

МЕТОДЫ УСКОРЕНИЯ МНОГОМЕРНЫХ
ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ С ДЕТАЛЬНЫМИ
КИНЕТИЧЕСКИМИ МЕХАНИЗМАМИ ОКИСЛЕНИЯ
И ГОРЕНИЯ МОТОРНЫХ ТОПЛИВ

С. Н. Медведев, В. А. Сметанюк, С. М. Фролов, И. О. Шамшин

ИХФ РАН
г. Москва, Россия

Стремительное развитие вычислительной техники привело к тому, что компьютерное моделирование стало неотъемлемой и основополагающей частью современных технологий проектирования транспортных двигателей, в частности двигателей внутреннего сгорания (ДВС). Одновременно с совершенствованием этих технологий ужесточаются нормы по удельному расходу горючего в ДВС и по выходу оксидов азота и углерода, непрореагировавших углеводородов, а также сажи и дымовых частиц. Сегодня многовариантные многомерные газодинамические расчеты с оптимизацией направлены не только на определение облика проектируемого ДВС и выявление тенденций в изменении его важнейших характеристик, но и на сведение к минимуму количества наиболее перспективных конструктивных решений и на количественное прогнозирование параметров рабочих режимов, включая эмиссию вредных веществ. На повестке дня — использование в многомерных расчетах детальных кинетических механизмов (ДКМ) окисления и горения многокомпонентных моторных топлив, содержащих сотни реагентов и промежуточных продуктов и тысячи элементарных реакций. В связи с этим исключительно большое значение приобретают математические методы ускорения кинетических расчетов в многомерных задачах: по некоторым литературным данным на решение уравнений химической кинетики требуется до 80%–90% всего расчетного времени.

Цель данной работы — обзор наиболее перспективных современных методов ускорения кинетических расчетов, разработка соответствующих прикладных программ и демонстрация этих методов на примерах.

Судя по многолетней динамике развития известных пакетов кинетических программ, пока нет оснований ожидать существенного повышения производительности кинетических решателей (КР) — программ, решающих систему уравнений химической кинетики на газодинамическом шаге по времени. Поэтому все методы ускорения кинетических расчетов можно условно разделить на две группы: **пассивные** и **активные**. Пассивные методы

подразумевают проведение подготовительной работы по сокращению ДКМ перед началом многомерного расчета, а активные методы в такой работе не нуждаются.

Самый простой и часто применяемый пассивный метод — сокращение ДКМ с целью уменьшения количества реагентов и реакций вплоть до построения «скелетного» механизма, содержащего только основные стадии процесса, или до построения «глобального» механизма в виде одной или нескольких эмпирических реакций (см., например, [1, 2]). Во всех известных алгоритмах получения сокращенных механизмов реакций используются заранее заданные интервалы изменения термодинамических переменных (давление, температура, состав смеси). Поэтому, вообще говоря, такие механизмы верны только в этих интервалах, а их применение за пределами этих интервалов может приводить к ошибочным результатам.

Более трудоемкий, но более точный пассивный метод — создание каталога сокращенных механизмов (КСМ) с интервалами применимости, перекрывающими все фазовое пространство изучаемой системы [3]. В этом случае в зависимости от текущих значений термодинамических переменных в КР используется тот или иной сокращенный кинетический механизм из каталога. Такой метод также не лишен недостатков: при создании КСМ необходимо четко представлять границы фазового пространства рассматриваемой системы, а при решении задачи — применять обоснованные правила переключения между механизмами с разным количеством реагентов.

Активные методы ускорения кинетических расчетов основаны на уменьшении частоты вызовов КР и на динамическом сокращении механизма реакций по ходу вычислений.

В самом простом активном методе, основанном на уменьшении частоты вызовов КР, используется тот факт, что в поле любого течения, как правило, имеются области с «близкими» мгновенными значениями термодинамических переменных. Если такие области (не обязательно связанные) приближенно рассматривать как области с идентичными параметрами течения, то для определения в них скорости химических превращений на одном газодинамическом шаге по времени достаточно только одного вызова КР. Очевидно, для эффективного применения этого метода требуется быстрая процедура сканирования всей расчетной области с отбором и группировкой вычислительных ячеек с «близкими» значениями термодинамических параметров. Недостаток метода — неопределенность в допустимом разбросе значений термодинамических параметров в группе таких ячеек, поскольку допустимый разброс в общем случае зависит от самих значений этих параметров.

Наиболее перспективными активными методами считают метод динамического сокращения (МДС) [4] и метод динамической табуляции (МДТ) [5] кинетических механизмов по ходу вычислений, а также комбинированный метод — метод динамической табуляции и сокращения (МДТС) кинетических механизмов [6].

В МДС для отбора наиболее важных химических компонентов для заданного локального мгновенного термохимического состояния смеси используется метод ориентированных взвешенных графов. Каждой вершине графа соответствует один компонент из всего списка компонентов ДКМ. Вершины графа связаны с другими вершинами направленными дугами, вес которых определяется нормированным вкладом этих вершин (компонентов) в скорость изменения того или иного выбранного компонента. В алгоритме МДС после выбора начальных вершин графа или определяющих компонентов (например, исходное горючее и СО) производится обход графа с ранжированием вкладов вершин, а затем на основе принятого критерия малости вклада часть компонентов удаляется и формируется список компонентов сокращенного механизма реакций. Соответственно, в сокращенный механизм реакций включаются только те реакции, которые содержат компоненты из полученного списка. При этом удаленные компоненты учитываются при расчете скоростей реакций с участием третьего тела. Важнейшее отличие МДС от пассивного метода КСМ — получение по ходу вычислений и использование сокращенных механизмов реакций для ограниченного набора термохимических состояний системы, возникающих при решении конкретной задачи.

В основе МДТ лежит идея табуляции всех термохимических состояний системы, которые возникают в процессе вычислений, и получения новых термохимических состояний системы через линейную экстраполяцию табличных данных вместо вызова КР. Вначале таблица состояний пуста. По мере вычислений, сопровождаемых вызовом КР, в таблицу вносится информация о каждом новом термохимическом состоянии и о чувствительности этого состояния к изменению параметров, а также о размерах доверительной области в окрестности этого состояния, в которой допустима линейная экстраполяция состояний с заранее заданной точностью. В алгоритме МДТ перед вызовом КР предусмотрено обращение к таблице и поиск термохимических состояний, «близких» к текущему. «Близкими» здесь считаются состояния, которые находятся внутри одной доверительной области. Если в таблице найдено «близкое» состояние, оно используется для расчета нового состояния без вызова КР. Если же «близкое» состояние не найдено, вызывается КР, и таблица пополняется информацией о новом термохимическом состоянии. В процессе заполнения таблицы доверительные области разных состояний могут пересекаться: в этом случае они объединяются и расширяются. С помощью МДТ удалось ускорить кинетические расчеты более чем в 1000 раз [5].

В [6] предложен метод, объединяющий преимущества описанных выше МДС и МДТ. В алгоритме МДТС сначала идет обращение к таблице МДТ, далее — к процедуре динамического сокращения ДКМ и к вызову КР, а затем повторное обращение к таблице МДТ с целью записи информации о новом термохимическом состоянии и возможного расширения соответствующей доверительной области. В отличие от МДТ в МДТС табулируются

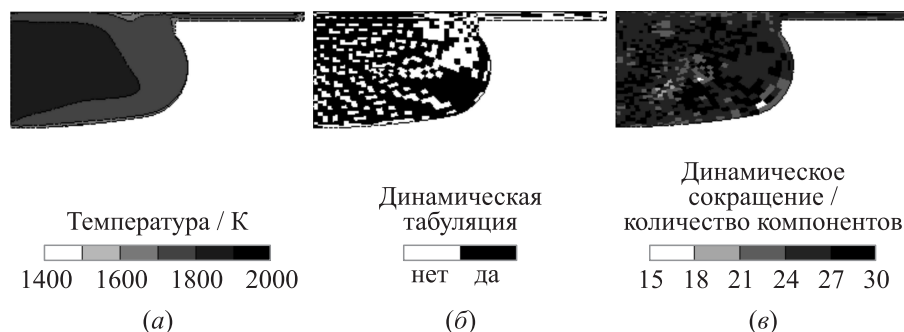


Рис. 1 Результаты трехмерного расчета рабочего процесса в ДВС с гомогенным зарядом и с зажиганием от сжатия с использованием МДТС: (а) распределение температуры в цилиндре двигателя; (б) карта областей в цилиндре двигателя, в которых термохимическое состояние смеси определяется из таблиц МДТ (черный цвет), т. е. без вызова кинетического решателя; (в) карта областей в цилиндре двигателя с указанием количества компонентов в сокращенных кинетических механизмах, полученных с помощью МДС. Все распределения показаны для угла поворота коленчатого вала 360°

результаты расчета с использованием сокращенного кинетического механизма.

Процедуры МДС, МДТ и МДТС внедрены в программный пакет OpenFOAM [7], написанный на языке C++, и находятся в открытом доступе. Эти процедуры были нами извлечены из OpenFOAM и внедрены в виде внешних библиотек в газодинамический вычислительный пакет для многомерного моделирования сжимаемых турбулентных реагирующих течений, написанный на языке Фортран, с целью проверки эффективности этих процедур при расчете рабочего процесса в ДВС с гомогенным зарядом и зажиганием от сжатия.

Проведены расчеты двигателя с зажиганием от сжатия гомогенной смеси гептана и воздуха. Двигатель имел следующие параметры: радиус цилиндра — 43 см, степень сжатия — 21, число оборотов — 1400 об/мин, коэффициент избытка горючего — 0,27, температура стенки — 458 К. В расчетах использовали скелетный кинетический механизм окисления н-гептана, содержащий 29 компонентов и 54 реакции (механизм 29/54), или ДКМ, содержащий 88 компонентов и 287 реакций (механизм 88/287).

На рис. 1 представлены результаты трехмерного расчета рабочего процесса в ДВС с использованием МДТС и механизма 29/54 в момент времени, соответствующий углу поворота коленчатого вала (ПКВ) 360° . Видно, что в этот момент времени температура газов в цилиндре неоднородна и изменяется приблизительно от 1500 до 1800 К (рис. 1, а). Применение МДТ

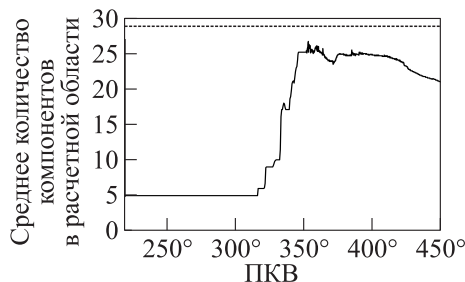


Рис. 2 Зависимость среднего количества компонентов в сокращенном кинетическом механизме от угла поворота коленчатого вала ДВС при использовании МДТС

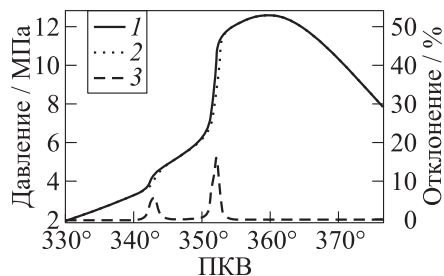


Рис. 3 Изменение давления в цилиндре ДВС с углом поворота коленчатого вала: 1 — ДКМ, 2 — МДТС, 3 — относительное отклонение

приводит к существенному сокращению вызовов КР: на рис. 1, б зачернены области, в которых термохимическое состояние определяется с помощью линейной экстраполяции табличных данных. Применение МДС иллюстрируется данными рис. 1, в: в указанный момент времени полный кинетический механизм окисления *n*-гептана с 29 компонентами используется лишь в каждой 6-й вычислительной ячейке, тогда как наиболее часто применяется сокращенный механизм с 25 компонентами, а в некоторых областях — сокращенные механизмы с 20 и даже с 15 компонентами.

На рис. 2 представлена зависимость среднего количества компонентов в сокращенном кинетическом механизме окисления *n*-гептана от угла поворота коленчатого вала ДВС при использовании МДТС и механизма 29/54. Отметим, что минимальное количество компонентов в расчете было равно 5 (*n*-гептан, кислород, азот, водяной пар и двуокись углерода) для правильного расчета теплофизических параметров смеси до воспламенения (расчет проводился с учетом рециркуляции отработавших газов). Из рис. 2 видно, что в моменты, предшествующие воспламенению (320°–350°), количество компонентов стремительно возрастает, достигая 26 в момент воспламенения (~ 352°).

На рис. 3 приведено сравнение двух расчетов давления в цилиндре ДВС: без использования (кривая 1) и с использованием (кривая 2) МДТС и механизма 29/54. Видно, что кривые удовлетворительно согласуются друг с другом, хотя максимальное отклонение кривых на участке быстрого роста давления достигает 15%. Следует отметить и двухстадийный характер воспламенения: при ~ 343° появляется стадия холодного пламени, а горячий взрыв происходит при 352°.

Использование МДТС с механизмом 29/54 привело к сокращению расчетного времени на 25%. Когда же сравнительные расчеты проводились для

механизма 88/287, время расчета сократилось на 43%, т. е. эффективность МДТС возрастает с увеличением объема кинетического механизма.

Таким образом, была проверена эффективность существующих процедур ускорения кинетических расчетов при решении многомерных газодинамических задач. Проведены расчеты рабочего процесса в ДВС с гомогенным зарядом и зажиганием от сжатия без применения и с применением МДТС кинетических механизмов. Показано, что эффективность метода возрастает с увеличением объема кинетического механизма. В дальнейшем планируется оптимизировать алгоритмы ускорения кинетических расчетов для получения большего эффекта.

Работа выполнена при частичной поддержке Российской академии наук (Программа Президиума РАН № 26 «Горение и взрыв») и Российского фонда фундаментальных исследований (грант 11-08-01297).

Литература

1. Басевич В. Я., Беляев А. А., Брандштетер У., Нейгауз М. Г., Ташл Р., Фролов С. М. Кинетическая схема для моделирования самовоспламенения воздушных смесей изооктана и н-гептана // ФГВ, 1994. Т. 30. № 8-9. С. 15–25.
2. Басевич В. Я., Фролов С. М. Глобальные кинетические механизмы для моделирования многостадийного самовоспламенения углеводородов в реагирующих течениях // Хим. физика, 2006. Т. 25. № 6. С. 54–62.
3. Schwer, D. A., P. Lu, and W. H. Green. 2003. An adaptive chemistry approach to modeling complex kinetics in reacting flows. *Combust. Flame* 133:451–65.
4. Liang, L., J. G. Stevens, and J. T. Farrell. 2009. A dynamic adaptive chemistry scheme for reactive flow computations. *Proc. Combust. Inst.* 32:527–34.
5. Pope, S. B. 1997. Computationally efficient implementation of combustion chemistry using *in situ* adaptive tabulation. *Combust. Theory Model.* 1:41–63.
6. Contino, F., H. Jeanmart, T. Lucchini, and G. D'Errico. 2011. Coupling of *in situ* adaptive tabulation and dynamic adaptive chemistry: An effective method for solving combustion in engine simulations. *Proc. Combust. Inst.* 33:3057–64.
7. OpenFOAM source code. <http://www.extend-project.de/>.