

УДК 536.46

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ДИНАМИЧЕСКОЙ ТАБУЛЯЦИИ ПРИ РЕШЕНИИ ЗАДАЧ ГОРЕНИЯ С ДЕТАЛЬНЫМИ МЕХАНИЗМАМИ ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ**С. Н. Медведев, В. А. Сметанюк, С. М. Фролов, И. О. Шамшин**Институт химической физики им. Н.Н. Семенова
Российской академии наук, Москва, Россия

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. Цель данной работы – разработка и применение одного из методов ускорения кинетических расчетов – метода динамической табуляции кинетических механизмов по ходу вычислений.

Введение

Многомерное компьютерное моделирование стало неотъемлемой и основополагающей частью современных технологий проектирования транспортных двигателей. Новейшая тенденция в этом направлении – использование в многомерных расчетах 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: по литературным данным на решение уравнений химической кинетики требуется до 80%–90% всего расчетного времени.

Цель данной работы – разработка и применение одного из методов ускорения кинетических расчетов – метода динамической табуляции (МДТ) кинетических механизмов по ходу вычислений [1, 2]. 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 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.

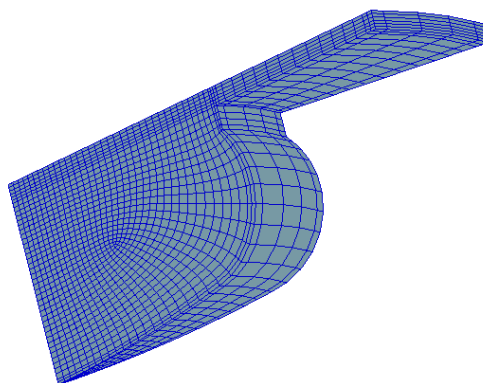


Рисунок 1 – Расчетная сетка

Нами 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 ниже демонстрируется на примере расчета рабочего процесса в поршневом двигателе.

Постановка задачи

На рисунке 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 рисунке 1 соответствует подвижному поршню с выемкой, верхняя – крышке цилиндра, а боковая – стенке цилиндра. Двигатель имеет следующие характеристики: радиус цилиндра – 43 см, 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 разных значениях доверительного интервала ξ . Цель расчетов – продемонстрировать эффективность МДТ.

Расчеты проводили с использованием относительно короткого кинетического механизма окисления н-гептана, содержащего 29 компонентов, участвующих в 52 реакциях, представленного в [3].

Результаты расчетов

В таблице 2 представлены значения полного времени расчета одного рабочего цикла двигателя τ_c и суммарного времени кинетических расчетов τ_k без МДТ и с МДТ при разных значениях доверительного интервала ξ (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 рисунке 2 показано сравнение расчетных зависимостей средней температуры в цилиндре двигателя от времени, полученных без применения МДТ (черная кривая) и с МДТ при $\xi = 10^{-4}$ (красная кривая). 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 ПКВ (100% означает, что при каждом обращении к таблице из нее берется экстраполированное термохимическое состояние вместо

Таблица 2 – Время расчета одного рабочего цикла двигателя при разных настройках МДТ

Расчет	Полное время расчета, τ_{Σ} с	Время расчета кинетической задачи, τ_c с	Отношение 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

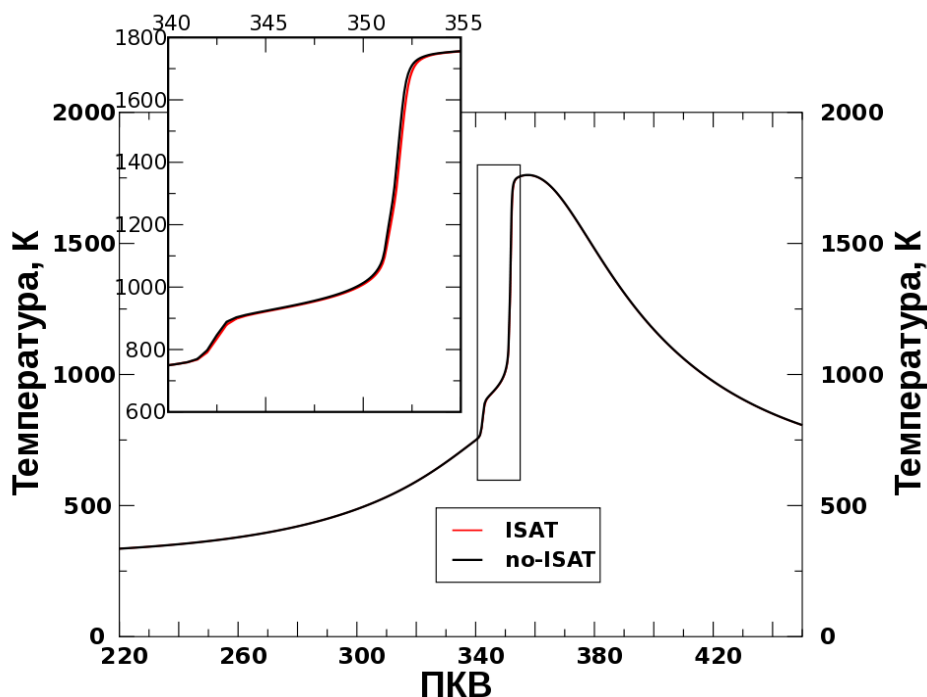


Рисунок 2 – Расчетные зависимости средней температуры от угла поворота коленчатого вала (ПКВ): черная кривая – без МДТ, красная – с МДТ ($\xi=10^{-4}$). На вставке показан участок кривой с максимальными скоростями изменения температуры).

вызова КР). Видно, что частота использования табличных данных сокращается в моменты холоднопламенного воспламенения (первый «провал») и горячего взрыва (второй «провал»), 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 рисунках 4 и 5 приведены мгновенные распределения температуры (рисунок 4) и длины вектора скорости (рисунок 5) в два разных момента времени, соответствующих углам ПКВ 365° и 400° , полученные в расчете без МДТ (слева) и с МДТ (справа). 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.

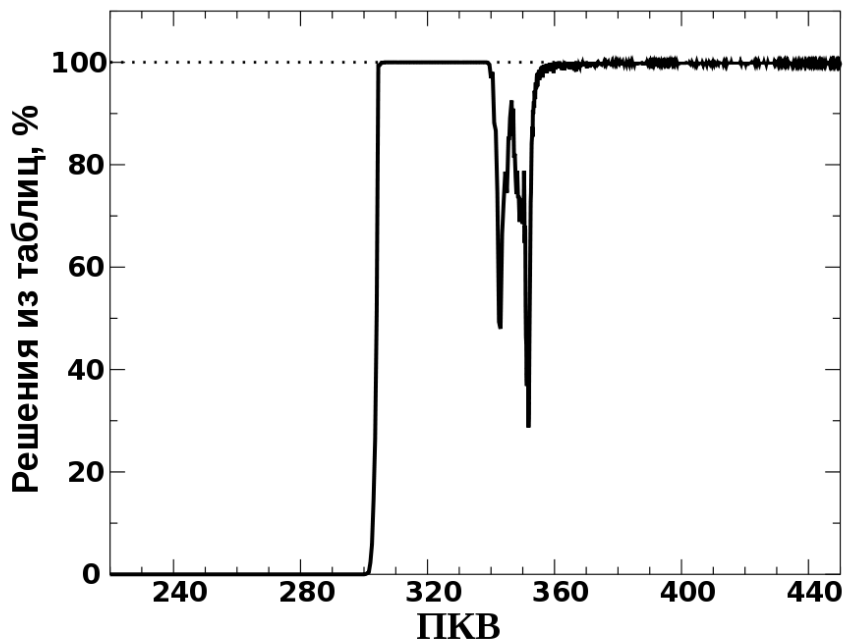


Рисунок 3 – Частота использования табличных данных при расчете с $\xi = 10^{-4}$.

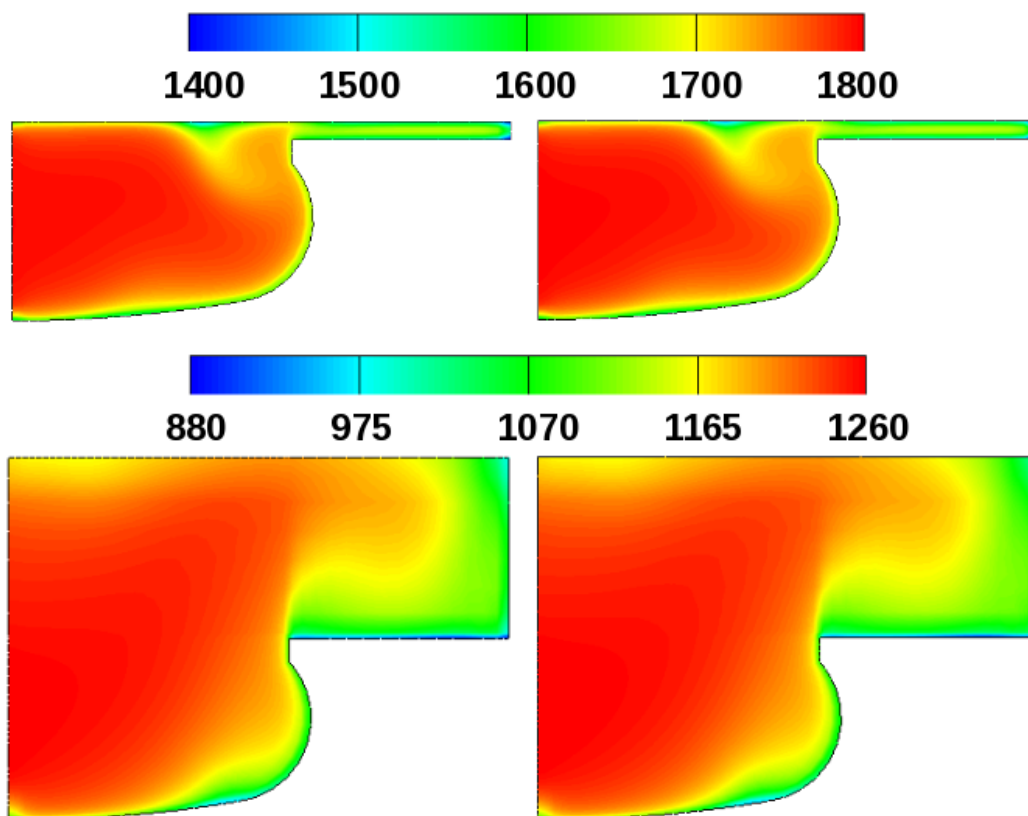


Рисунок 4 – Сравнение расчетных распределений температуры в цилиндре двигателя при углах ПКВ 365° и 400°: слева – без МДТ, справа с МДТ ($\xi = 10^{-4}$). Поршень движется сверху вниз.

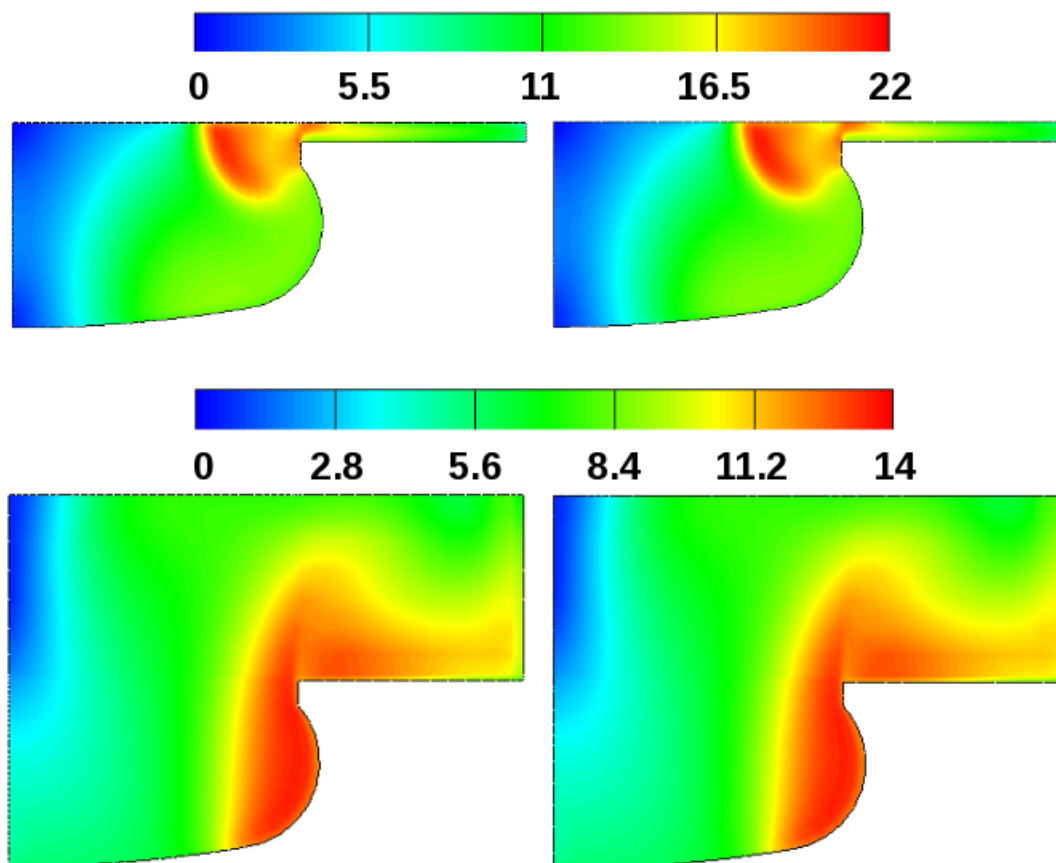


Рисунок 5 – Сравнение расчетных распределений длины вектора скорости в цилиндре двигателя при углах ПКВ 365° и 400° слева – без МДТ, справа – с МДТ ($\xi=10^{-4}$). Поршень движется сверху вниз.

Заключение

Нами разработан алгоритм МДТ, позволяющий существенно сократить затраты машинного времени на многомерные газодинамические расчеты. Метод основан на табуляции термохимических состояний системы, которые возникают в процессе вычислений, и получения новых термохимических состояний системы через линейную экстраполяцию табличных данных (вместо вызова кинетического решателя). Эффективность метода продемонстрирована на примере расчета рабочего процесса в поршневом двигателе с гомогенным зарядом и с зажиганием от сжатия с использованием детального кинетического механизма 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. В отличие от существующих алгоритмов МДТ, наш алгоритм обладает дополнительным свойством: он обеспечивает значительное сокращение расчетного времени за счет запоминания и последующего многократного использования таблиц термохимических состояний исследуемой системы при проведении многовариантных параметрических расчетов.

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

Литература

1. Pope S. B. Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation // *Combustion Theory and Modeling*. 1997. Vol. 1. P. 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. Patel A., Kong S., Reitz R. Development and validation of a reduced reaction mechanism for HCCI engine simulations // SAE Technical Paper 2004-01-0558. 2004.