

МЕТОДЫ СОКРАЩЕНИЯ РАСЧЕТНОГО ВРЕМЕНИ ДЛЯ ЗАДАЧ ГОРЕНИЯ С ДЕТАЛЬНЫМИ МЕХАНИЗМАМИ ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ

С. Н. Медведев¹, В. А. Сметанюк¹, С. М. Фролов^{1,2},
И. О. Шамшин^{1,2}, Б. Басара³, П. Пришинг³, М. Суффа³

¹ИХФ РАН

г. Москва, Россия

²НИЯУ МИФИ

г. Москва, Россия

³АВЛ Лист

г. Грац, Австрия

Многомерное компьютерное моделирование стало неотъемлемой и основополагающей частью современных технологий проектирования транспортных двигателей. Новейшая тенденция в этом направлении — 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 большое значение приобретают математические методы ускорения кинетических расчетов в многомерных задачах.

Цель данной работы — разработка и применение методов ускорения кинетических расчетов. Представлены два наиболее перспективных метода: метод динамической табуляции (МДТ) [1, 2] и метод динамического сокращения (МДС) кинетических механизмов [2, 3].

Метод динамической табуляции

В основе МДТ лежит идея табуляции термохимических состояний системы, которые возникают в процессе вычислений, и получения новых термохимических состояний системы через линейную экстраполяцию табличных данных вместо вызова кинетического решателя (КР). Термохимическое состояние характеризуется составом смеси, температурой и давлением.

Вначале таблица параметров термохимических 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 (якобиан химической системы), 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

ние 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 проводится повторная сверка с таблицей. Здесь возможны два варианта: расширение доверительной области уже затабулированных термохимических состояний или внесение в таблицу нового термохимического состояния. В процессе заполнения таблицы доверительные области разных термохимических состояний могут пересекаться: в этом случае они объединяются и расширяются, т. е. таблица реорганизуется. С помощью МДТ удалось ускорить кинетические расчеты более чем в 1000 раз [1], причем эффект возрастает с увеличением объема расчетной сетки.

Авторами разработан собственный алгоритм МДТ, позволяющий существенно сократить затраты машинного времени на многомерные параметрические расчеты за счет запоминания и последующего многократного использования таблиц термохимических состояний при решении задач о рабочем процессе в поршневых двигателях. Алгоритм внедрен в вычислительную платформу AVL FIRE. Эффективность нового алгоритма демонстрируется ниже на примере расчета рабочего процесса в поршневом двигателе.

На рис. 1 показана расчетная сетка (~ 8200 ячеек) сектора поршневого двигателя с гомогенным зарядом и с зажиганием от сжатия (в иностранной литературе — “homogeneous charge compression ignition (HCCI) engine”). Нижняя граница на рис. 1 соответствует подвижному поршню с

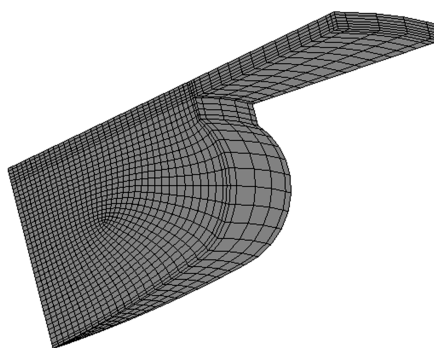


Рис. 1 Расчетная сетка

выемкой, верхняя — крышке цилиндра, а боковая — стенке цилиндра. Двигатель имеет следующие характеристики: радиус цилиндра — 43 мм, степень сжатия — 21, число оборотов — 1400 об/мин, коэффициент избытка горючего — 0,27, температура поршня — 458 К, температура крышки — 460 К, температура стенки цилиндра — 415 К. Начальные параметры системы: смесь в среднем покоится при $T = 333,5$ К и $P = 154$ кПа; кинетическая энергия турбулентности $8,84$ м²/с², ее диссипация — 1080 м²/с³.

Провели серию расчетов: один без применения МДТ, а другие — с применением МДТ при одинаковых условиях расчетов, но при разных значениях доверительного интервала ϵ . Цель расчетов — продемонстрировать эффективность МДТ.

Таблица 1 Время расчета одного рабочего цикла двигателя при разных настройках МДТ

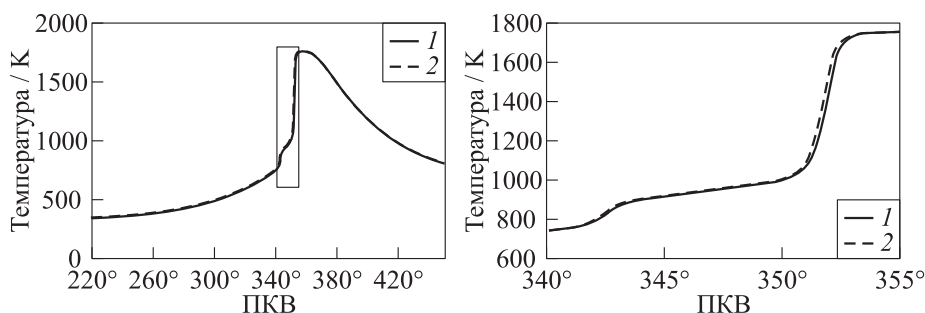
Расчет	Полное время расчета, τ_{Σ} , с	Время расчета кинетической задачи, τ_c , с	τ_c/τ_{Σ} , %
Без МДТ	11680	6839	59
МДТ ($\varepsilon = 10^{-6}$)	6775	1868	28
МДТ ($\varepsilon = 10^{-5}$)	5929	1029	17
МДТ ($\varepsilon = 10^{-4}$)	5438	567	10

Расчеты проводили с использованием относительно короткого кинетического механизма окисления н-гептана, содержащего 29 компонентов, участвующих в 52 реакциях, представленного в [4].

В табл. 1 представлены значения полного времени расчета одного рабочего цикла двигателя τ_{Σ} и суммарного времени кинетических расчетов τ_c без МДТ и с МДТ при разных значениях доверительного интервала ε (от 10^{-6} до 10^{-4}). Видно, что в данном примере, несмотря на использование относительно короткого кинетического механизма окисления горючего, с помощью МДТ удалось сократить суммарное время кинетических расчетов в 12 раз, тогда как полное время расчета уменьшилось немногим более, чем в 2 раза.

На рис. 2 показано сравнение расчетных зависимостей средней температуры в цилиндре двигателя от времени, полученных без применения МДТ (1) и с МДТ при $\varepsilon = 10^{-4}$ (2). Из рисунка следует, что применение МДТ практически не отражается на эволюции средней температуры.

Рисунок 3 показывает частоту использования табличных данных МДТ в зависимости от угла поворота коленчатого вала (ПКВ), причем 100% означает, что при каждом обращении к таблице из нее берется экстраполированное термодимическое состояние вместо вызова КР.

**Рис. 2** Расчетные зависимости средней температуры от угла ПКВ: 1 — без МДТ; 2 — с МДТ ($\varepsilon = 10^{-4}$)

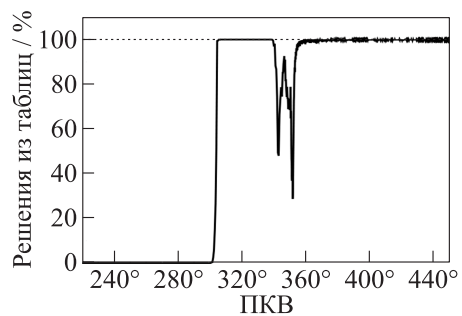


Рис. 3 Частота использования табличных данных при расчете с $\varepsilon = 10^{-4}$

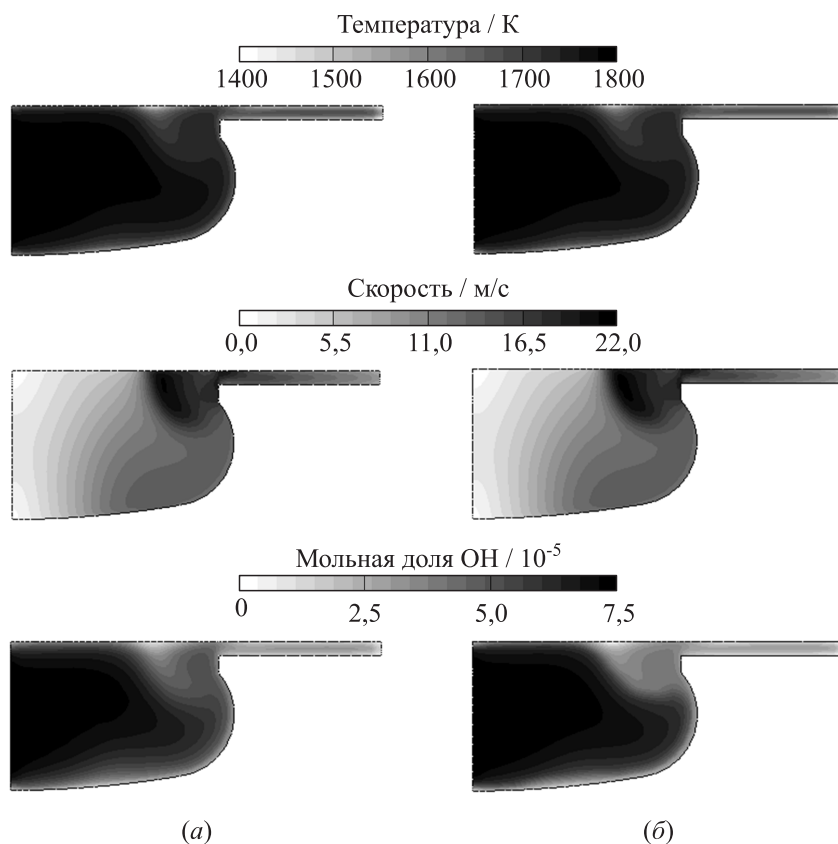


Рис. 4 Сравнение расчетных распределений температуры, скоростей и мольной доли ОН в цилиндре двигателя при угле ПКВ = 365°: (а) без МДТ; (б) с МДТ ($\varepsilon = 10^{-4}$)

Видно, что частота использования табличных данных сокращается в моменты холоднопламенного воспламенения (первый «провал» кривой) и горячего взрыва (второй «провал» кривой), т. е. в моменты ускорения реакции окисления, тогда как при относительно размеренном протекании реакции частота использования табличных данных увеличивается.

Представляет интерес проследить, как МДТ влияет на локальные характеристики течения в двигателе.

На рис. 4 приведены мгновенные распределения температуры, длины вектора скорости и мольной доли ОН в момент времени, соответствующий углу ПКВ 365° , полученные в расчете без МДТ (рис. 4, а) и с МДТ (рис. 4, б). Видно, что применение МДТ не оказывает заметного влияния на локальные характеристики течения.

Таким образом, применение МДТ позволяет существенно сократить время кинетических расчетов без какого-либо заметного ухудшения средних и локальных характеристик течения.

Метод динамического сокращения кинетических механизмов

В МДС для отбора наиболее важных химических компонентов при любом мгновенном термодинамическом состоянии используется метод ориентированных взвешенных графов. Отбор производится на основе анализа влияния того или иного вещества B на изменение скорости превращения некоторого реперного компонента, задаваемого в начале расчета. В качестве реперных компонентов выбираются один или несколько веществ, например исходное топливо или/и СО. Простое ранжирование графов производится по формуле для относительного изменения скорости реакции превращения компонента A при исключении компонента B из кинетического механизма:

$$r_{AB} = \sum_{i=1}^N \frac{|\vartheta_{Ai} w_i \delta_{Bi}|}{|\vartheta_{Ai} w_i|}, \quad (1)$$

где δ_{Bi} — дельта-функция:

$$\delta_{Bi} = \begin{cases} 1, & \text{если } B \text{ есть в } i\text{-реакции;} \\ 0, & \text{остальное;} \end{cases}$$

i — номер реакции ($i = 1, \dots, N_R$, N_R — полное количество реакций в ДКМ); ϑ_{Ai} — стехиометрический коэффициент вещества A в i -й реакции; w_i — скорость i -й реакции.

Задавшись некоторым максимально допустимым относительным отклонением скорости реакции ε , по критерию $r_{AB} < \varepsilon$ часть веществ можно исключить из исходного кинетического механизма и построить для любого

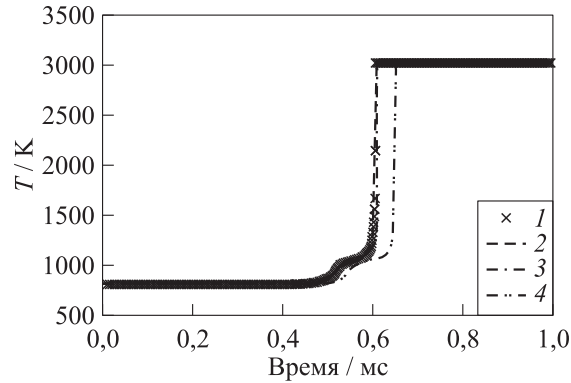


Рис. 5 Расчетные температурные кривые в гомогенном реакторе при использовании полного ДКМ (стандартный случай (1)) и сокращенных кинетических механизмов (МДС) с допустимым относительным отклонением скорости реакции $\varepsilon = 10^{-4}$ (2), 10^{-3} (3) и 10^{-2} (4)

термохимического состояния сокращенный механизм реакций с меньшим количеством компонентов. Такой алгоритм разработан и внедрен в вычислительную платформу AVL FIRE. Для повышения эффективности МДС дополнительно разработан и внедрен предложенный в [3] алгоритм «R-value», т. е. кроме «связей» A и B , описываемых уравнением (1), учитываются «связи» A и B через произведения типа $R_{AB} = r_{Ai}r_{ij} \cdots r_{nB}$.

Для иллюстрации работы МДС решили задачу о самовоспламенении стехиометрической n -гептановоздушной смеси в гомогенном реакторе при начальной температуре $T = 800$ К и начальном давлении $P = 50$ атм. Для описания кинетики самовоспламенения использовали ДКМ, содержащий 654 компонента и 2827 элементарных реакций [5].

На рис. 5 приведено сравнение результатов расчетов с разными значениями ε в виде температурных кривых. Видно, что при $\varepsilon = 10^{-4}$ и 10^{-3} температурные кривые, полученные с использованием МДС, практически не отличаются друг от друга и от расчета без использования МДС, т. е. по полному ДКМ. При $\varepsilon = 10^{-2}$ время задержки горячего взрыва (резкий подъем температуры до ~ 3000 К) увеличивается лишь на 8% по сравнению со значением, полученным при использовании полного ДКМ.

В табл. 2 представлены значения расчетных времен для задач с использованием и без использования МДС. Видно, что с увеличением ε время расчета уменьшается.

Таким образом, разработаны алгоритмы МДТ и МДС, позволяющие существенно сократить затраты машинного времени на многомерные газодинамические расчеты. Метод МДТ основан на табуляции термохимических состояний системы, которые возникают в процессе вычислений, и получения

Таблица 2 Время расчета самовоспламенения н-гептановоздушной смеси в гомогенном реакторе при разных настройках МДС

Расчет	Полное время расчета, τ_{Σ} , с	Время расчета кинетической задачи, τ_c , с	τ_c/τ_{Σ} , %
Стандартный	2037	1496	73,4
МДС ($\varepsilon = 10^{-4}$)	881	325	37
МДС ($\varepsilon = 10^{-3}$)	819	263	32
МДС ($\varepsilon = 10^{-2}$)	501	76	15
Ускорение ($\varepsilon = 10^{-4}$)	2,31	4,60	
Ускорение ($\varepsilon = 10^{-3}$)	2,49	5,69	
Ускорение ($\varepsilon = 10^{-2}$)	4,07	19,74	

новых термохимических состояний системы через линейную экстраполяцию табличных данных (вместо вызова КР). Эффективность метода продемонстрирована на примере расчета рабочего процесса в поршневом двигателе с гомогенным зарядом и с зажиганием от сжатия с использованием ДКМ окисления горючего, содержащего 29 компонентов и 52 реакции. С помощью МДТ удалось сократить суммарное время кинетических расчетов в 12 раз при сохранении средних и локальных характеристик течения. Алгоритм МДС основан на сокращении кинетических механизмов на каждом кинетическом шаге. На примере задачи гомогенного реактора МДС показал почти 20-кратное ускорение кинетического расчета.

Работа выполнена при частичной поддержке Российской академии наук (Программа Президиума РАН №26 «Горение и взрыв»).

Литература

1. Pope, S. B. 1997. Computationally efficient implementation of combustion chemistry using *in situ* adaptive tabulation. *Combust. Theory Modeling* 1:41–63.
2. Медведев С. Н., Сметанюк В. А., Фролов С. М., Шамшин И. О. Методы ускорения многомерных газодинамических расчетов с детальными кинетическими механизмами окисления и горения моторных топлив // Горение и взрыв / Под общ. ред. С. М. Фролова. — М.: ТОРУС ПРЕСС, 2013. №6. С. 45–50.
3. Liang, L., J. G. Stevens, and J. T. Farrell. 2009. A dynamic adaptive chemistry scheme for reactive flow computations. *Proc. Combust. Inst.* 32:527–534.
4. Patel, A., S. Kong, and R. Reitz. 2004. Development and validation of a reduced reaction mechanism for HCCI engine simulations. SAE Technical Paper No. 2004-01-0558.
5. Mehl, M., W. J. Pitz, C. K. Westbrook, and H. J. Curran. 2011. Kinetic modeling of gasoline surrogate components and mixtures under engine conditions. *Proc. Combust. Inst.* 33:193–200.