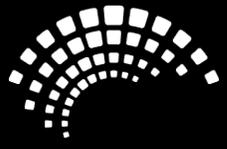




# Оптимизация моделирования процессов горения методом табличной аппроксимации решений уравнений химической кинетики



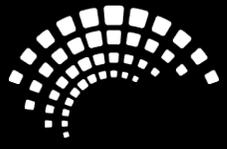
**Введенский П.П., Михальченко Е.В.,  
Яковенко И.С.**



# Общие сведения



- Для повышения эффективности решения системы дифференциальных уравнений процессов химических превращений используется метод табличной аппроксимации.
- Табличная аппроксимация строится на основе расчетов стабилизации одномерных волн горения.
- Результаты расчётов одномерных волн горения используются для создания массива данных о распределении параметров среды на масштабах фронта пламени зависимостей скоростей химических превращений в зависимости от состояния среды



# Математическая модель



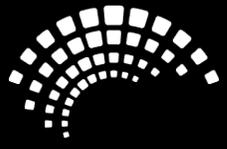
$$\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_i Y_k)}{\partial x_i} = \frac{\partial(\rho Y_k V_{k,j})}{\partial x_i} + \rho \dot{\omega}_k$$

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} - \vec{v} \times \vec{\omega} + \text{grad } H - \tilde{p} \text{ grad} \left( \frac{1}{\rho} \right) = \left( \frac{1}{\rho} \right) \text{grad } \sigma$$

$$\frac{\partial \rho h_s}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i h_s}{\partial x_i} = \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} - \sum_{k=1}^{N_c} \dot{\omega}_k \Delta h_{f,k}^0 - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho \sum_{k=1}^{N_c} h_{s,k} Y_k V_{k,i} \right) - \left( \kappa(T) \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \sigma_{ij} \cdot \frac{\partial v_i}{\partial x_i}$$

$$\bar{p} = \rho R T \sum_{k=1}^{N_c} \frac{Y_k}{M_k} \quad dh_s = c_p(Y_k, T) dT \quad \sigma_{ij} = \mu(T) \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right)$$

$$H = \frac{|v|^2}{2} + \frac{p}{\rho} \quad \vec{\omega} = \frac{1}{2} \text{rot } \vec{v}$$



# Химическая кинетика



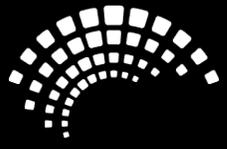
Изменение массы компонента  $k$  в ходе химических превращений:

$$\dot{\omega}_k = \sum_{r=1}^{N_R} (k_{rf}(T) (v_{rk}^{(p)} - v_{rk}^{(r)}) \prod_{s=1}^{N_c} X_s^{V_{rs}^{(r)}} + k_{rb}(T) (v_{rk}^{(r)} - v_{rk}^{(p)}) \prod_{s=1}^{N_c} X_s^{V_{rs}^{(p)}})$$

Уравнение Аррениуса:

$$k_r(T) = A_r T^{\beta_r} e^{-\frac{E_r}{RT}}$$

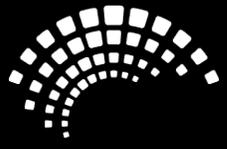
Химический механизм: 19 реакций для 8 компонент



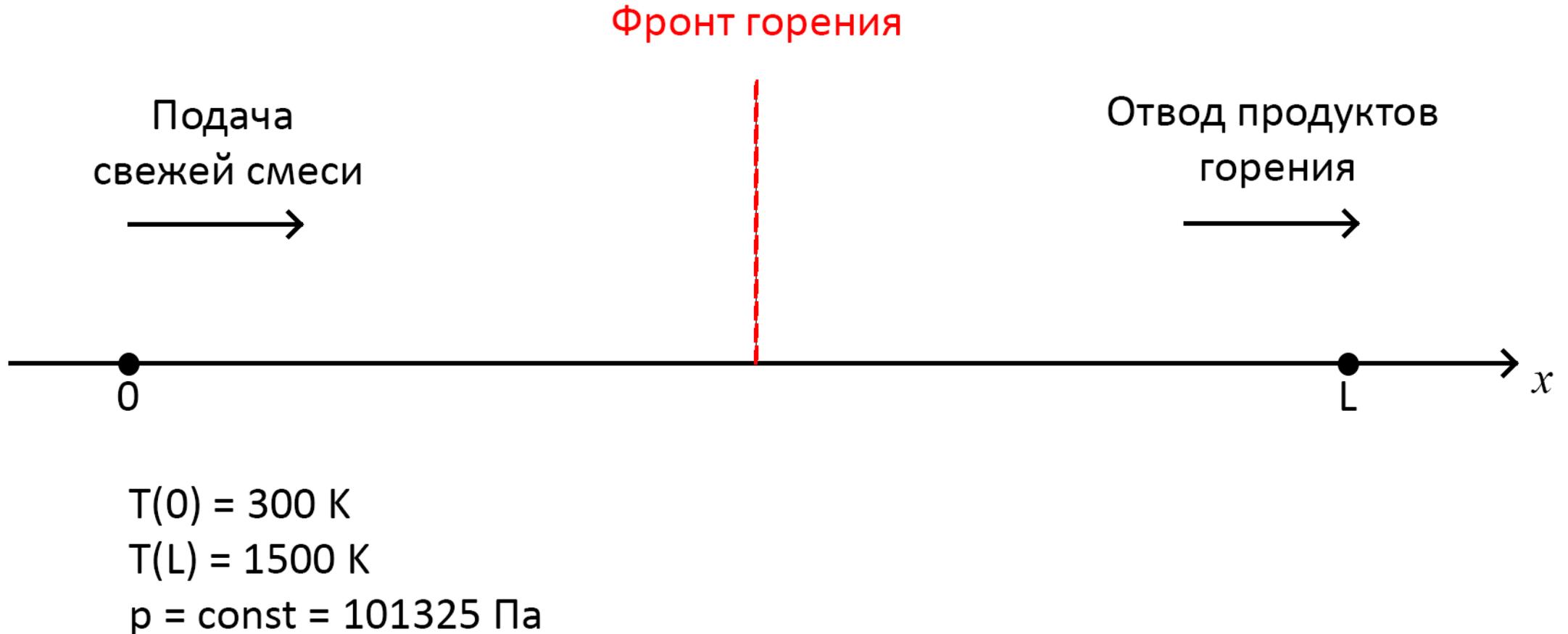
# Вычислительный аппарат

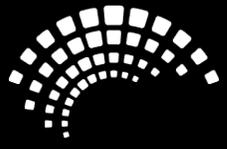


- Решение системы уравнений сохранения проводилось с использованием программного комплекса NRG.
- Уравнение Пуассона решается геометрическим многосеточным методом
- Численное решение системы ОДУ – реализация метода Гира в библиотеке slates.
- Размер ячейки – 50 мкм.



# Постановка задачи

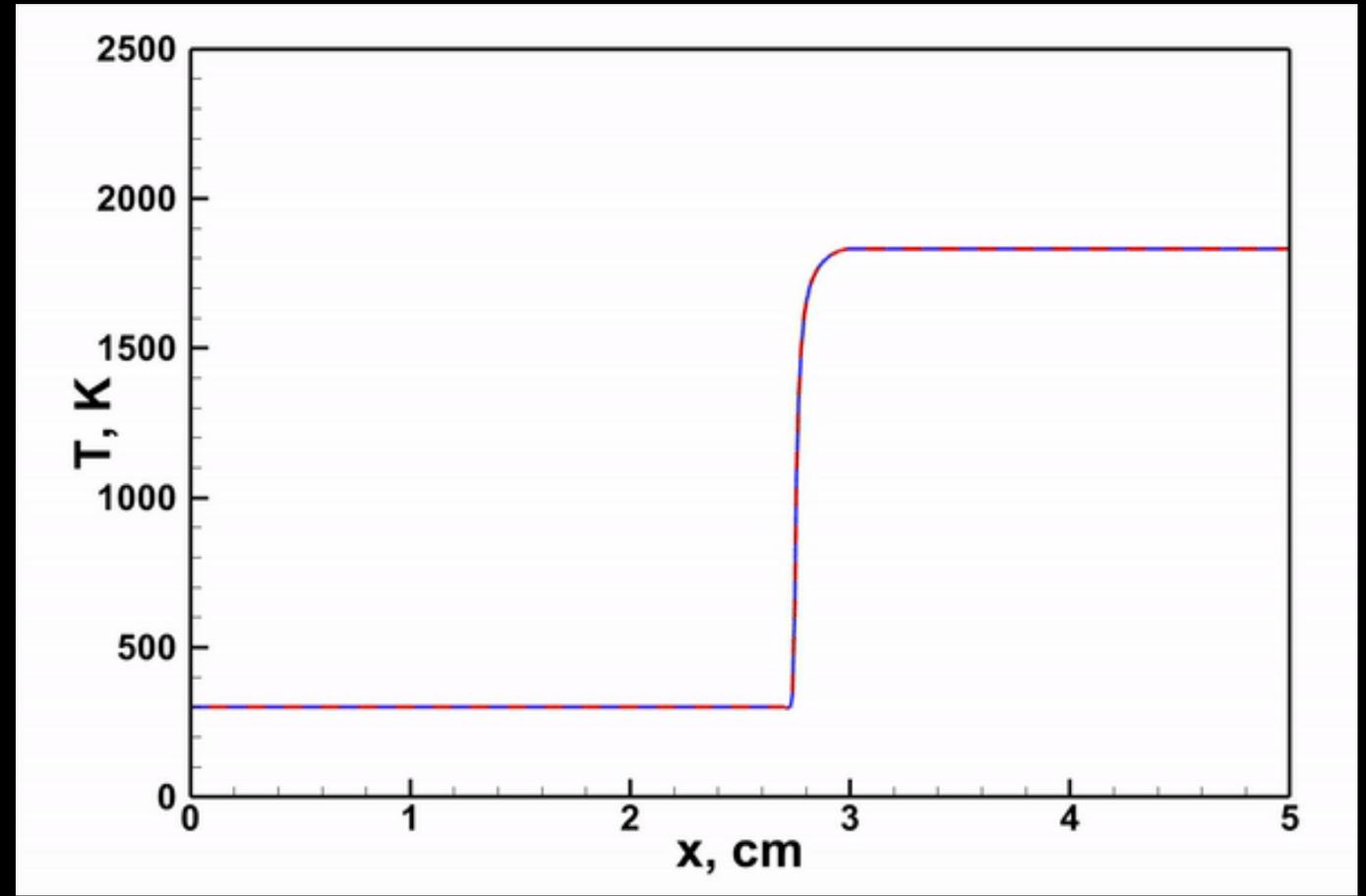
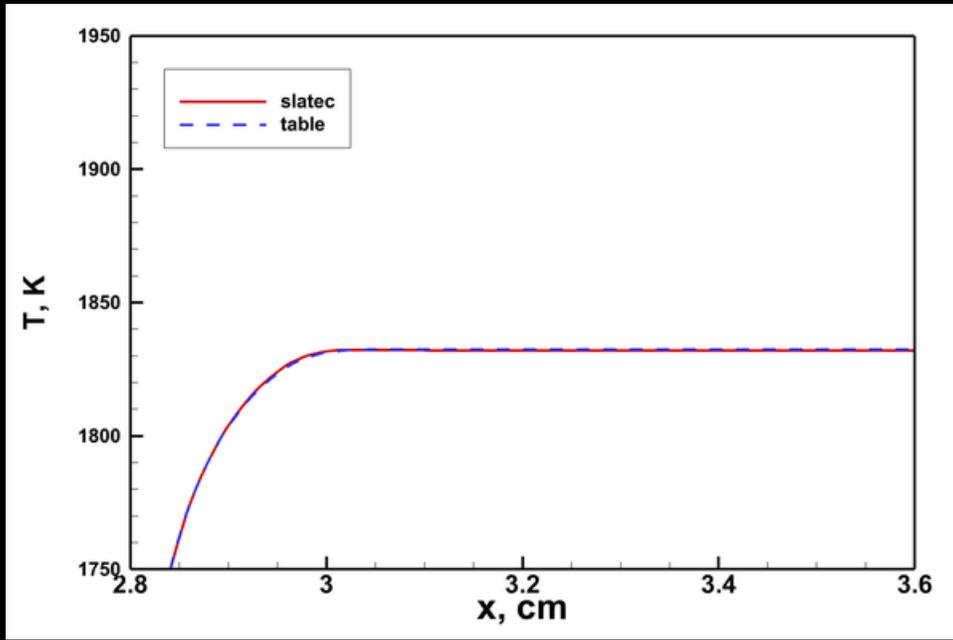


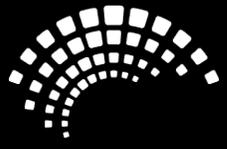


# Сравнение температур



Концентрация  $\text{H}_2$   
в смеси – 20%

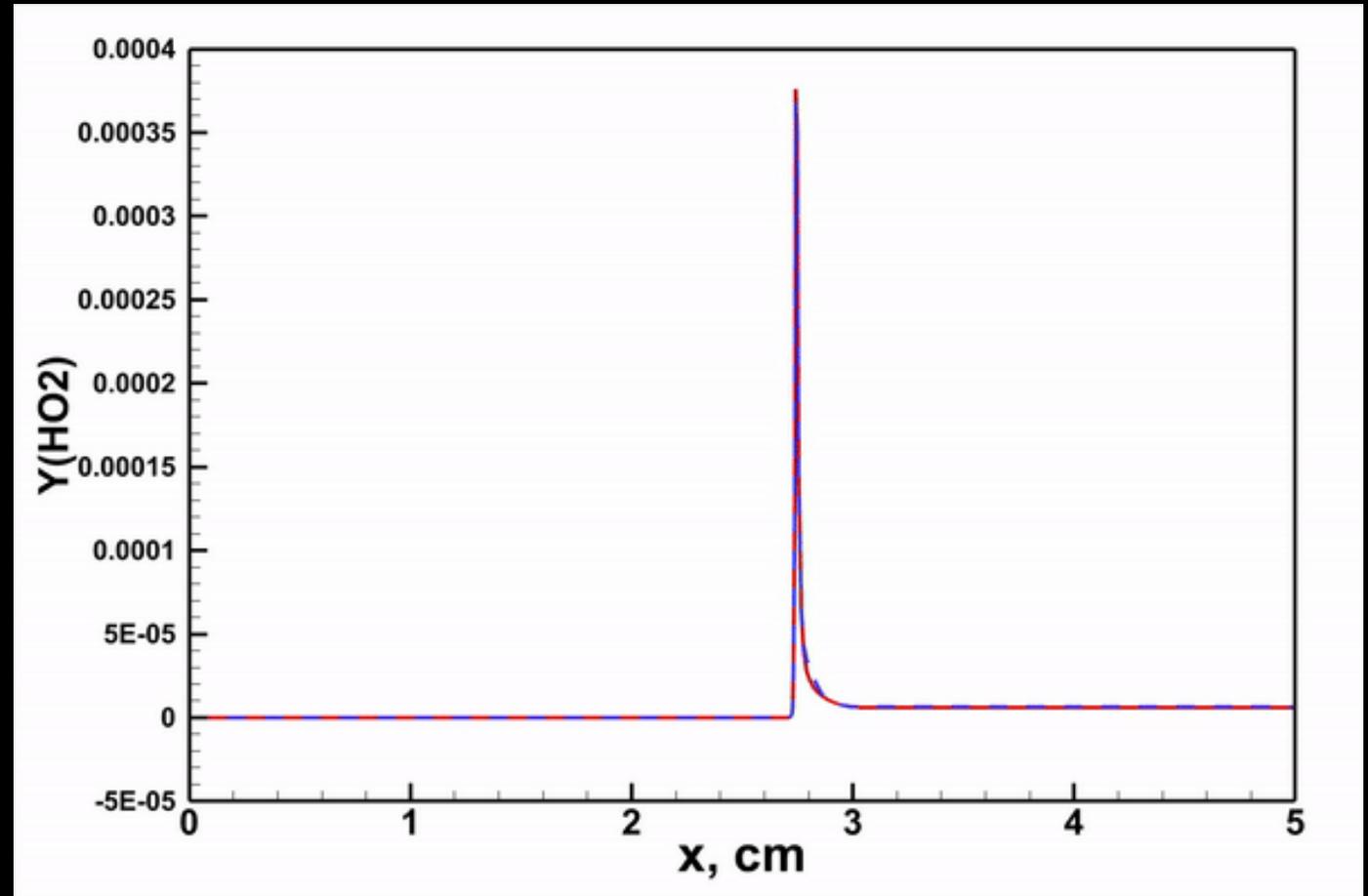
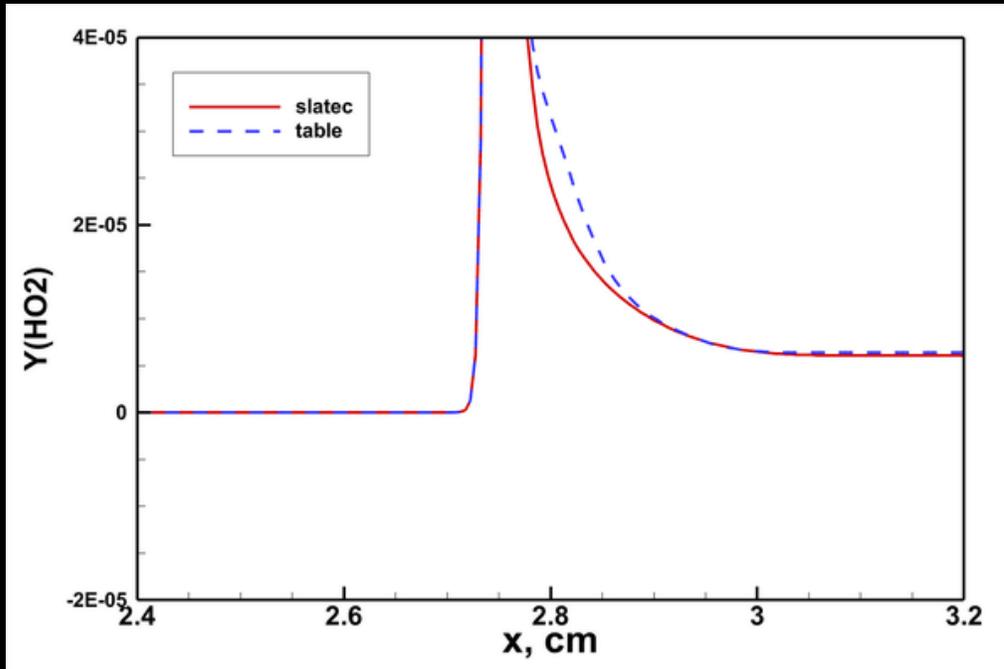


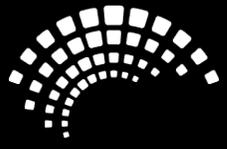


# Сравнение концентрации -ОН



Концентрация  $\text{H}_2$   
в смеси – 20%

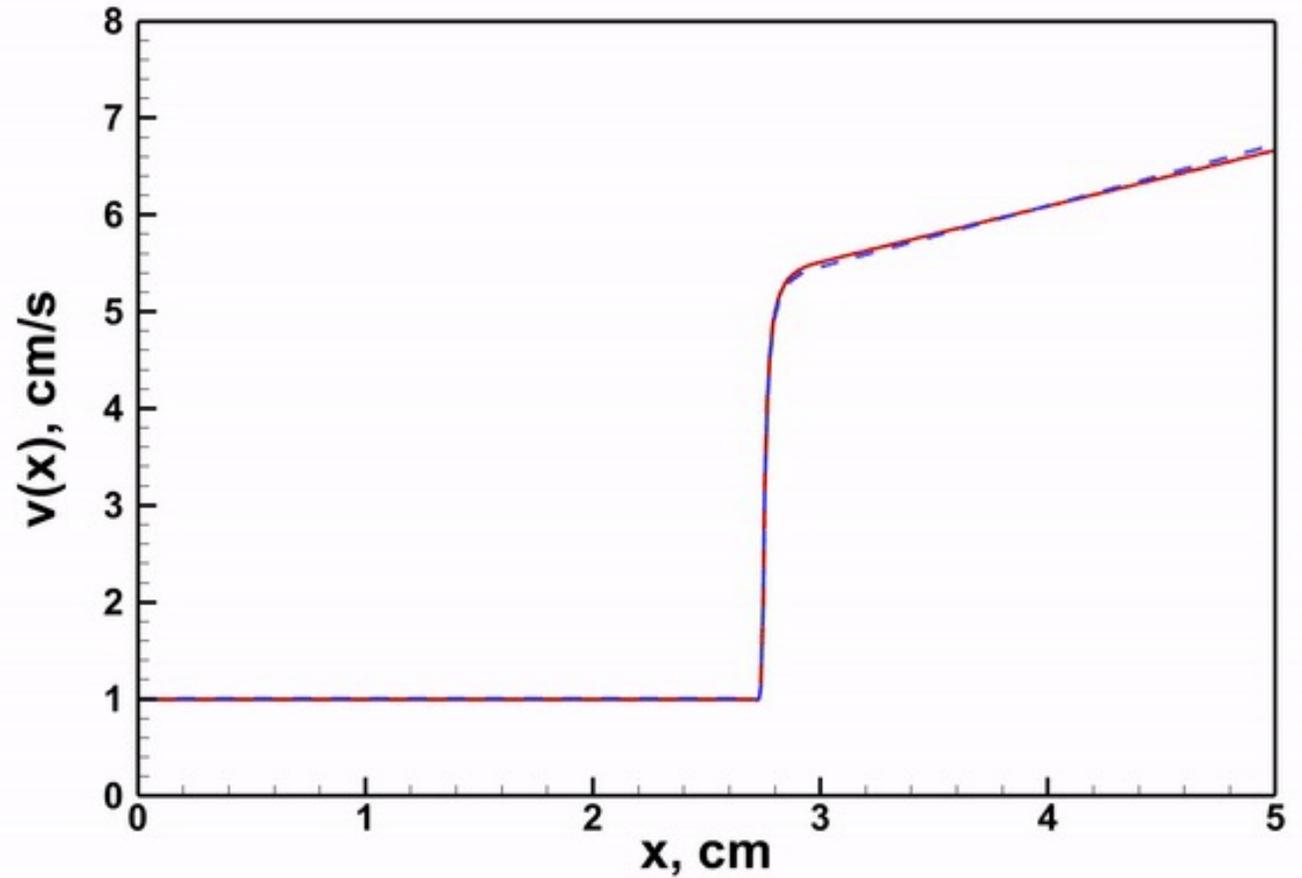
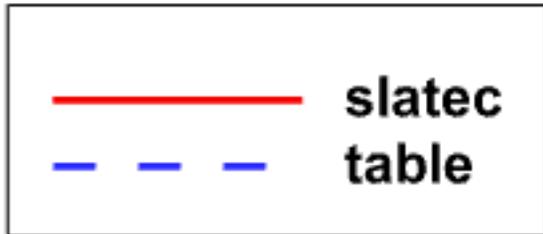


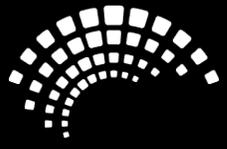


# Сравнение скорости



Концентрация  $\text{H}_2$   
в смеси – 20%





# Перспектива решения 2D задачи

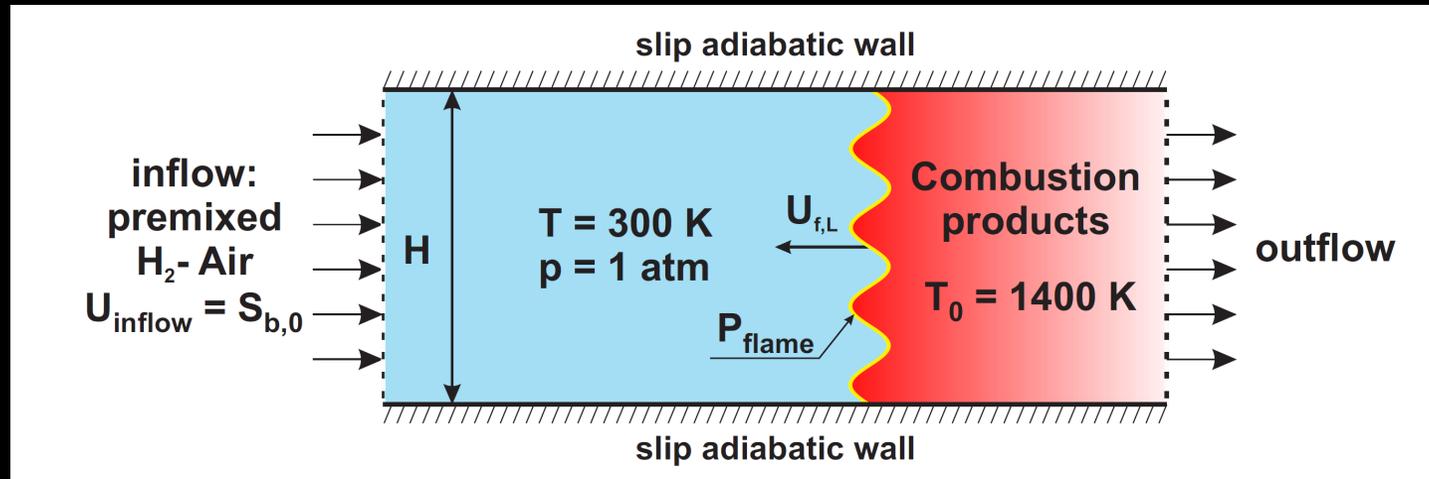


Рис. 1. Физическая постановка задачи

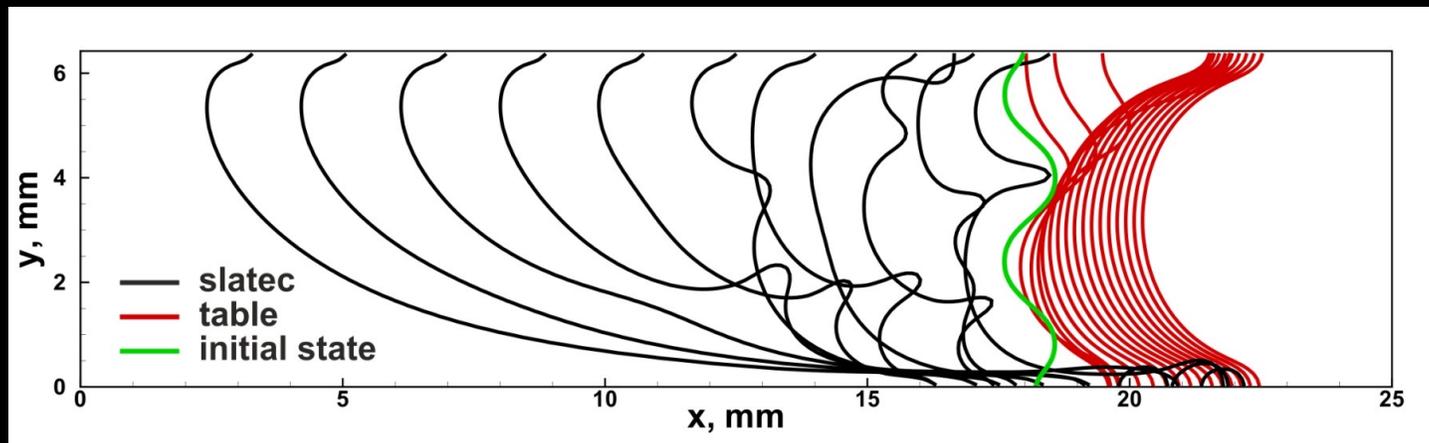
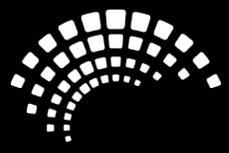


Рис. 2. Сравнение результатов расчёта температуры



# Расчёты горения в двумерном канале

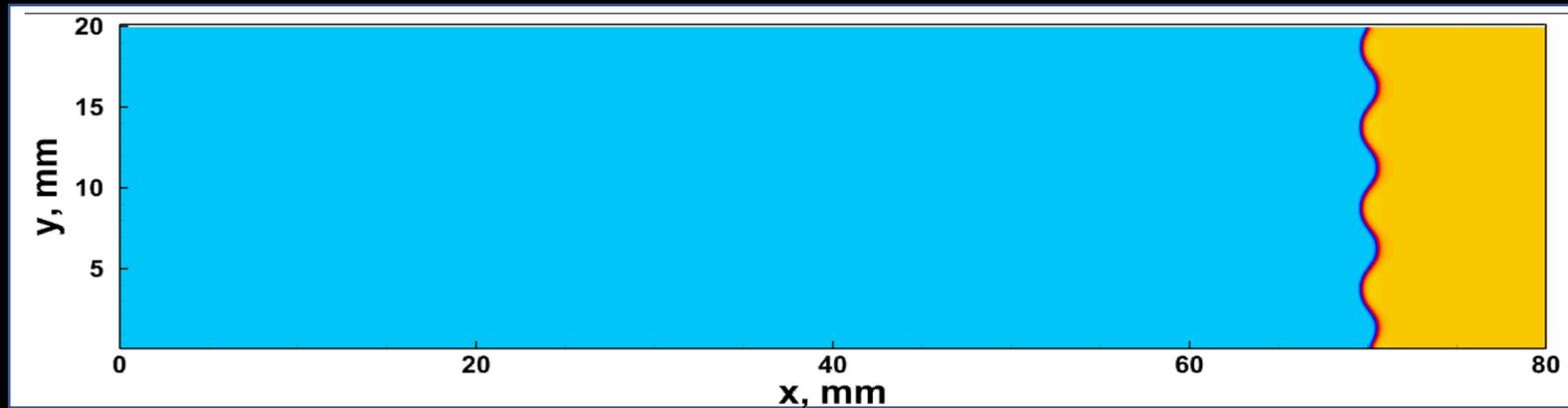


Рис. 3. Расчёт температуры среды. Концентрация  $\text{H}_2$  – 15%

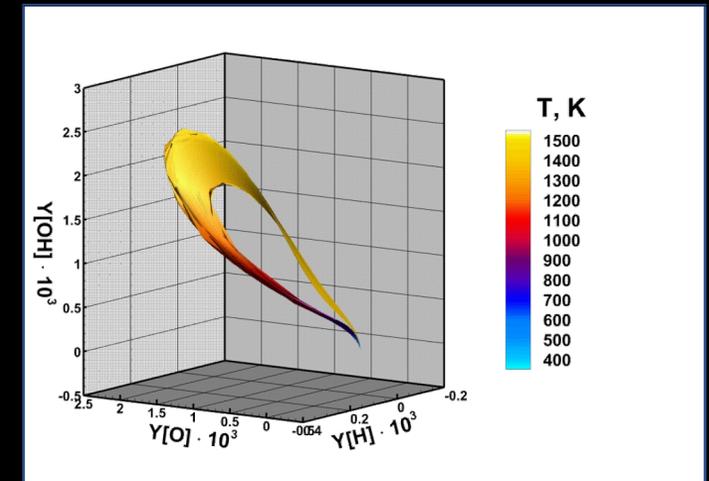
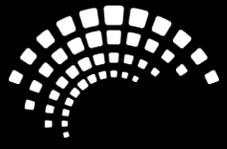


Рис. 4. Пространство состояний концентраций радикалов



# Вывод



- Проведена серия расчетов процесса распространения пламени как для прямого подхода к решению системы уравнений химической кинетики, так и для метода табличной аппроксимации.
- Проведено сравнение параметров среды при прямом решении и при аппроксимированном
- Показано, что использование таблиц без значительной потери точности позволяет в 2 раза повысить эффективность расчётов распространения волн горения в одномерной камере сгорания.



Спасибо за внимание!