

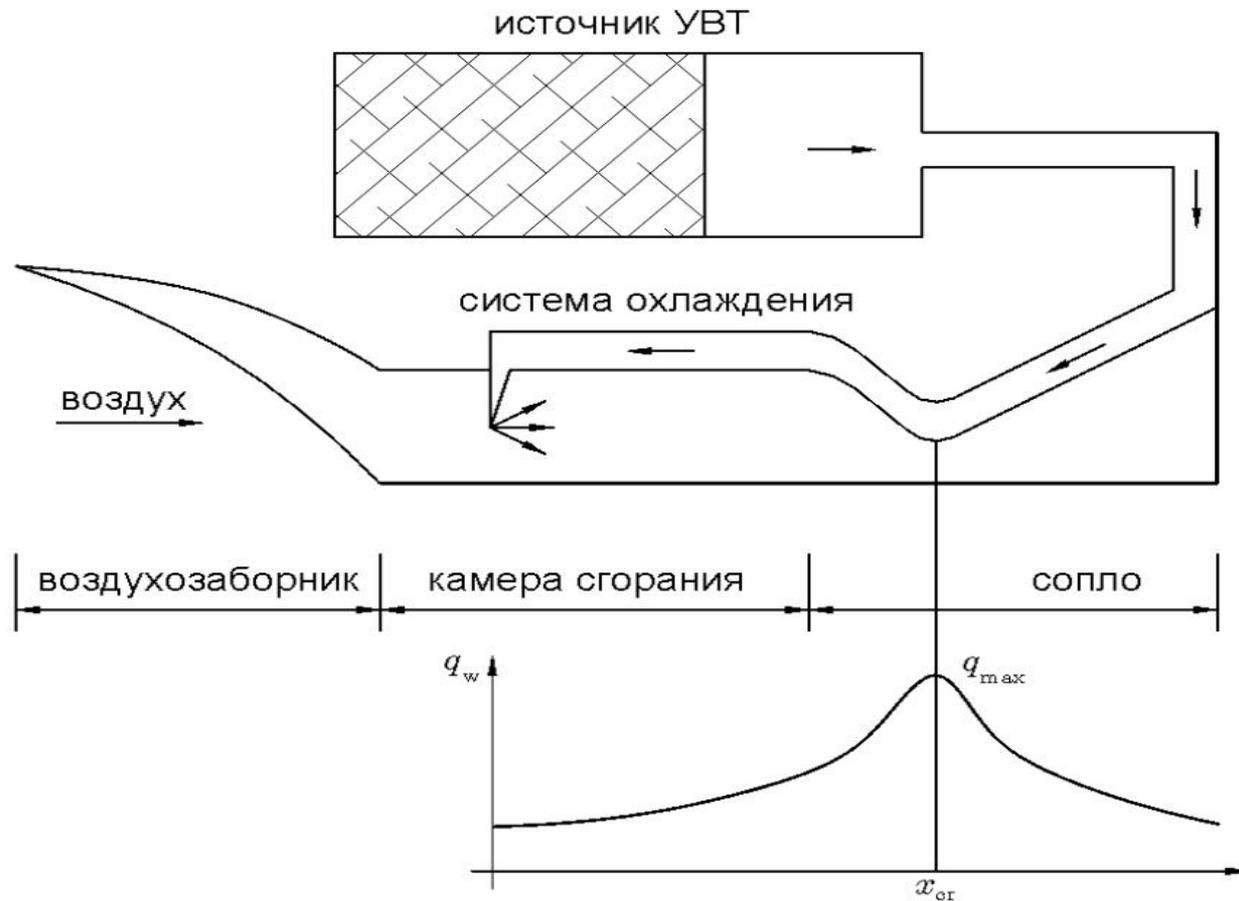
Computer Simulation of Endothermic Decomposition of High-energy Substances $C_xH_yN_mO_n$. Substance Composition Optimization.

Volokhov Vadim, Volokhov A.V., Varlamov D.A., Amosova E.S.,
Zyubina T.S., Toktaliev P.D., Martynenko S.I.

*Institute of Problems of Chemical Physics,
Russian Academy of Sciences, Chernogolovka, Russia, vvm@icp.ac.ru*



Схема ПВРД с системой охлаждения камеры сгорания за счет эндотермического эффекта



Верхняя панель камеры сгорания охлаждается за счет эндотермических (с поглощением тепла) реакций в потоке газовой смеси

Формулировка проблемы

- **Разработка методики оптимизации состава топлива, отвечающего основным требованиям:**
 - создание максимальной тяги
 - эффективное охлаждение камеры сгорания

Задачи, решаемые в рамках проблемы

1. Разработка кинетической схемы химических реакций в потоке реагирующей газовой смеси: редукция схемы химических реакций
2. Решение задачи турбулентного течения газовой смеси с химическими реакциями в системе охлаждения
3. Оптимизация состава топлива по двум критериям: 1) максимальная тяга, 2) неразрушение конструкции

Использованные вычислительные ресурсы

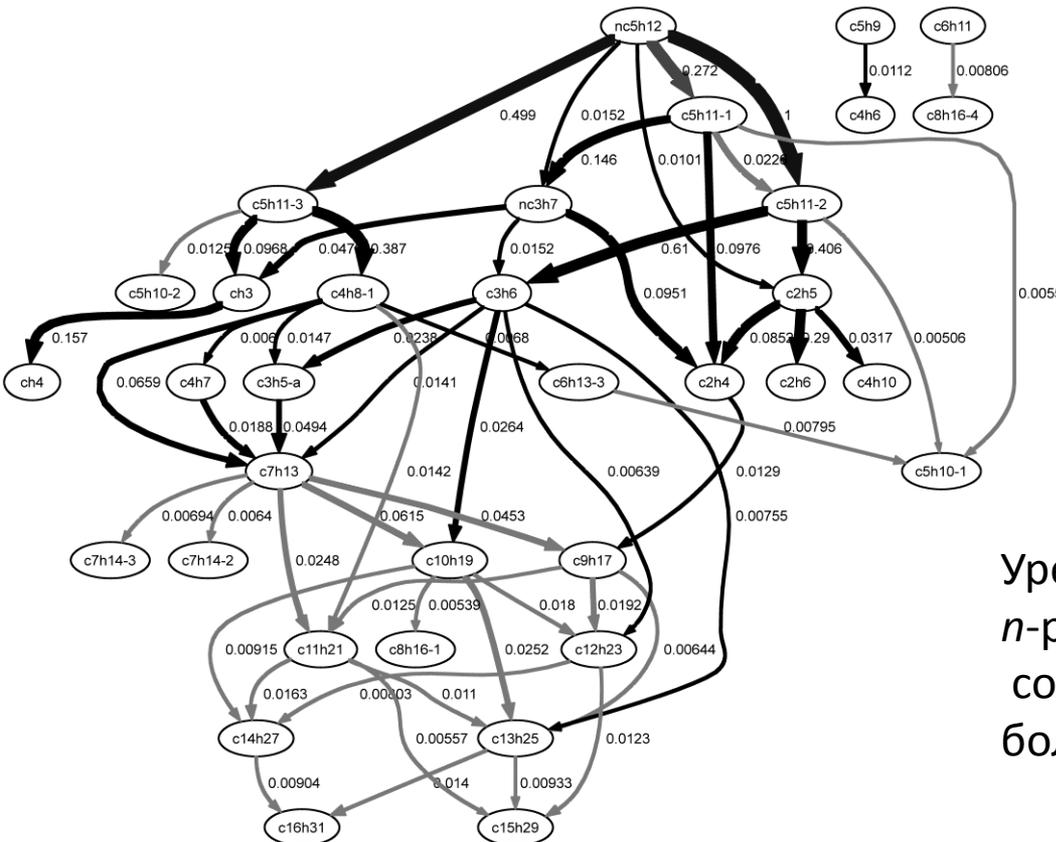
Вычислительный ресурс	Процессоры/Число ядер/GPU	Использованные ресурсы
Ломоносов-2	Intel Xeon® E5-2697 v3@2.60GHz, 14 ядер, 64 Гб; Tesla K40s	до 128 ядер, 64 Гб на узел
МВС-100 ИПХФ РАН	Intel Xeon® 5450 5670@ 3 ГГц, 4-6 ядер, 8 и 12 Гб RAM	до 352 CPU, 1408 ядер, 12 Гб на узел
РСК-Торнадо - 1,2,3	Intel Xeon® Gold	до 48 ядер, 192 Gb
Саров,		До 2000 ядер
Workstation Godwin, ИЭМ РАН	Intel Xeon® E5-2690v3, 2.6Ghz, 2x12 ядер, RAM 256 Гб, SSD	До 24 ядер, 248 Гб

Статистика использования ресурсов

1. «Ломоносов-2» – примерно 50 % экспериментов в рамках проекта «Enthalpy-2065», затраты (на 08.2019) около 175000 ядро-часов, квантовая химия
2. Кластер ИПХФ (MBC-100) – примерно 30 % газодинамика, расчеты кинетических схем
3. Рабочие станции ИПХФ и ИЭМ РАН – 12-15%
4. РСК (разные очереди) – 5-7 %
5. Саров – более 10^7 ядро-часов

Разработка кинетической схемы химических реакций в потоке реагирующей газовой смеси. Редукция схемы химических реакций

	$C_{16}H_{34}$	$C_{14}H_{30}$	$C_{12}H_{26}$	$C_{10}H_{22}$
Кол-во реакций	8130	6449	5030	3878
Кол-во веществ	2116	1668	1282	940



Scale = 31
Reaction path diagram following C

$$\frac{dX_i}{dt} = F_i, i = 1..M; \quad F_i = \sum_{j=1}^N S_{ij} W_j;$$

$$W_j = P_j * \prod_{i=1}^M (X_i)^{\delta_{ij}^+} - Q_j * \prod_{i=1}^M (X_i)^{\delta_{ij}^-};$$

$$P_j = P_j^O * \exp\left(-\frac{E_j^P}{RT}\right), \quad Q_j = Q_j^O * \exp\left(-\frac{E_j^Q}{RT}\right)$$

S_{ij} – стехиометрическая матрица

Урезанная на 90% схема разложения n -pentane $CH_3(CH_2)_3CH_3$. Полная схема состоит из более чем 8000 реакций более 2000 компонент.

Метод редуцирования схемы химических реакций

$$r_{AB} \equiv \frac{\sum_{i=1,I} |v_{A,i} \omega_i \delta_{Bi}|}{\sum_{i=1,I} |v_{A,i} \omega_i|}$$

Directed Relation Graph – метод редуцирования детального реакционного <https://doi.org/10.1016/j.proci.2004.08.145>

r_{AB} коэффициент связи между веществами A и B: если $r_{AB} \ll 1$, реакцией можно пренебречь;

ω_i – скорость i -й реакции; v_{Ai} – стехиометрический коэффициент вещества A в i -й реакции;

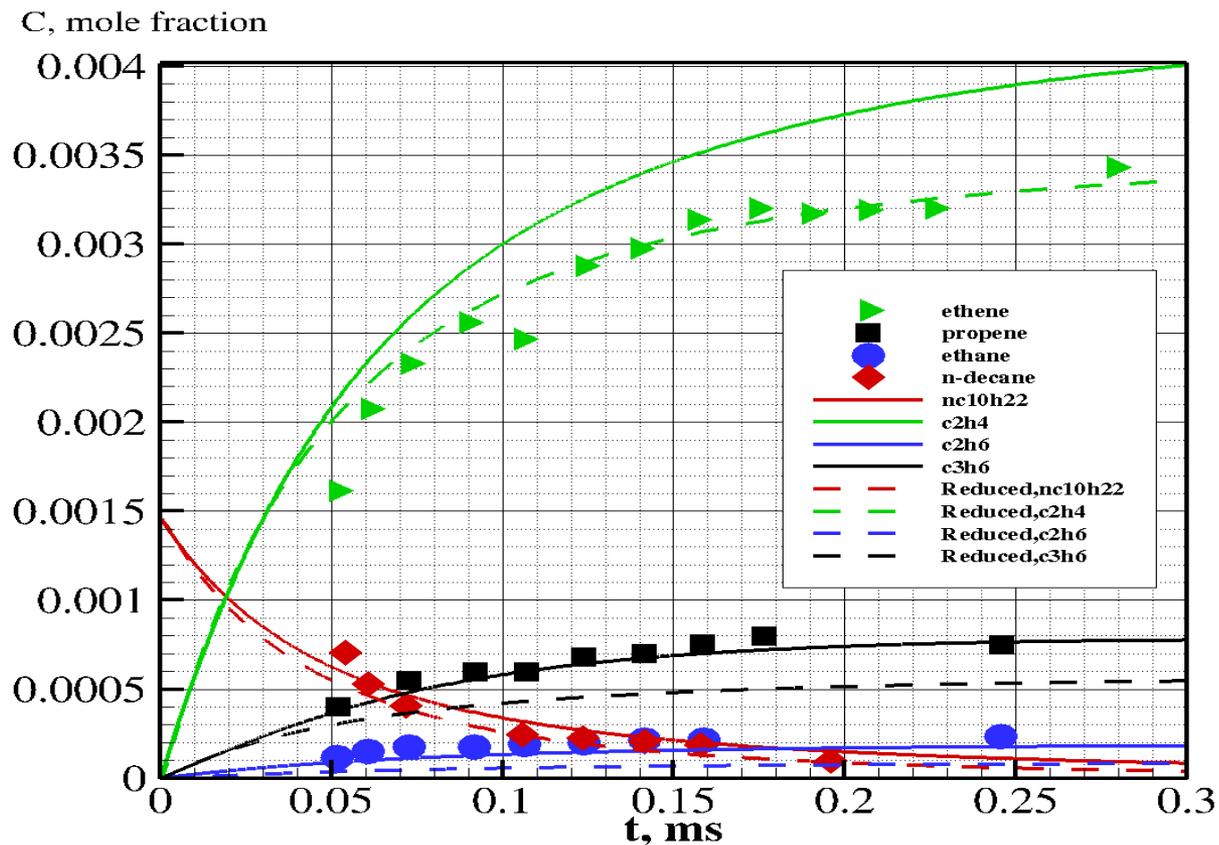
Для количественной оценки зависимости A от B определяется небольшое пороговое значение ϵ такое, что при $r_{AB} < \epsilon$, зависимость можно считать незначительной, и нет никакой связи между A и B. Таким образом, процедура DRG может быть построена по следующим правилам:

Каждый узел в DRG однозначно сопоставлен веществу в подробном механизме.

Направленное ребро из A в B существует тогда и только тогда, когда $r_{AB} \geq \epsilon$.

! Эта процедура делается вдоль течения смеси с шагом по температуре 10 K

Верификация механизма редуцирования



P.D. Toktaliev, I.O. Galitskiy, S.I. Martynenko, A.V. Volokhov, E.S. Amosova, V.M. Volokhov, and L.S. Yanovskiy
On the numerical simulation of thermal decomposition of hydrocarbon mixtures in channels of cooling
systems of high-speed vehicles. Optimization of the fuel composition // Thermophysics and Aeromechanics,
2019, V.26, N.1., PP.89-101 DOI: 10.1134/S0869864319010098 Jan 2019

Решение задачи турбулентного течения газовой смеси с химическими реакциями в системе охлаждения

Система стационарных уравнений неразрывности компонент, их импульса и энергии в плоском приближении:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i Y_k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j Y_k) = -\frac{\partial J_k}{\partial x_i} + S_k, \quad i = 1, 2, k = 1..N,$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(\mu + \mu_t) \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \right], \quad i, j = 1, 2,$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(u_i(\rho E + p)) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\lambda_m + \frac{c_{p,m} \mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial T}{\partial x_j} - \sum_{j=1}^N h_j J_j + u_i (\tau_{ij})_{eff} \right] - \sum_{j=1}^N \frac{h_j}{M_j} S_j, \quad i = 1, 2,$$

S_k – источник вещества из химических реакций – параметры турбулентности – обобщенная модель диссипации вихря. Химические реакции происходят в «мелкомасштабных» структурах - $\xi^* = C_\xi \left(\frac{\nu \varepsilon}{k^2} \right)^{0.75}$ как в «реакторе идеального смешения»
 K – кинетическая энергия турбулентных пульсаций, $Pr=0.8$ число Прандтля
 $(\tau_{ij})_{eff}$ – тензор вязких напряжений

В стенке системы охлаждения:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left[\lambda_s \frac{\partial T}{\partial x_j} \right] = 0$$

Солвер reacting Foam из OpenFoam v.2.3

Кинетическая задача - Cantera

Оптимизация состава топлива:

максимальная тяга + достаточное охлаждение камеры сгорания

$$\min_Y \left\{ \overline{T_{out}}(Y), \sup_X I^{-1}(X, Y) \right\},$$

$$Y \in S_1, X \in S_2,$$

Y – вектор массовых концентраций компонент смеси на входе в СО,

S_1 – множество допустимых значений для массовых концентраций на входе в СО,

$\overline{T_{out}}(Y)$ – первая целевая функция, средняя температура смеси на выходе из СО,

X – вектор состоит из режимных и геометрических характеристик системы охлаждения и камеры сгорания.

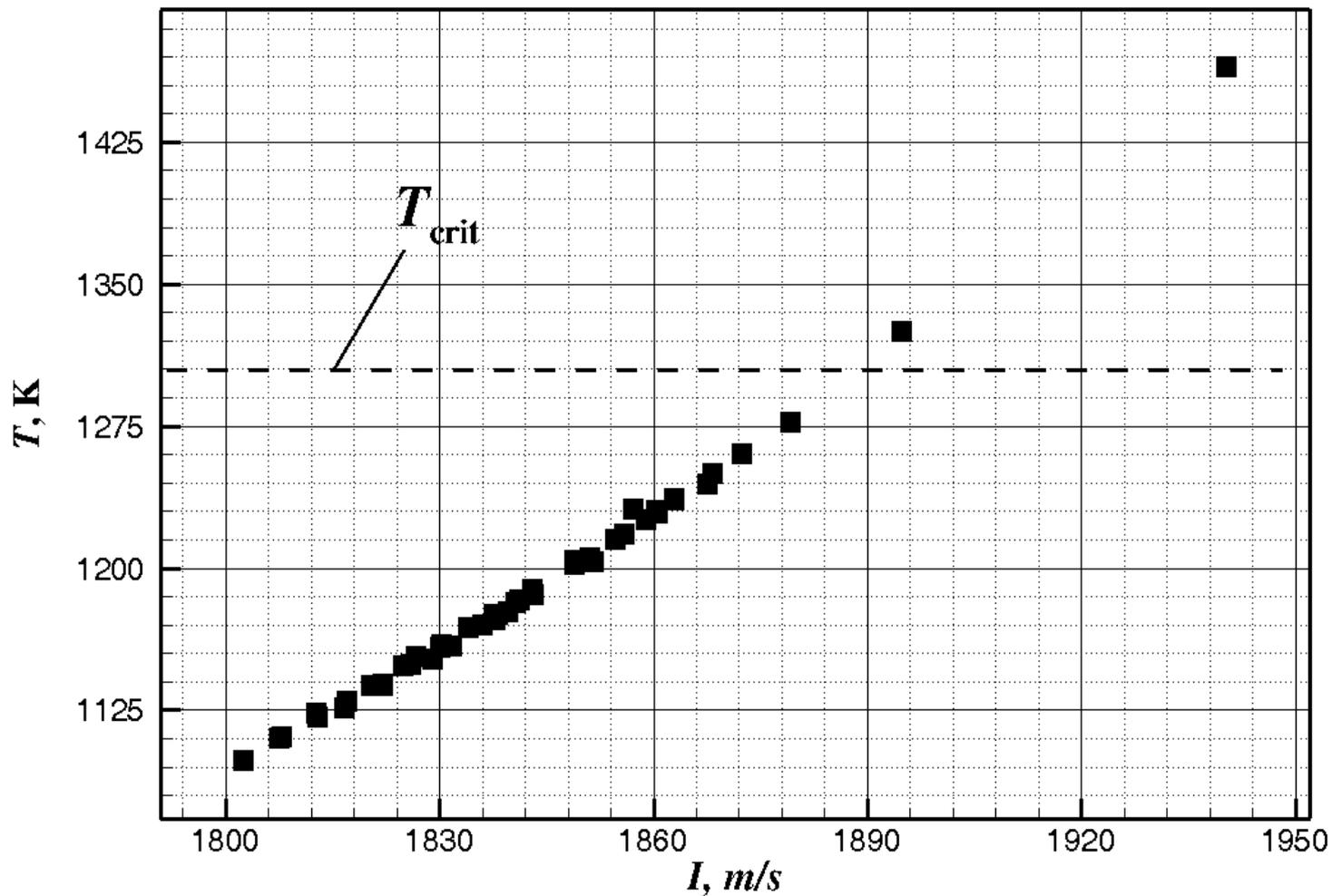
$\sup_X I^{-1}(X, Y) = H_2(Y)$ – вторая целевая функция = верхний предел удельного импульса, потенциально достижимый в рассматриваемой системе СО и КС .

Ищем такие решения задачи Y^* , для которых выполняется:

$$H_i(Y^*) \leq H_i(Y), i = 1, 2, Y \in S_1,$$

будем называть такие решения оптимальными по Парето.

Результаты оптимизации состава смеси алканов C=8 ряд метан – октан



Результаты

1. Разработана система оптимизации состава топлива для достижения максимальной тяги при ограничении температуры КС и СО и получены оптимальные составы топлива в широком диапазоне температур СО.
2. Разработана методика редукции детальной кинетической схемы эндотермических реакций в системе охлаждения ПВРД, что уменьшает время расчетов в 10-100 раз.
3. Показано, что эндотермический эффект наиболее значителен для ряда веществ с карбоновым числом $C=4,5$.

Спасибо за внимание !