



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 6 за 2015 г.



**Борисов В.Е., Кулешов А.А.,  
Савенков Е.Б., Якуш С.Е.**

Программный комплекс TCS  
3D: математическая модель

**Рекомендуемая форма библиографической ссылки:** Программный комплекс TCS 3D: математическая модель / В.Е.Борисов [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2015. № 6. 20 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2015-6>

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
ОРДЕНА ЛЕНИНА  
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ  
имени М. В. КЕЛДЫША

В.Е. Борисов, А.А. Кулешов, Е.Б. Савенков, С.Е. Якуш

**Программный комплекс TCS 3D:  
математическая модель**

Москва, 2015

*В.Е. Борисов, А.А. Кулешов, Е.Б. Савенков, С.Е. Якуш*, Программный комплекс TCS 3D: математическая модель

**Аннотация.** Программный комплекс TCS 3D предназначен для прямого численного моделирования трехмерных турбулентных течений многокомпонентной смеси реагирующих газов на вычислительных системах сверхвысокой производительности. Данная работа посвящена описанию соответствующей математической модели, которая легла в основу вычислительного ядра программы.<sup>1</sup>

**Ключевые слова:** прямое численное моделирование, горение газов, уравнения Навье-Стокса, приближение малых чисел Маха.

*V.E. Borisov, A.A. Kuleshov, E.B. Savenkov, S.E. Yakush*, TCS 3D simulator: mathematical model

**Abstract.** TCS 3D simulator is a software for direct numerical simulation of 3D turbulent reacting multicomponent flows on supercomputer. In this paper we present fully description of mathematical model, which was put into the essence of the program's core.

**Key words and phrases:** Direct Numerical Simulation, Low Mach number combustion

## Содержание

|   |                              |    |
|---|------------------------------|----|
| 1 | Введение                     | 3  |
| 2 | Основные уравнения модели    | 4  |
| 3 | Уравнения химических реакций | 8  |
| 4 | Дополнительные соотношения   | 9  |
| 5 | Заключение                   | 14 |
|   | Список обозначений           | 15 |
|   | Литература                   | 18 |

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 13-01-12058 офи\_м)

# 1 Введение

Моделирование процессов турбулентного смесеобразования и горения газов, в том числе в сильно неравновесных условиях, является одной из актуальных задач современной вычислительной гидрогазодинамики. Характерная особенность этой задачи заключается в наличии многомасштабных вихревых структур и динамических фронтов концентраций компонент воздушно – газовой смеси, численное моделирование которых в силу многомасштабности и большого числа компонент требует значительных вычислительных ресурсов. Эти обстоятельства выдвигают следующие требования к вычислительным алгоритмам:

- высокая точность разрешения многомасштабных вихревых структур и подвижных фронтов горения;
- эффективное интегрирование жестких уравнений химических реакций;
- масштабируемость;
- использование высокопроизводительных параллельных систем.

В свою очередь, возможность эффективной реализации указанных требований сильно зависит от используемой математической модели.

Процессы неравновесного турбулентного смесеобразования и горения представляют собой сложное физическое явление [1, 2]. Основными уравнениями гидродинамики для описания таких течений являются уравнения Навье – Стокса. Они допускают два типа волн, распространяющихся со скоростью движения смеси  $U$  и со скоростью звука в смеси  $c$ , соответственно. При этом лабораторные эксперименты показывают, что для задачи зажигания горючих газов  $U \sim 3 - 30$  м/с, а  $c \sim 1000$  м/с. Движения в таком режиме соответствуют малым числам Маха, когда  $M = |U|/c \ll 1$ . Практика показывает, что для таких режимов течения уравнения Навье – Стокса без применения специальных модификаций численно неустойчивы [3].

Существует несколько подходов к решению данной проблемы [3–13], которые позволяют при численной реализации снять связанные со скоростью звука ограничения на шаг по времени. Наиболее известные из них основаны на использовании асимптотического анализа и метода проекций. Асимптотический анализ используется для покомпонентного расщепления переменных исходя из физической природы изменения конкретного компонента, с его помощью осуществляется эффективный учет сильного различия скоростей  $U$  и  $c$  [3]. Идея метода проекций заключается в том, чтобы сначала проинтегрировать по времени часть уравнений, не требуя выполнения всех ограничений, а потом спроектировать полученное решение на требуемые ограни-

чения [10–12]. Такой подход активно использовался и адаптировался применительно к моделированию задач течения и зажигания горючих газов в работах [13–16]. На их основании, а также описанных выше требованиях к вычислительным алгоритмам, была построена математическая модель, используемая в настоящей работе.

Разработанный авторами программный комплекс TCS 3D предназначен для прямого численного моделирования трехмерных турбулентных течений многокомпонентной смеси реагирующих газов на вычислительных системах сверхвысокой производительности. Данная работа посвящена описанию соответствующей математической модели, которая легла в основу вычислительного ядра программы. Описанию схемы решения уравнений математической модели, алгоритмов вычислительного ядра и параллельной версии программного комплекса будут посвящены следующие работы авторов.

## 2 Основные уравнения модели

Основными уравнениями гидродинамики для описания течений газовых смесей являются уравнения Навье – Стокса. В настоящей работе используется их модификация, полученная в приближении малых чисел Маха [14, 17]. Рассматриваются течения при достаточно малом числе Маха (обычно полагается  $M < 0.3$ ). В таком случае давление  $p$  может быть представлено в виде:

$$p(\mathbf{x}, t) = p_0 + \pi(\mathbf{x}, t),$$

где  $p_0$  – среднее (термодинамическое) давление (пространственно постоянное в области), а  $\pi$  – динамическое отклонение давления, не зависящее от термодинамических величин и удовлетворяющее соотношению  $\pi/p_0 = O(M^2)$ .

Тогда система уравнений Навье – Стокса в общем виде запишется следующим образом:

$$\frac{\partial \rho Y_m}{\partial t} + \nabla \cdot \rho Y_m \mathbf{U} = \nabla \cdot \mathcal{F}_m + \dot{\omega}_m, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \otimes \mathbf{U}) = -\rho \mathbf{g} - \nabla \pi + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \nabla \cdot \rho h \mathbf{U} = \nabla \cdot \mathcal{Q}. \quad (3)$$

Здесь  $m$  – индекс компонента смеси,  $\rho$  – плотность смеси,  $\mathbf{U}$  – вектор скорости смеси,  $Y_m$  – относительная массовая концентрация компонента  $m$ ,  $\dot{\omega}_m$  – приток компонента  $m$  за счет химических реакций,  $\boldsymbol{\tau}$  – тензор вязких напряжений,  $h$  – энтальпия смеси,  $\mathcal{F}_m$  – вектор диффузионного потока соответствующей компоненты смеси,  $\mathcal{Q}$  – вектор потока тепла для смеси.

В указанных условиях выполнены следующие нормировочные соотношения:

$$\sum_m Y_m = 1, \quad \sum_m \dot{\omega}_m = 0, \quad \sum_m \mathcal{F}_m = \mathbf{0}. \quad (4)$$

Тензор вязких напряжений  $\boldsymbol{\tau}$  имеет вид:

$$\boldsymbol{\tau} = \mu \left( \nabla \otimes \mathbf{U} + (\nabla \otimes \mathbf{U})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{U}) \mathbf{I} \right), \quad (5)$$

где  $\mu$  – динамическая вязкость смеси,  $\mathbf{I}$  – единичный тензор.

Энтальпия смеси  $h$  записывается в виде:

$$h(T, Y_m) = \rho E + p_0 = \sum_m Y_m h_m(T), \quad (6)$$

где  $h_m$  – энтальпия компонента  $m$ ,  $E$  – полная энергия смеси,  $T_0$  – некоторое референтное значение температуры.

Уравнение состояния смеси идеальных газов имеет следующий вид:

$$p = p_0 = \rho \mathcal{R} T \sum_m (Y_m / W_m). \quad (7)$$

Здесь  $\mathcal{R}$  – универсальная газовая постоянная,  $W_m$  – молекулярная масса компонента  $m$ .

Вид вектора диффузионных потоков  $\mathcal{F}_m$  и вектора потока тепла  $\mathcal{Q}$  зависит от вида используемой модели [15]. Наиболее часто используемой является модель средних по смеси значений (mixture-averaged):

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_m^{(mix)} &= \rho D_{m,mix} \nabla Y_m, \\ \mathcal{Q}^{(mix)} &= \lambda \nabla T + \left( \sum_m h_m \mathcal{F}_m^{(mix)} \right), \end{aligned} \quad (8)$$

где  $T$  – температура смеси,  $\lambda$  – коэффициент теплопроводности смеси,  $D_{m,mix}$  – средний по смеси коэффициент диффузии компонента  $m$  относительно смеси. Более точной является модель многокомпонентной диффузии (multicomponent), учитывающая эффекты Дюфура и Соре [15]:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_m^{(multi)} &= \left( \sum_l \rho D_{m,l} Y_m \nabla X_l \right) + \frac{\rho Y_m \theta_m}{T} \nabla T, \\ \mathcal{Q}^{(multi)} &= \lambda' \nabla T + \left( \sum_m h_m \mathcal{F}_m^{(multi)} \right) + \sum_m \rho \theta_m \nabla X_m, \end{aligned} \quad (9)$$

где  $l$  – индекс компонента,  $X_m = \rho Y_m / W_m$  – относительная объемная концентрация компонента  $m$ ,  $D_{m,l}$  – бинарный коэффициент диффузии компонента  $m$  относительно компонента  $l$ ,  $\theta_m$  – термодиффузионный коэффициент компонента,  $\lambda'$  – парциальный коэффициент теплопроводности смеси. Данная модель относится к классу дифференциальных моделей диффузии, в которых для расчета диффузионных потоков необходимо в каждой точке решать систему линейных алгебраических уравнений, что сопряжено с большими вычислительными затратами и существенно увеличивает общее время расчета, что часто является неприемлимым. Модели данного класса обычно используют только в том случае, когда модель средних по смеси диффузионных потоков оказывается недостаточно точной.

Просуммировав покомпонентно уравнение (1) с учетом (4), можно получить уравнение неразрывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{U} = 0,$$

которое в недивергентном виде представимо как

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = -\frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dt} = -\frac{d}{dt} (\ln \rho). \quad (10)$$

С другой стороны, прологарифмировав уравнение (7) и затем продифференцировав результат по  $t$ , получим:

$$\begin{aligned} \ln \rho &= \underbrace{\ln p_0 - \ln \mathcal{R}}_{=0} - \ln T - \ln \sum_m (Y_m / W_m), \\ \frac{d}{dt} (\ln \rho) &= \frac{d}{dt} (\ln T) - \frac{d}{dt} \left( \ln \sum_m (Y_m / W_m) \right) = \\ &= -\frac{1}{T} \frac{dT}{dt} - \underbrace{1 / \left( \sum_m (Y_m / W_m) \right)}_{=W} \sum_m \left( \frac{1}{W_m} \frac{dY_m}{dt} \right), \end{aligned}$$

где  $W$  – средняя молекулярная масса смеси.

Таким образом, промежуточно можно записать:

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = \frac{1}{T} \frac{dT}{dt} + W \sum_m \left( \frac{1}{W_m} \frac{dY_m}{dt} \right). \quad (11)$$

Теперь продифференцируем уравнение (6) по  $t$ :

$$\frac{Dh}{Dt} = \sum_m \frac{Dh_m}{Dt} Y_m + \sum_m h_m \frac{DY_m}{Dt} = \sum_m \frac{\partial h_m}{\partial T} \frac{DT}{Dt} Y_m + \sum_m h_m \frac{DY_m}{Dt}.$$

Умножая результат на  $\rho$  с учетом

$$\sum_m \frac{\partial h_m}{\partial T} Y_m = c_p$$

и уравнений (1) и (3), после перестановки слагаемых получим:

$$\rho c_p \frac{DT}{Dt} = \nabla \cdot \mathcal{Q} - \sum_m h_m (\dot{\omega}_m + \nabla \cdot \mathcal{F}_m). \quad (12)$$

Полученное соотношение представляет собой альтернативную форму уравнения (3), записанного относительно температуры смеси  $T$ , где  $c_p$  обозначает теплоемкость смеси при постоянном давлении. Подставляя выражение для полной производной температуры  $DT/Dt$  в уравнение (11) с учетом уравнения (1), получим окончательное выражение для дивергентного ограничения (10) на вектор скорости:

$$\mathcal{S} \equiv \nabla \cdot \mathbf{U} = \frac{1}{\rho c_p T} (\nabla \cdot \mathcal{Q}) + \sum_m \frac{1}{\rho} \left( \frac{W}{W_m} - \frac{h_m}{c_p T} \right) (\dot{\omega}_m + \nabla \cdot \mathcal{F}_m) \quad (13)$$

Математическая модель, реализованная в программной комплексе TCS 3D, основана на уравнениях (1)–(3) без учета гравитационного члена в правой части уравнения (2), с использованием модели средних по смеси диффузионных потоков (8). Также предполагается, что уравнение состояния для многокомпонентной газовой смеси описывается уравнением состояния смеси идеальных газов (7).

В такой постановке с учетом того, что

$$\nabla \cdot \left( \sum_m h_m \mathcal{F}_m \right) = \sum_m h_m \nabla \cdot \mathcal{F}_m + \sum_m \mathcal{F}_m \nabla h_m,$$

основные уравнения модели (1)–(3), (13) принимают следующий вид:

$$\frac{\partial \rho Y_m}{\partial t} + \nabla \cdot \rho Y_m \mathbf{U} = \nabla \cdot (\rho D_{m,mix} \nabla Y_m) + \dot{\omega}_m, \quad (14)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \otimes \mathbf{U}) = -\nabla \pi + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}, \quad (15)$$

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \nabla \cdot \rho h \mathbf{U} = \nabla \cdot \left( \lambda \nabla T + \sum_m h_m \rho D_{m,mix} \nabla Y_m \right), \quad (16)$$



$$\begin{aligned} \mathcal{S} \equiv \nabla \cdot \mathbf{U} = & \frac{1}{\rho c_p T} \left( \nabla \cdot \lambda \nabla T + \sum_m \rho D_{m,mix} \nabla Y_m \nabla h_m \right) + \\ & + \frac{1}{\rho} \sum_m \frac{W}{W_m} (\nabla \cdot \rho D_{m,mix} \nabla Y_m) + \frac{1}{\rho} \sum_m \left( \frac{W}{W_m} - \frac{h_m}{c_p T} \right) \dot{\omega}_m \quad (17) \end{aligned}$$

и вместе с соотношениями (4)–(7) составляют модель, для замыкания которой остается описать источниковый член  $\dot{\omega}_m$ , отвечающий за приток компонента в результате химических реакций; коэффициенты переноса для смеси (вязкость  $\mu$ , теплопроводность  $\lambda$ , коэффициент диффузии  $D_{m,mix}$ ); а также теплофизические свойства смеси (теплоемкость  $c_p$  и энтальпия  $h$ ). Для их вычисления потребуются соответствующие величины для отдельных компонент.

### 3 Уравнения химических реакций

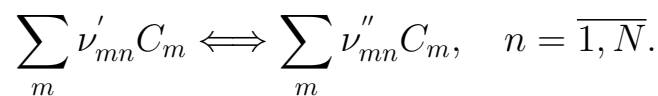
С точки зрения моделирования нестационарных трехмерных реагирующих течений методами вычислительной гидродинамики, наличие реакций делает уравнения переноса компонент (1) и уравнение для энергии смеси (3) взаимосвязанными [1, 2]. Для эффективной практической реализации используется процедура расщепления по физическим процессам [16], в результате чего расчет химических реакций выделяется в отдельный шаг и заключается в решении системы уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho Y_m}{\partial t} &= \dot{\omega}_m, \\ \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} &= - \sum_m h_m \dot{\omega}_m. \end{aligned} \quad (18)$$

Заметим, что при расщеплении вместо уравнения (3), использовалась его эквивалентная запись в виде (12), в которой  $T$  и  $\dot{\omega}_m$  фигурируют явно.

Модель химических реакций описывается следующим образом.

Предположим, что реагирующая смесь состоит из  $M$  химических компонент, между которыми может протекать  $N$  реакций вида



Здесь  $C_m$  обозначает химический символ компонента  $m$ , а  $\nu'_{mn}$  и  $\nu''_{mn}$  — стехиометрические коэффициенты компонента  $m$  в реакции  $n$ .

Массовый приток (массовая скорость реакции) для компонента  $m$  определяется суммированием по всем реакциям:

$$\dot{\omega}_m = \sum_n \dot{\omega}_{mn} = W_m \sum_n \nu_{mn} Q_n, \quad m = \overline{1, M}, \quad (19)$$

где  $\nu_{mn} = \nu''_{mn} - \nu'_{mn}$ , а  $Q_n$  – скорость протекания  $n$ -й реакции.

При использовании детальной кинетической схемы скорости реакции записываются в виде

$$Q_n = K_{fn} \prod_m [X_m]^{\nu'_{mn}} - K_{rn} \prod_m [X_m]^{\nu''_{mn}}.$$

Здесь  $K_{fn}$  и  $K_{rn}$  – константы скорости прямой и обратной реакций.

Константы скорости прямых реакций определяются из закона Аррениуса [2] в виде

$$K_{fn} = A_{fn} T^{\beta_n} \exp\left(-\frac{E_n}{\mathcal{R}T}\right),$$

где  $A_{fn}$  – предэкспоненциальный множитель,  $\beta_n$  – показатель степени в температурном факторе,  $E_n$  – энергия активации.

Константы скорости обратных реакций определяются по константам скорости прямых реакций при помощи констант равновесия:

$$K_{rn} = \frac{K_{fn}}{\left(\frac{p_0}{\mathcal{R}T}\right)^{\sum_m \nu_{mn}} \exp\left(\frac{\Delta s_n}{\mathcal{R}} - \frac{\Delta h_n}{\mathcal{R}T}\right)},$$

где  $\Delta h_n$  и  $\Delta s_n$  – изменение энтальпии и энтропии смеси при переходе от исходных веществ к продуктам  $n$ -й реакции:

$$\begin{aligned} \Delta h_n &= \sum_m \nu''_{mn} h_m - \sum_m \nu'_{mn} h_m \\ \Delta s_n &= \sum_m \nu''_{mn} s_m - \sum_m \nu'_{mn} s_m \end{aligned}$$

## 4 Дополнительные соотношения

### 4.1 Теплофизические свойства веществ

Для каждого вещества (компонента)  $m$  многокомпонентной реагирующей смеси необходимо вычислять его теплофизические свойства – теплоемкость  $c_{p,m}$ , энтальпию  $h_m$  и энтропию  $s_m$ .

Для многих веществ (например, свободных радикалов) полные данные не могут быть найдены в справочных таблицах, а должны рассчитываться

на основе молекулярно – кинетической теории, либо определяться экспериментально. Такие исследования были проведены и представлены в виде полиномиальных аппроксимаций NASA [18]. Коэффициенты полиномов были найдены для очень широкого круга веществ, представляющих интерес при расчете задач горения, а соответствующие данные представлены в стандартизированном формате [19, 20].

Для теплофизических свойств вещества используется полиномиальная аппроксимация в двух температурных интервалах (как правило, 300 – 1000 К и 1000 – 5000 К, хотя для отдельных веществ границы диапазонов могут быть другими). Аппроксимирующие полиномы имеют следующий вид (индекс компонента опущен):

$$\frac{c_p}{\mathcal{R}} = a_1 + a_2T + a_3T^2 + a_4T^3 + a_5T^4 \quad (20)$$

$$\frac{h}{\mathcal{R}T} = a_1 + \frac{1}{2}a_2T + \frac{1}{3}a_3T^2 + \frac{1}{4}a_4T^3 + \frac{1}{5}a_5T^4 + \frac{a_6}{T} \quad (21)$$

$$\frac{s}{\mathcal{R}} = a_1 \ln T + a_2T + \frac{1}{2}a_3T^2 + \frac{1}{3}a_4T^3 + \frac{1}{4}a_5T^4 + a_7. \quad (22)$$

При необходимости другие термодинамические параметры индивидуальных веществ (теплоемкость при постоянном объеме  $c_v$  и внутренняя энергия  $u$ ) вычисляются как функции  $c_p$ ,  $h$  и  $s$ :

$$c_v = c_p - \mathcal{R}, \quad (23)$$

$$u = h - \mathcal{R}T. \quad (24)$$

Общая энтальпия смеси, как уже отмечалось ранее, задается уравнением (6). Аналогично рассчитывается средняя теплоемкость смеси  $c_p$ :

$$c_p = \sum_m Y_m c_{p,m}. \quad (25)$$

## 4.2 Коэффициенты переноса

В настоящей модели коэффициенты переноса рассчитываются на основе молекулярно – кинетической теории. Подход аналогичен применяемому в пакете CHEMKIN [21].

Коэффициент динамической вязкости  $\mu_m$  вычисляется согласно [22] по следующей формуле:

$$\mu_m = \frac{5}{16} \frac{\sqrt{\pi W_m k_B T}}{\pi \sigma_m^2 \Omega^{(2,2)*}}. \quad (26)$$

Здесь  $\sigma_m$  – приведенный столкновительный диаметр Леннарда – Джонса,  $k_B$  – постоянная Больцмана,  $\Omega^{(2,2)*}(T_m^*, \delta_m^*)$  – столкновительный интеграл, являющийся функцией приведенной температуры  $T_m^*$  и приведенного дипольного момента  $\delta_m^*$ , имеющих вид

$$T_m^* = \frac{k_B T}{\varepsilon_m}, \quad \delta_m^* = \frac{1}{2} \frac{\eta_m^2}{\varepsilon_m \sigma_m^3},$$

где  $\varepsilon_m$  – глубина потенциальной ямы потенциала Леннарда – Джонса, а  $\eta_m$  – дипольный момент. Значение интеграла столкновений  $\Omega^{(2,2)*}$  определяется согласно табличным данным [23].

Вязкость смеси описывается формулой Уилке [24]:

$$\mu = \sum_m \left( X_m \mu_m / \sum_l X_l \Phi_{ml} \right), \quad (27)$$

где

$$\Phi_{ml} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left( 1 + \frac{W_m}{W_l} \right)^{-\frac{1}{2}} \left( 1 + \left( \frac{\mu_m}{\mu_l} \right)^{\frac{1}{2}} \left( \frac{W_l}{W_m} \right)^{\frac{1}{4}} \right)^2.$$

Коэффициент теплопроводности индивидуального вещества  $\lambda_m$  определяется следующим соотношением, учитывающим вклад поступательных (trans), вращательных (rot) и колебательных (vibr) степеней свободы [25]:

$$\lambda_m = \frac{\mu_m}{W_m} (f_{trans} c_{v,trans} + f_{rot} c_{v,rot} + f_{vibr} c_{v,vibr}). \quad (28)$$

Здесь

$$f_{trans} = \frac{5}{2} \left( 1 - \frac{2}{\pi} \frac{c_{v,rot}}{c_{v,trans}} \frac{A}{B} \right), \quad f_{rot} = \frac{\rho D_{mm}}{\mu_m} \left( 1 + \frac{2}{\pi} \frac{A}{B} \right), \quad f_{vibr} = \frac{\rho D_{mm}}{\mu_m},$$

$$A = \frac{5}{2} - \frac{\rho D_{mm}}{\mu_m}, \quad B = Z_{rot} + \frac{2}{\pi} \left( \frac{5}{3} c_{v,rot} + \frac{\rho D_{mm}}{\mu_m} \right).$$

Молярная теплоемкость имеет различный вид в зависимости от строения молекулы. Для линейной молекулы имеем:

$$c_{v,trans} = \frac{3}{2} \mathcal{R}, \quad c_{v,rot} = \mathcal{R}, \quad c_{v,vibr} = c_v - \frac{5}{2} \mathcal{R}.$$

Для нелинейных молекул соответствующие формулы имеют следующий вид:

$$c_{v,trans} = \frac{3}{2} \mathcal{R}, \quad c_{v,rot} = \frac{3}{2} \mathcal{R}, \quad c_{v,vibr} = c_v - 3 \mathcal{R}.$$

Наконец, для одноатомных молекул вклад вращательных и колебательных степеней свободы отсутствует, поэтому

$$c_{v,trans} = \frac{3}{2}\mathcal{R}, \quad c_{v,rot} = 0, \quad c_{v,vibr} = 0.$$

Столкновительное число  $Z_{rot}$ , описывающее вращательную релаксацию молекул, является функцией температуры. Предполагается, что оно известно при 298 К, тогда его температурная зависимость имеет вид [26]:

$$Z_{rot}(T) = Z_{rot}(298) \frac{F(298)}{F(T)},$$

$$F(T) = 1 + \frac{\pi^{3/2}}{2} \left( \frac{\varepsilon_m/k_B}{T} \right)^{1/2} + \left( \frac{\pi^2}{4} + 2 \right) \left( \frac{\varepsilon_m/k_B}{T} \right) + \pi^{3/2} \left( \frac{\varepsilon_m/k_B}{T} \right)^{3/2}.$$

Коэффициент теплопроводности смеси газов описывается соотношением [27]

$$\lambda = \frac{1}{2} \left( \sum_m X_m \lambda_m + 1 \left/ \sum_m \frac{X_m}{\lambda_m} \right. \right). \quad (29)$$

Бинарные коэффициенты диффузии определяются для каждой пары компонент  $m$  и  $l$  согласно [22]:

$$D_{ml} = \frac{3}{16} \frac{\sqrt{2\pi k_B^2 T^3 / W_{ml}}}{p_0 \pi \sigma_{ml}^2 \Omega^{(1,1)*}}. \quad (30)$$

Здесь  $W_{ml} = 2W_m W_l / (W_m + W_l)$  – приведенная молекулярная масса данной пары компонент,  $\sigma_{ml}$  – приведенный столкновительный диаметр,  $\Omega^{(1,1)*}(T_{ml}^*, \delta_{ml}^*)$  – столкновительный интеграл, являющийся функцией приведенной температуры  $T_{ml}^*$  и приведенного дипольного момента  $\delta_{ml}^*$ , имеющих вид

$$T_{ml}^* = \frac{k_B T}{\varepsilon_{ml}}, \quad \delta_{ml}^* = \frac{1}{2} \frac{\eta_{ml}^2}{\varepsilon_{ml} \sigma_{ml}^3},$$

где  $\varepsilon_{ml}$  – глубина потенциальной ямы потенциала Леннарда – Джонса пары компонент  $m$  и  $l$ . Аналогично столкновительному интегралу  $\Omega^{(2,2)*}$ , значение интеграла  $\Omega^{(1,1)*}$  определяется согласно табличным данным [23].

Если обе молекулы компонент являются полярными, или обе являются неполярными, то

$$\sigma_{ml} = \frac{1}{2}(\sigma_m + \sigma_l), \quad \varepsilon_{ml}^2 = \varepsilon_m \varepsilon_l, \quad \eta_{ml}^2 = \eta_m \eta_l.$$

Если же одна из молекул является неполярной (индекс  $n$ ), а другая полярной (индекс  $p$ ), то

$$\sigma_{np} = \frac{1}{2}(\sigma_n + \sigma_p)\xi^{-1/6}, \quad \varepsilon_{ml}^2 = \xi^4 \varepsilon_n \varepsilon_p, \quad \eta_{ml} = 0,$$

где

$$\xi = 1 + \frac{1}{4}\alpha_n^* \eta_p^* \sqrt{\frac{\varepsilon_p}{\varepsilon_n}}.$$

Здесь  $\alpha_n^*$  – приведенная поляризуемость неполярной молекулы  $n$ ,  $\eta_p^*$  – приведенный дипольный момент полярной молекулы  $p$ :

$$\alpha_n^* = \frac{\alpha_n}{\sigma_n^3}, \quad \eta_p^* = \frac{\eta_p}{\sqrt{\varepsilon_p \sigma_p^3}}.$$

Средний по смеси коэффициент диффузии вычисляется через бинарные коэффициенты диффузии  $D_{ml}$  по формуле Гиршфельдера и Кертисса [22]:

$$D_{m,mix} = \frac{1 - Y_m}{\sum_{l \neq m} X_l / D_{lm}}. \quad (31)$$

### 4.3 Коррекция диффузионных потоков

Известная проблема [28, 29] модели средних по смеси диффузионных потоков состоит в том, что коэффициенты  $D_{m,mix}$  определяются таким образом, что соотношение (8) не удовлетворяет условию нормировки (4), т.е.

$$\sum_m \mathcal{F}_m^{(mix)} \neq \mathbf{0}, \quad \mathcal{F}_m^{(mix)} = \rho D_{m,mix} \nabla Y_m.$$

Стандартный метод решения данной проблемы заключается в введении специальной поправки  $\mathbf{V}_c$  к вектору скорости, задаваемой следующим образом:

$$\rho \mathbf{V}_c = \sum_m \mathcal{F}_m^{(mix)}.$$

Скорректированный диффузионный поток записывается в виде

$$\mathcal{F}_m = \mathcal{F}_m^{(mix)} + \rho Y_m \mathbf{V}_c. \quad (32)$$

Таким образом,  $\sum_m \mathcal{F}_m = \mathbf{0}$ .

## 5 Заключение

В данной работе представлена математическая модель, описывающая класс существенно дозвуковых течений с химическими реакциями, которая легла в основу разработанного авторами программного комплекса TCS 3D.

Модель основана на уравнениях Навье – Стокса в приближении малых чисел Маха, которое позволяет при численной реализации снять связанные со скоростью звука ограничения на шаг по времени. Основные уравнения модели имеют вид (14)–(17), и замыкаются соотношениями (4)–(7), (19), (25), (27), (29), (31).

Сформулированная математическая постановка задачи применима к решению задач ламинарного и турбулентного горения. Ее численная реализация требует применения методов, учитывающих особенности реагирующих потоков – наличие тонких фронтов пламени, которые необходимо разрешать сквозным образом.

В последующих публикациях будут описаны схема решения уравнений представленной математической модели, алгоритмы вычислительного ядра и параллельной версии программного комплекса. В частности, будет описан метод адаптивного измельчения сетки и метод решения уравнений на используемых в нем многоуровневых иерархиях сеток.

## Список обозначений

|             |  |
|-------------|--|
| $p$         | полное давление смеси  |
| $p_0$       | среднее (термодинамическое) давление смеси                     |
| $\pi$       | динамическое отклонение давления смеси                         |
| $\rho$      | плотность смеси  |
| $T$         | температура смеси  |
| $T_0$       | референтное значение температуры                               |
| $E$         | полная энергия смеси   |
| $h$         | энтальпия смеси  |
| $h_m$       | энтальпия компонента $m$                                       |
| $\mu$       | динамическая вязкость смеси                                    |
| $\mu$       | динамическая вязкость компонента $m$                           |
| $\lambda$   | коэффициент теплопроводности смеси                             |
| $\lambda'$  | парциальный коэффициент теплопроводности смеси                 |
| $\lambda_m$ | коэффициент теплопроводности компонента $m$                    |
| $W$         | средняя молекулярная масса смеси                               |
| $W_m$       | молекулярная масса компонента $m$                              |
| $W_{ml}$    | приведенная молекулярная масса пары компонент $m$ и $l$        |
| $D_{m,mix}$ | средний по смеси коэффициент диффузии компонента $m$           |
| $D_{m,l}$   | бинарный коэффициент диффузии комп. $m$ относительно комп. $l$ |
| $c_p$       | теплоемкость смеси при постоянном давлении                     |
| $c_{p,m}$   | теплоемкость компонента $m$ при постоянном давлении            |
| $c_{v,m}$   | теплоемкость компонента $m$ при постоянном объеме              |
| $\theta_m$  | термодиффузионный коэффициент компонента $m$                   |



|                    |  |
|--------------------|--|
| $Y_m$              | относительная массовая концентрация компонента $m$                           |
| $X_m$              | относительная объемная концентрация компонента $m$                           |
| $\dot{\omega}_m$   | приток компонента $m$ за счет химических реакций                             |
| $s_m$              | энтропия компонента $m$  |
| $u_m$              | внутренняя энергия компонента $m$  |
| $C_m$              | химический символ компонента $m$   |
| $Q_n$              | скорость протекания реакции $n$  |
| $\nu'_{mn}$        | стехиометрические коэффициенты компонента $m$ в реакции $n$                  |
| $K_{fn}$           | константа скорости прямой реакции в формуле закона Аррениуса                 |
| $K_{rn}$           | константа скорости обратной реакции в формуле закона Аррениуса               |
| $A_{fn}$           | предэкспоненциальный множитель в формуле закона Аррениуса                    |
| $\beta_n$          | энергия активации в формуле закона Аррениуса                                 |
| $E_n$              | показатель степени в температурном факторе в формуле закона Аррениуса        |
| $\sigma_m$         | приведенный столкновительный диаметр Леннарда – Джонса компонента $m$        |
| $\sigma_{ml}$      | приведенный столкновительный диаметр Леннарда – Джонса пары компонент $m, l$ |
| $\varepsilon_m$    | глубина потенциальной ямы потенциала Леннарда – Джонса компонента $m$        |
| $\varepsilon_{ml}$ | глубина потенциальной ямы потенциала Леннарда – Джонса пары компонент $m, l$ |
| $T_m^*$            | приведенная температура компонента $m$                                       |
| $T_{ml}^*$         | приведенная температура компонент $m$ и $l$                                  |
| $\eta_m$           | дипольный момент компонента $m$  |
| $\eta_{ml}$        | дипольный момент пары компонент $m$ и $l$                                    |
| $\delta_m^*$       | приведенный дипольный момент компонента $m$                                  |

|                     |   |
|---------------------|---|
| $\delta_{ml}^*$     | приведенный дипольный момент пары компонент $m$ и $l$ |
| $\alpha_n^*$        | приведенная поляризуемость неполярной молекулы $n$    |
| $\eta_p^*$          | приведенный дипольный момент полярной молекулы $p$    |
| $Z_{rot}$           | столкновительное число                                |
| $\Omega^{(1,1)*}$   | 1-й столкновительный интеграл                         |
| $\Omega^{(2,2)*}$   | 2-й столкновительный интеграл                         |
| $k_B$               | постоянная Больцмана                                  |
| $\mathcal{R}$       | универсальная газовая постоянная                      |
| $\mathcal{S}$       | дивергентное ограничение на вектор скорости           |
| $\mathbf{I}$        | единичный тензор                                      |
| $\mathbf{U}$        | вектор скорости смеси                                 |
| $\boldsymbol{\tau}$ | тензор вязких напряжений                              |
| $\mathcal{F}_m$     | вектор диффузионного потока компонента $m$            |
| $\mathcal{Q}$       | вектор потока тепла для смеси                         |

## Список литературы

- [1] Я.Б. Зельдович, Г.И. Баренблатт, В.Б. Либрович, Г.М. Махвиладзе. Математическая теория горения и взрыва. М.: Наука, 1980, 478 с.
- [2] T. Poinsot, D. Veynante. Theoretical and Numerical Combustion. 2nd Ed. Philadelphia, Edwards Inc., 2005, 522 p.
- [3] M. Metzner and G. Wittum. "Computing low Mach number flows by parallel adaptive multigrid". COMPUTING AND VISUALIZATION IN SCIENCE, 2006, 9(4):259-269.
- [4] Turkel, E. "Preconditioned methods for solving the incompressible and low speed compressible equations". Journal of Computational Physics, 1987, Vol 72, pp. 277-298.
- [5] Turkel, E., Radespiel, R. and Kroll, N. "Assessment of preconditioning methods for multidimensional aerodynamics". Computers & Fluids, 1997, Vol 26, No 6, pp. 613-634.
- [6] Guillard, H. and Viozat, C. "On the behaviour of upwind schemes in the low Mach number limit". Computers & Fluids, 1999, 28/1, pp. 63-86.
- [7] Roller, S. and Munz, C. D. "A low Mach number scheme based on multi-scale asymptotics". Computing and Visualization in Science, 2000, Vol 3, No 1/2, pp. 85-91.
- [8] Choi, Y. H. and Merkle, C. L. "The application of preconditioning in viscous flows". Journal of Computational Physics, 1993, Vol 105, No 2, pp. 207-223.
- [9] Peyret, R. and Taylor, T. D. "Computational methods for fluid flow 1983, Springer-Verlag, New York.
- [10] Almgren, A.S., Bell, J.B., Szymczak, W.G. "A numerical method for the incompressible Navier-Stokes equations based on an approximate projection". SIAM J. Sci. Comput., 1996, 17, 358-369
- [11] Bell, J.B., Colella, P., Glaz, H.M. "A second-order projection method for the incompressible Navier-Stokes equations". J. Comput. Phys., 1989, 85, 257-283
- [12] Almgren, A.S., Bell, J.B., Colella, P., Howell, L.H., Welcome, M.L. "A Conservative Adaptive Projection Method for the Variable Density

- Incompressible Navier-Stokes Equations". Journal of Computational Physics, 1998, 142, pp. 1-46, article № CP985890
- [13] John Bell and Marcus Day. Chapter 13 "Adaptive Methods for Simulation of Turbulent Combustion". Turbulent Combustion Modeling: Advances, New Trends and perspectives. Volume 95 of Fluid mechanics and its applications, Springer London, 2010, pp.201–329
- [14] R.B. Pember, L.H. Howell, J.B. Bell, P. Collela, C.Y. Crutchfield, W.A. Fiveland, J.P. Jessee. "An Adaptive Projection Method for Unsteady, Low-Mach Number Combustion". Preprint of Lawrence Livermore National Laboratory, 1998, UCRL-JC-132064
- [15] J.F. Grcar. "An Explicit Runge-Kutta Iteration for Diffusion in the Low Mach Number Combustion Code". Lawrence Berkeley National Laboratory report LBNL-63375, 2007
- [16] M.S. Day, J.B. Bell. "Numerical simulation of laminar reacting flows with complex chemistry". Combustion Theory and Modelling, 4:4, pp. 535-556, DOI: 10.1088/1364-7830/4/4/309
- [17] A. Majda, J.A. Sethian. "The derivation and numerical solution of the equations for zero Mach number combustion". Combust. Sci. Tech., 1985, 42: pp. 185-205
- [18] Gordon, S. and McBride, B.J.: "Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions, Rocket Performance, Incident and Reflected Shocks and Chapman-Jouguet Detonations". 1971, NASA Report SP-273
- [19] Kee, R.J., Rupley, F.M. and Miller, J.A. "The CHEMKIN Thermodynamic Data Base". 1990, Sandia National Laboratories Report SAND87-8215B
- [20] А. Буркат. "База термодинамических данных 3-го тысячелетия об идеальных газах и конденсированных средах для изучения горения". Технион, Авиационный факультет (ТАЕ) доклад 867 от января 2001 года, <http://garfield.elte.chem/Burcat/burcat.html>
- [21] Kee, R.J., Dixon-Lewis, G., Warnatz, J., Coltrin, M.E. and Miller, J.A. "A Fortran Computer Code Package for the Evaluation of Gas-Phase Multicomponent Transport Properties". 1986, Sandia National Laboratories Report SAND86-8246
- [22] Дж. Гиршфельдер, Ч. Кертисс и Р. Берд. Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: Иностранная литература, 1961, 928 с.

- [23] L. Monchick and E.A. Mason. "Transport Properties of Polar Gases". 1961, Journal of Chemical Physics 35: 1676
- [24] R.B. Bird, W.E. Stewart, and E.N. Lightfoot. Transport Phenomena. John Wiley and Sons, 1960, New York
- [25] J. Warnatz. "In Numerical Methods in Flame Propagation". Edited by N. Peters and J. Warnatz Friedr. Vieweg and Sohn, 1982, Wiesbaden
- [26] J.G. Parker. "Rotational and Vibrational Relaxation in Diatomic Gases". 1959, Physics of Fluids 2: 449
- [27] S.Mathur, P.K. Tondon, and S.C. Saxena. "Thermal conductivity of binary, ternary and quaternary mixtures of rare gases". 1967, Molecular Physics 12: 569
- [28] Coffe T.P., Heimerl J.M., "Transport algorithms for premixed laminar steady-state flames". Combust. Flame., 1981, 43, 273
- [29] Giovangigli V. "Convergent iterative methods for multicomponent diffusion". IMPACT Comput. Sci. Eng., 1991, 3, pp. 244-76