Отчет за апрель

Ершова Даниила Сергеевича

# Алгоритм расчета одномерного ламинарного пламени в Cantera

## Измельчение сетки

1. Добавление ячеек по абсолютному значению
2. Добавление ячеек по значению градиента
3. Добавление ячеек по размеру ячейки



1. Измельчение сетки происходит до момента, пока конечное решение не будет удовлетворять коэффициенту m\_slope по умолчанию 0.8

## Алгоритм

1.Попытка посчитать стационарную задачу

2. Если посчитать стационарную задачу не вышло, делаем 10 шагов по времени

## **Вычисление** якобиана

1. Сначала считается невозмущенная невязка
2. В массиве храните количество элементов в данной ячейке сетки.
3. Для вычисления каждой возмущенной невязки есть переменные j0, j1, которые говорят, что уравнения зависят от переменных лежащих в ячейке j0 до переменных, лежащих в ячейке j1. В данном случае для ячейки j: j0 = j -1, j1 = j+1
4. Есть массивы, в которых хранятся коэффициенты. Коэффициенты обновляются только для ячеек j0…j1, транспортные коэффициенты считаются один раз перед расчетом якобиана, в невозмущенной невязке

## Итерационный метод Ньютона

1. Вычисляется незатухающий шаг Ньютона
2. Делаются шаги с затухающим шагом ( всего шагов NDAMP = 7, затухающий фактор DampFactor = sqrt(2.0))
3. Якобиан обновляется раз в 20 таких эпох

## Шаг по времени

1. Делается один шаг по времени
2. Если шаг по времени сделан удачно, то шаг по времени увеличивается в полтора раза
3. Если шаг по времени сделан неудачно, то шаг по времени умножается на m\_tfactor = 0.5 раз
4. Если шаг по времени сделан трижды неудачно, то отрицательные массовые доли в решении обнуляются, массовые доли нормируются на единицу

# Реализация программного модуля для аппроксимации коэффициентов переноса с помощью полиномов

Программный код был взят из открытой библиотеки Cantera для расчета процесса горения. Задача состояла в том, чтобы отделить часть кода, которая аппроксимирует коэффициенты бинарной диффузии и теплопроводности для веществ, участвующих в реакциях.

Для получения истинных значений коэффициента бинарной диффузии использовалась формула:



Для получения истинных значений коэффициента бинарной диффузии использовалась формула:



Полученные значения аппроксимировались с помощью взвешенного метода наименьших квадратов. Так как взвешенный метод наименьших квадратов в Cantera был взят из библиотеки Eigen, реализация данного метода была выполнена самостоятельно.

# Расчет с помощью библиотеки KLU

Была подключена библиотека KLU, было выяснено, что данная библиотека не подходит для расчета одномерного ламинарного пламени.

# Расчет одномерного ламинарного пламени с кинетикой горения гептана

Был выполнен расчет одномерного ламинарного пламени с кинетикой горения гептана. Были проведены сравнения расчетов моей программы с Chemkin и Cantera.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | Мой расчет | Cantera | Chemkin |
| T, K | 2279.65 | 2281.3 | 2287.7 |
| v, см/с | 39.2909 | 39.83 | 39.5 |

Видно, что мои результаты расчета отличаются от данных библиотек. Была выявлена ошибка в работе ChemkinReader, связанная с тем, что вещества, указанные в третьем теле должны идти строго в одну строку. Написан скрипт на Python, чтобы сверить скорости реакций посчитанные мной и посчитанные в Chemkin. Эти скорости совпали с погрешностью 0.05%. Сделан вывод, что кинетика считается правильно. Дальше будет проверено верно ли считаются коэффициенты переноса.

# Ускорение расчета одномерного ламинарного пламени

Для ускорения расчета система была приведена в ленточному виду с помощью добавления  в каждую ячейку. Для работы с ленточным якобианом использовался модуль Band в Sundials. Были переведены структуры, использующиеся в ChemkinReader, в массивы для ускорения расчета, сделан вывод, что данный подход не дал ощутимого ускорения. В расчете кинетики были усовершенствованы некоторые циклы для ускорения расчета скоростей химических реакций. Все функции pow были заменены на произведения.