

## Сравнительный анализ двух групп неявных методов численного интегрирования на примере решения систем уравнений химической кинетики

Р.С. Соломатин

Институт автоматизации проектирования РАН

Московский физико-технический институт (государственный университет)

В современных задачах моделирования реагирующих газовых течений, в том числе детонационных, необходимо учитывать химические процессы, происходящие в газовой смеси. Данные процессы обычно описываются жесткими системами обыкновенных дифференциальных уравнений (СОДУ). Интегрирование жестких СОДУ требует значительных ресурсов, поэтому встает вопрос о быстром и эффективном решении данной задачи. Для этого лучше всего подходят неявные схемы. Они достаточно сложны в программной реализации и часто состоят из нескольких этапов получения решения. Однако использование неявных схем позволяет эффективнее решать существенно больший диапазон задач, при этом сокращая временные затраты на расчеты. Область устойчивости у таких схем гораздо шире, чем у явных, что позволяет использовать больший шаг интегрирования по времени.

Данная работа посвящена изучению двух групп неявных методов: методов Гира и неявных методов типа Радо ПА [1], их реализаций в виде интеграторов DLSODE [2] и RADAU5 [1], а также сравнению работы этих интеграторов с точки зрения точности вычислений и времени работы на различных модельных системах уравнений химической кинетики.

Методы Гира являются подклассом методов, называемых формулами дифференцирования назад (ФДН – методами) и для них существует так называемое представление Нордсика, позволяющее сравнительно легко преодолевать типичные для ФДН – методов проблемы.

Вектор Нордсика:

$$\bar{z}_n = \left( Y_n, h\dot{Y}_n, \frac{h^2}{2}\ddot{Y}_n, \dots, \frac{h^q}{q!}Y_n^{(q)} \right)^T$$

В качестве примера реализации данных методов был взят интегратор DLSODE.

Интегратор работает по схеме «предиктор - корректор». Решение в точке  $x_n$  сначала определяется с использованием грубого начального приближения, а потом правится путем вычисления приближений  $Y_n^{[m]}$ ,  $m=1..M$ . Каждая итерация вносит малую поправку в решение.

Нахождение решения проходит путем аппроксимации СОДУ системой нелинейных

алгебраических уравнений, ее дальнейшей линейризации и решения линейной системы в итерационном цикле.

В работе для аппроксимации СОДУ использовался метод Гира, способный менять порядок аппроксимации от 1 до 5. Для решения нелинейной системы алгебраических уравнений использовался метод Ньютона – Рафсона.

Интегратор DLSODE обладает возможностями динамического подбора шага по времени, а также возможностью интерполировать решение с нужным порядком точности вместо интегрирования в областях с малой величиной градиента.

Неявными методами типа Радо ПА называются неявные методы Рунге-Кутты с дополнительным наложенным условием:

$$C(s): \sum_{j=1}^s a_{ij} c_j^{q-1} = \frac{c_i^q}{q}, i = 1 \dots s, q = 1 \dots s$$

В качестве реализации 3-х стадийного метода Радо ПА 5-го порядка был использован интегратор RADAU5. RADAU5 также ищет решение в несколько этапов, схожих с таковыми у DLSODE. Данный интегратор также обладает возможностью динамического подбора шага по времени, однако порядок метода фиксирован (всегда равен 5) и не предусмотрена возможность интерполяции решения.

Сравнительный анализ интеграторов проводился на трех жестких системах уравнений химической кинетики: задаче Робертсона [1], задаче Шеффера [1] и глобального кинетического механизма двухстадийного воспламенения пропано-воздушной смеси [3]. Сравнивалась точность решения, а также время работы интеграторов на каждой задаче. Полученные результаты показали, что оба интегратора ищут решение с хорошей точностью, но за счёт применения интерполяции интегратор DLSODE находит решение быстрее, особенно при больших шагах интегрирования. На Рис. 1 представлено время работы интеграторов на глобальной двухстадийной кинетике пропано-воздушной смеси в зависимости от шага интегрирования. Доля пропана в смеси: 6.5% (9.5% по массе), начальная температура 671К, давление 5.5 атмосфер.

#### Литература

1. Хайпер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. – М.: Мир, 1993. – 685 с.
2. Radhakrishnan K., Hindmarsh A.C. Description and Use of LSODE, the Livermore Solver for Ordinary Differential Equations. – Lawrence Livermore National Laboratory Report UCRL-ID-113855. – 1993.
3. Басевич В.Я., Фролов С.М. Глобальные кинетические механизмы, использующиеся при моделировании многостадийного воспламенения углеводородов в реагирующих течениях. – Химическая физика. – 2006. – Т. 25, №6. – С. 54 – 62.

Рис. 1. Сравнение времени работы интеграторов на глобальной двухстадийной кинетике пропано-воздушной смеси

