

КОМПРОМИССНАЯ РАЗНОСТНАЯ СХЕМА ДЛЯ УРАВНЕНИЙ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ НА ОСНОВЕ СХЕМ АДАМСА-МОУЛТОНА И РОЖКОВА

ПЕКУНОВ В.В., канд. техн. наук

Предложена компромиссная разностная схема для уравнений химической кинетики. Схема не предполагает затратных процедур вычисления якобиана и решения системы нелинейных уравнений. Исследованы характеристики схемы в численном эксперименте по моделированию горения метана. Показано, что схема имеет приемлемую точность и достаточную устойчивость при невысоких вычислительных затратах.

При моделировании природных и промышленных процессов, в которых участвует множество различных веществ, часто необходимо учитывать фактор химических реакций. Обычно задача сводится к интегрированию жесткой системы обыкновенных дифференциальных уравнений химической кинетики. Наиболее часто применяются численные методы двух разновидностей:

а) методы Розенброка, основанные на введении якобиана в разностную схему Рунге-Кутты (например, метод Арсеньева-Демидова) [2];

б) различные вариации методов типа «предиктор-корректор», включающие явную схему для вычисления предиктора и неявную для корректора. Сюда относятся методы Гира, Адамса-Бэшфорда-Моултона [4] и многие комбинированные методы, реализованные, например, в системе MATLAB.

Достоинствами перечисленных методов являются высокая точность и обычно хорошая устойчивость. Однако есть весьма серьезный недостаток — высокие вычислительные затраты на поиск якобиана, а также на решение системы нелинейных уравнений при вычислении корректора. В то же время известен простой метод Рожкова [1, 3], обладающий высокой устойчивостью при малых вычислительных затратах, однако имеющий лишь первый порядок точности. Актуален вопрос разработки компромиссной разностной схемы, которая при сравнительно малых вычислительных затратах имела бы приемлемую точность и достаточную устойчивость. В данной работе предлагается такая схема, комбинирующая подход Рожкова с неявной схемой Адамса-Моултона, и исследуются ее характеристики.

Кинетические уравнения, описывающие изменение концентраций веществ C_i в результате химических реакций, имеют вид

$$\frac{dC_i}{dt} = \sum_{k=1}^q R_{ik} A_k \prod_{m=1}^N C_m^{L_{mk}} - \sum_{k=1}^q L_{ik} A_k \prod_{m=1}^N C_m^{L_{mk}}; i = \overline{1, N},$$

где q — число реакций; N — количество веществ; R_{ik} — стехиометрический коэффициент при i -м веществе в правой части k -й реакции; L_{ik} — стехиометрический коэффициент при i -м веществе в левой части k -й реакции; $A_k = A_k(T)$ — константа скорости k -й реакции в зависимости от температуры проведения реакции T . Матрицы $L = [L_{ik}]$ и $R = [R_{ik}]$ имеют размерность $(N \times q)$.

Подход Рожкова предполагает представление кинетических уравнений в виде

$$\frac{dC_i}{dt} = C_i \cdot f(C_1, \dots, C_N) + g(C_1, \dots, C_{i-1}, C_{i+1}, \dots, C_N); i = \overline{1, N},$$

с последующей записью разностной схемы:

$$\frac{C_i^{s+1} - C_i^s}{h} = \tilde{F}_i^{s+1};$$

$$\tilde{F}_i^{s+1} = C_i^{s+1} f_i^s + g_i^s, \quad (1)$$

где верхний индекс s — номер итерации; h — шаг интегрирования.

Запишем многошаговый *неявный* метод Адамса-Моултона с использованием подхода Рожкова:

$$\frac{C_i^{s+1} - C_i^s}{h} = \beta_n \tilde{F}_i^{s+1} + \beta_{n-1} \tilde{F}_i^s + \dots + \beta_0 \tilde{F}_i^{s+1-n},$$

где β — параметры метода Адамса-Моултона n -го порядка. Получим выражение

$$C_i^{s+1} = \frac{C_i^s + h(\beta_n g_i^s + \beta_{n-1} \tilde{F}_i^s + \dots + \beta_0 \tilde{F}_i^{s+1-n})}{1 - h\beta_n f_i^s}. \quad (2)$$

Выражения (1) и (2) составляют предлагаемую компромиссную схему, при $n = 1$ сводится к схеме Рожкова. На каждом шаге интегрирования τ выполняется:

а) вычисление $h = \tau/N$, где N — заданный максимальный порядок схемы;

б) выполнение N итераций по схеме (1)-(2) с шагом h , причем порядок метода n для каждой итерации будет равняться номеру итерации (методика с рестартом на шаге).

Проанализируем основные характеристики схемы (точность, устойчивость, вычислительную трудоемкость) в численном эксперименте по моделированию горения метана (кинетическая схема процесса взята из [2], включает 17 реакций) при температуре $T = 1300$ К. Пусть начальная концентрация CH_4 составляет $0,29$ млн⁻¹ ($\approx 0,013$ моль·л⁻¹); начальная концентрация O_2 — $0,71$ млн⁻¹ ($\approx 0,029$ моль·л⁻¹). Соответствующая жесткая система из 15 дифференциальных уравнений, описывающая процесс горения, интегрировалась на интервале времени $t \in [10^{-6}; 10^{-2}]$ с применением компромиссной схемы различных максимальных порядков, а также методов Гира и Арсеньева-Демидова. Эксперимент проводился при различных шагах интегрирования $\tau \in [5 \cdot 10^{-6}; 10^{-3}]$, для каждого значения шага определялись: а) максимальное отклонение (по временным точкам $t = k \cdot 10^{-3}$, $k = \overline{1, 10}$) от образцового решения; б) время расчета. Чтобы сгладить влияние нелинейных аппаратных факторов (например, кэшей первого и второго уровней) на скорость расчета, подсчитывалось суммарное время счета в серии из 50 одинаковых экспериментов. За образцовое решение были приняты результаты, полученные жестко устойчивым методом Гира (с минимальным шагом по времени $\tau = 5 \cdot 10^{-6}$ и контролем точности $\varepsilon = 0,01$) [2, 3].

Целью первой серии экспериментов было определение «чистых» точности, устойчивости и трудоемкости компромиссной схемы, поэтому для нее контроль точности не велся, для метода Гира была задана стандартная точность $\varepsilon = 0,01$. На рис. 1 показаны графики абсолютного максимального отклонения решений, полученных с помощью компромиссной схемы ($N = 1, 2, 3, 4$), а также методом Гира, при различных величинах шага интегрирования τ . На рис. 2 даны соответствующие графики суммарного времени счета.

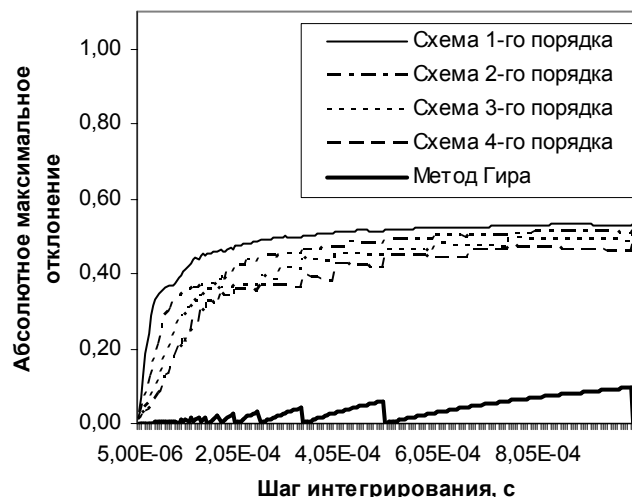


Рис. 1. Графики абсолютного максимального отклонения (млн⁻¹) при отсутствии контроля точности для компромиссной разностной схемы

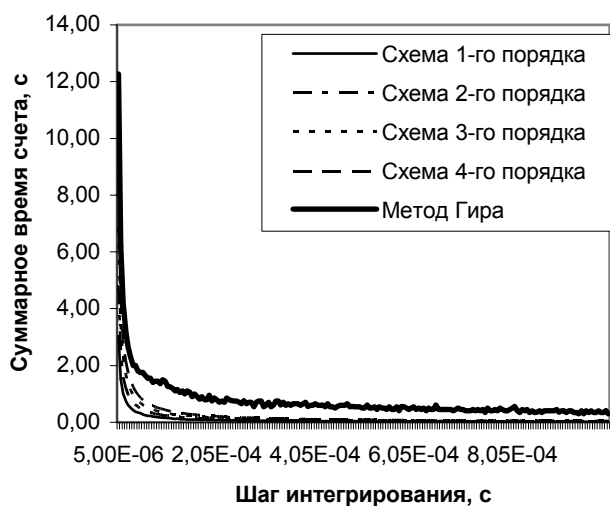


Рис. 2. Суммарное время счета в экспериментах без контроля точности для компромиссной схемы

Метод Арсеньева-Демидова (схема по типу Розенброка 4-го порядка) оказался неустойчивым при $\tau > 10^{-5}$, поэтому графики для него отсутствуют. При $\tau \leq 10^{-5}$ метод Арсеньева-Демидова показал приблизительно ту же точность, что и компромиссная схема с $N = 4$. Но трудоемкость компромиссной схемы оказалась в 2,5 раза меньше, что привело к выводу о неперспективности дальнейших экспериментов с методом Арсеньева-Демидова.

Как следует из графиков, при $N > 1$ компромиссная схема дает более высокую точность, по сравнению со

схемой Рожкова ($N = 1$), и меньшую, в сравнении с использованным вариантом метода Гира. Вычислительная неустойчивость при рассмотренных величинах τ не наблюдалась. Однако неустойчивость появлялась при попытке применить схему с $N = 5$. Также возникновением неустойчивости закончилось большинство попыток (при $N > 2$) применить методику шага интегрирования без рестарта, когда порядок метода менялся лишь на первом шаге, а на последующих шагах устанавливалось постоянное $n = N$.

Вычислительная трудоемкость «чистой» компромиссной схемы оказалась в 6-7 раз меньше трудоемкости примененного варианта метода Гира. Такое сравнение недостаточно корректно, так как реализованный вариант метода Гира имел совершенные механизмы контроля точности, что дало ему преимущество по точности за счет повышения трудоемкости. Поэтому в следующей серии экспериментов сравним трудоемкость, добившись близких результатов по точности. Для компромиссной схемы применим простейшую методику контроля точности: в начале каждого шага будем проводить циклическое половинное деление τ , пока

оценка погрешности
$$\frac{\max_i |C_i(\tau/2) - C_i(\tau)|}{\max_i |C_i(\tau/2)|}$$
 не станет

меньше заданной точности ε' . Здесь $C_i(\tau/2)$ — концентрация, полученная решением за две итерации $\tau/2$; $C_i(\tau)$ — концентрация, полученная решением за одну итерацию τ . В результате определим оптимальное τ' и вместо одного шага τ произведем τ/τ' шагов (без контроля точности).

Вторая серия экспериментов проводилась с контролем точности по описанной методике. При $\varepsilon' = 10^{-4}$ результаты, полученные с применением компромиссной схемы ($N = 4$) оказались наиболее близки к результатам метода Гира. То, что ε' взято на два порядка меньше ε , вероятно, объясняется несовершенством примененной методики контроля точности. На рис. 3 показаны графики абсолютного максимального отклонения, на рис. 4 даны соответствующие графики суммарного времени счета.

При малых величинах шага по времени $\tau \leq 2 \cdot 10^{-4}$ компромиссная схема с $N = 4$ при точности, сравнимой с точностью метода Гира, показала меньшую (приблизительно в 1,2-2 раза) трудоемкость. Поскольку при указанных малых величинах τ методическая погрешность была минимальной, временные затраты, связанные с контролем точности, также имели минимальную величину, которой можно пренебречь. Следовательно, основные временные затраты на данном участке были обусловлены именно «работой» разностных схем, что приводит к выводу о меньшей трудоемкости «чистой» компромиссной схемы по сравнению с разностными формулами метода Гира. Это объясняется отсутствием затратных процедур вычисления якобиана и решения нелинейной системы уравнений.

При $\tau > 2 \cdot 10^{-4}$ компромиссная схема с $N = 4$ (с контролем точности) показала трудоемкость, большую или равную трудоемкости метода Гира. Такой результат вероятно объясняется несовершенством примененной методики контроля точности по сравнению с методом Гира: большими временными затратами на собственно

контроль и отсутствием регулирования максимального порядка метода (при некоторых значениях τ достаточно хорошие результаты показывали схемы с $1 < N < 4$ (см. рис. 3). Это говорит о том, что возможна разработка такой методики контроля точности для компромиссной схемы, применение которой позволит получить меньшую (или равную) вычислительную трудоемкость, в сравнении с методом Гира, при той же точности для любых величин шага по времени.

Таким образом, на базе схем Рожкова и Адамса-Моултона предложена компромиссная неявная разностная схема (1)-(2) для уравнений химической кинетики. Проведен анализ характеристик схемы в численном эксперименте по моделированию горения метана. Показаны хорошие устойчивость и точность расчетов при невысокой вычислительной трудоемкости и простоте реализации.

Показано, что с помощью компромиссной разностной схемы 4-го максимального порядка (при использо-

вании простейшей методики контроля) можно получить результаты с той же точностью, что и в методе Гира, причем при малом шаге по времени компромиссная схема имеет меньшую трудоемкость.

Список литературы

1. Зими́на Т.Н., Нуждин Н.В., Ясинский Ф.Н. Асинхронное интегрирование в задаче конверсии метана // Вестник ИГЭУ. – 2004. – Вып. 3. – С. 148.
2. Полак Л.С., Гольденберг М.Я., Левицкий А.А. Вычислительные методы в химической кинетике. – М.: Наука, 1984.
3. Численные методы и параллельные вычисления для задач механики жидкости, газа и плазмы: Учеб. пособие / Э.Ф. Балаев, Н.В. Нуждин, В.В. Пекунов и др.; Иван. гос. энерг. ун-т. – Иваново, 2003.
4. Press W.H. et al. Numerical recipes in C: The art of scientific computing. – Cambridge University Press, 1992.

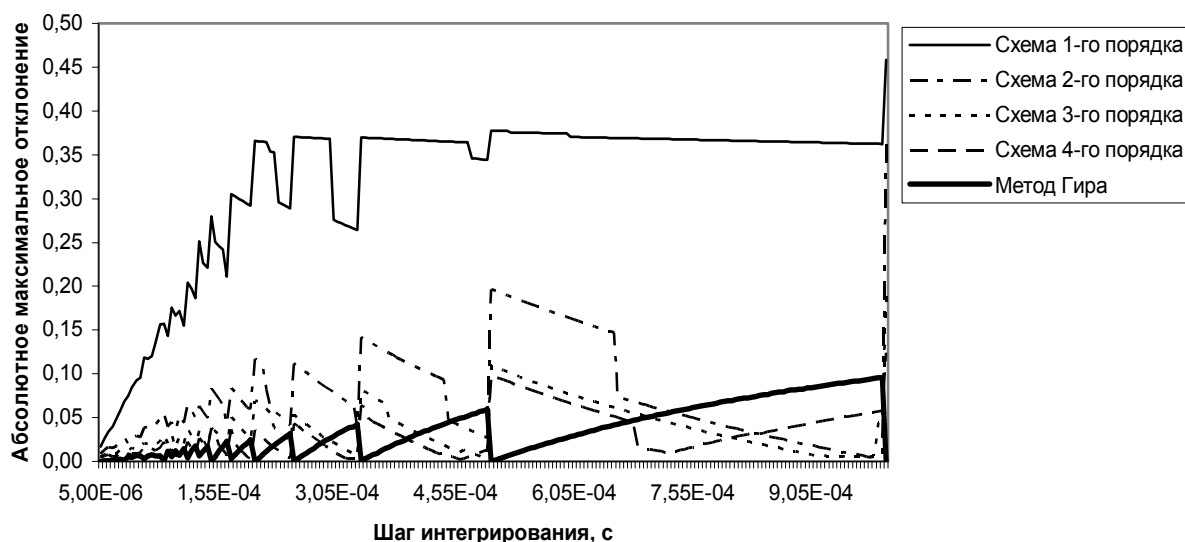


Рис. 3. Графики абсолютного максимального отклонения (млн⁻¹) в экспериментах с контролем точности для компромиссной разностной схемы

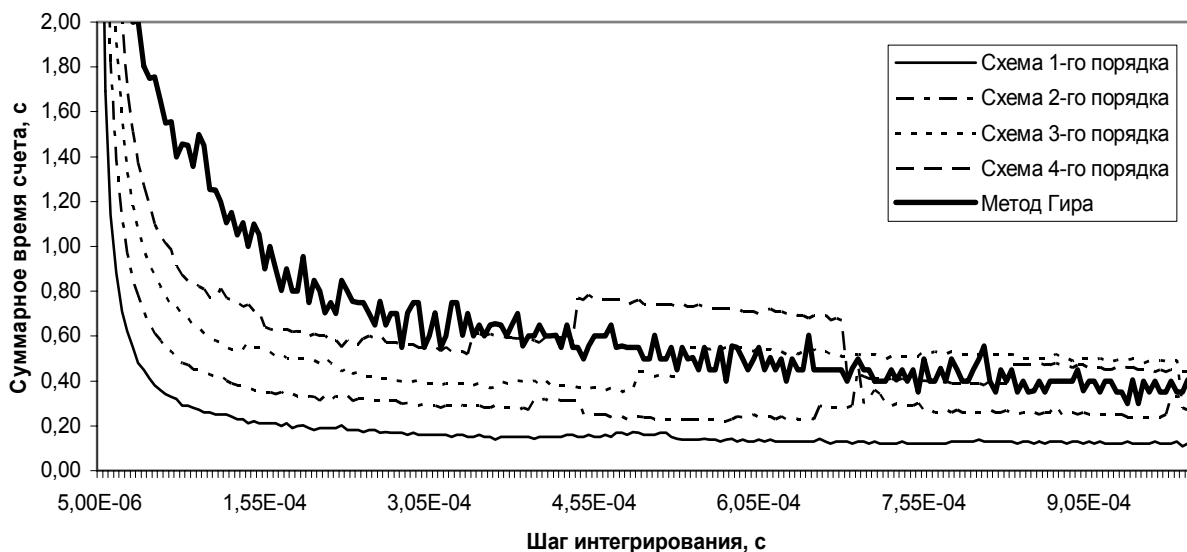


Рис. 4. Суммарное время счета в экспериментах с контролем точности для компромиссной схемы