интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений. Т. 8. — Томск : ИДО ТГУ, 01.2009. — С. 52. — ISBN 9785703523230. — DOI: 10.1007/978-3-540-78862-1.

35. Леонов В. В. Самохина С. И. Исследование на жесткость системы обыкновенных дифференциальных уравнений, соответствующей математической модели деформационного упрочнения сплавов со сверхструктурой L12 // Инноватика - 2020 : сборник материалов XVI Международной школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых, 23-25 апреля 2020 г., г. Томск, Россия. Томск. — 2020. — С. 384—387.

36. Пошивайло И. П. Жёсткие и плохо обусловленные нелинейные модели и методы их расчета // Инноватика - 2020 : сборник материалов XVI Международной школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых, 23-25 апреля 2020 г., г. Томск, Россия. Томск. — 2014. — Т. 55, № 6. — С. 384—387. — DOI: 10.7868/S0044466915030114.

37. Hairer E., Norsett S., Wanner G. Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems. Т. 8. — 01.1993. — ISBN 978-3-540-56670-0. — DOI: 10.1007/978-3-540-78862-1.
38. John C. Butcher. Numerical methods for ordinary differential equations: early days // The Birth of Numerical Analysis / под ред. A. Bultheel, R. Cools. — World Scientific, 2009. — С. 35—44. — DOI: 10.1142/9789812836267\\_0003. — URL: [https://doi.org/10.1142/9789812836267%5C\\_0003](https://doi.org/10.1142/9789812836267%5C_0003).
39. abcdef. А-стабильность. — 2023. — URL: [https://ru.abcdef.wiki/wiki/Stiff\\_equation#A-stability](https://ru.abcdef.wiki/wiki/Stiff_equation#A-stability) (дата обращения 21.05.2023).
40. abcdef. L-стабильность. — 2023. — URL: <https://ru.abcdef.wiki/wiki/L-stability> (дата обращения 21.05.2023).
41. Скворцов Л. М. Диагонально-неявные методы Рунге–Кутты для жестких задач // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 2006. — Т. 46, № 12. — С. 2209—2222. — DOI: 10.1134/S0965542506120098.
42. Hairer E., Wanner G. Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems. Т. 14. — Springer Verlag Series in Comput. Math., 01.1996. — DOI: 10.1007/978-3-662-09947-6.

## **ПРИЛОЖЕНИЕ А**

### **Исходный код**

Исходный код программы выложен в публичном репозитории GitHub. QR код на репозиторий представлен на рисунке А.1.



Рисунок А.1 – Рисунок в приложении