



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

Препринты ИПМ • Препринт № 21 за 2022 г.

ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

В.Е. Борисов, Б.В. Критский,
Ю.Г. Рыков

Программный модуль MCFL-
Chem для расчета
высокоскоростных течений
смеси реагирующих газов

Статья доступна по лицензии
Creative Commons Attribution 4.0 International



Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Борисов В.Е., Критский Б.В., Рыков Ю.Г. Программный модуль MCFL-Chem для расчета высокоскоростных течений смеси реагирующих газов // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2022. № 21. 40 с.
<https://doi.org/10.20948/prepr-2022-21>
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2022-21>

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

В.Е. Борисов, Б.В. Критский, Ю.Г. Рыков

**Программный модуль MSFL-Chem для расчета
высокоскоростных течений смеси
реагирующих газов**

Москва, 2022

В.Е. Борисов, Б.В. Критский, Ю.Г. Рыков, Программный модуль MCFL-Chem для расчета высокоскоростных течений смеси реагирующих газов

Аннотация. В работе представлена вычислительная модель для расчета высокоскоростных течений смесей реагирующих газов, которая легла в основу программного модуля MCFL-Chem. В качестве математической модели используется система уравнений Навье–Стокса многокомпонентного реагирующего газа, химические реакции описываются детальной кинетической схемой. Общий алгоритм решения основан на схеме расщепления по типам рассматриваемых процессов: конвекция–диффузия–химические реакции, применяется подход на основе модифицированного метода С.К. Годунова. Работа продолжает предыдущие исследования коллектива авторов по моделированию течений многокомпонентных газовых смесей, основное внимание уделяется реализации модуля расчета химических реакций, его внедрению в общий алгоритм, проведению валидационных и верификационных расчетов.

Ключевые слова: многокомпонентная газовая динамика, горение газовых смесей, метод Годунова

V.E. Borisov, B.V. Kritsky, Yu.G. Rykov, MCFL-Chem software module for numerical simulation of high-speed reacting flows

Abstract. In this paper we present a computational model for high-speed multicomponent flows of reacting gases mixtures, which formed the core of the MCFL-Chem software module. The system of Navier–Stokes equations for a multicomponent reacting gas is used as a mathematical model; chemical reactions are described by a detailed kinetic scheme. The general solution algorithm is based on the splitting scheme for the types of processes under consideration: convection–diffusion–chemical reactions, an approach based on the modified method of S.K. Godunov is used. The present work continues the previous studies of the authors on numerical simulation of multicomponent gas mixtures flows, in this work we focus on the implementation of the chemical reactions module, its implementation in the general algorithm, validation and verification tests.

Key words and phrases: multicomponent gas dynamics, premixed combustion, Godunov method

Работа выполнена в рамках государственного задания ИПМ им. М.В. Келдыша РАН № АААА-А19-119012990083-7

1 Введение

Моделирование высокоскоростных течений смесей реагирующих газов представляет собой одну из актуальных задач современной вычислительной газовой динамики, решение которой критически важно для эффективного проектирования перспективных летательных аппаратов [1]. Применяемые для ее решения подходы должны быть комплексными, учитывать сильную многомасштабность происходящих физических процессов, возникающих при внешнем обтекании аппаратов и течений в двигательных установках: возникновение сложных ударно-волновых конфигураций и отрывных зон, изменение свойств воздушной среды вследствие отклонения от идеальности, абляцию теплозащитных материалов, горение топлив разного вида и т.д. Численное моделирование таких явлений требует использования специальных математических моделей и схем счета, обеспечивающих как требуемую точность решения, так и приемлемую скорость расчета.

Для описания многокомпонентных течений газовых смесей обычно используется система уравнений типа Навье–Стокса с учетом дополнительных эффектов, связанных с компонентным составом смеси [2, 3]. По описанным выше причинам решение такой системы уравнений представляет собой комплексную задачу, общим подходом к которому является расщепление на несколько этапов по типам рассматриваемых процессов. Обычно это разделение системы уравнений на гиперболическую (конвекция) и параболическую (диффузия и химические реакции) части с их последующим отдельным решением и тем или иным связыванием получившихся решений между собой. Один из возможных вариантов такого подхода описан в цикле работ научной группы под руководством В.Т. Жукова, проводимых сотрудниками ИПМ им. М.В. Келдыша РАН и направленных на создание вычислительной модели и программного комплекса для расчета высокоскоростных течений смесей реагирующих газов [4–9]. Программный комплекс разрабатывается на базе платформы NOISEtte [10] и получил название MCFL-NOISEtte [6]. Отличительной особенностью создаваемой вычислительной модели является использование для решения диффузионной части системы явной схемы специального типа [5, 11], позволяющей производить расчет с временным шагом порядка $h^{3/2}$ вместо стандартного для явных схем ограничения в h^2 (здесь h – обозначение шага сетки).

Настоящая работа продолжает начатые ранее исследования в части создания процедуры для расчета уравнений химической кинетики и ее встраивания в вычислительную модель. Созданный программный модуль получил название MCFL-Chem. В работе подробно представлены описание используемой математической модели и вычислительных методов, а также общий алгоритм решения и детали реализации. В основу модуля положена авторская

библиотека `libchem`, реализующая решение уравнений химической кинетики, связь которой с основной программой осуществляется с помощью функций модуля. Валидация и верификация проводятся на нескольких задачах о горении водорода и кислорода в рамках смеси из 9 компонент и схеме из 20 элементарных реакций, результаты сравниваются с данными из открытых источников и расчетов в программном комплексе Ansys Fluent. Поскольку основное внимание уделяется реализации модуля и его тестированию, решение диффузионной части системы на данном этапе работ осуществляется с помощью простой явной схемы, внедрение специального расщепления в случае реагирующих течений предполагается выполнить в последующих работах.

2 Основные уравнения для описания течения смеси реагирующих газов

Используемая в работе математическая модель для расчета высокоскоростных течений смесей реагирующих газов основана на моделях из работ [2, 3] и подробно рассмотрена в [4, 6]. Ниже она будет представлена в сокращенном виде.

Основой модели является система уравнений Навье–Стокса, записанная для смеси идеальных несовершенных газов с учетом дополнительных эффектов, связанных с компонентным составом: переносом отдельных компонент, диффузией и химическими реакциями между ними. В работах [4, 6] также рассматривались эффекты, связанные с осреднением уравнений и использованием для их замыкания моделей турбулентности. В настоящей работе предполагается, что уравнения рассматриваются без осреднения. Это связано со сложностью правильного учета влияния турбулентных эффектов на процесс горения смеси [12]. Внедрение в общую схему моделей турбулентного горения предполагается выполнить в дальнейших работах. Таким образом, рассматриваемая система уравнений имеет следующий вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (1)$$

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

$$\frac{\partial (\rho e_t)}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho e_t + p) \mathbf{u}) = -\nabla \cdot \mathbf{q} + \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{u}), \quad (3)$$

$$\frac{\partial (\rho Y_m)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_m \mathbf{u}) = -\nabla \cdot \boldsymbol{\Gamma}_m + \dot{\omega}_m. \quad (4)$$

Здесь p и ρ – массовая плотность и давление смеси соответственно, e_t – удельная полная («total chemical energy» в [2]) энергия смеси, $\mathbf{u} = (u, v, w)^T$ –

вектор скорости смеси, $m = 1 \dots N_{\text{sp}}$ – индекс компонента смеси, N_{sp} – число компонент, Y_m – относительная массовая концентрация (массовая доля) компонента m , $\boldsymbol{\tau}$ – тензор вязких напряжений, \mathbf{q} – вектор теплового потока, $\boldsymbol{\Gamma}_m$ – вектор диффузионного потока соответствующей компоненты смеси, $\dot{\omega}_m$ – приток компонента m за счет химических реакций (массовая скорость производства вещества). Также должны быть выполнены следующие нормировочные соотношения:

$$\sum_m Y_m = 1, \quad \sum_m \dot{\omega}_m = 0, \quad \sum_m \boldsymbol{\Gamma}_m = \mathbf{0}. \quad (5)$$

Тензор вязких напряжений $\boldsymbol{\tau}$ записывается как

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

где μ – коэффициент динамической вязкости смеси, \mathbf{I} – единичный тензор.

Выражение для удельной полной энергии смеси имеет вид

$$e_t = e + \frac{\mathbf{u}^2}{2} = h - \frac{p}{\rho} + \frac{\mathbf{u}^2}{2}. \quad (6)$$

Здесь e и h – удельная внутренняя энергия и удельная энтальпия смеси («sensible+chemical» в [2]). В свою очередь энтальпия может быть выражена через соответствующие энтальпии для отдельных компонент следующим образом:

$$h = \sum_m h_m Y_m, \quad h_m \equiv h_{s,m} + \Delta h_m^0 = \int_{T_0}^T C_{p,m}(\theta) d\theta + \Delta h_m^0, \quad (7)$$

где $C_{p,m}$ – удельная теплоемкость компонента m при постоянном давлении, $h_{s,m}$ – энтальпийная функция компонента, Δh_m^0 – энтальпия, требуемая для образования 1 кг компонента m при опорной температуре $T_0 = 298.15$ °К.

Уравнение состояния смеси совершенных неидеальных газов записывается в виде:

$$p = \rho R T = \rho \frac{\mathcal{R}}{W} T, \quad \frac{1}{W} = \sum_m \frac{Y_m}{W_m}, \quad (8)$$

где T – температура смеси, R и \mathcal{R} – индивидуальная и универсальная газовые постоянные соответственно, W и W_m – молярная масса смеси и отдельного компонента. Таким образом, смесь газов может быть представлена как некоторый несовершенный газ с «эффективными» параметрами, при этом

из термодинамических соотношений также следует сохранение формулы для скорости звука c , справедливой в случае политропного газа:

$$\gamma \equiv \frac{C_p}{C_v} = \frac{c^2}{RT},$$

γ – показатель адиабаты, C_p и C_v – удельные теплоемкости смеси при постоянном давлении и постоянном объеме, определяемые через соответствующие величины для компонент:

$$C_p = \sum_m C_{p,m} Y_m, \quad C_v = \sum_m C_{v,m} Y_m. \quad (9)$$

Вектор суммарного теплового потока в смеси реагирующих газов состоит из двух частей: теплового потока, связанного с градиентом температуры в соответствии с законом Фурье [13], а также потока, обусловленного диффузией компонент:

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T + \sum_m h_m \mathbf{\Gamma}_m,$$

где λ – коэффициент теплопроводности смеси. Диффузионные потоки компонент описываются моделью средних по смеси значений [14] согласно закону Фика с поправкой [15] (для обеспечения выполнения условий нормировки (5)):

$$\mathbf{\Gamma}_m = -\rho D_m \nabla Y_m + \rho Y_m \sum_m D_m \nabla Y_m,$$

где D_m – средний коэффициент диффузии компонента m относительно смеси.

3 Уравнения химических реакций

Моделирование химических реакций между компонентами газовой смеси осуществляется согласно стандартной кинетической схеме [2, 16]. Предположим, что реагирующая смесь состоит из M химических компонент (как и ранее, m – индекс отдельного компонента), между которыми может протекать N реакций (n – индекс отдельной реакции) со следующими стехиометрическими уравнениями:

$$\sum_m \nu'_{mn} \mathcal{C}_m \Leftrightarrow \sum_m \nu''_{mn} \mathcal{C}_m, \quad n = 1 \dots N.$$

Здесь ν''_{mn} и ν'_{mn} – стехиометрические коэффициенты компонента m в продуктах и исходных веществах реакции n , \mathcal{C}_m – химический символ реагента m .

Массовая скорость притока компонента m в результате всех химических реакций равна

$$\dot{\omega}_m = W_m \sum_n \nu_{mn} \dot{q}_n, \quad \nu_{mn} = \nu''_{mn} - \nu'_{mn},$$

где \dot{q}_n – скорость протекания n -й реакции, имеющая вид

$$\dot{q}_n = K_{f,n} \prod_m [X_m]^{\nu'_{mn}} - K_{r,n} \prod_m [X_m]^{\nu''_{mn}}. \quad (10)$$

Здесь $K_{f,n}$ и $K_{r,n}$ – константы скорости прямой и обратной реакций, $[X_m]$ – молярная концентрация вещества m , которая выражается через массовые доли согласно формуле

$$[X_m] = \rho \frac{Y_m}{W_m}.$$

Константа скорости прямой реакций определяется из закона Аррениуса [2] в виде

$$K_{f,n} = A_{f,n} T^{\beta_n} \exp\left(-\frac{E_{f,n}}{\mathcal{R}T}\right), \quad (11)$$

где $A_{f,n}$ – предэкспоненциальный множитель, β_n – показатель степени в температурном факторе, $E_{f,n}$ – энергия активации. Константа скорости обратной реакции определяется через константу равновесия:

$$K_{r,n} = \frac{K_{f,n}}{K_{c,n}}, \quad K_{c,n} = \left(\frac{p_0}{\mathcal{R}T}\right)^\nu \exp\left(\frac{\Delta\tilde{s}_n}{\mathcal{R}} - \frac{\Delta\tilde{h}_n}{\mathcal{R}T}\right), \quad \nu = \sum_m \nu_{mn}.$$

Здесь p_0 – опорное значение давления, ν – изменение числа молей при протекании реакции n , $\Delta\tilde{h}_n$ и $\Delta\tilde{s}_n$ – изменение молярных энтальпии и энтропии при переходе от исходных веществ к продуктам реакции:

$$\Delta\tilde{h}_n = \sum_m \nu_{mn} \tilde{h}_m, \quad \Delta\tilde{s}_n = \sum_m \nu_{mn} \tilde{s}_m,$$

\tilde{h}_m и \tilde{s}_m – молярная энтальпия и энтропия соответствующей компоненты. При наличии в реакции «третьего» тела скорость реакции (10) дополнительно умножается на коэффициент, зависящий от молярных концентраций [2]:

$$\dot{q}_n = \left(\sum_m \alpha_{mn} [X_m]\right) \left(K_{f,n} \prod_m [X_m]^{\nu'_{mn}} - K_{r,n} \prod_m [X_m]^{\nu''_{mn}}\right),$$

где α_{mn} – весовые коэффициенты компонент при наличии в реакции третьего тела.

4 Теплофизические и транспортные свойства компонент и смеси

Для замыкания системы уравнений (1)–(4) для каждого вещества (компонента смеси) требуется определить его теплофизические свойства – удельные энтальпию h_m , энтропию s_m и теплоемкость при постоянном давлении $C_{p,m}$, а также коэффициенты переноса – динамическую вязкость μ_m , коэффициент теплопроводности λ_m и коэффициент диффузии компонента относительно смеси D_m , через которые выражаются соответствующие усредненные величины для всей смеси.

На практике вычисление теплофизических свойств веществ выполняется по заранее сформированным таблицам в виде полиномов высокого порядка [17–19] относительно температуры. Обычно аппроксимация осуществляется в двух температурных интервалах (как правило, 300–1000 °К и 1000–5000 °К, хотя для отдельных веществ границы диапазонов могут быть другими). В настоящей работе используется следующая форма полиномов:

$$\begin{aligned}\frac{\tilde{C}_{p,m}}{\mathcal{R}} &= a_{0,m} + a_{1,m}T + a_{2,m}T^2 + a_{3,m}T^3 + a_{4,m}T^4, \\ \frac{\tilde{h}_m}{\mathcal{R}T} &= a_{0,m} + \frac{a_{1,m}}{2}T + \frac{a_{2,m}}{3}T^2 + \frac{a_{3,m}}{4}T^3 + \frac{a_{4,m}}{5}T^4 + \frac{a_{5,m}}{T}, \\ \frac{\tilde{s}_m}{\mathcal{R}} &= a_{0,m} \ln(T) + a_{1,m}T + \frac{a_{2,m}}{2}T^2 + \frac{a_{3,m}}{3}T^3 + \frac{a_{4,m}}{4}T^4 + a_{6,m},\end{aligned}\quad (12)$$

где $\tilde{(\cdot)}$ обозначает, что соответствующая величина относится к одному молю вещества. При необходимости другие термодинамические параметры индивидуальных веществ вычисляются как функции $\tilde{C}_{p,m}$, \tilde{h}_m и \tilde{s}_m :

$$\begin{aligned}\tilde{C}_{v,m} &= \tilde{C}_{p,m} - \mathcal{R}, \\ \tilde{e}_m &= \tilde{h}_m - \mathcal{R}T.\end{aligned}$$

При этом удельные (массовые) величины выражаются как $f_m = \tilde{f}_m/W_m$, $f = e, h, s, C_p, C_v$.

Коэффициенты переноса рассчитываются на основе молекулярно-кинетической теории. Эффективный коэффициент диффузии компонента относительно смеси D_m вычисляется через бинарные коэффициенты диффузии $D_{m,l}$ усреднением по правилу Уилки [20]:

$$D_m = \left(\frac{1}{W} - \frac{Y_m}{W_m} \right) \left(\sum_{l=1, l \neq m}^{N_{sp}} \frac{Y_l}{W_l D_{m,l}} \right)^{-1}.$$

Бинарные коэффициенты $D_{m,l}$ вычисляются с помощью аппроксимационных соотношений на основе кинетической теории Чепмена-Энскога [21]:

$$D_{m,l} = \frac{3}{16} \sqrt{\frac{2k_B T}{\pi w_{m,l}}} \frac{1}{n_c \sigma_{m,l}^2 \Omega_{m,l}^{(1,1)*}}. \quad (13)$$

Здесь n_c – концентрация частиц, $w_{m,l}^{-1} = w_m^{-1} + w_l^{-1}$, $w_m = W_m/N_A$ – приведенная масса пары частиц компонентов, N_A – число Авогадро, $\sigma_{m,l} = 0.5(\sigma_m + \sigma_l)$ – диаметр столкновения, который можно рассматривать как эффективный молекулярный диаметр для столкновений частиц типов веществ m и l , $\Omega_{m,l}^{(1,1)*}$ – приведенный интеграл столкновений веществ m и l , рассчитываемый для потенциала Леннарда-Джонса с учетом зависимости от приведенной температуры $T_{m,l} = k_B T / \varepsilon_{m,l}$, k_B – постоянная Больцмана, $\varepsilon_{m,l} = \sqrt{\varepsilon_m \varepsilon_l}$ – эффективная глубина потенциальной ямы для столкновений частиц веществ m и l . После подстановки соответствующих параметров формула (13) может быть преобразована к следующему виду, используемому в практических расчетах:

$$D_{m,l} = 5.8825 \times 10^{-4} \frac{\sqrt{(W_m^{-1} + W_l^{-1}) T^3}}{p \sigma_{m,l}^2 \Omega_{m,l}^{(1,1)*}}. \quad (14)$$

Следует отметить, что численная константа в приведенном выше уравнении (14) является размерной и вычислена для системы СИ, таким образом, $D_{m,l}$ здесь имеет размерность м²/с. Величины σ_m и ε_m/k_B табулированы [3] и подставляются без изменений в исходных размерностях в ангстремах и кельвинах соответственно. Приведенный безразмерный интеграл $\Omega_{m,l}^{(1,1)*}$ определяется приближенно [22]:

$$\Omega_{m,l}^{(1,1)*} = 1.074 \cdot T_{m,l}^{-0.1604}.$$

Коэффициенты вязкости и теплопроводности смеси вычисляются через соответствующие величины для отдельных компонент следующим образом [23, 24]:

$$\mu = \frac{1}{2} \left[\sum_m X_m \mu_m + \left(\sum_m X_m / \mu_m \right)^{-1} \right], \quad (15)$$

$$\lambda = \frac{1}{2} \left[\sum_m X_m \lambda_m + \left(\sum_m X_m / \lambda_m \right)^{-1} \right], \quad (16)$$

где $X_m = Y_m W / W_m$ – мольные доли компонент. Отметим, что для вязкости смеси часто используются формулы на основе комбинаторных соотношений

Уилке, не приводящие, однако, к заметным различиям в распределении концентраций компонент [3].

Эффективные коэффициенты вязкости и теплопроводности m -го компонента смеси записываются согласно кинетической теории следующим образом [25]:

$$\mu_m = \frac{5}{16} \sqrt{\frac{w_m k_B T}{\pi}} \frac{1}{\sigma_m^2 \Omega_m^{(2,2)*}}, \quad (17)$$

$$\lambda_m = \frac{75}{64} \sqrt{\frac{k_B^3 T}{\pi w_m}} \frac{1}{\sigma_m^2 \Omega_m^{(2,2)*}}, \quad (18)$$

где $\Omega_m^{(2,2)*}$ – второй приведенный интеграл столкновений, вычисляемый приближенно аналогично первому интегралу [22]:

$$\Omega_m^{(2,2)*} = 1.157 \cdot T_m^{-0.1472}.$$

В практических расчетах после подстановки параметров в размерном виде в системе Си формулы (17)–(18) приобретают вид:

$$\mu_m = 8.44 \times 10^{-5} \frac{\sqrt{W_m T^3}}{\sigma_m^2 \Omega_m^{(2,2)*}}, \quad (19)$$

$$\lambda_m = 2.6341 \times 10^{-3} \sqrt{\frac{T}{W_m}} \frac{1}{\sigma_m^2 \Omega_m^{(2,2)*}}, \quad (20)$$

где μ_m имеет размерность Па·с, λ_m – Вт/(м·°К). Подробнее вывод соответствующих размерных констант представлен в приложении.

5 Дополнительные соотношения

В данном разделе приведем дополнительные соотношения и полезные формулы, которые далее потребуются при построении общей схемы решения основных уравнений математической модели.

Уравнение теплопроводности. Уравнение сохранения энергии (3), записанное относительно полной энергии смеси, можно переписать в нескольких альтернативных формах. В частности, получить уравнение теплопроводности смеси:

$$\rho C_p \frac{dT}{dt} = - \sum_m h_m \dot{\omega}_m - \nabla \cdot \mathbf{q} + \frac{dp}{dt} + \boldsymbol{\tau} : (\nabla \otimes \mathbf{u}),$$

где d/dt обозначает полную (субстанциональную) производную. После подстановки выражений теплового и диффузионного потоков уравнение теплопроводности принимает следующий вид:

$$\rho C_p \frac{dT}{dt} = - \sum_m h_m \dot{\omega}_m + \frac{dp}{dt} + \rho \sum_m D_m \nabla Y_m \nabla h_m + \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \boldsymbol{\tau} : (\nabla \otimes \mathbf{u}). \quad (21)$$

В отличие от уравнения (3) в (21) в явном виде присутствуют температура смеси и массовая скорость притока компонентов, что в дальнейшем позволяет использовать его как дополнительное соотношение при решении системы методом расщепления по физическим процессам.

Отметим также, что часто вместо уравнения (3) в полной системе уравнений используется его энтальпийная форма. Однако следует учесть, что при наличии сильных ударных волн этого делать нельзя, поскольку соотношения на скачках (т.е. в области больших градиентов) будут другими.

Определение температуры смеси. Одним из применяемых на практике способов вычисления температуры смеси является определение температуры как обратной функции к внутренней энергии смеси, которая выражается через ее энтальпию и ее компонентный состав согласно формулам (7) и (12).

В этом случае требуется решить нелинейное уравнение вида

$$F(T) \equiv h(T) - \hat{R}T - \hat{e} = 0 \quad (22)$$

при известных \hat{e} и $\hat{R} = R(\hat{Y}_m)$. Для его решения можно применить метод Ньютона, итерации которого запишутся в виде

$$T_{i+1} = T_i - \frac{h(T_i) - \hat{R}T_i - \hat{e}}{C_p(T_i) - \hat{R}}. \quad (23)$$

В качестве критерия останова используется выражение

$$\Delta T < \varepsilon_r T_0 + \varepsilon_a, \quad \Delta T = T_{i+1} - T_i,$$

где T_0 – известное начальное приближение, ε_r и ε_a – относительная и абсолютная точности метода.

6 Общая схема решения

Моделирование нестационарных трехмерных реагирующих течений представляет собой сложную задачу, требующую аккуратного численного решения с помощью специальных методов вычислительной газовой динамики. В

частности, система уравнений (1)–(4) является жесткой за счет наличия источника, связанного с химическими превращениями компонент смеси. Для эффективной численной реализации решения уравнений математической модели в настоящей работе используется метод расщепления по физическим процессам [26, 27], широко применяемый для задач данного класса [28].

Для пространственной дискретизации системы уравнений (1)–(4) используется узловая конечно-объемная схема. Предполагается, что каждый узел сетки является центром выпуклой ячейки, на гранях которой определяются конвективные и диффузионные потоки. Общее количество ячеек трехмерной расчетной сетки обозначим как N_{cell} , $i = 1 \dots N_{\text{cell}}$ – индекс ячейки, $\sigma = \sigma(i)$ – обозначает ее грани, V_i – объем ячейки, S_σ – площадь конкретной грани ячейки. В полудискретной форме система может быть записана как

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U} + \mathcal{C}_h(\mathbf{U}) + \mathcal{D}_h(\mathbf{U}) = \mathcal{S}_h(\mathbf{U}), \quad (24)$$

где консервативный вектор $\mathbf{U} \equiv (\rho, \rho u, \rho v, \rho w, \rho e_t, \rho Y_m)^T$, \mathcal{C}_h обозначает нелинейный дискретный конвективный оператор, \mathcal{D}_h – нелинейный дискретный диффузионный оператор и \mathcal{S}_h – нелинейный дискретный оператор для описания источников, связанных с химическими реакциями. Далее без ограничения общности будем предполагать, что соответствующие граничные условия накладываются на границах рассматриваемой трехмерной области и включены в определение операторов.

Исходная система уравнений является жесткой из-за сильного различия во временных масштабах происходящих процессов. В силу этого при использовании для временных аппроксимаций явных разностных схем из соображений устойчивости допустимый шаг интегрирования сильно ограничен. Наиболее сильное ограничение на временной шаг следует из условия устойчивости для уравнений химической кинетики, на порядки слабее оно для диффузионной и, далее, конвективной частей системы. Для решения этой проблемы существует несколько путей. Во-первых, можно использовать полностью неявную разностную схему, формально безусловно устойчивую. Однако практическая реализация такой схемы создаст значительные сложности, особенно в случае разработки параллельной версии. Кроме того, как было показано в [29] на примере простейшего уравнения теплопроводности, даже при не очень высоких требованиях к точности соотношение между пространственным шагом сетки и временным шагом для неявной схемы почти такое же, как и обеспечивающее требование устойчивости для аналогичной явной схемы. Поэтому для обеспечения приемлемой точности нестационарного расчета условие Куранта в общем случае не может быть нарушено очень сильно. В то же время для жестких систем ОДУ разработаны специальные неявные методы [30], позволяющие обеспечить их решение с нужным временным шагом и заданной

точностью, однако требующие значительных вычислительных ресурсов, что делает их применение для всей системы уравнений затруднительным. Второй путь к преодолению проблемы слишком малых шагов интегрирования по времени заключается в построении явно- неявных алгоритмов совместно со схемами расщепления по физическим процессам. На таком подходе основана схема решения, используемая в настоящей работе: конвективная и диффузионная части системы считаются по явной схеме, блок с уравнениями химической кинетики – по неявной схеме специального типа. Поскольку уравнения химической кинетики решаются в каждой ячейке изолированно от остальных, такой подход допускает эффективную параллельную реализацию. В дальнейшем планируется внедрение в схему дополнительного расщепления конвективно-диффузионной части из работы [5] на основе метода [11], что позволит интегрировать всю систему исходя только из ограничения шага для конвективной ее части (как показывает практика, при горении водорода в воздухе конвективное и диффузионное числа Куранта могут отличаться в несколько раз).

Применив к системе (24) процедуру расщепления по физическим процессам на малом временном интервале $[t_k, t_{k+1}]$, получим следующую схему [26, 27]:

$$\text{Шаг 1 : } \frac{\partial}{\partial t} \hat{\mathbf{U}} = \mathcal{S}_h(\hat{\mathbf{U}}), \quad \hat{\mathbf{U}}^k = \mathbf{U}^k, \quad (25)$$

$$\text{Шаг 2 : } \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U} + \mathcal{C}_h(\mathbf{U}) + \mathcal{D}_h(\mathbf{U}) = \mathbf{0}, \quad \mathbf{U}^k = \hat{\mathbf{U}}^{k+1}, \quad (26)$$

уравнения в которой решаются последовательно, каждое с помощью своего метода (неявный многошаговый метод решения жестких систем ОДУ для интегрирования уравнений химической кинетики (25) и явная разностная схема Эйлера для уравнения конвекции–диффузии (26)). Таким образом, переход на новый временной слой формально осуществляется с помощью композиции операторов. Вычисление одного шага по времени на основе представленной схемы расщепления оформлено в виде алгоритма 1. Остановимся на его отдельных частях более подробнее, для наглядности предварительно перейдя к используемому в работе конкретному виду операторов схемы, записав входящие в нее уравнения как

$$\text{Шаг 1 : } \frac{\partial \rho Y_m}{\partial t} = \dot{\omega}_m, \quad (27)$$

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = - \sum_m h_m \dot{\omega}_m + \frac{\partial p}{\partial t}, \quad (28)$$

Алгоритм 1 Расчет одного временного шага: $t_k \rightarrow t_{k+1}$

1. Инициализация: известны \mathbf{U}^k и все вторичные переменные
 2. Вычисление текущего временного шага τ_k
 3. Вычисление источников, получение $\hat{\mathbf{U}}$
 4. Обновление поля вторичных переменных по $\hat{\mathbf{U}}$
 5. Вычисление диффузионных и конвективных потоков
 6. Обновление поля: расчет \mathbf{U}^{k+1} и вторичных переменных.
-

$$\text{Шаг 2 : } \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (29)$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}, \quad (30)$$

$$\frac{\partial (\rho e_t)}{\partial t} + \nabla \cdot ((\rho e_t + p) \mathbf{u}) = -\nabla \cdot \mathbf{q} + \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{u}), \quad (31)$$

$$\frac{\partial (\rho Y_m)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_m \mathbf{u}) = -\nabla \cdot \boldsymbol{\Gamma}_m. \quad (32)$$

Расчет шага по времени. Согласно используемой методике расщепления системы по физическим процессам и отдельного интегрирования уравнений химической кинетики с помощью специальных методов, временной шаг определяется из условия устойчивости явной схемы для подсистемы уравнений (29)–(32) [31] (будет представлена в соответствующем параграфе далее):

$$\tau_k \leq \left(\tau_{\text{conv},k}^{-1} + \tau_{\text{diff},k}^{-1} \right)^{-1}.$$

После подстановки всех параметров схемы входящие в формулу величины записываются следующим образом (номер временного слоя k опущен):

$$1/\tau_{\text{conv}} = \sqrt{3} \max_i \left(\frac{|\mathbf{u}|_i + c_i}{d_i} \right), \quad i = 1 \dots N_{\text{cell}}, \quad (33)$$

$$1/\tau_{\text{diff}} = 12 \max_i \left(\frac{1}{d_i^2} \left[\frac{1}{\rho_i} \max \left\{ \frac{4}{3} \mu_i, \frac{\lambda_i}{C_{p,i}} \right\}, \max_m D_{m,i} \right] \right), \quad (34)$$

где $d_i = \alpha V_i / S_{\text{max},i}$ – характерный размер ячейки (для тетраэдральной сетки $\alpha = 3$, гексагональной – $\alpha = 1$), $S_{\text{max},i}$ – максимальная из площадей ее граней.

Расчет источников, связанных с химическими реакциями. В общем виде подсистема уравнений, полученная расщеплением исходной относительно влияния источников из уравнений химической кинетики, записывалась как (25). Для получения ее конкретного вида, а именно формулы (28), вместо уравнения (3) использовалось уравнение теплопроводности (21), в котором явно фигурирует источник массы в результате химических реакций. Полученная таким образом подсистема уравнений химической кинетики представляет собой некоторый химический реактор, состав которого и температура должны быть рассчитаны исходя из ограничений, накладываемых постановкой задачи [32]. В рассматриваемом случае, когда для пространственных аппроксимаций использовался метод конечных объемов на постоянных эйлеровых сетках, таким ограничением является постоянство объема ячейки, в которой осуществляется расчет реактора.

Химический реактор с постоянным объемом для системы (27)–(28) относительно молярных величин может быть записан в следующем виде

$$\frac{\partial[X_m]}{\partial t} = \sum_n \nu_{mn} \dot{q}_n, \quad (35)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = - \frac{\sum_m (\tilde{h}_m - \mathcal{R}T) \sum_n \nu_{mn} \dot{q}_n}{\sum_m \tilde{C}_{p,m}[X_m] - \mathcal{R} \sum_m [X_m]}, \quad (36)$$

т.е. $\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{f}(\mathbf{y})$, $\mathbf{y} = ([X_m], T)^T$. Согласно (25) его необходимо проинтегрировать на временном интервале $[t_k, t_{k+1}]$ с начальными данными $[X_m]_k$ и T_k для определения величин $[\hat{X}_m]$ и \hat{T}_k . Интегрирование осуществляется с помощью одного из методов BDF семейства неявных многошаговых методов интегрирования жестких систем ОДУ [33].

После вычисления $[\hat{X}_m]$ и \hat{T}_k обновляются все остальные переменные модели, при этом в векторе консервативных величин обновляется только поле массовых концентраций, поскольку массовая плотность смеси и полная энергия в результате химических реакций в случае реактора постоянного объема не изменяются. Давление смеси вычисляется из уравнения состояния (8), вторичные величины пересчитываются как функции концентраций и температуры.

Расчет диффузионной и конвективной частей системы. Система уравнений (29)–(32) (в общем виде (26)) дискретизируется с помощью явной конечно-объемной схемы годуновского типа [34]:

$$V_i \frac{\mathbf{U}_i^{k+1} - \mathbf{U}_i^k}{\tau_k} + \sum_{\sigma} S_{\sigma} \mathbf{F}_{\sigma}(\mathbf{U}_{\sigma}^k) + \sum_{\sigma} S_{\sigma} \mathbf{G}_{\sigma}(\mathbf{U}_{\sigma}^k) = \mathbf{0}, \quad (37)$$

где $\mathbf{F}_\sigma(\mathbf{U}^k)$ и $\mathbf{G}_\sigma(\mathbf{U}^k)$ – конвективный и диффузионные потоки через грань. Согласно схеме расщепления все величины на начало временного слоя берутся из соответствующих значений на конец шага расчета источников, т.е. здесь $\mathbf{U}^k := \hat{\mathbf{U}}^{k+1}$ и т.д.

Диффузионные потоки дискретизируются стандартным образом с использованием центрально-разностных аппроксимаций производных. Для вычисления конвективных потоков на грани используется точное решение соответствующей задачи Римана для совершенного идеального многокомпонентного газа [7, 8, 35], позволяющее учесть особенности течений с сильными ударными волнами. Как показывает практика, при рассмотрении смесей совершенных неидеальных газов решение такой задачи Римана можно успешно использовать как некоторую аппроксимацию, при этом формула для внутренней энергии приводится к виду

$$e = \bar{h} - \frac{p}{\rho(\gamma - 1)}, \quad \bar{h} = h - C_p T. \quad (38)$$

Известной проблемой схем Годуновского типа для уравнений многокомпонентной газовой динамики является возникновение в ряде случаев осцилляций на контактных границах между газами с существенно различающимися параметрами, что требует внесения модификаций в схему расчета конвективных частей системы. В настоящей работе мы используем модифицированную схему Годунова на основе метода двойного потока («double flux method») для расчета конвективной части системы, подробно описанного и исследованного в работах [8, 9, 36, 37]. Суть метода заключается в корректировке процедуры расчета потока через грани ячейки, в результате которой на каждой грани вместо одного потока с общими для грани параметрами вычисляются два разных потока для ячеек слева и справа от грани при фиксации ряда параметров из ячеек.

Кратко проиллюстрируем метод на примере одномерного варианта системы уравнений Эйлера, полученной из (37) выделением конвективной части. В такой постановке она записывается в виде

$$\frac{\mathbf{U}_i^{k+1} - \mathbf{U}_i^k}{\tau_k} + \frac{\mathbf{F}(\mathbf{U}_{i+1/2}^k) - \mathbf{F}(\mathbf{U}_{i-1/2}^k)}{d_i} = \mathbf{0}, \quad (39)$$

где полуцелыми индексами обозначены грани ячеек, d_i – шаг сетки по пространству, $\mathbf{U} = (\rho, \rho u, \rho e_t, \rho Y_m)^T$, $\mathbf{F}(\mathbf{U}) = (\rho u, \rho u^2 + p, u(\rho e_t + p), \rho u Y_m)^T$.

Предположим, что на грани с индексом $i+1/2$ расположен изолированный контактный разрыв с постоянными $u = \text{const} \neq 0$ и $p = \text{const}$ на момент времени t_k . Тогда уравнения баланса массы и импульса при расчете значений на следующем временном слое в стандартной схеме Годунова будут иметь

вид [9]

$$\rho_i^{k+1} = \rho_i^k - \frac{u\tau_k}{d_i} \left(\rho_{i+1/2}^k - \rho_{i-1/2}^k \right), \quad (40)$$

$$(\rho u)_i^{k+1} = (\rho u)_i^k - \frac{u^2\tau_k}{d_i} \left(\rho_{i+1/2}^k - \rho_{i-1/2}^k \right), \quad (41)$$

т.е. $(\rho u)_i^{k+1} = u\rho_i^{k+1}$ и, следовательно, $u_i^{k+1} = u_i^k = u$. С учетом (38), (40) и (41) аналогично преобразовывается и уравнение энергии:

$$\begin{aligned} & (\rho\bar{h})_i^{k+1} - (\rho\bar{h})_i^k + p \left(\frac{1}{\gamma_i^{k+1} - 1} - \frac{1}{\gamma_i^k - 1} \right) + \frac{1}{\gamma_i^{k+1} - 1} (p_i^{k+1} - p_i^k) = \\ & = -u \frac{\tau_k}{d_i} \left[(\rho\bar{h})_{i+1/2}^k - (\rho\bar{h})_{i-1/2}^k + p \left(\frac{1}{\gamma_{i+1/2}^k - 1} - \frac{1}{\gamma_{i-1/2}^k - 1} \right) \right]. \end{aligned} \quad (42)$$

Очевидно, что $p_i^{k+1} = p_i^k$ только если γ и $\rho\bar{h}$ не изменяются на интервале $[i - 1/2, i + 1/2] \times [k, k + 1]$. На этом постулате и основан метод двойного потока, заключающийся в расщеплении процедуры расчета годуновского потока для уравнения энергии. В результате ее вычисление происходит по схеме «предиктор–корректор» с определением давления на этапе предиктора.

На первом шаге схемы значение полной энергии в ячейке вычисляется с помощью потоков, рассчитанных при фиксированных для данной ячейки γ и $\rho\bar{h}$. Т.е. для грани с номером $i + 1/2$ вычисляются два разных потока: левый «L» с γ_i , $\rho\bar{h}_i$, и правый «R» с γ_{i+1} , $\rho\bar{h}_{i+1}$, что позволяет в рамках каждой ячейки локально удовлетворить условию (42). Соответствующий шаблон для схемы первого порядка и стандартного потока с использованием точного римановского солвера представлен на рис. 1. При этом, т.к. компонентный состав смеси учитывается на уровне решения задачи о распаде разрыва, ее вычисление осуществляется один раз для каждой грани и корректируется только соответствующая величина в потоке энергии. Таким образом, первый шаг модифицированного алгоритма может быть записан как

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} \rho^{k+1} \\ (\rho u)^{k+1} \\ (\rho e_t)^* \\ (\rho Y_m)^{k+1} \end{bmatrix}_i = \begin{bmatrix} \rho^k \\ (\rho u)^k \\ (\rho e_t)^k \\ (\rho Y_m)^k \end{bmatrix}_i - \\ & - \frac{\tau_k}{d_i} \left[\mathbf{F}^L \left(\mathbf{U}_{i+1/2}^k, (\rho\bar{h}_i)^k, \gamma_i^k \right) - \mathbf{F}^R \left(\mathbf{U}_{i-1/2}^k, (\rho\bar{h}_i)^k, \gamma_i^k \right) \right]. \end{aligned} \quad (43)$$

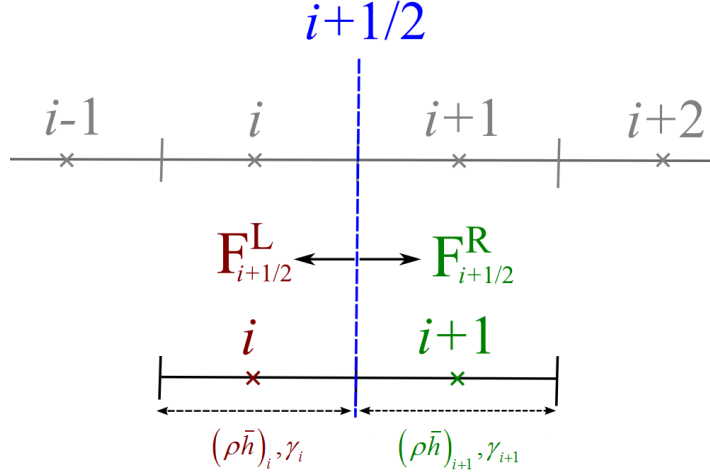


Рис. 1. Метод двойного потока для грани $i + 1/2$, [9]

На втором шаге алгоритма по полученному значению предиктора к энергии производится вычисление давления согласно (38) с теми же фиксированными $\rho\bar{h}$ и γ

$$p_i^{k+1} = (\gamma_i^{k+1} - 1) \left[(\rho e_t)_i^* - (\rho\bar{h}_i)^k - \frac{1}{2}(\rho u^2)_i^{k+1} \right] \quad (44)$$

и, далее, температуры согласно уравнению состояния (8):

$$T_i^{k+1} = \frac{p_i^{k+1}}{\rho_i^{k+1} R_i^{k+1}}, \quad R^{k+1} = R(Y_m^{k+1}). \quad (45)$$

После этого по T^{k+1} и Y_m^{k+1} вычисляются вторичные переменные C_p^{k+1} , γ^{k+1} и \bar{h}^{k+1} и, наконец, полная энергия смеси

$$e_{t,i}^{k+1} = \bar{h}_i^{k+1} + \frac{p_i^{k+1}}{\rho_i^{k+1} (\gamma_i^{k+1} - 1)} + \frac{1}{2}(u_i^{k+1})^2. \quad (46)$$

При использовании метода двойного потока нарушается консервативность схемы, вследствие чего неизбежно возникает ошибка в балансе полной энергии. Однако, как показывает практика, в большинстве случаев она не оказывает существенного влияния на полное решение задачи. Анализу данного вопроса посвящены работы [37, 38].

Для внедрения представленного метода в схему решения уравнений конвекции–диффузии (37) запишем данную систему в следующем виде:

$$\mathbf{U}_i^{k+1} = \mathbf{U}_i^k - \frac{\tau_k}{V_i} \sum_{\sigma} S_{\sigma} (\mathbf{F}_{\sigma}(\mathbf{U}_{\sigma}^k) + \mathbf{G}_{\sigma}(\mathbf{U}_{\sigma}^k)). \quad (47)$$

Для сохранения правильного порядка действий в методе двойного потока выделим расчет ее конвективной части в отдельный шаг следующим образом

$$\mathbf{U}_{\text{conv},i}^{k+1} = \mathbf{U}_i^k - \frac{\tau_k}{V_i} \sum_{\sigma} S_{\sigma} \mathbf{F}_{\sigma}(\mathbf{U}_{\sigma}^k), \quad (48)$$

$$\mathbf{U}_i^{k+1} = \mathbf{U}_{\text{conv},i}^{k+1} - \frac{\tau_k}{V_i} \sum_{\sigma} S_{\sigma} \mathbf{G}_{\sigma}(\mathbf{U}_{\sigma}^k), \quad (49)$$

где метод двойного потока с пересчетом давления и энергии применяется только для вычисления $\mathbf{U}_{\text{conv},i}^{k+1}$.

Расчет одного временного слоя завершается вычислением по \mathbf{U}^{k+1} всех оставшихся величин модели. В частности, температуры смеси по ее полной энергии и концентрациям согласно формуле (23).

7 Программная реализация

Программный модуль MCFL-Chem является дополнением программы MCFL-NOISEtte [6], предназначенной для моделирования высокоскоростных течений смесей газов, реализованной на базе платформы NOISEtte [10]. В основу модуля положена авторская библиотека libchem, реализующая решение уравнений химической кинетики (раздел 3), связь которой с основной программой осуществляется с помощью функций модуля. Libchem реализует функционал «химического реактора», т.е. выполняет решение уравнений химической кинетики вида $\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{f}(\mathbf{y})$ при наличии тех или иных ограничений, таких как постоянство объема, давления или потока тепла. В настоящей работе используется реактор с постоянным объемом (система уравнений (35) и (36), полученная при условии постоянства объема ячейки):

$$\begin{aligned} \frac{\partial[X_m]}{\partial t} &= \sum_n \nu_{mn} \dot{q}_n, \\ \frac{\partial T}{\partial t} &= - \frac{\sum_m (\tilde{h}_m - \mathcal{R}T) \sum_n \nu_{mn} \dot{q}_n}{\sum_m \tilde{C}_{p,m}[X_m] - \mathcal{R} \sum_m [X_m]}. \end{aligned}$$

Также в библиотеке реализованы общие случаи реактора с с постоянной температурой:

$$\frac{\partial[X_m]}{\partial t} = \sum_n \nu_{mn} \dot{q}_n$$

и реактора с постоянным давлением:

$$\frac{\partial Y_m}{\partial t} = \frac{W_m}{\rho} \sum_n \nu_{mn} \dot{q}_n,$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{1}{\rho} \frac{\sum_m \tilde{h}_m \sum_n \nu_{mn} \dot{q}_n}{\sum_m \tilde{C}_{p,m} Y_m / W_m}.$$

Следует отметить, что уравнения реактора с постоянным давлением специально записаны относительно массовых долей, поскольку только этот вид позволяет записать систему в компактной форме, удобной для интегрирования. В случае использования в кинетической схеме реакций нестандартного вида, константы скоростей которых не могут быть выражены как (11), требуется модификация используемого реактора для каждого конкретного случая.

Модуль MCFL-Chem и библиотека libchem написаны на языке программирования C++. Для интегрирования системы уравнений химической кинетики используются методы библиотеки CVODE [39], расчет якобианов системы для которых осуществляется методом автоматического дифференцирования, реализованным с помощью функций библиотеки Adept [40].

8 Верификационные расчеты

В рамках проведения валидационных и верификационных расчетов разработанной методики были рассмотрены несколько задач, описывающих горение водорода в воздухе в различных постановках. Результаты расчетов сравнивались с опубликованными в литературе данными, а также с расчетами, проведенными с помощью программного комплекса Ansys Fluent (License Ansys Hybrid 12032019_05255_603_AM, Customer №511564 (KIAM RAS)) с подключаемым модулем для решения задач химической кинетики Chemkin [41, 42].

Для всех задач предполагалось, что многокомпонентный газ является смесью совершенных неидельных газов, для которых известны полиномиальные зависимости теплофизических параметров от температуры в виде [19]. Смесью состоит из 9 компонент: H_2 , H , O_2 , O , OH , HO_2 , H_2O_2 , H_2O и N_2 , теплофизические свойства которых представлены в таблицах 1 и 2, транспортные – в таблице 3 (в виде параметров потенциала Ленарда-Джонса, используемых в формулах (14), (19), (20)). Для всех веществ теплофизические свойства указаны для интервала температур $[300, 5000]^\circ\text{K}$ с промежуточной температурой разделения $T_{\text{mid}} = 1000^\circ\text{K}$.

Между компонентами смеси могут протекать 20 элементарных реакций, кинетический механизм которых представлен в таблице 4, коэффициенты

Таблица 1. Теплофизические свойства компонент смеси H₂, H, O₂, O, OH.

$a_i^{up,low}$ \ C_m	H ₂	H	O ₂	O	OH
a_0^{up}	2.9914230e+00	2.5000000e+00	3.6975780e+00	2.5420600e+00	2.8827300e+00
a_1^{up}	7.0006440e-04	0.0	6.1351970e-04	-2.755062e-05	1.0139740e-03
a_2^{up}	-5.633829e-08	0.0	-1.258842e-07	-3.102803e-09	-2.276877e-07
a_3^{up}	-9.231578e-12	0.0	1.7752810e-11	4.5510670e-12	2.1746840e-11
a_4^{up}	1.5827520e-15	0.0	-1.136435e-15	-4.368052e-16	-5.126305e-16
a_5^{up}	-8.350340e+02	2.5471630e+04	-1.233930e+03	2.9230800e+04	3.8868880e+03
a_6^{up}	-1.355110e+00	-4.601176e-01	3.1891660e+00	4.9203080e+00	5.5957120e+00
a_0^{low}	3.2981240e+00	2.5000000e+00	3.2129360e+00	2.9464290e+00	3.6372660e+00
a_1^{low}	8.2494420e-04	0.0	1.1274860e-03	-1.638166e-03	1.8509100e-04
a_2^{low}	-8.143015e-07	0.0	-5.756150e-07	2.4210320e-06	-1.676165e-06
a_3^{low}	-9.475434e-11	0.0	1.3138770e-09	-1.602843e-09	2.3872030e-09
a_4^{low}	4.1348720e-13	0.0	-8.768554e-13	3.8906960e-13	-8.431442e-13
a_5^{low}	-1.012521e+03	2.5471630e+04	-1.005249e+03	2.9147640e+04	3.6067820e+03
a_6^{low}	-3.294094e+00	-4.601176e-01	6.0347380e+00	2.9639950e+00	1.3588600e+00

для реакций с третьим телом – в таблице 5. Здесь A_f (размерность зависит от реакции), β_f и E_f (кал/моль) – соответственно предэкспоненциальный множитель, показатель степени в температурном факторе и энергия активации прямой реакции из (11) в размерностях входного формата данных пакета Chemkin. Все расчеты в Ansys Fluent проводились с помощью неявной схемы с решателем на основе коррекции уравнения давления (pressure-based solver) и схемой MUSCL третьего порядка. Расчеты с помощью программного комплекса MCFL велись по явно-неявной схеме первого порядка точности по времени и пространству, согласно представленной в предыдущих разделах методике. Параметры точности для метода интегрирования жестких систем ОДУ в обоих программных комплексах брались согласованно и составили $\varepsilon_r = 10^{-10}$ и $\varepsilon_a = 10^{-12}$.

8.1 Горение водорода (0D)

Данный тест проводился для оценки правильности реализации химического реактора, который описывает горение водорода в одной изолированной ячейке. Расчет проводился при постоянных объеме и энергии смеси с начальной температурой $T_0 = 900$ °К, давлением $p_0 = 10^5$ Па и мольными долями $X_{H_2} = 0.2$, $X_{O_2} = 0.4$ и $X_{N_2} = 0.4$, остальные мольные доли полагались

Таблица 2. Теплофизические свойства компонент смеси HO_2 , H_2O_2 , H_2O , N_2 .

$a_i^{\text{up,low}}$ \diagdown C_m	HO_2	H_2O_2	H_2O	N_2
a_0^{up}	4.0721910e+00	4.5731670e+00	2.6721460e+00	2.9266400e+00
a_1^{up}	2.1312960e-03	4.3361360e-03	3.0562930e-03	1.4879770e-03
a_2^{up}	-5.308145e-07	-1.474689e-06	-8.730260e-07	-5.684761e-07
a_3^{up}	6.1122690e-11	2.3489040e-10	1.2009960e-10	1.0097040e-10
a_4^{up}	-2.841165e-15	-1.431654e-14	-6.391618e-15	-6.753351e-15
a_5^{up}	-1.579727e+02	-1.800696e+04	-2.989921e+04	-9.227977e+02
a_6^{up}	3.4760290e+00	5.0113700e-01	6.8628170e+00	5.9805280e+00
a_0^{low}	2.9799630e+00	3.3887540e+00	3.3868420e+00	3.2986770e+00
a_1^{low}	4.9966970e-03	6.5692260e-03	3.4749820e-03	1.4082400e-03
a_2^{low}	-3.790997e-06	-1.485013e-07	-6.354696e-06	-3.963222e-06
a_3^{low}	2.3541920e-09	-4.625806e-09	6.9685810e-09	5.6415150e-09
a_4^{low}	-8.089024e-13	2.4715150e-12	-2.506588e-12	-2.444855e-12
a_5^{low}	1.7622740e+02	-1.766315e+04	-3.020811e+04	-1.020900e+03
a_6^{low}	9.2227240e+00	6.7853630e+00	2.5902330e+00	3.9503720e+00

Таблица 3. Параметры потенциала Ленарда-Джонса, используемые при расчете транспортных свойств компонент.

C_m	$\sigma, \text{ \AA}$	$\varepsilon/k_B, \text{ }^\circ\text{K}$
H_2	2.827	59.70
H	2.708	37.00
O_2	3.467	106.7
O	3.050	106.7
OH	3.147	79.80
HO_2	3.458	107.4
H_2O_2	4.196	289.3
H_2O	2.641	809.1
N_2	3.798	71.40

равными нулю. Расчет велся до контрольного момента времени $t_{\text{end}} = 0.1$ с. Получившиеся поля температуры и мольных долей компонент смеси представлены на рис. 2 и 3, где красным цветом обозначены результаты, полученные по Ansys, синим – MCFL. Как видно из рисунков, полученные значения хорошо соотносятся между собой.

Таблица 4. Кинетический механизм горения водорода.

№	Реакция	A_f	β_f	E_f
1	$H+O_2+M=HO_2+M$	$3.61e+17$	-0.72	0.
2	$H+H+M=H_2+M$	$1.0e+18$	-1.	0.
3	$H+H+H_2=H_2+H_2$	$9.2e+16$	-0.6	0.
4	$H+H+H_2O=H_2+H_2O$	$6.0e+19$	-1.25	0.
5	$H+OH+M=H_2O+M$	$1.6e+22$	-2.	0.
6	$H+O+M=OH+M$	$6.2e+16$	-0.6	0.
7	$O+O+M=O_2+M$	$1.89e+13$	0.	-1788.
8	$H_2O_2+M=OH+OH+M$	$1.3e+17$	0.	45500.
9	$H_2+O_2=2OH$	$1.7e+13$	0.	47780.
10	$OH+H_2=H_2O+H$	$1.17e+9$	1.3	3626.
11	$O+OH=O_2+H$	$3.61e+14$	-0.5	0.
12	$O+H_2=OH+H$	$5.06e+4$	2.67	6290.
13	$OH+HO_2=H_2O+O_2$	$7.5e+12$	0.	0.0
14	$H+HO_2=2OH$	$1.4e+14$	0.	1073.
15	$O+HO_2=O_2+OH$	$1.4e+13$	0.	1073.
16	$2OH=O+H_2O$	$6.0e+8$	1.3	0.
17	$H+HO_2=H_2+O_2$	$1.25e+13$	0.	0.
18	$HO_2+HO_2=H_2O_2+O_2$	$2.0e+12$	0.	0.
19	$H_2O_2+H=HO_2+H_2$	$1.6e+12$	0.	3800.
20	$H_2O_2+OH=H_2O+HO_2$	$1.0e+13$	0.	1800.

Таблица 5. Коэффициенты для реакций с третьим телом.

№	H_2	H	O_2	O	OH	HO_2	H_2O_2	H_2O	N_2
1	2.86	1.	1.	1.	1.	1.	1.	18.6	1.
5	1.	1.	1.	1.	1.	1.	1.	5.	1.
6	1.	1.	1.	1.	1.	1.	1.	5.	1.

8.2 Горение водорода в покоящейся среде (1D)

Следующий тест проводился в квазиодномерной постановке и состоял в зажигании неравномерно нагретой и покоящейся в начальный момент стехиометрической смеси водорода и воздуха (коэффициент избытка топлива $\phi = 1$), которая в дальнейшем начинала двигаться к границам области. Для расчетов использовалась область $L = [0.04, 0.06] \times [0.0, 0.005]$ м, покрытая равномерной сеткой, содержащей 201×51 узел с шагом $\Delta = 0.0001$ м. На

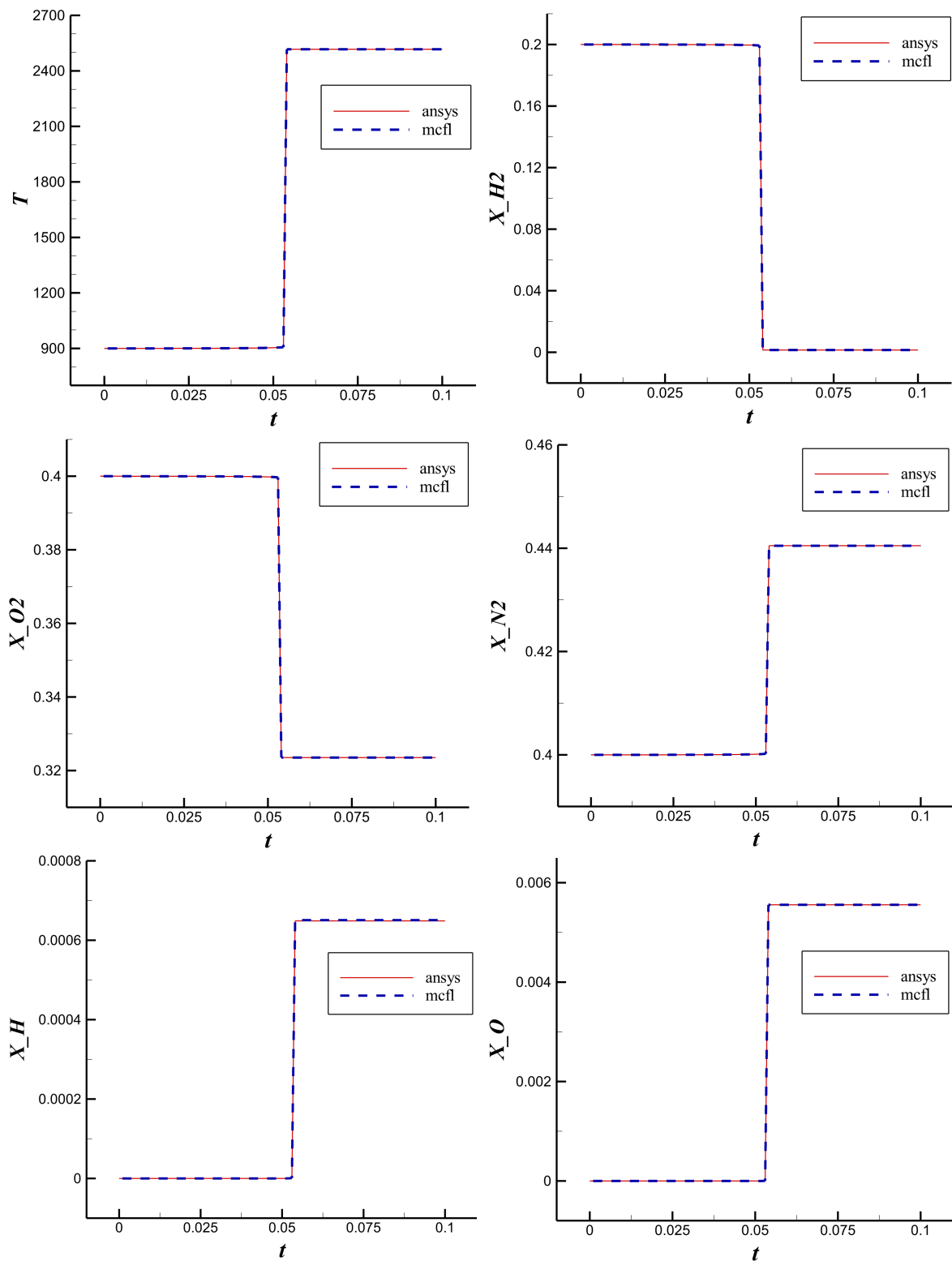


Рис. 2. Тест 1. Температура T и мольные доли компонент H_2 , O_2 , N_2 , H и O в зависимости от времени t .

вертикальных границах ставилось условие симметрии, на горизонтальных – свободного выхода потока. В начальный момент времени задавались следующие профили температуры и массовых долей компонент (указаны только

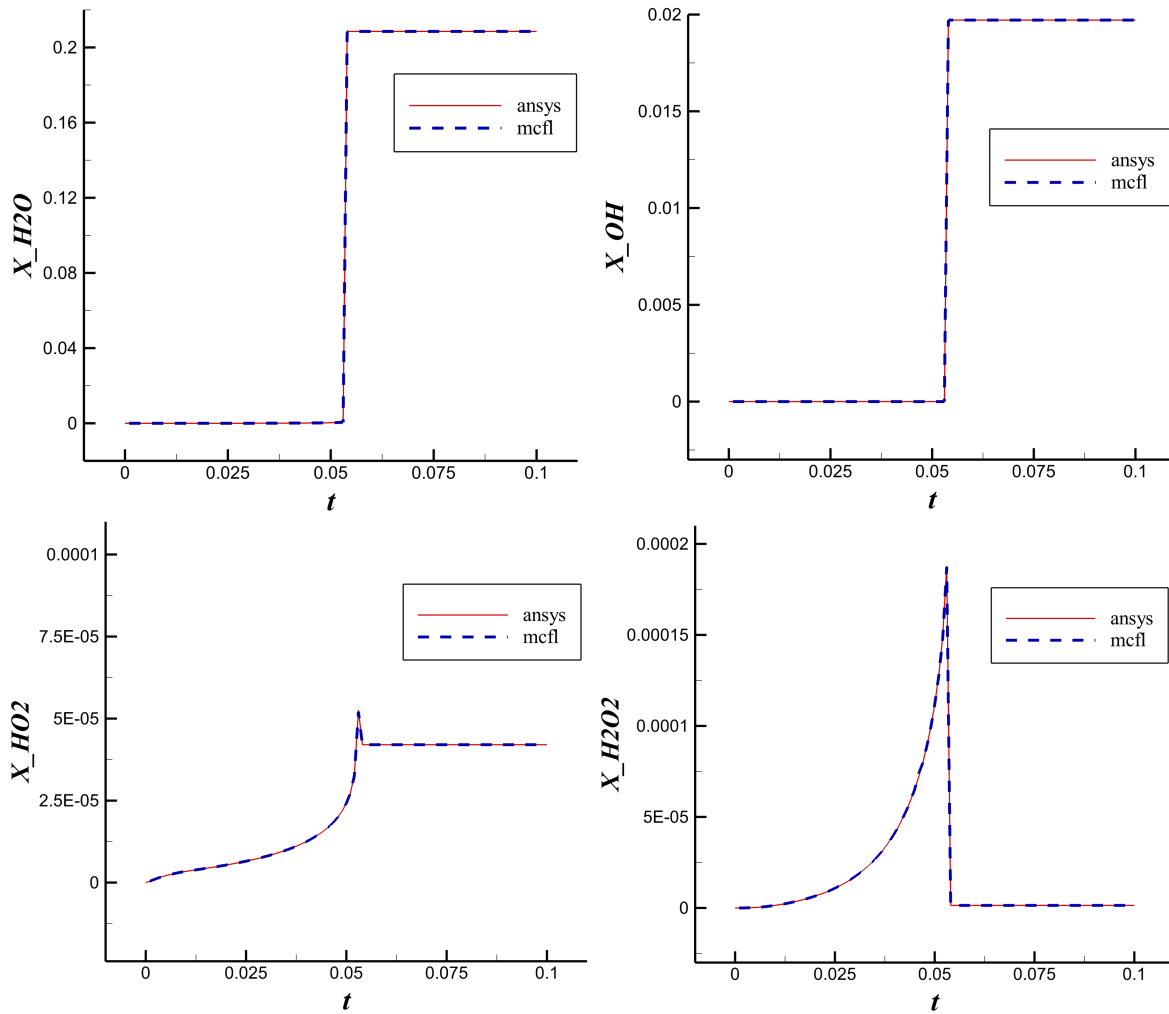


Рис. 3. Тест 1. Мольные доли компонент H_2O , OH , HO_2 и H_2O_2 в зависимости от времени t .

отличные от нуля значения):

$$T_0 = 300 + 360 \left[1 + \tanh \left\{ 80 \left(\frac{1}{2} - 1000 |x - 0.05| \right) \right\} \right],$$

$$Y_{\text{H}_2,0} = 0.028302, \quad Y_{\text{O}_2,0} = 0.226415, \quad Y_{\text{N}_2,0} = 0.745283$$

при $p_0 = 10^5$ Па, $u_0 = v_0 = 0$ м/с. В качестве контрольного момента времени бралось $t_{\text{end}} = 0.0005$ с.

Распределение температуры вдоль линии $y = 0$ в начальный и конечный момент времени представлено на рис. 4, Массовые концентрации и плотность смеси в конечный момент времени – на рис. 5 и 6. Как и ранее, красным цветом обозначены результаты, полученные в Ansys, синим – MCFL. В целом можно констатировать приемлемое совпадение результатов расчетов, при этом ожидаемо расчеты по Ansys дают более резкие положения фронтов за счет меньшей численной диффузии. Наблюдаемые различия объясняются

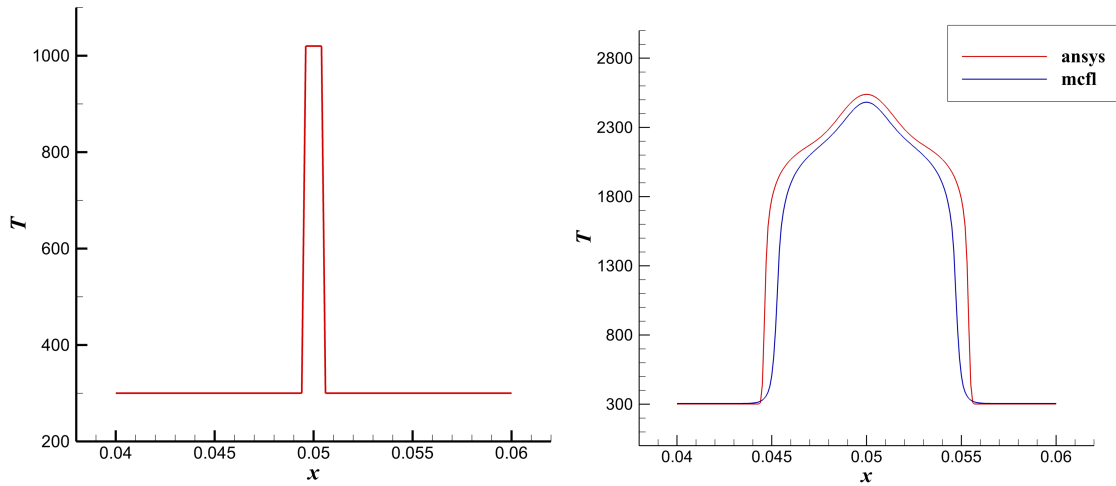


Рис. 4. Тест 2. Температура смеси T в начальный и конечный моменты времени.

использованием как разных по точности численных схем, так и отличиями в формулах для определения транспортных свойств индивидуальных веществ и смеси. Хорошо видно, что в расчетах по обоим кодам поля концентраций демонстрируют качественное совпадение с небольшим сдвигом пиковых значений за исключением азота, изменение концентрации которого в обоих случаях вызвано лишь численными эффектами. Данные эффекты объясняются особенностью используемых схем расчета, в которых весь возникающий на временном шаге численный дисбаланс в концентрациях корректируется с помощью изменения концентрации некоторой опорной (заранее выбранной и всегда присутствующей в смеси) компоненты. Несмотря на видимые различия, колебания концентрации азота в обоих случаях составляют менее 0.3% от истинного (совпадающего с начальным) значения, что можно считать допустимой погрешностью. Следует также отметить, что дополнительно для MCF1 кода на сетках с шагом $\Delta/2$ и $\Delta/4$ была проверена сеточная сходимость.

8.3 Горение водорода в движущейся среде (1D)

Представленный тест обобщает результат предыдущей задачи на случай движущейся смеси, его постановка взята из работы [37]. Расчетная сетка остается прежней, на вертикальных границах ставится условие симметрии потока, на левой границе – условие набегающего потока с параметрами $T_\infty = 2000$ °K, $p_\infty = 10^5$ Па, $u_\infty = 20$ м/с, $v_\infty = 0$ м/с, $Y_{O_2,\infty} = 1.0$ и остальные массовые доли нулевые, на правой границе остается условие свободного выхода. В начальный момент времени задавались следующие профили температуры

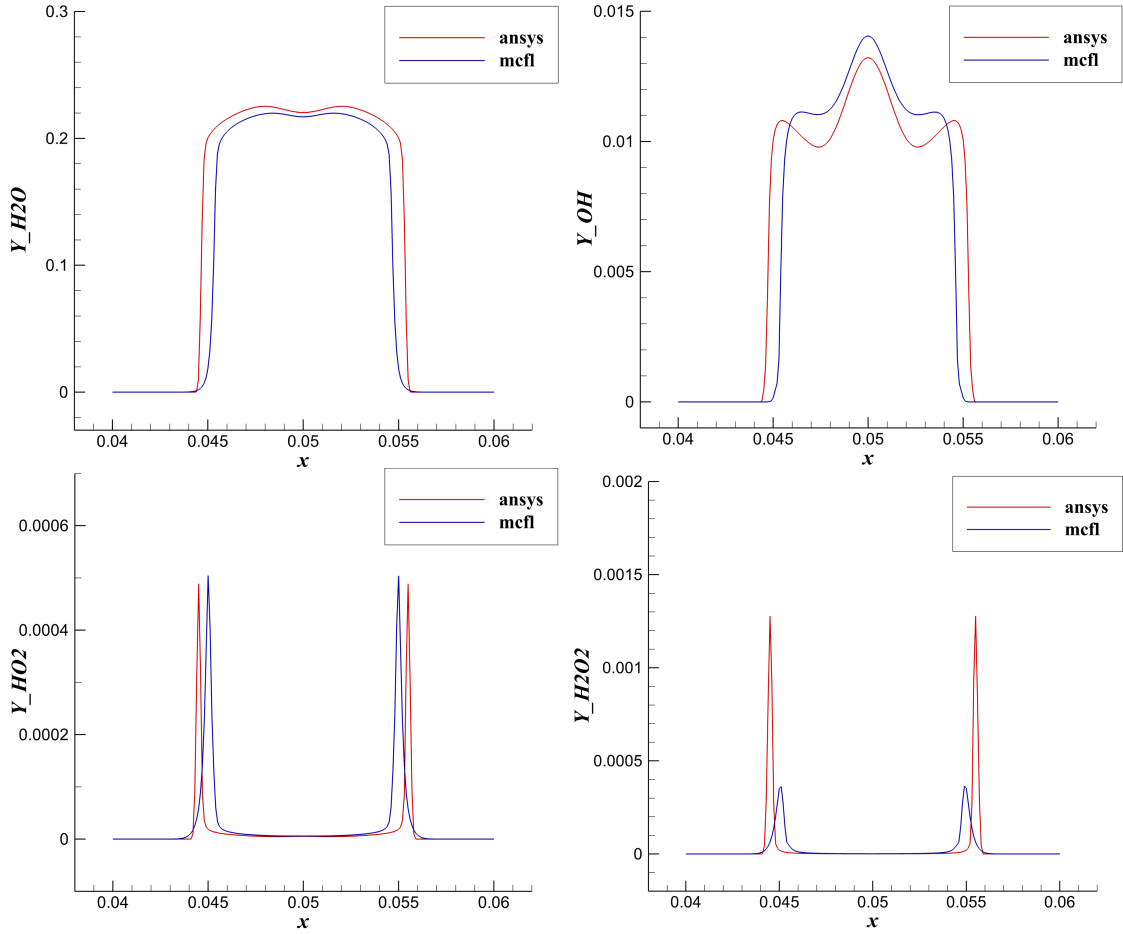


Рис. 5. Тест 2. Массовые доли компонент H_2O , OH , HO_2 и H_2O_2 в конечный момент времени.

и массовых долей компонент (указаны только отличные от нуля значения):

$$T_0 = 1500 \left[1 - \frac{1}{3} \tanh \{80 (3 - |x - 0.047|)\} \right],$$

$$Y_{\text{H}_2,0} = \frac{1}{2} [1 + \tanh \{80 (3 - |x - 0.047|)\}], \quad Y_{\text{O}_2,0} = 1 - Y_{\text{H}_2,0}$$

при $p_0 = 10^5$ Па, $u_0 = 20$ м/с, $v_0 = 0$ м/с. В качестве контрольного момента времени бралось $t_{\text{end}} = 0.0001$ с. Начальные распределения температуры и концентраций кислорода и водорода представлены на рис. 8. Дополнительно для определения численной диффузии используемых схем и ее сравнения с физической диффузией, оценка которой была получена для данной задачи в работе [37], были проведены расчеты движения инертного фронта в невязкой постановке согласно параметрам из [37]. Полученные результаты представлены на рис. 7. В расчете с помощью Ansys численная диффузия составила порядка 1 мм, по MCFL – 4.5 мм, что в обоих случаях меньше физической диффузии, равной 6 мм.

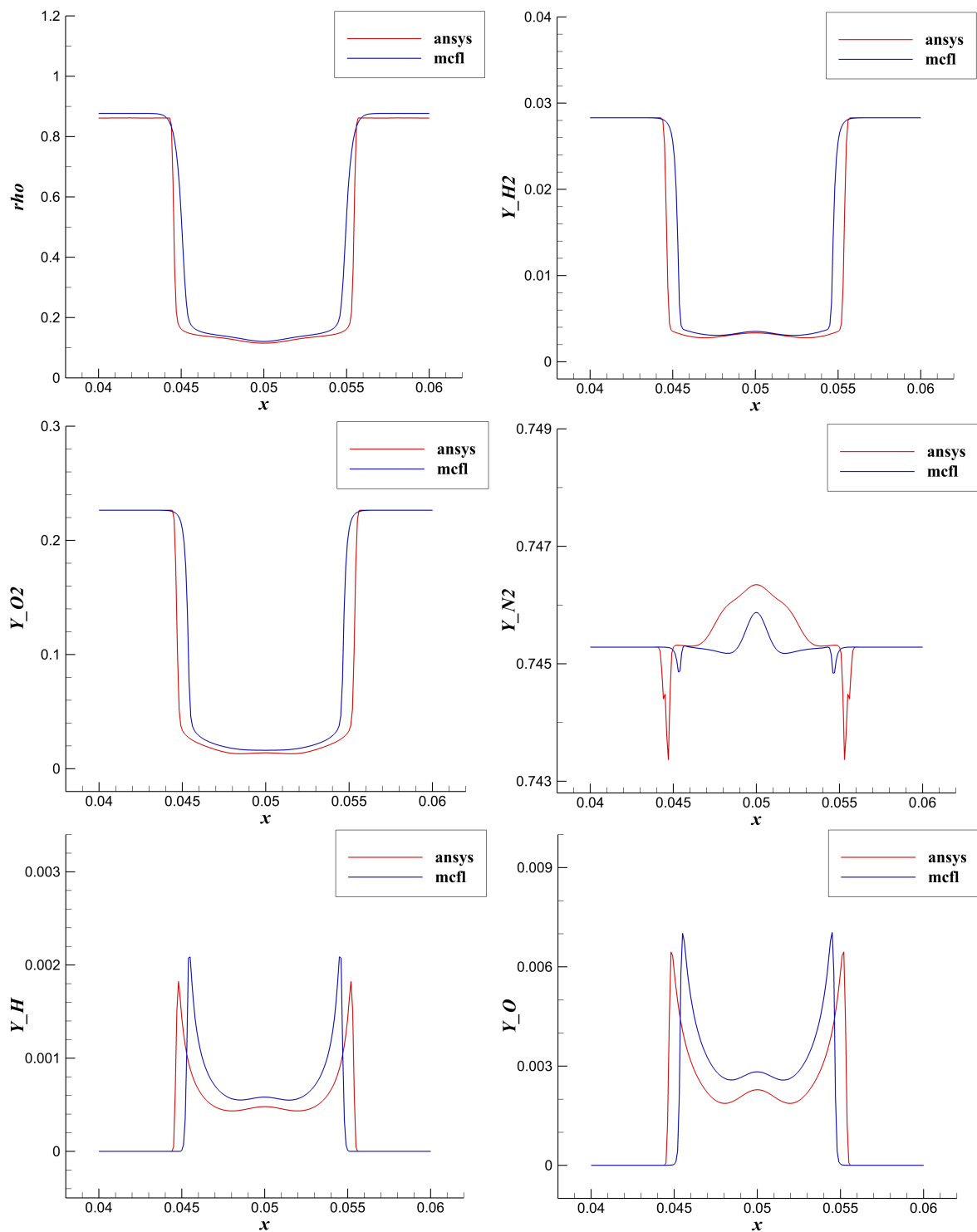


Рис. 6. Тест 2. Плотность ρ и массовые доли компонент H_2 , O_2 , N_2 , H и O в конечный момент времени.

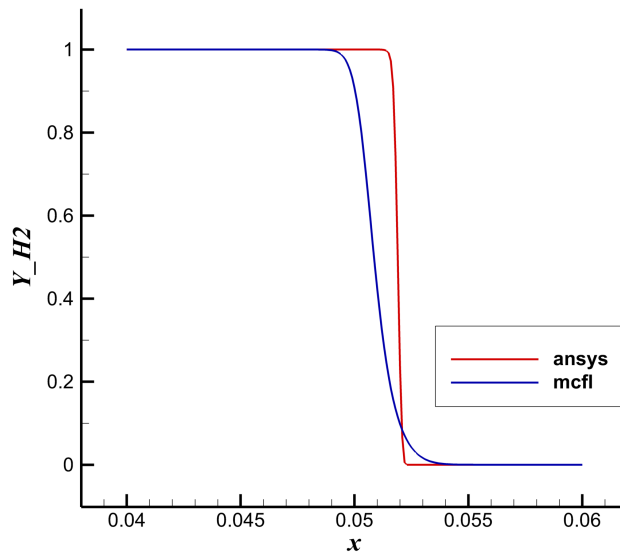


Рис. 7. Тест 3. Массовая доля водорода в момент времени $\tilde{t} = 0.0004$ с при расчете движения инертного фронта.

Получившиеся в основном расчете по полной модели поле температуры вдоль линии $y = 0$ и массовые концентрации компонент представлены на рис. 9 и 10. Красным цветом обозначены результаты, полученные в Ansys, синим – MCFL, зеленым – результаты из работы [37], в которой расчет осуществлялся с помощью редуцированной кинетической схемы горения водорода. Полученные результаты демонстрируют хорошее совпадение как по величине пиковой температуры, так и по положению фронтов. Как и в предыдущем тесте, получающиеся отличия можно объяснить разностью в точности используемых схем счета (и, соответственно, численной диффузии и ширине фронта) и формулах для определения транспортных свойств индивидуальных веществ и смеси. Аналогично предыдущему случаю объясняется и различие в концентрации азота, который в представленном тесте является нейтральным компонентом (относительно химических реакций) и используется для корректировки эффектов, связанных с численным дисбалансом в концентрациях при расчете временного шага.

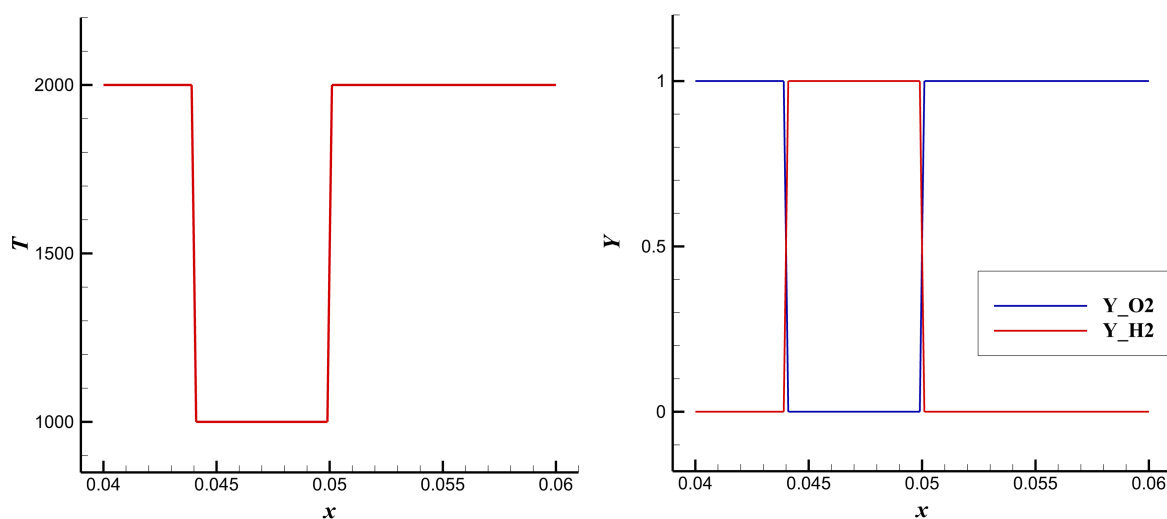


Рис. 8. Тест 3. Температура смеси T и массовые доли кислорода и водорода в начальный момент времени.

9 Заключение

Работа была посвящена описанию программного модуля MCFL-Chem для расчета высокоскоростных течений смесей реагирующих газов на основе программного комплекса MCFL-Noisette. Подробно были описаны общая для всего программного комплекса математическая модель в рамках уравнений Навье–Стокса многокомпонентного реагирующего газа, а также отдельно блок уравнений химической кинетики. Также было представлено описание полного алгоритма решения уравнений вычислительного ядра, который основывался на схеме расщепления по типам рассматриваемых процессов: конвекция–диффузия–химические реакции. В конце работы были приведены результаты тестовых расчетов, проведенных для задач горения водорода и кислорода в различных постановках, и их сравнение с данными, полученными внешним программным комплексом Ansys Fluent, и данными из открытых источников. Полученные результаты позволяют сделать вывод об успешной валидации и верификации используемой математической модели и численного метода для моделирования течений реагирующих газовых смесей.

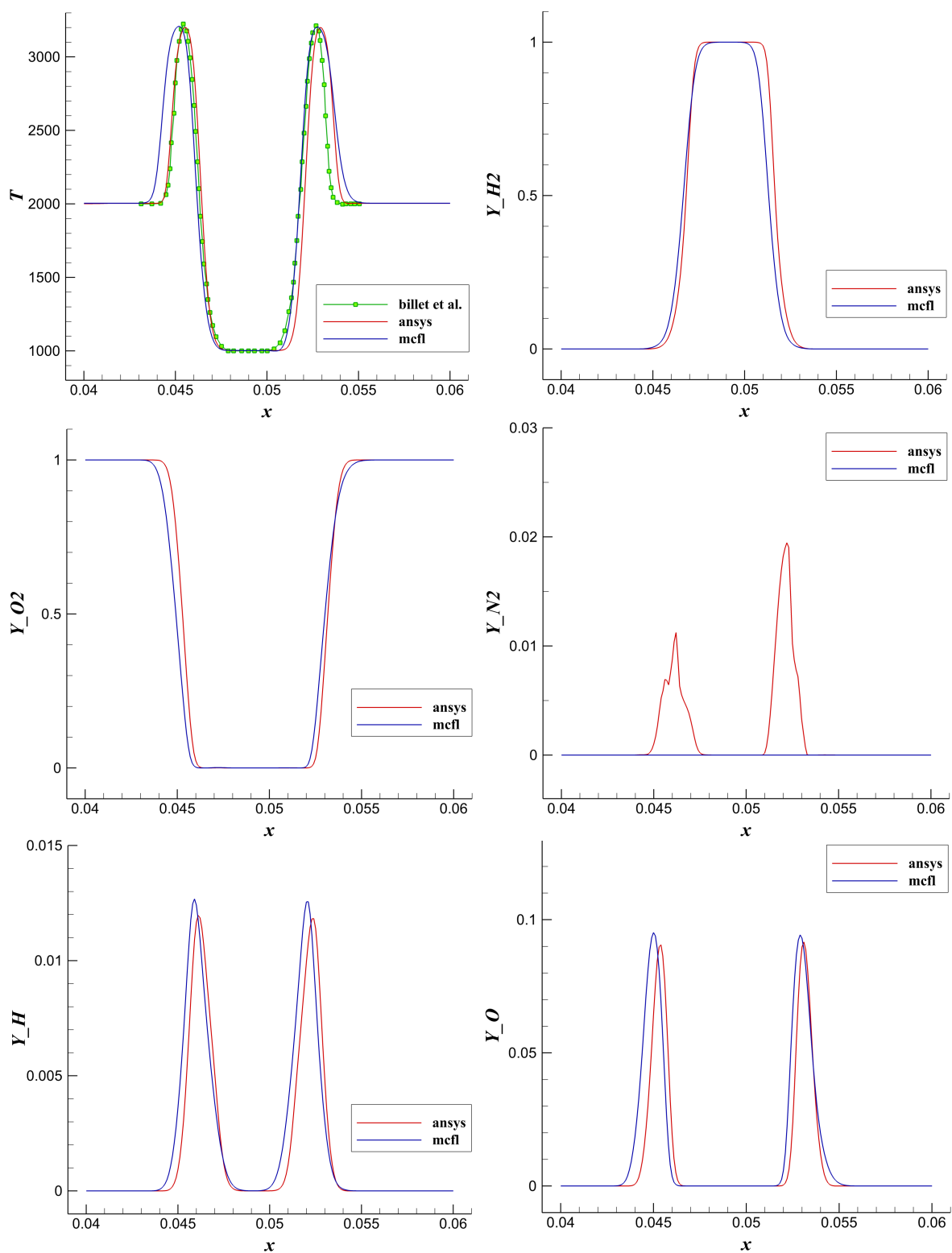


Рис. 9. Тест 3. Температура смеси T и массовые доли компонент H_2 , O_2 , N_2 , H и O в конечный момент времени.

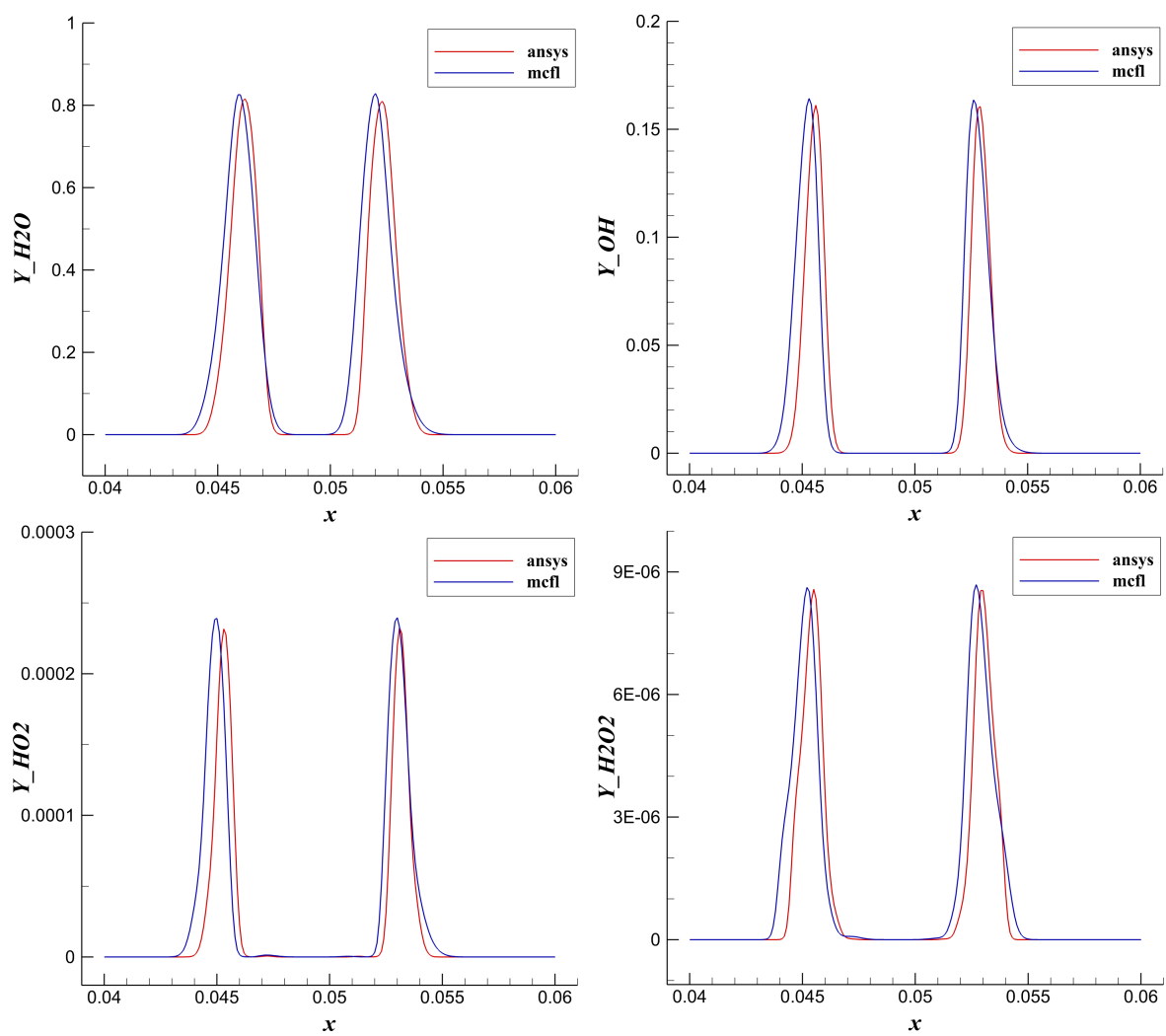


Рис. 10. Тест 3. Массовые доли компонент H_2O , OH , HO_2 и H_2O_2 в конечный момент времени.

Список обозначений

Параметры смеси

p	давление	[Па]
ρ	массовая плотность	[кг/м ³]
T	температура	[°К]
e	удельная внутренняя энергия	[Дж/кг]
\tilde{e}	молярная внутренняя энергия	[Дж/моль]
e_t	удельная полная энергия	[Дж/кг]
h	удельная энтальпия	[Дж/кг]
\tilde{h}	молярная энтальпия	[Дж/моль]
μ	коэффициент динамической вязкости	[Па·с]
λ	коэффициент теплопроводности	[Вт/(м·°К)]
\mathbf{u}	вектор скорости	[м/с]
$\boldsymbol{\tau}$	тензор вязких напряжений	[Па]
\mathbf{q}	вектор теплового потока	[Вт/м ²]
C_p	удельная теплоемкость при постоянном давлении	[Дж/(кг·°К)]
\tilde{C}_p	молярная теплоемкость при постоянном давлении	[Дж/(моль·°К)]
C_v	удельная теплоемкость при постоянном объеме	[Дж/(кг·°К)]
\tilde{C}_v	молярная теплоемкость при постоянном объеме	[Дж/(моль·°К)]
R	индивидуальная газовая постоянная	[Дж/(кг·°К)]
W	молярная масса	[кг/моль]
$[X]$	полная молярная концентрация смеси (молярная плотность)	[моль/м ³]
c	скорость звука	[м/с]
γ	показатель адиабаты	[-]

Параметры индивидуальных веществ и химических реакций

m	индекс компонента	
N_{sp}	число компонент	
Y_m	относительная массовая концентрация (массовая доля)	[-]
X_m	относительная молярная концентрация (молярная доля)	[-]
$[X_m]$	молярная концентрация	[МОЛЬ/М ³]
μ_m	коэффициент динамической вязкости	[Па·с]
λ_m	коэффициент теплопроводности	[Вт/(м·°К)]
D_m	средний коэффициент диффузии относительно смеси	[М ² /с]
$D_{m,l}$	бинарный коэффициент диффузии	[М ² /с]
Γ_m	вектор диффузионного потока	[КГ/(М ² ·С)]
$\dot{\omega}_m$	массовый приток за счет химических реакций	[КГ/(М ³ ·С)]
e_m	удельная внутренняя энергия	[ДЖ/КГ]
\tilde{e}_m	молярная внутренняя энергия	[ДЖ/МОЛЬ]
h_m	удельная энтальпия	[ДЖ/КГ]
\tilde{h}_m	молярная энтальпия	[ДЖ/МОЛЬ]
\tilde{s}_m	молярная энтропия	[ДЖ/(МОЛЬ·°К)]
$h_{s,m}$	энтальпийная функция компонента	[ДЖ/КГ]
Δh_m^0	удельная энтальпия образования	[ДЖ/КГ]
$C_{p,m}$	удельная теплоемкость при постоянном давлении	[ДЖ/(КГ·°К)]
$\tilde{C}_{p,m}$	молярная теплоемкость при постоянном давлении	[ДЖ/(МОЛЬ·°К)]
$C_{v,m}$	удельная теплоемкость при постоянном объеме	[ДЖ/(КГ·°К)]
$\tilde{C}_{v,m}$	молярная теплоемкость при постоянном объеме	[ДЖ/(МОЛЬ·°К)]
W_m	молярная масса	[КГ/МОЛЬ]

N	число химических реакций	
n	индекс реакции	
C_m	химический символ реагента в реакции	
ν'_{mn}	стехиометрический коэффициент в исходных веществах реакции	[-]
ν''_{mn}	стехиометрический коэффициент в продуктах реакции	[-]
\dot{q}_n	скорость протекания реакции	[моль/((см) ³ ·с)]
$K_{f,n}$	константа скорости прямой реакции	[зависит от реакции]
$K_{r,n}$	константа скорости обратной реакции	[зависит от реакции]
$K_{c,n}$	константа равновесия для реакции	[зависит от реакции]
$A_{f,n}$	предэкспоненциальный множитель	[зависит от реакции]
β_n	показатель степени в температурном факторе	[-]
$E_{f,n}$	энергия активации реакции	[кал/моль]
α_{mn}	весовой коэффициент при наличии в реакции третьего тела	[-]
$a_{i,m}$	коэффициенты полиномов	[зависит от степени]
w_m	приведенная масса частиц компонента	[кг]
σ_m	диаметр столкновения частиц компонента	[Å]
$\sigma_{m,l}$	диаметр столкновения частиц пары компонентов	[Å]
$\Omega_{m,l}^{(1,1)*}$	первый приведенный интеграл столкновений	[-]
$\Omega_m^{(2,2)*}$	второй приведенный интеграл столкновений	[-]
$T_{m,l}$	приведенная температура частиц пары компонентов	[-]
ε_m	глубина потенциальной ямы частиц компонента	[Дж]
$\varepsilon_{m,l}$	глубина потенциальной ямы частиц пары компонентов	[Дж]

Параметры общего назначения

\mathcal{R}	универсальная газовая постоянная	8.31446261815324 [Дж/(моль·°К)]
k_B	постоянная Больцмана	$1.3806488 \times 10^{-23}$ [Дж/°К]
N_A	число Авогадро	$6.0221417930 \times 10^{23}$ [моль ⁻¹]
\mathbf{I}	единичный тензор	
N_{cell}	число ячеек трехмерной расчетной сетки	
i	индекс ячейки сетки	
σ	обозначение граней ячейки	
V_i	объем ячейки	[м ³]
d_i	характерный размер ячейки	[м]
S_σ	обозначение площади грани ячейки	[м ²]
t	время	[с]
τ_k	временной шаг	[с]
k	индекс для обозначения временного слоя	
ε_r	относительная точность метода	
ε_a	абсолютная точность метода	
\mathcal{C}_h	нелинейный дискретный конвективный оператор	
\mathcal{D}_h	нелинейный дискретный диффузионный оператор	
\mathcal{S}_h	нелинейный дискретный оператор для описания источников	
\mathbf{U}	вектор консервативных переменных	
\mathbf{F}_σ	обозначение конвективного потока	
\mathbf{G}_σ	обозначение диффузионного потока	

Список литературы

- [1] Железнякова А.Л., Суржиков С.Т. На пути к созданию модели виртуального ГЛА. I. М.: ИПМех РАН, 2013.
- [2] Poinsot T., Veynante D. Theoretical and Numerical Combustion. 2nd Ed. Philadelphia, Edwards Inc., 2005, 522 p.
- [3] Суржиков С.Т. Радиационная газовая динамика спускаемых космических аппаратов. Многотемпературные модели. М.: ИПМех РАН, 2013.
- [4] Жуков В.Т., Рыков Ю.Г., Феодоритова О.Б. Математическая модель течения многокомпонентной смеси газов с учетом возможности возникновения жидкой фазы // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 183. 36 с. doi:10.20948/prepr-2018-183.
- [5] Feodoritova O.B., Novikova N.D., Zhukov V.T. An explicit iterative scheme for 3D multicomponent heat conducting flow simulation // Journal of Physics: Conference Series, IOP Publishing Ltd, 2021, Vol. 2028, 012022. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/2028/1/012022>
- [6] Borisov V.E., Feodoritova O.B., Novikova N.D., Rykov Yu.G., Zhukov V.T. Computational model for high-speed multicomponent flows // MATHEMATICA MONTISNIGRI, 2020, Vol. XLVIII, pp. 32–42. doi:10.20948/mathmontis-2020-48-4.
- [7] Борисов В.Е., Рыков Ю.Г. Точный римановский солвер в алгоритмах решения задач многокомпонентной газовой динамики // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2018. № 96. 28 с. doi:10.20948/prepr-2018-96.
- [8] Borisov V.E., Rykov Yu.G. Modified Godunov Method for Multicomponent Flow Simulation // Journal of Physics: Conference Series, IOP Publishing Ltd, 2019, Vol. 1250, 012006. doi:10.1088/1742-6596/1250/1/012006.
- [9] Борисов В.Е., Рыков Ю.Г. Моделирование течений многокомпонентных газовых смесей с использованием метода двойного потока // Математическое моделирование, 2020, т. 32, № 10, с. 3–20. <https://doi.org/10.20948/mm-2020-10-01>.
- [10] Abalakin I.V., Gorobets A.V., Duben A.P., Kozubskaya T.K., Bakhvalov P.A. Parallel Research Code NOISEtte for Large-Scale CFD and CAA Simulations // Num. methods and prog., 2012. V. 13, pp. 110–125.
- [11] Жуков В.Т. О явных методах численного интегрирования для параболических уравнений // Мат. модел. 2010. Т.22, № 10. С. 127–158.

- [12] Ed. Vervisch L., Roekaerts D. Computational Fluid Dynamics of Turbulent Combustion. London, ERCOFTAC, 2015, 380 p.
- [13] Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М.: Наука. 1987. 491 с.
- [14] Grcar J.F. An Explicit Runge-Kutta Iteration for Diffusion in the Low Mach Number Combustion Code // Lawrence Berkeley National Laboratory report LBNL-63375, 2007
- [15] Mason E.A., Saxena S.C. Approximate Formula for the Thermal Conductivity of Gas Mixtures // Phys. Fluids, 1958, v. 1, № 5, pp. 361–369.
- [16] Семиохин И.А., Страхов Б.В., Осипов А.И. Кинетика химических реакций. М. Изд. МГУ, 1995, 347 с.
- [17] Jr. Chase M.W. NIST-JANAF thermochemical tables, fourth edition // J. Phys. Chem. Ref. Data, Monogr., 1998, № 9.
- [18] Burkat A., Ruscic B. Third Millennium Ideal Gas and Condensed Phase Thermochemical Database for Combustion with Updates from Active Thermochemical Tables. Technion Report TAE 960 and ANL Report ANL-05/20, 2005. <https://burcat.technion.ac.il/>
- [19] Kee R.J., Rupley F.M., Miller J.A. The CHEMKIN Thermodynamic Data Base. Sandia National Laboratories Report SAND87-8215B, 1990.
- [20] Fairbanks D.F., Wilke C.R. Diffusion Coefficients in Multicomponent Gas Mixtures // Ind. Eng. Chem., 1950, 42 (3), pp. 471–475.
- [21] Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч. , Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: Иностранная литература, 1961, 928 с.
- [22] Анфимов Н.А. Ламинарный пограничный слой в многокомпонентной смеси газов. Изв. АН СССР. Мех. и машин. 1962, № 1, с.25–31.
- [23] Bird R.B., Stewart W.E., Lightfoot E.N. Transport Phenomena. John Wiley and Sons, 1960, New York.
- [24] Mathur S., Tondon, P.K., Saxena S.C. Thermal conductivity of binary, ternary and quaternary mixtures of rare gases // Molecular Physics, 1967, 12(6), pp. 569–579.
- [25] Ферцигер Д., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. М.: Мир, 1975, 555 с.

- [26] Марчук Г.И. Методы расщепления.–М.: Наука, 1988. 263 с.
- [27] Strang G. On the construction and comparison of difference schemes // SIAM J. Num. Ana., 1968, V. 5(3), pp. 506–517.
- [28] Day M.S., Bell. J.B. Numerical simulation of laminar reacting flows with complex chemistry // Combustion Theory and Modelling, 4:4, pp. 535–556.
- [29] Федоренко Р.П. Введение в вычислительную физику. 2-е изд, испр. и доп. Долгопрудный: Издательский дом «Интеллект», 2008, 503 с.
- [30] Хайпер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. – М: Мир, 1999. 685 с.
- [31] Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Численные методы решения задач конвекции–диффузии. – М: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2015. 248 с.
- [32] Kee R.J., Coltrin M.E., Glarborg P. Chemically Reacting Flow: Theory and Practice. Hoboken: John Wiley and Sons, 2003.
- [33] Süli E., Mayers D. An Introduction to Numerical Analysis. –Cambridge: Cambridge University Press, 2003. 444 p.
- [34] Годунов С.К. и др. Численное решение многомерных задач газовой динамики. –М.:Наука, 1976. 400 с.
- [35] Куликовский А.Г., Погорелов Н.В., Семенов А.Ю. Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. –М.: Физматлит, 2001. 608 с.
- [36] Abgrall R., Karni S. Computations of compressible multifluids // J. Comp. Phys., 2001, 169 (2), pp. 594–623.
- [37] Billet G., Abgrall R. An Adaptive Shock-Capturing Algorithm for Solving Unsteady Reactive Flows // Comput. Fluids, 2003, 32 (10), pp. 1473–1495.
- [38] Ma P.C., Lv Yu, Ihme M. An entropy-stable hybrid scheme for simulations of transcritical real-fluid flows // J. of Computational Physics, 2017. V. 340, pp. 330–357.
- [39] Cohen S.D., Hindmarsh A.C. CVODE, a Stiff/Nonstiff ODE Solver // C. Computers in Physics, 1996. V. 10(2), pp. 138–143.

- [40] Hogan R.J. Fast reverse-mode automatic differentiation using expression templates in C++ // ACM Trans. Math. Softw., 2014. V. 40, №4, art. 26, pp. 1–16.
- [41] Kee R.J., Miller J.A., Jefferson T.H. Chemkin: A General-Purpose, Problem- Independent, Transportable, Fortran Chemical Kinetics Code Package, Sandia National Laboratories Report SAND80-8003, 1980.
- [42] Kee R.J., Rupley F.M., Meeks E., Miller J.A. Chemkin-III: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical and Plasma Kinetics, Sandia National Laboratories Report SAND96-8216, 1996.

Содержание

1	Введение	3
2	Основные уравнения для описания течения смеси реагирующих газов	4
3	Уравнения химических реакций	6
4	Теплофизические и транспортные свойства компонент и смеси	8
5	Дополнительные соотношения	10
6	Общая схема решения	11
7	Программная реализация	19
8	Верификационные расчеты	20
	8.1 Горение водорода (0D)	21
	8.2 Горение водорода в покоящейся среде (1D)	23
	8.3 Горение водорода в движущейся среде (1D)	26
9	Заключение	30
	Список обозначений	33
	Литература	37