

УДК 629.76, 519.615

О. В. Мищенко, кандидат физико-математических наук, доцент, Ижевский государственный технический университет имени М. Т. Калашникова

О. А. Воеводина, аспирант, Ижевский государственный технический университет имени М. Т. Калашникова

ПРИМЕНЕНИЕ *LU*- И *QR*-МЕТОДОВ ПРИ РЕШЕНИИ ЗАДАЧИ О РАВНОВЕСНОМ СОСТАВЕ ПРОДУКТОВ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ

*Рассматривается задача о составе химически реагирующей смеси газов как задача о решении системы нелинейных уравнений. Для решения используется метод Ньютона – Рафсона, в котором на этапе решения линеаризованной системы уравнений вместо метода Гаусса применяются *LU*- и *QR*-методы. Приводятся примеры, показывающие эффективность такого подхода.*

Ключевые слова: химически равновесный состав, продукты сгорания, математическая модель, система нелинейных уравнений, метод Ньютона – Рафсона, *LU*-метод, *QR*-метод.

Решение задач о работе химических реакторов и тепловых установок, работающих на органическом топливе (топочные устройства, тепловые двигатели и газогенераторы и др.) требует знаний о теплофизических характеристиках продуктов сгорания. Теплофизические характеристики могут быть определены, например, в предположении о том, что продукты сгорания органического топлива находятся в состоянии термодинамического равновесия [1, 2]. В математической постановке задачи о равновесном составе продуктов сгорания рассматриваются две группы уравнений – уравнения сохранения массы и уравнения для коэффициентов равновесия химических реакций (реакций диссоциации). В общем случае математическая модель о равновесном составе продуктов сгорания требует решения системы линейных (уравнения сохранения массы и уравнение Дальтона) и нелинейных (уравнения химического равновесия) уравнений. В соответствии с [1] решение итоговой системы нелинейных уравнений после преобразований (переход от массовых и мольных концентраций к их логарифмам и др.) осуществляется методом Ньютона – Рафсона с определением итерационных поправок на каждом шаге итерации методом Гаусса. Такой же алгоритм решения реализуется в программных продуктах [2, 3].

У изложенного вычислительного алгоритма имеются недостатки, и эти недостатки проявляются при решении некоторых практических задач. Как пример можно привести задачу о нахождении равновесного состава продуктов сгорания органических топлив, в которых отличие одного или нескольких химических элементов относительно невелико. Решение, получаемое с использованием алгоритма [1], может завершиться аварийно (из-за деления на ноль в процессе вычислений) или дать не удовлетворяющие по монотонности численные результаты. Такая особенность вычислительного алгоритма не позволяет его

использовать, например, в задачах о выходе на режим твердотопливного газогенератора в условиях воздействия возмущений случайного характера [4, 5].

Анализ показывает, что аварийное завершение термодинамического расчета происходит на этапе вычисления итерационных поправок для разыскиваемых неизвестных парциальных давлений (или концентраций) компонентов смеси методом Гаусса, и причиной этого может быть плохая обусловленность матрицы коэффициентов, входящих в линейные уравнения для итерационных поправок [6]. Повысить надежность вычислительного алгоритма в этом случае можно, заменив метод решения системы линейных уравнений. В частности, вместо метода Гаусса можно применить либо *LU*-метод, либо *QR*-метод [6, 7]. При этом следует отметить, что применение *QR*-метода особенно привлекательно в силу его ортогональности.

В качестве тестовой задачи будем рассматривать химическую реакцию взаимодействия водорода H_2 и кислорода O_2 . Условную формулу вещества представим в виде $H_a O_b$. Условная формула записывается для одного килограмма вещества, при этом индексы a и b означают, соответственно, число молей водорода и кислорода в составе вещества [1]. В результате химической реакции в зависимости от первоначальных концентраций водорода и кислорода, давления и температуры в химическом реакторе в продуктах сгорания могут содержаться следующие элементы и соединения: H , O , HO_2 , H_2 , H_2O , H_2O_2 , OH , O_2 . Будем полагать, что в продуктах отсутствует конденсат.

Введем следующие обозначения:

– p_i , $i = 1, 8$ – парциальные давления компонентов смеси продуктов сгорания (значение i соответствует вышеприведенному порядку следования компонентов смеси, значения давлений принимаются в атмосферах);

– Δ_i , $i = 1, 9$ – поправки на значения $\ln p_i$ и $\ln M_m$, устанавливаемые на очередной итерации решения систем линейных уравнений;

– M_m – нормирующий множитель, связывающий парциальные давления с мольными концентрациями компонентов смеси (число молей исходных веществ);

– $K_j^p(T)$, $j = 3, 8$ – константы равновесия по парциальным давлениям для химических реакций (реакций диссоциации), вычисляемые по энтропиям и энтальпиям продуктов, участвующих в реакциях [1] и зависящих от температуры продуктов реакции T .

В соответствии с [1] уравнения сохранения массы для рассматриваемой химической реакции (для водорода и кислорода) могут быть записаны в следующем матричном виде

$$\begin{pmatrix} 1,00 & 0,00 & 1,00 & 2,00 & 2,00 & 2,00 & 1,00 & 0,00 \\ 0,00 & 1,00 & 2,00 & 0,00 & 1,00 & 2,00 & 1,00 & 2,00 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \\ p_4 \\ p_5 \\ p_6 \\ p_7 \\ p_8 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \cdot M_m \\ b \cdot M_m \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Уравнения для коэффициентов равновесия химических реакций (реакций диссоциации) в матричном виде запишутся как

$$\begin{pmatrix} -1,00 & -2,00 & 1,00 & 0,00 & 0,00 & 0,00 & 0,00 & 0,00 \\ -2,00 & 0,00 & 0,00 & 1,00 & 0,00 & 0,00 & 0,00 & 0,00 \\ -2,00 & -1,00 & 0,00 & 0,00 & 1,00 & 0,00 & 0,00 & 0,00 \\ -2,00 & -2,00 & 0,00 & 0,00 & 0,00 & 1,00 & 0,00 & 0,00 \\ -1,00 & -1,00 & 0,00 & 0,00 & 0,00 & 0,00 & 1,00 & 0,00 \\ 0,00 & -2,00 & 0,00 & 0,00 & 0,00 & 0,00 & 0,00 & 1,00 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \ln p_1 \\ \ln p_2 \\ \ln p_3 \\ \ln p_4 \\ \ln p_5 \\ \ln p_6 \\ \ln p_7 \\ \ln p_8 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K_3 \\ K_4 \\ K_5 \\ K_6 \\ K_7 \\ K_8 \end{pmatrix}. \quad (2)$$

В уравнениях (2) коэффициенты K_i определяются логарифмированием коэффициентов равновесия K_i^p :

$$K_i = \ln K_i^p(T), \quad i = 3, 8.$$

Система уравнений для неизвестных значений p_i (или $\ln p_i$) и нормирующего множителя M_m замыкается уравнением Дальтона

$$p_1 + p_2 + p_3 + p_4 + p_5 + p_6 + p_7 + p_8 = p_k. \quad (3)$$

Уравнения (1)–(3) (в дальнейшем называются полной системой уравнений) решаются при задаваемых значениях температуры продуктов реакции T и давления p_k смеси газов. Можно решать «укороченную» (или «короткую») систему уравнений (1), (3), исключив с помощью уравнений (2) значения p_3, \dots, p_8 в уравнении (1).

При решении полной системы уравнений итерационным методом Ньютона – Рафсона система уравнений (1)–(3) переписывается в линеаризованном виде для неизвестных поправок Δ_i . По вычисленным значениям поправок устанавливаются новые значения парциальных давлений и нормирующего множителя M_m :

$$(\ln p_i)^{(N)} = (\ln p_i)^{(N-1)} + \Delta_i, \quad i = 1, 8; \quad (4)$$

$$(\ln M_m)^{(N)} = (\ln M_m)^{(N-1)} + \Delta_9. \quad (5)$$

В уравнениях (4), (5) N – номер итерации. Поправки Δ_i определяются решением системы линейных уравнений

$$\begin{pmatrix} p_1 & 0 & p_3 & 2p_4 & 2p_5 & 2p_6 & p_7 & 0 & -f_1 \\ 0 & p_2 & 2p_3 & 0 & p_5 & 2p_6 & p_7 & 2p_8 & -f_2 \\ -1 & -2 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ p_1 & p_2 & p_3 & p_4 & p_5 & p_6 & p_7 & p_8 & 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \Delta_1 \\ \Delta_2 \\ \Delta_3 \\ \Delta_4 \\ \Delta_5 \\ \Delta_6 \\ \Delta_7 \\ \Delta_8 \\ \Delta_9 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -g_1 \\ -g_2 \\ -g_3 \\ -g_4 \\ -g_5 \\ -g_6 \\ -g_7 \\ -g_8 \\ -g_9 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

В системе уравнений (6) коэффициенты f_1, f_2, g_1, g_2 определяются формулами:

$$f_1 = p_1 + p_3 + 2p_4 + 2p_5 + 2p_6 + p_7;$$

$$f_2 = p_2 + 2p_3 + p_5 + 2p_6 + p_7 + 2p_8;$$

$$g_1 = f_1 \cdot (\ln f_1 - \ln(a \cdot M_m));$$

$$g_2 = f_2 \cdot (\ln f_2 - \ln(b \cdot M_m)).$$

Коэффициенты g_3, \dots, g_8 определяются по формулам:

$$g_3 = \ln p_3 - \ln p_1 - 2 \ln p_2 + K_3;$$

$$g_4 = \ln p_4 - 2 \ln p_1 + K_4;$$

$$g_5 = \ln p_5 - 2 \ln p_1 - \ln p_2 + K_5;$$

$$g_6 = \ln p_6 - 2 \ln p_1 - 2 \ln p_2 + K_6;$$

$$g_7 = \ln p_7 - \ln p_1 - \ln p_2 + K_7;$$

$$g_8 = \ln p_8 - 2 \ln p_2 + K_8.$$

Для уравнения Дальтона правая часть g_9 уравнения (6) вычисляется как

$$g_9 = \ln \sum_{i=1}^8 p_i - \ln p_k.$$

«Короткая» система уравнений получается из системы (6) исключением неизвестных $\Delta_3 \dots \Delta_8$. В окончательном виде «короткая» система уравнений имеет вид

$$\mathbf{A} \times \begin{pmatrix} \Delta_1 \\ \Delta_2 \\ \Delta_9 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -g_1 - p_3 g_3 - 2p_4 g_4 - 2p_5 g_5 - 2p_6 g_6 - p_7 g_7 \\ -g_2 - 2p_3 g_3 - p_5 g_5 - 2p_6 g_6 - p_7 g_7 - 2p_8 g_8 \\ -g_9 - p_3 g_3 - p_4 g_4 - p_5 g_5 - p_6 g_6 - p_7 g_7 - p_8 g_8 \end{pmatrix}. \quad (7)$$

В уравнении (7) матрица \mathbf{A} имеет размер 3×3 , и значения ее коэффициентов следующие:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} p_1 + p_3 + 4p_4 + 4p_5 + 4p_6 + p_7 & p_1 + 2p_3 + 2p_5 + 4p_6 + p_7 & -f_1 \\ p_2 + 2p_3 + 2p_5 + 4p_6 + p_7 & p_2 + 4p_3 + p_5 + 4p_6 + p_7 + 4p_8 & -f_2 \\ p_1 + p_3 + 2p_4 + 2p_5 + 2p_6 + p_7 & p_2 + 2p_3 + p_5 + 2p_6 + p_7 + 2p_8 & 0 \end{pmatrix}.$$

Последовательность решения задачи о равновесном составе продуктов реакции устанавливается в следующем порядке:

- задаются первоначальные значения парциальных давлений p_i и M_m ;
- решением системы уравнений (6) определяются поправки Δ_i ;
- решением уравнений (4), (5) устанавливаются новые значения парциальных давлений p_i и M_m ;
- если поправки Δ_i превосходят заданную точность, то принимается решение о необходимости проведения новой итерации.

Если для определения поправок решается «короткая» система уравнений, то новые значения давлений p_3, \dots, p_8 устанавливаются по формулам (2).

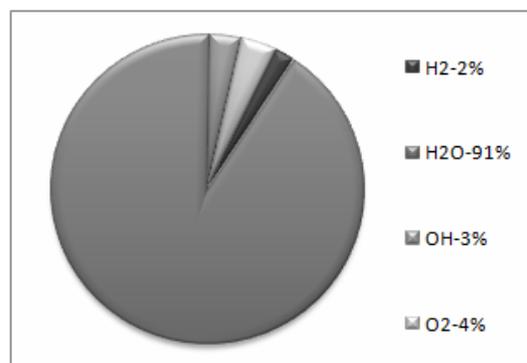
Ниже приводятся результаты расчетов равновесного состава продуктов сгорания водорода и кислорода, полученные при следующих исходных данных:

- давление смеси газов – 50 атм (4,905 МПа);
- температура смеси – 2500 К;
- коэффициенты в условной формуле – $a = 104,096$; $b = 55,944$.

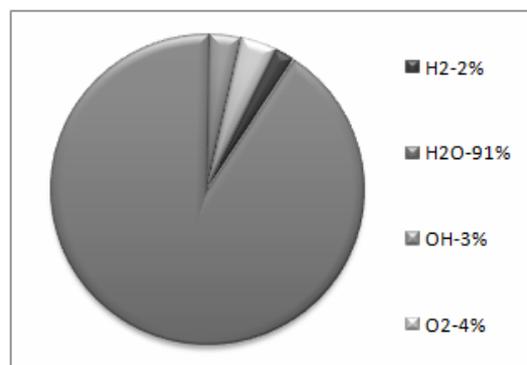
Расчеты выполнены по методике [3] (для решения системы линейных уравнений (6) или (7) используется метод Гаусса) и по вновь разработанной методике, в которой вместо метода Гаусса используются LU - или QR -методы.

Сравнение результатов, полученных тремя методами для выбранного состава окислителя и горючего, показывает следующее:

- решение задачи с высокой точностью обеспечивается всеми рассматриваемыми методами. На рис. 1 в качестве примера приводятся круговые диаграммы по составу основных компонентов смеси, полученные по методике [3] (рис. 1, а) и QR -методом (рис. 1, б);
- количество итераций, необходимых для решения задачи LU - или QR -методом, а также характер сходимости итерационного процесса в сравниваемых вариантах расчета совпадают, как при решении задачи с использованием уравнений (6), так и при использовании уравнений (7) (рис. 2).



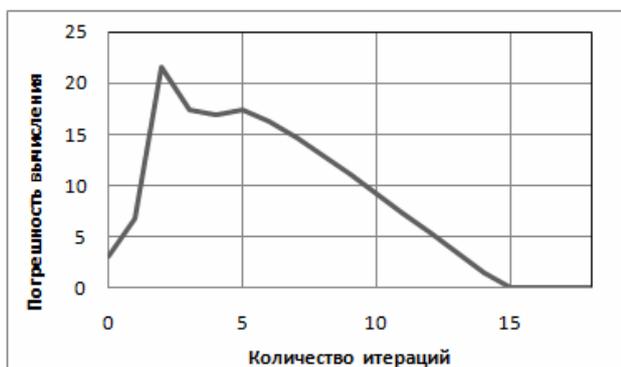
а



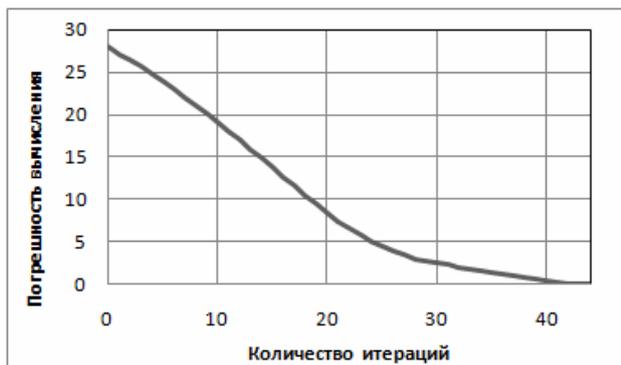
б

Рис. 1. Распределение массовых долей основных элементов и соединений равновесного состава топлива H_2O_2

Расчеты показывают, что в рассмотренной задаче максимальные значения числа обусловленности матриц с коэффициентами при неизвестных Δ_i (как при решении с использованием уравнений (6), так и при решении с использованием уравнений (7)) на всех итерациях не превосходят 300.



а



б

Рис. 2. Изменение ошибки вычислений при решении задачи по полной и «короткой» системам уравнений: а – LU-метод для «короткой» системы уравнений; б – QR-метод для полной системы уравнений

Ниже приводятся результаты расчета состава $H_aO_bC_dN_kK_fV_g$ при значениях давления смеси 10 атм. и при температуре 2000 К. Коэффициенты в условной формуле: $a = 9,122$; $b = 27,89$; $d = 7,090$; $k = 14,34$; $f = 5,729$; $g = 3,179$.

Для этого состава полная система (6) содержит 17 уравнений, а «короткая» система (7) – 7 уравнений. Следует отметить, что расчеты этого состава в интервале от 1000 К до 2000 К по методике [3] завершаются аварийно. Применение LU-метода сопровождается выводом предупреждающей информации о возможном делении на ноль в процессе вычислений, однако расчет завершается успешно. Вычисления с использованием QR-метода выполняются без замечаний.

Расчеты показывают (рис. 3), что матрицы коэффициентов в системах уравнений (6) и (7) для рассматриваемых реагентов плохо обусловлены практически на всех итерациях (значение числа обусловленности на первых итерациях превосходит 60 миллионов, и по мере приближения к решению число обусловленности приближается к значению 390).

Для сравнения на рис. 4 приводятся результаты расчета равновесного состава для вещества $H_aO_bC_dN_kK_fV_g$ при температуре смеси 1000 К (рис. 4, а) и 2000 К (рис. 4, б) QR-методом (решение обоих вариантов по методике [3] завершаются аварийно).

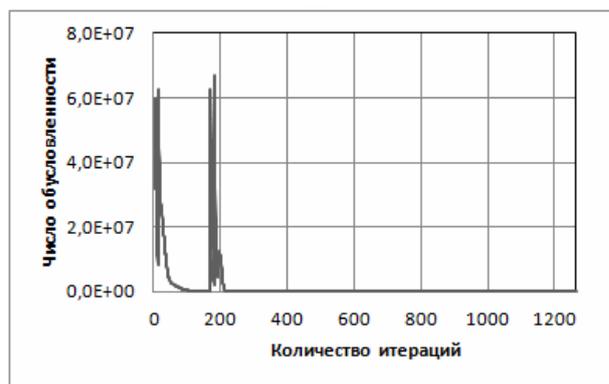
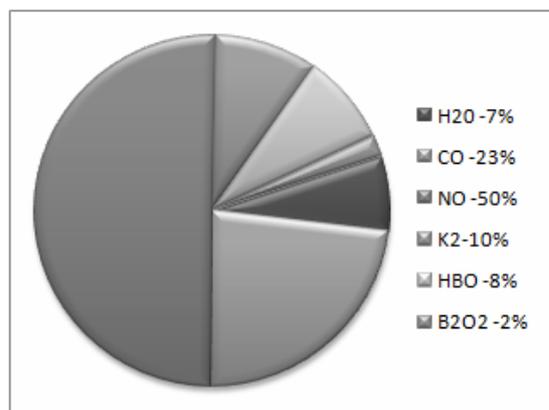
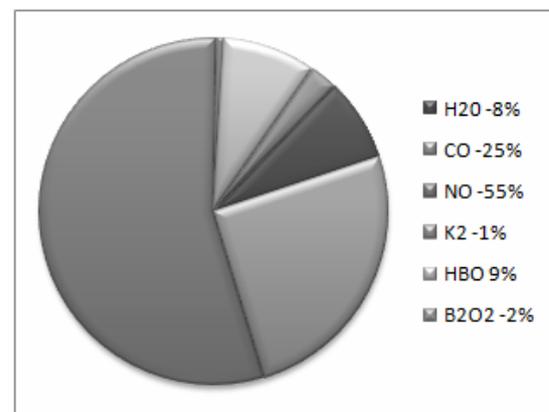


Рис. 3. Изменение числа обусловленности при решении полной и короткой систем линейных уравнений



а



б

Рис. 4. Распределение массовых долей основных соединений и элементов равновесного состава топлива $H_aO_bC_dN_kK_fV_g$

В заключение следует отметить, что проведенные многочисленные расчеты подтверждают высокую эффективность применения в задачах о расчете равновесного состава смеси QR-метода вместо метода Гаусса.

Библиографические ссылки

1. Алемасов В. Е., Дергалин А. Ф., Тишин А. П. Теория ракетных двигателей / под ред. В. Е. Алемасова. – М. : Машиностроение, 1969. – 548 с.

2. Термодинамические и теплофизические свойства твердых ракетных топлив и их продуктов сгорания / под ред. В. Е. Алемасова. – М. : Министерство обороны СССР, 1977. – 316 с.

3. Корепанов М. А. Программа «Термодинамика» // Каталог инновационных разработок Ижевского государственного технического университета. – 2-е изд., доп. и перераб. – Ижевск : Изд-во ИжГТУ, 2001. – С. 95.

4. Моделирование начального участка работы РДТТ с учетом стохастического характера исходной информации / А. В. Алиев, О. В. Мищенко, В. И. Сарабьев, В. И. Бабин //

Химическая физика и мезоскопия. – 2006. – Т. 8. – № 3. – С. 304–310.

5. Моделирование работы регулируемого РДТТ с учетом воздействия случайных факторов / А. В. Алиев, О. В. Мищенко, А. Н. Лошкарев, В. И. Черепов // Интеллектуальные системы в производстве. – 2007. – № 2. – С. 5–12.

6. Вержбицкий В. М. Основы численных методов. – 3-е изд., стер. – М. : Высш. шк., 2009. – 840 с.

7. Алиев А. В., Мищенко О. В. Математическое моделирование в технике. – Ижевск : Ин-т компьютерных исследований, 2012. – 456 с.

O. V. Mishchenkova, PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor, Kalashnikov Izhevsk State Technical University
O. A. Voevodina, Post-graduate, Kalashnikov Izhevsk State Technical University

Application of LU- and QR-Methods to Solve the Task on Equilibrium Structure of Products of Chemical Reaction

The paper considers the task about composition of chemically reacting mix of gases as a task about solving the system of nonlinear equations. To solve this task, method of Newton-Rafson is used, in which LU-and QR-methods instead of Gauss method are applied at a stage of solving the linearized system of equations. Examples illustrating the efficiency of such an approach are given.

Keywords: chemically equilibrium composition, combustion products, mathematical model, system of nonlinear equations, method of Newton-Rafson, LU-method, QR-method.

Получено 02.06.14

УДК 532.529.2

М. М. Горохов, доктор физико-математических наук, профессор, Ижевский государственный технический университет имени М. Т. Калашникова

А. В. Корепанов, кандидат физико-математических наук, доцент, Ижевский государственный технический университет имени М. Т. Калашникова»

В. А. Тенев, доктор физико-математических наук, профессор, Ижевский государственный технический университет имени М. Т. Калашникова»

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ МНОГОМЕРНЫХ МНОГОФАЗНЫХ РЕАГИРУЮЩИХ ТЕЧЕНИЙ

Приводятся уравнения механики сплошных гетерогенных сред, кинетическое уравнение капельной среды, рассматриваются модели столкновений частиц, представлены уравнения сплошной среды из частиц для непрерывной модели столкновений.

Ключевые слова: кинетическое уравнение капельной среды, многофазные течения, модели столкновений частиц.

Уравнения механики сплошных гетерогенных сред

Феноменологическая теория многоскоростного континуума сформулирована и подробно описана в работах Р. И. Нигматулина [1], А. Н. Крайко [2], Л. Е. Стернина [3], И. М. Васенина [4]. Многоскоростной континуум представляет собой совокупность N континуумов, каждый из которых относится к своей компоненте смеси и заполняет один и тот же объем, занятый смесью. Для каждого из составляющих континуумов в каждой точке определяется плотность ρ_i (масса i -й составляющей в единице объема среды), скорость \mathbf{v}_i , ($i=1, \dots, N$) и другие параметры. Субстанциональная производная, связанная с движением i -й составляющей, имеет вид

$$\frac{d_i}{dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla. \quad (1)$$

Механика смесей строится на основе физических законов сохранения массы, импульса и энергии для каждой составляющей в некотором объеме смеси V , ограниченном поверхностью S , с учетом взаимодействия с внешней средой и с другими составляющими.

Уравнения масс имеют вид

$$\int_V \frac{\partial \rho_i}{\partial t} dV = - \int_S \rho_i v_i^n dS + \int_V \sum_{j=1, j \neq i}^N J_{ji} dV \quad (i=1, \dots, N), \quad (2)$$

где J_{ji} характеризует интенсивность перехода массы из j -й в i -ю составляющую в единице объема смеси и в единицу времени. Из закона сохранения массы при различных физико-химических превращениях имеем $J_{ji} = -J_{ij}$, $J_{ii} = 0$. Известная формула Гаусса – Остроградского записывается в виде