Математическое моделирование и информатика

DOI 10.15507/2079-6900.27.202502.243-254
Оригинальная статья
ISSN 2079-6900 (Print)
ISSN 2587-7496 (Online)

УДК 519.63

Численный алгоритм для исследования дозвукого потока с химическими реакциями в присутствии лазерного излучения

Е. Е. Пескова, О. С. Язовцева, М. С. Мустайкин

МГУ им. Н. П. Огарёва (г. Саранск, Российская Федерация)

Аннотация. В статье разработан численный алгоритм для исследования дозвуковых вязких химически активных потоков в присутствии лазерного излучения. Модель процесса описана в приближении уравнений Навье-Стокса с поправкой на дозвуковой режим течения, добавлением источниковых членов, отвечающих химическим превращениям, и внедрением дополнительного обыкновенного дифференциального уравнения, описывающего распространение лазерного излучения по длине исследуемой области. Вычислительный алгоритм построен с применением принципа расщепления по физическим процессам. Это позволяет отдельно рассчитывать изменения концентраций в ходе химических превращений, конвективные потоки, диссипативные члены, динамическое отклонение давления и распространение лазерного излучения. Для учета диссипативных слагаемых (диффузия, вязкость и теплопроводность) используется метод локальных итераций, основанный на упорядочивании полиномов Чебышева. Программная реализация построенного алгоритма выявила более короткие времена расчетов с использованием метода локальных итераций для расчета диссипативных членов в сравнении с алгоритмом, вычисляющим их на основе схемы с центральными разностями, за счет возможного использования более крупного общего расчетного шага по времени. Верификация алгоритма проведена на примере конверсии метана сравнением с расчетом стехиометрического баланса брутто-реакции процесса, а также исследованием сходимости решения на последовательности сгущающихся сеток. На основе разработанного алгоритма проведено численное исследование неокислительной конверсии метана под воздействием лазерного излучения в трубе круглого сечения, получены графики распределения основных характеристик смеси.

Ключевые слова: уравнения Навье-Стокса, схема ЛИ-М, дозвуковые течения, неокислительная конверсия метана, лазерное излучение

Для цитирования: Пескова Е. Е., Язовцева О. С., Мустайкин М. С. Численный алгоритм для исследования дозвукого потока с химическими реакциями в присутствии лазерного излучения // *Журнал Средневолжского математического общества.* 2025. Т. 27, № 2. С. 243–254. DOI: 10.15507/2079-6900.27.202502.243-254

Об авторах:

Пескова Елизавета Евгеньевна, канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры прикладной математики, МГУ им. Н. П. Огарёва (430005, Россия, г. Саранск, ул. Большевистская, д. 68/1), ORCID: http://orcid.org/0000-0003-2618-1674, e.e.peskova@math.mrsu.ru

© *Пескова Е. Е., Язовцева О. С., Мустайкин М. С.*

Контент доступен по лицензии Creative Commons Attribution 4.0 International License.
This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution 4.0 International License.

Язовцева Ольга Сергеевна, канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник кафедры прикладной математики, МГУ им. Н. П. Огарёва (430005, Россия, г. Саранск, ул. Большевистская, д. 68/1), ORCID: https://orcid.org/0000-0001-8075-4491, yaos@math.mrsu.ru

Мустайкин Максим Сергеевич, студент факультета математики и информационных технологий, МГУ им. Н. П. Огарёва (430005, Россия, г. Саранск, ул. Большевистская, д. 68/1), ORCID: https://orcid.org/0009-0000-8690-0787, maksimmustajkin@mail.ru

Original article

MSC2020 65L20

A Numerical Algorithm for Studying Subsonic Chemically Reacting Flow in the Presence of Laser Radiation

E. E. Peskova, O. S. Yazovtseva, M. S. Mustaykin

National Research Mordovia State University (Saransk, Russian Federation)

Abstract. The article presents a numerical algorithm for studying subsonic viscous chemically active flows in the presence of laser radiation. The process model is described in the Navier – Stokes approximation adjusted for the subsonic flow regime, with addition of source terms corresponding to chemical transformations. An additional ordinary differential equation describing the propagation of laser radiation along the length of the region under study is introduced as well. The computational algorithm is based on splitting by physical processes. This makes it possible to calculate separately changes in concentrations during chemical transformations, convective fluxes, dissipative terms, dynamic pressure deviation and propagation of laser radiation. To account for the dissipative terms (diffusion, viscosity, and thermal conductivity), the local iteration method based on Chebyshev polynomials' ordering. Due to the possible use of a larger total calculation time step, the software implementation of the constructed algorithm reveals shorter calculation times using the local iteration method for calculating dissipative terms in comparison with the algorithm calculating them based on a scheme with central differences. The algorithm was verified using the example of methane conversion by comparing it with the calculation of the stoichiometric balance of the brutto-reaction, as well as by studying the convergence of the solution on a sequence of thickening grids. Based on the developed algorithm, a numerical study of non-oxidative conversion of methane under the influence of laser radiation in a circular tube was carried out, and graphs of the distribution of the main characteristics of the mixture were obtained.

Keywords: Navier-Stokes equations, LI-M scheme, subsonic flow, non-oxidative methane conversion, laser radiation

For citation: *E. E. Peskova, O. S. Yazovtseva, M. S. Mustaykin.* A Numerical Algorithm for Studying Subsonic Chemically Reacting Flow in the Presence of Laser Radiation. *Zhurnal Srednevolzhskogo matematicheskogo obshchestva.* 27:2(2025), 243–254. DOI: 10.15507/2079-6900.27.202502.243-254

About the authors:
Elizaveta E. Peskova, Ph.D. (Phys. and Math.), Associate professor, Senior Researcher, Department of Applied Mathematics, National Research Mordovia State University (68/1 Bolshevistskaya St., Saransk 430005, Russia), ORCID: http://orcid.org/0000-0003-2618-1674, e.e.peskova@math.mrsu.ru
Olga S. Yazovtseva, Ph.D. (Phys. and Math.), Senior Researcher, Department of Applied Mathematics, National Research Mordovia State University (68/1 Bolshevistskaya St., Saransk 430005, Russia), ORCID: https://orcid.org/0000-0001-8075-4491, yaos@math.mrsu.ru
Maxim S. Mustaykin, student of the Faculty of Mathematics and Information Technology, Ogarev Moscow State University (68/1 Bolshevistskaya str., Saransk, 430005, Russia), ORCID: https://orcid.org/0009-0000-8690-0787, maksimmustajkin@mail.ru

1. Введение

Математическое моделирование химически активных течений в настоящее время является не до конца изученным направлением исследования физико-химических явлений. Системы сложны, неразрешимы аналитически, а вычислительные алгоритмы трудоемки и требуют специализированных подходов. Благодаря повсеместному распространению таких течений в природе (химия [1], физиологии [2], экологии [3]) разработка вычислительных алгоритмов для исследования подобных систем остается актуальной на протяжении долгого времени.

Исследование химически активных течений напрямую связано с необходимостью разработки новых математических моделей и вычислительных алгоритмов, обеспечивающих анализ течения многокомпонентных неизотермических процессов с целью выявления наиболее эффективных и безопасных условий течения реакций. Особую сложность при моделировании дозвуковых течений представляет выбор математической модели. Во-первых, требуется выявление необходимости учета диссипативных членов в модели: описание изменения энергии уравнением относительно энтальпии смеси допускает упрощение, связанное с незначительностью вклада внутреннего трения в полную энергию системы [4], но диссипативные члены остаются важной частью модели в законах сохранения массы и импульса [5]. Во-вторых, важен учет изменения давления, существенно влияющего на скорость [6], что усложняет вычислительный алгоритм в силу малости его изменения. Физические особенности дозвуковых химически реагирующих газовых потоков с учетом многокомпонентной диффузии, вязкости и теплопроводности обуславливают несколько основных проблем построения вычислительных алгоритмов для их исследования [7]. При использовании явных схем интегрирования по времени, которые являются предпочтительными при учете большого количества разномасштабных процессов, возникает жесткое ограничение на шаг интегрирования, связанное с самым быстрым процессом в изучаемой системе. Еще одна сложность заключается в возникновении уравнения Пуассона для давления, решение которого является трудоемкой задачей, особенно при моделировании процессов в 3D геометрии.

Исследование химически реагирующих течений под воздействием лазерного излучения остается актуальной проблемой на протяжении многих лет [8]. Вопрос изучения воздействия излучения на процессы химии возник еще до активного изучения лазеров. Первым масштабным исследованием процессов фотохимии является статья [9]. Основной теоретически значимый результат заключается в наблюдении активного внутримолекулярного переноса энергии, изменяющего характер течения реакции. Изменение хо-

да химических превращений под воздействием CO_2-лазера представлено в работе [10]. Появление неожиданных продуктов реакции обусловило возможности управления параллельными и последовательными реакциями с использованием лазерного излучения. Теоретические оценки вероятности рекомбинации атомов и их влияние на ход термохимического процесса описаны в работе [11]. Здесь же приведены обоснования значимости использования математических методов для решения задач лазерной термохимии. Подвод в систему лазерного излучения и, как следствие, локальные изменения температуры и компонентного состава смеси может накладывать серьезные ограничения на построение вычислительного алгоритма, в частности, может влиять на шаг интегрирования по времени общей системы уравнений.

В силу необходимости учета большого набора физико-химических процессов, характеризующимися существенно отличными временами протекания, а также локальными изменениями характеристик течения в исследуемых областях, вопрос построения вычислительных алгоритмов для подобных течений остается актуальным. Вычислительные алгоритмы должны обладать высокой точностью при сохранении приемлемого времени получения результатов на высокопроизводительных вычислительных системах.

Целью настоящей работы является разработка численного алгоритма на основе схемы локальных итераций для моделирования химически активных дозвуковых потоков под воздействием лазерного излучения. Алгоритм протестирован на задаче неокислительной конверсии метана в осесимметричном приближении течения среды.

2. Математическая модель дозвукового химически активного газового потока в присутствии лазерного излучения

В зависимости от характера газовых течений применяется та или иная модификация уравнений типа Навье-Стока. Мы рассматриваем течения при малом изменении давления в области и при малых числах Маха. Однако, течение не может быть признано несжимаемым, поскольку за счет нагрева смеси и химических реакций происходит изменение объема [6]. При малых изменениях давления система уравнений Навье-Стокса может быть записана относительно поправки к давлению, постоянному в области [7], и обуславливает сложность подбора численного метода для решения системы с целью учета влияния давления на скорость потока. Учет энергии лазерного излучения реализуется как дополнительный источниковый член в уравнении энергии величины его интенсивности, изменение которой определяется из обыкновенного дифференциального уравнения [12]. Таким образом, математическая модель химически реагирующих течений под воздействием лазерного излучения описана модифицированной системой уравнений Навье-Стокса [7], дополненной уравнением для интенсивности лазерного излучения [13]:

$$\frac{\partial \rho Y_m}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho Y_m \vec{v}) - \nabla \cdot \vec{J_m} + R_m, \tag{2.1}$$

$$\frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \vec{v}\vec{v}) - \nabla \pi + \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}}, \tag{2.2}$$

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho h \vec{v}) - \nabla \cdot \vec{q} + \alpha \theta, \tag{2.3}$$

$$\frac{d\theta(l)}{dl} = -\alpha \theta(l), \tag{2.4}$$

где $m = \overline{1, M}$, M – количество компонент в газовой смеси; ρ — плотность смеси; Y_m — массовая доля m-ой компоненты смеси; $\vec{v}$ — вектор скорости; h — энтальпия смеси; $\vec{J_m}$ — вектор диффузионного потока; R_m — скорость образования или расхода m-ой компоненты смеси; p — давление; $\overline{\overline{\tau}}$ — тензор вязких напряжений; $\vec{q}$ — вектор потока тепла для смеси; α — коэффициент поглощения; θ — интенсивность излучения; l – координата вдоль направления распространения лазерного излучения; $\pi = p - p_0$ – отклонение давления от давления p_0, постоянного в области; p – полное давление, при этом $\dfrac{|\pi|}{p_0} \sim O(M^2)$.

Вектор диффузии описывает диффузию многокомпонентного потока:

$$\vec{J_m} = -\rho D_{m,mix} \nabla Y_m, \tag{2.5}$$

где $D_{m,mix}(Y_m, T)$ – средний по смеси коэффициент диффузии m-ой компоненты.

Вектор потока тепла включает в себя конвективный теплоперенос и изменение температуры в ходе химических реакций:

$$\vec{q} = -\lambda \nabla T - \sum_m h_m \rho D_{m,mix} \nabla Y_m, \tag{2.6}$$

где $h_m(T)$ – энтальпия компоненты m.

Тензор вязких напряжений примет вид:

$$\overline{\overline{\tau}} = \mu \left(\nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^T \right) - \frac{2}{3} \mu \left(\nabla \cdot \vec{v} \right) I, \tag{2.7}$$

где $\mu(Y_m, T)$ – вязкость смеси.

Динамика температуры определяется изменением энергии в системе. Энтальпия смеси рассчитывается как средневзвешенное энтальпий компонент

$$h(T, Y_m) = \sum_m Y_m h_m(T). \tag{2.8}$$

Условие на дивергенцию вектора скорости выводится из недивергентного вида уравнения неразрывности, уравнения состояния идеального газа и уравнения (2.3), что еще раз указывает на сжимаемость исследуемых течений:

$$\nabla \cdot \vec{v} = \frac{1}{\rho C_p T} \left(\nabla \cdot \lambda \nabla T + \sum_m \rho D_{m,mix} \nabla Y_m \nabla h_m + \alpha \theta \right) + \tag{2.9}$$

$$+ \frac{1}{\rho} \sum_m \frac{M_w}{M_{wm}} \left(\nabla \cdot \rho D_{m,mix} \nabla Y_m \right) + \frac{1}{\rho} \sum_m \left(\frac{M_w}{M_{wm}} - \frac{h_m}{C_p T} \right) R_m \equiv S, \tag{2.10}$$

где $C_p(Y_m, T)$ – теплоемкость смеси при постоянном давлении; M_w – молекулярная масса смеси. Дивергенция скорости далее используется при расчете отклонения давления π и скорости в уравнении (2.2).

3. Вычислительный алгоритм

3.1. Разработка алгоритма

В настоящей работе построение алгоритма выполнено на основе принципа расщепления по физическим процессам [14]. Интегрирование по времени производится явным

методом Эйлера, шаг выбирается из условия устойчивости для гиперболической части системы [15] посредством использования схемы локальных итераций для диссипативных составляющих модели. В работе [16] приведена детализация вычислительного алгоритма на основе схемы локальных итераций для многокомпонентных уравнений Навье-Стокса в приближении малых чисел Маха без слагаемых для учета лазерного излучения. Однако, подвод лазерного излучения локально меняет температуру и компонентный состав смеси, что может усилить диффузионные ограничения на шаг интегрирования по времени. В настоящей работе проведено расширение алгоритма, который представляет собой следующую последовательность вычислений:

1. Решение системы уравнений химической кинетики.

   Для решения системы дифференциальных уравнений, полученной из схемы химических реакций, подключен модуль RADAU5, который представляет собой программную реализацию трехстадийного метода Рунге-Кутты пятого порядка точности с адаптивным шагом [17].

2. Решение задачи Коши для уравнения интенсивности лазерного излучения.

   Расчет интенсивности излучения вдоль оси трубы проведен с использованием модуля RADAU5.

3. Решение гиперболической задачи для конвективных составляющих системы (2.1) – (2.3).

   Для расчета конвективных потоков применены потоки Русанова с модифицированным стабилизирующим членом [6].

4. Решение параболической задачи для учета членов, отвечающих процессам диффузии, вязкости, теплопроводности, в системе (2.1) – (2.3).

   Решение самой трудоемкой задачи – расчет диссипативных членов. Для расчета применена явная схема локальных итераций на основе упорядочивания корней полинома Чебышева [15]. Применение схемы позволило значительно увеличить шаг интегрирования по времени за счет ослабления условия устойчивости – устойчивость достигается за счет использования определенного порядка корней полиномов Чебышева как итерационных параметров.

5. Решение эллиптической задачи для динамического давления и коррекция вектора скорости.

   Расчет динамической составляющей давления выполнен с использованием метода Якоби. Его эффективность на данном этапе обусловлена малостью изменения давления – за начальное приближение берется давление на предыдущем временном шаге.

3.2. Верификация алгоритма

Ввиду отсутствия в широком доступе экспериментальных данных по неокислительной конверсии метана в присутствии лазерного излучения верификация алгоритма проводилась на основании стехометрического уравнения для брутто-реакции процесса:

$$2CH_4 = C_2H_6 + H_2.$$

Из стехиометрического уравнения слудет, что 2 моль метана CH_4 превращаются в 1 моль водорода H_2 и 1 моль этана C_2H_6.

Для проведения вычислительного эксперимента рассмотрим цилиндрическую трубу длины 0.1 м и радиуса 0.05 м, на 100% заполненную метаном без подвода реакционной смеси. При подаче энергии от нагрева стенок и лазерного излучения расчет для полного распада метана дает следующие концентрации продуктов: 6.3% водорода и 93.7% этана.

С учетом значений молярной массы используемых веществ:

$$M(CH_4) = 16 \text{ г/моль}, \quad M(H_2) = 2 \text{ г/моль}, \quad M(C_2H_6) = 28 \text{ г/моль}$$

сделаем пересчет на 1 кг реакционной смеси по результатам вычислительного эксперимента:

$$CH_4: \ 1000 \text{ г} \sim 62.5 \text{ моль}, H_2: \ 63 \text{ г} \sim 31.2 \text{ моль}, C_2H_6: \ 937 \text{ г} \sim 31.5 \text{ моль}.$$

Из пересчета количества продуктов на 1 кг реакционной смеси по стехиометрическому уравнению

$$CH_4: \ \sim 62.5 \text{ моль}, H_2: \ \sim 31.25 \text{ моль}, C_2H_6: \ \sim 31.25 \text{ моль},$$

Из хорошей согласованности расчетных данных и результатов, вычисленных по стехиометрическому уравнению, следует адекватность материального баланса модели и вычислительного алгоритма.

Исследуем сходимость алгоритма на последовательности сгущающихся сеток. Были выбраны сетки размерности 300×10, 600×20, 1200×40, интегрирование велось с сохранением числа Куранта $\dfrac{a\Delta t}{h} \approx 0.01$. Рис. 3.1 иллюстрирует результаты расчета для различных размеров пространственных сеток (измельчающихся шагов по пространству).

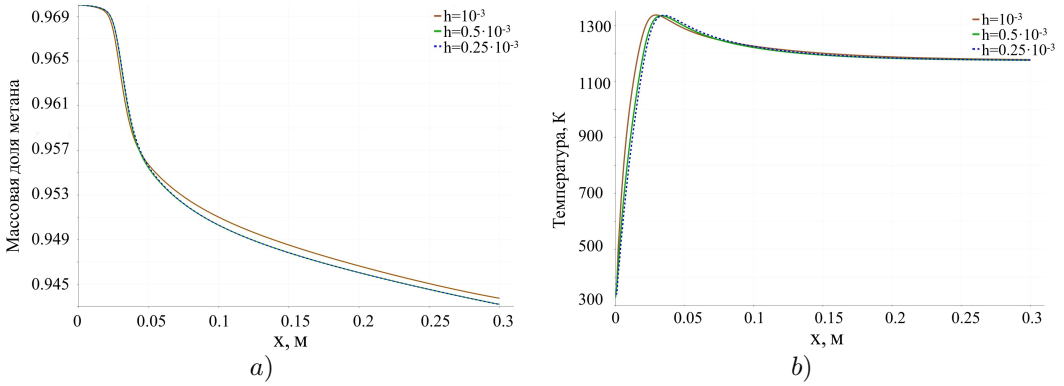


Рис. 3.1. Расчет на последовательности сгущающихся сеток:
a) массовая доля метана, *b*) температура газа

Fig. 3.1. Calculation based on a sequence of thickening grids:
a) mass fraction of methane, *b*) gas temperature

На рис. 3.1 размер шага обозначен в легенде в правых верхних углах поля графиков. Как видно, алгоритм показывает достаточно быструю сходимость: графики для шагов

интегрирования по пространству $0.5 \cdot 10^{-3}$м и $0.25 \cdot 10^{-3}$м отличаются незначительно. Порядок аппроксимации по пространству рассчитан по правилу Рунге в норме L^2. Для массовой доли метана получено значение 2.38, для температуры газа – 1.94.

Было проведено сравнение расчетного времени разработанного алгоритма и алгоритма, в котором не предусмотрено отщепление диффузионных потоков [6]. Посредством вычислительных экспериментов при сравнении двух алгоритмов расчетный шаг по времени увеличен в 5 раз по сравнению с требованиями диффузионных ограничений. Получено ускорение расчетов по разработанному алгоритму приблизительно в 6 раз при расчетах на кластере МГУ им. Н.П. Огарева на 12 вычислительных узлах.

4. Численное эксперименты по исследованию течения газа в осесимметричной трубе круглого сечения

Для проведения вычислительного эксперимента выбраны следующие расчетные параметры. Цилиндрическая труба длины 0.3 м, диаметра 0.02 м. В начальный момент времени труба заполнена метаном температурой 1073 K, температура ее стенок 1173 K. На вход подана смесь состава метан (97%), этилен (3%) с объемной скоростью 60 л/ч, температуры 300 K. Через левый торец трубы вдоль оси симметрии пущен лазерный луч мощности излучения 30 Вт. Давление на выходе из трубы 101325 Па. Для описания схемы химических превращений принята радикальная схема конверсии метана, включающая 15 компонент смеси [1].

Для расчета выбраны следующие шаги интегрирования по радиусу реактора и его оси: $h_r = h_z = 10^{-3}$ м. Шаг интегрирования по времени равен $5 \cdot 10^{-5}$ с. В качестве исследуемого процесса выбрана неокислительная конверсия метана. На рис. 4.1 представлены результаты расчетов, полученные с использованием программной реализации разработанного алгоритма при времени 5 секунд.

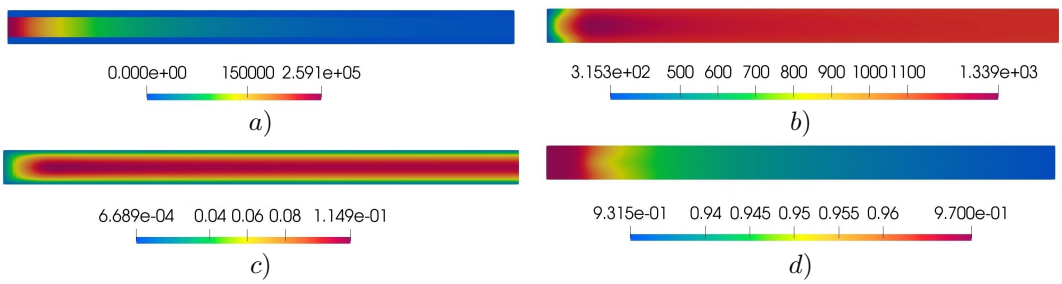


Рис. 4.1. Результаты расчетов для неокислительной конверсии метана под воздействием лазерного излучения: *a*) интенсивность излучения, Вт/м^2, *b*) температура, K, *c*) скорость, м/с, *d*) массовая доля метана

Fig 4.1. Calculation results for non-oxidative conversion of methane under the influence of laser radiation: *a*) radiation intensity, W/m^2, *b*) temperature, K, *c*) velocity, m/s, *d*) mass fraction of methane

Лазерное излучение поглощается этиленом, что объясняет снижение его интенсивности от левого торца трубы к правому (рис. 4.1*a*). Вклад поглощаемой энергии дает картину распределения температурного поля – в области максимального поглощения лазерного излучения температура увеличилась на 160 K по сравнению с температурой

стенок (рис. 4.1*b*). Распределение скорости (рис. 4.1*c*) параболично, что согласуется с ранее наблюдаемыми эффектами в вычислительных экспериментах [6]. При этом в первой половине трубы, в которой поглощается большая часть лазерного излучения, запускается процесс разложения метана (рис. 4.1*d*) с образованием радикалов и продуктов реакции. Во второй половине трубы реакции в основном протекают за счет энергии, подаваемой от стенок (рис. 4.1*b*).

5. Заключение

В статье представлен численный алгоритм для исследования дозвуковых химически реагирующих потоков с учетом многокомпонентных теплопроводности, вязкости, диффузии и в присутствии лазерного излучения, которое существенно меняет температуру компонентный состав смеси. Исследуемая математическая модель представляет собой модифицированную систему уравнений Навье-Стокса в приближении малых чисел Маха. Вычислительный алгоритм основан на принципе расщепления по физическим процессам: задача разделена на несколько подзадач, для решения каждой из которых применен адекватный ей численный метод. Особенностью алгоритма является адаптация в него схемы локальных итераций для снятия диффузионных ограничений на шаг интегрирования по времени. Алгоритм исследован на сходимость в постановке сгущающихся сеток с сохранением числа Куранта. Верификация алгоритма проведена на примере брутто-реакции неокислительной конверсии метана.

В дальнейшем планируется расширение разработанного алгоритма на решение трехмерных задач в цилиндрической системе координат, а также на расчет течения многофазной среды газ-пылевая твердая фаза с химическими реакциями на ее поверхности.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект N 23-21-002, https://rscf.ru/project/23-21-00202/.

Список литературы

1. Лашина Е. А., Пескова Е. Е., Снытников В. Н. Математическое моделирование нестационарной температурной конверсии метан-этановых смесей в широком диапазоне температур // *Химия в интересах устойчивого развития*. 2023. Т. 31, № 3. С. 288–296. DOI: 10.15372/KhUR2023467

2. Bezyaev V. I., Sadekov N. K. On Hemodynamics Problems on Graphs. *Journal of Mathematical Sciences*. 2019. Vol. 239, no. 6. P. 725–738. DOI: 10.1007/S10958-019-04322-W

3. Сухинов А. И., Чистяков А. Е., Белова Ю. В., Кузнецова И. Ю. Аналитическое и численное исследование задачи динамики планктонных популяций при наличии микропластика // *Математическое моделирование*. 2024. Т. 36, № 3. С. 95–114. DOI: 10.20948/mm-2024-03-07

4. Majda A., Sethian J. The derivation and numerical solution of the equations for zero Mach number combustion. *Combustion Science and Technology*. 1985. Vol. 42, no. 3-4. P. 185–205. DOI: 10.1080/00102208508960376

5. Rehm R. G., Baum H. R. The equation of motion for thermally driven, buoyant flows. *Journal of Research of the National Bureau of Standards*. 1978. Vol. 83, no. 3. P. 297–308. DOI: 10.6028/jres.083.019

6. Пескова Е. Е., Снытников В. Н., Жалнин Р. В. Вычислительный алгоритм для изучения внутренних ламинарных потоков многокомпонентного газа с разномасштабными химическими процессами // *Компьютерные исследования и моделирование*. 2023. Т. 15, № 5. С. 1169–1187. DOI: 10.20537/2076-7633-2023-15-5-1169-1187

7. Day M. S., Bell J. B. Numerical simulation of laminar reacting flows with complex chemistry. *Combustion Theory and Modelling*. 2000. Vol. 4, no. 4. P. 535–556. DOI: 10.1088/1364-7830/4/4/309

8. Бункин Ф. В., Кириченко Н. А., Лукьянчук Б. С. Термохимическое действие лазерного излучения // *Успехи физических наук*. 1982. Т. 138, № 1. С. 45–94. DOI: 10.3367/UFNr.0138.198209b.0045

9. Hall R. T., Pimentel G. C. Isomerization of Nitrous Acid: An Infrared Photochemical Reaction. *The Journal of Chemical Physics*. 1963. Vol. 38, no. 8. P. 1889–1897. DOI: 10.1063/1.1733892

10. Басов Н. Г., Маркин Е. П., Ораевский А. Н., Панкратов А. В. Фотохимическое действие инфракрасного излучения // *Докл. АН СССР*. 1971. Т. 198, № 5. С. 1043–1045.

11. Торбин А. П., Михеев П. А., Азязов В. Н. Гетерогенные реакции атомов йода в лазерной среде O_2 $(^1\Delta) - I$ // *Известия Самарского научного центра РАН*. 2013. Т. 15, № 4. С. 133–135.

12. Snytnikov Vl. N., Snytnikov V. N., Masyuk N. S., Markelova T. V. The Absorption of CO2 Laser Radiation by Ethylene in Mixtures with Methane. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. 2020. Vol. 253, 107119. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2020.107119

13. Пескова Е. Е., Снытников В. Н. Численное исследование конверсии метановых смесей под воздействием лазерного излучения // *Журнал Средневолжского математического общества*. 2023. Т. 25, № 3. С. 159–173. DOI: 10.15507/2079-6900.25.202303.159-173

14. Марчук Г. И. Методы расщепления. – М.: Наука, 1988. – 263 с.

15. Zhukov V. T., Feodoritova O. B., Novikova N. D., Duben A. P. Explicit-Iterative Scheme for the Time Integration of a System of Navier–Stokes Equations. *Mathematical Models and Computer Simulations*. 2020. Vol. 12, no. 6. P. 958–968. DOI: 10.1134/S2070048220060174

16. Peskova E. E., Yazovtseva O. S. Application of the Explicitly Iterative Scheme to Simulating Subsonic Reacting Gas Flows. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*. 2024. Vol. 64, no. 2. P. 326–339. DOI: 10.1134/S0965542524020106

17. Hairer E., Wanner G. Solving Ordinary Differential Equations II. Springer-Verlag, 1996. DOI: 10.1007/978-3-662-09947-6

Поступила 18.02.2025; доработана после рецензирования 22.04.2025;
принята к публикации 28.05.2025

Авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи.
Конфликт интересов: авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

References

1. E. A. Lashina, E. E. Peskova, V. N. Snytnikov, "Mathematical Modeling of the Dynamics of Thermal Conversion of Methane-Ethane Mixtures in a Wide Temperature Range", *Chemistry for Sustainable Development*, **31**:3 (2023), 278–286. DOI: 10.15372/KhUR2023467

2. V. I. Bezyaev, N. K. Sadekov, "On Hemodynamics Problems on Graphs", *Journal of Mathematical Sciences*, **239**:6 (2019), 725–738. DOI: 10.1007/S10958-019-04322-W

3. A. I. Sukhinov, A. E. Chistyakov, Yu. V. Belova, I. Yu. Kuznetsova, "Analytical and numerical study of the problem of plankton population dyncrossrefamics in the presence of microplastics", *Matematicheskoe modelirovanie*, **36**:3 (2024), 95–114 (In Russ.). DOI: 10.20948/mm-2024-03-07

4. A. Majda, J. Sethian, "The derivation and numerical solution of the equations for zero Mach number combustion", *Combustion Science and Technology*, **42** (1986), 185–205. DOI: 10.1080/00102208508960376

5. R. G. Rehm, H. R. Baum, "The equation of motion for thermally driven, buoyant flows", *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, **83**:3 (1978), 297–308. DOI: 10.6028/jres.083.019

6. E. E. Peskova, V. N. Snytnikov, R. V. Zhalnin, "The computational algorithm for studying internal laminar flows of a multicomponent gas with different-scale chemical processes", *Computer research and modeling*, **15**:5 (2023), 1169–1187. DOI: 10.1080/00102208508960376

7. M. S. Day, J. B. Bell, "Numerical simulation of laminar reacting flows with complex chemistry", *Combustion Theory and Modelling*, **4**:4 (2000), 535–556. DOI: 10.1088/1364-7830/4/4/309

8. F. V. Bunkin, N. A. Kirichenko, B. S. Luk'yanchuk, "Thermochemical action of laser radiation", *Uspekhi fizicheskih nauk*, **138**:1 (1982), 45–94 (In Russ.). DOI: 10.3367/UFNr.0138.198209b.0045

9. R. T. Hall, G. C. Pimentel, "Isomerization of Nitrous Acid: An Infrared Photochemical Reaction", *The Journal of Chemical Physics*, **38**:8 (1963), 1889–1897. DOI: 10.1063/1.1733892

10. N. G. Basov, E. P. Markin, A. N. Oraevsky, A. V. Pankratov, "Photochemical action of infrared radiation", *Doklady Akademii Nauk SSSR*, **198**:5 (1971), 1043–1045 (In Russ.).

11. A. P. Torbin, P. A. Mikheyev, V. N. Azyazov, "Heterogeneous reactions of iodine atoms in the laser medium O_2 $(^1\Delta) - I$", *Izvestiya Samarskogo Nauchnogo Tsentra*, **15**:4 (2013), 133–135 (In Russ.).

12. Vl. N. Snytnikov, V.Ṅ. Snytnikov, N. S. Masyuk, T. V. Markelova, "The Absorption of CO2 Laser Radiation by Ethylene in Mixtures with Methane", *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **253**:107119 (2020). DOI: 107119. -10.1016/j.jqsrt.2020.107119

13. E. E. Peskova, V. N. Snytnikov, "Numerical Study of Methane Mixtures' Conversion Under the Influence of Laser Radiation", *Middle Volga Mathematical Society Journal*, **25**:3 (2023), 159–173. DOI: 10.15507/2079-6900.25.202303.159-173

14. G. I. Marchuk, *Splitting methods*, Nauka, Moscow, 1988, 264 p.

15. V. T. Zhukov, O. B. Feodoritova, N. D. Novikova, A. P. Duben, "Explicit-Iterative Scheme for the Time Integration of a System of Navier–Stokes Equations", *Mathematical Models and Computer Simulations*, **12**:6 (2020), 958–968. DOI: 10.1134/S2070048220060174

16. E. E. Peskova, O. S. Yazovtseva, "Application of the Explicitly Iterative Scheme to Simulating Subsonic Reacting Gas Flows", *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, **61**:2 (2024), 326–339. DOI: 10.1134/S0965542524020106

17. E. Hairer, G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations II*, Springer-Verlag, 1996 DOI: 10.1007/978-3-662-09947-6.

Submitted 18.02.2025; Revised 22.04.2025; Accepted 28.05.2025

The authors have read and approved the final manuscript.
Conflict of interest: The authors declare no conflict of interest.