

УДК 519.63

Применение WENO алгоритма повышенного порядка точности для моделирования процесса горения кислородно-водородной смеси*

Р.В. Жалнин¹, Е.Е. Пескова¹, В.Ф. Тишкин²

Национальный исследовательский Мордовский государственный университет
им. Н.П. Огарёва¹, Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН²

Аннотация: В статье представлены результаты численного моделирования горения кислородно-водородной смеси. Моделирование проводилось с использованием разработанного программного комплекса для численного решения уравнений Навье-Стокса в приближении малых чисел Маха. В работе представлена схема численного решения уравнений с учетом процессов диффузии, вязкости, теплопроводности и химических реакций.

Ключевые слова: горение водорода, уравнения Навье-Стокса, химическая реакция, WENO схема.

1. Математическая модель и разностная схема

Для описания течения многокомпонентного реагирующего газа используется система уравнений Навье-Стокса в приближении малых чисел Маха [1–3]:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} &= -\nabla \cdot (\rho Y_i \vec{v}) - \nabla \cdot \vec{J}_i + Q_i, \\ \frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} &= -\nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) - \nabla \pi - \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}}, \\ \frac{\partial \rho h}{\partial t} &= -\nabla \cdot (\rho h \vec{v}) - \nabla \cdot \vec{q},\end{aligned}$$

Система дополнена уравнением состояния и условием на дивергенцию вектора скорости:

$$\begin{aligned}p_0 &= \rho R T \sum_i \frac{Y_i}{M_{wi}}, \\ S \equiv \nabla \cdot \vec{v} &= \frac{1}{\rho C_p T} \left(\nabla \cdot \lambda \nabla T + \sum_i \rho D_{im} \nabla Y_i \nabla h_i \right) + \frac{1}{\rho} \sum_i \frac{M_w}{M_{wi}} (\nabla \cdot \rho D_{im} \nabla Y_i) \\ &\quad + \frac{1}{\rho} \sum_i \left(\frac{M_w}{M_{wi}} - \frac{h_i}{C_p T} \right) Q_i.\end{aligned}$$

Здесь ρ — плотность смеси, \vec{v} — вектор скорости, Y_i — массовая доля i -ой компоненты смеси, T — температура, M_{wi} — молекулярная масса i -ой компоненты смеси, $\pi = p - p_0$ — динамическая составляющая давления, p_0 — термодинамическая составляющая давления, \vec{J}_i — вектор диффузионного потока, \vec{q} — вектор потока тепла, h — энтальпия смеси, $\bar{\bar{\tau}}$ — тензор вязких напряжений, Q_i — скорость образования или расхода i -ой компоненты смеси.

Вектор диффузионного потока компонента и вектор потока тепла для смеси определяются с использованием модели средних по смеси значений [1]:

$$\vec{J}_i = -\rho D_{im} \nabla Y_i,$$

*Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Минобрнауки России, базовая часть госзадания 1.6958.2017/8.9.

$$\vec{q} = -\lambda \nabla T - \sum_i h_i \rho D_{im} \nabla Y_i.$$

Здесь D_{im} — средний по смеси коэффициент диффузии i -ой компоненты смеси, λ — коэффициент теплопроводности смеси, h_i — энтальпия i -ой компоненты смеси.

Тензор вязких напряжений имеет вид:

$$\bar{\tau} = \mu \left(\nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{v}) I \right),$$

где μ — коэффициент динамической вязкости.

Вычислительный алгоритм можно представить следующим образом.

1. Интегрирование уравнений химической кинетики:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} = Q_i, \\ \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = - \sum_i Q_i h_i. \end{cases}$$

2. Интегрирование уравнений законов сохранения.

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial (F^{(1)}(U) - H^{(1)}(U))}{\partial x} + \frac{\partial (F^{(2)}(U) - H^{(2)}(U))}{\partial y} = 0.$$

$$U = \begin{pmatrix} \rho Y_i \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho h \end{pmatrix}, \quad F^{(1)}(U) = \begin{pmatrix} \rho u Y_i \\ \rho u^2 \\ \rho uv \\ \rho hu \end{pmatrix}, \quad F^{(2)}(U) = \begin{pmatrix} \rho v Y_i \\ \rho uv \\ \rho v^2 \\ \rho hv \end{pmatrix},$$

$$H^{(1)}(U) = \begin{pmatrix} J_{ix} \\ \tau_{xx} \\ \tau_{xy} \\ q_x \end{pmatrix}, \quad H^{(2)}(U) = \begin{pmatrix} J_{iy} \\ \tau_{yx} \\ \tau_{yy} \\ q_y \end{pmatrix},$$

$$J_{ix} = \rho D_{mi} \frac{\partial Y_i}{\partial x}, \quad J_{iy} = \rho D_{mi} \frac{\partial Y_i}{\partial y},$$

$$q_x = \lambda \frac{\partial T}{\partial x} + \sum_{j=1}^M h_j \rho D_{mj} \frac{\partial Y_j}{\partial x}, \quad q_y = \lambda \frac{\partial T}{\partial y} + \sum_{j=1}^M h_j \rho D_{mj} \frac{\partial Y_j}{\partial y},$$

$$\tau_{xx} = \mu \left(2 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right), \quad \tau_{yy} = \mu \left(2 \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right),$$

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right).$$

Аппроксимация конвективных членов проводится с использованием схемы Лакса-Фридрихса-Русанова [4, 5], значения газодинамических параметров слева и справа от границы ячейки рассчитываются с использованием WENO алгоритма пятого порядка точности [6, 7]. Аппроксимация диффузионных и тепловых потоков проводится по схеме с центральными разностями.

3. Вычисление динамической составляющей давления и коррекция вектора скорости.

$$\vec{v}^{n+1} = \vec{v}^* - \frac{\Delta t}{\rho} \nabla \pi^{n+1},$$

$$\nabla \cdot \frac{1}{\rho^n} \nabla \pi^{n+1} = \frac{1}{\Delta t} (\nabla \cdot \vec{v}^* - S^{n+1}).$$

2. Горение кислородно-водородной смеси

На основе построенного алгоритма разработан программный комплекс с использованием технологии параллельных вычислений [8]. Проведено моделирование горения кислородно-водородной смеси в прямоугольном канале. В начальный момент времени канал заполнен кислородом температуры 300 K, водород с температурой 1500 K поступает из плоской щели со скоростью 1 м/с. Для описания химических реакций была принята редуцированная схема окисления водорода, представленная в таблице 1 [9]. Данная схема позволяет моделировать взаимодействие 7 компонент: H, O, H₂, OH, H₂O, O₂, HO₂. Физикохимические свойства этих компонент представлены в источниках [10, 11].

№	Стадия	$A_i, \frac{\text{см}^3}{\text{моль} \cdot \text{с}}$	n	$E_i, \frac{\text{ккал}}{\text{моль}}$
1	$H + O_2 \rightarrow O + OH$	1.92E+14	0.0	1.64E+04
2	$O + OH \rightarrow H + O_2$	5.48E+11	0.39	-2.93E+02
3	$O + H_2 \rightarrow H + OH$	5.08E+04	2.67	6.29E+03
4	$H + OH \rightarrow O + H_2$	2.67E+04	2.65	4.88E+03
5	$OH + H_2 \rightarrow H + H_2O$	2.16E+08	1.51	3.43E+03
6	$H + H_2O \rightarrow OH + H_2$	2.30E+09	1.40	1.83E+04
7	$H_2 + O_2 \rightarrow HO_2 + H$	3.16E+12	0.35	5.55E+04

Таблица 1. Схема реакции и кинетические параметры

Скорость образования или расхода каждой компоненты смеси рассчитываются по формулам:

$$Q_H = M_H \cdot (-1 \cdot w_1 + 1 \cdot w_2 + 1 \cdot w_3 - 1 \cdot w_4 + 1 \cdot w_5 - 1 \cdot w_6 + 1 \cdot w_7),$$

$$Q_O = M_O \cdot (1 \cdot w_1 - 1 \cdot w_2 - 1 \cdot w_3 + 1 \cdot w_4),$$

$$Q_{H_2} = M_{H_2} \cdot (-1 \cdot w_3 + 1 \cdot w_4 - 1 \cdot w_5 + 1 \cdot w_6 - 1 \cdot w_7),$$

$$Q_{OH} = M_{OH} \cdot (1 \cdot w_1 - 1 \cdot w_2 + 1 \cdot w_3 - 1 \cdot w_4 - 1 \cdot w_5 + 1 \cdot w_6),$$

$$Q_{H_2O} = M_{H_2O} \cdot (1 \cdot w_5 - 1 \cdot w_6),$$

$$Q_{O_2} = M_{O_2} \cdot (-1 \cdot w_1 + 1 \cdot w_2 - 1 \cdot w_7),$$

$$Q_{HO_2} = M_{HO_2} \cdot (1 \cdot w_7).$$

Здесь w_i – скорости элементарных стадий реакции:

$$\begin{aligned}
 w_1 &= A_1 \cdot \left(\frac{T}{298}\right)^{n_1} \cdot e^{\left(\frac{-E_1}{RT}\right)} \cdot \left(\frac{\rho Y_H}{M_H}\right) \cdot \left(\frac{\rho Y_{O_2}}{M_{O_2}}\right), \\
 w_2 &= A_2 \cdot \left(\frac{T}{298}\right)^{n_2} \cdot e^{\left(\frac{-E_2}{RT}\right)} \cdot \left(\frac{\rho Y_O}{M_O}\right) \cdot \left(\frac{\rho Y_{OH}}{M_{OH}}\right), \\
 w_3 &= A_3 \cdot \left(\frac{T}{298}\right)^{n_3} \cdot e^{\left(\frac{-E_3}{RT}\right)} \cdot \left(\frac{\rho Y_O}{M_O}\right) \cdot \left(\frac{\rho Y_{H_2}}{M_{H_2}}\right), \\
 w_4 &= A_4 \cdot \left(\frac{T}{298}\right)^{n_4} \cdot e^{\left(\frac{-E_4}{RT}\right)} \cdot \left(\frac{\rho Y_H}{M_H}\right) \cdot \left(\frac{\rho Y_{OH}}{M_{OH}}\right), \\
 w_5 &= A_5 \cdot \left(\frac{T}{298}\right)^{n_5} \cdot e^{\left(\frac{-E_5}{RT}\right)} \cdot \left(\frac{\rho Y_{OH}}{M_{OH}}\right) \cdot \left(\frac{\rho Y_{H_2}}{M_{H_2}}\right), \\
 w_6 &= A_6 \cdot \left(\frac{T}{298}\right)^{n_6} \cdot e^{\left(\frac{-E_6}{RT}\right)} \cdot \left(\frac{\rho Y_H}{M_H}\right) \cdot \left(\frac{\rho Y_{H_2O}}{M_{H_2O}}\right), \\
 w_7 &= A_7 \cdot \left(\frac{T}{298}\right)^{n_7} \cdot e^{\left(\frac{-E_7}{RT}\right)} \cdot \left(\frac{\rho Y_{H_2}}{M_{H_2}}\right) \cdot \left(\frac{\rho Y_{O_2}}{M_{O_2}}\right).
 \end{aligned}$$

На рисунках приведены распределения температуры и массовых долей кислорода, водорода, водяного пара.

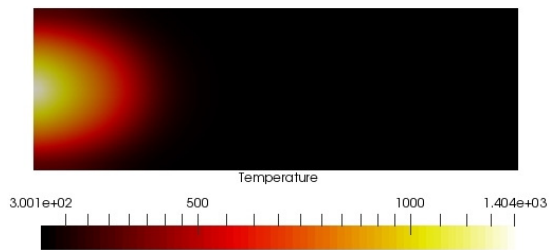


Рис. 1. Распределение температуры.

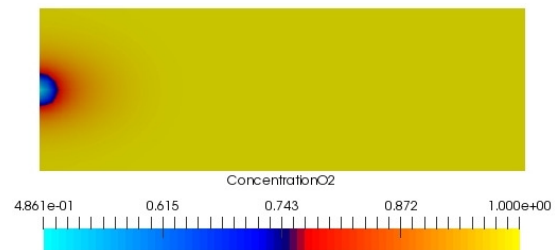


Рис. 2. Распределение кислорода.

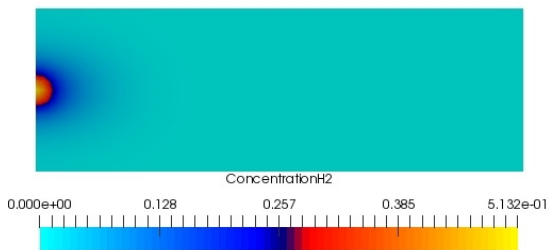


Рис. 3. Распределение водорода.

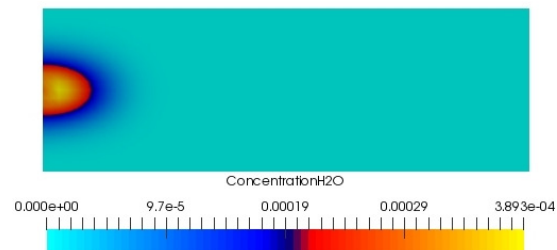


Рис. 4. Распределение водяного пара.

Литература

1. Борисов В.Е., Якуш С.Е. Применение адаптивных иерархических сеток для расчета течений реагирующих газов // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2015. Т. 16. Вып. 2. URL: <http://chemphys.edu.ru/issues/2015-16-2/articles/544/>
2. 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. P. 1–46.
3. Day M.S., Bell J.B. Numerical simulation of laminar reacting flows with complex chemistry // Combustion Theory and Modelling. P. 535–556. DOI: 10.1088/1364-7830/4/4/309

4. Русанов В.В. Расчет взаимодействия нестационарных ударных волн с препятствиями // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1961. 1. 2. P. 267–279.
5. Lax P.D. Weak solutions of nonlinear hyperbolic equations and their numerical computation // Communications on Pure and Applied Mathematics. 1954. 7. 1. P. 159–193.
6. Shu C.W. Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws // ICASE Report 97-65. 1997.
7. Жалнин Р.В., Змитренко Н.В., Ладонкина М.Е., Тишкин В.Ф. Численное моделирование развития неустойчивости Рихтмайера–Мешкова с использованием схем высокого порядка точности // Математическое моделирование. 2007. Т. 19. № 10. С. 61–66.
8. Жалнин Р.В., Пескова Е.Е., Стадниченко О.А., Тишкин В.Ф. Математическое моделирование динамики многокомпонентного газа с использованием WENO схем на примере пиролиза этана // Журнал Средневолжского математического общества. 2016. Т. 18. № 3. С. 98-106.
9. Нурисламова Л.Ф., Губайдуллин И.М. Редукция детальных схем химических превращений окислительных реакций формальдегида и водорода на основании результатов анализа чувствительности математической модели // Вычислительные методы и программирование. 2014. Т. 15. С. 685–696.
10. Оран Э., Борис Дж. Численное моделирование реагирующих потоков. М., Мир, 1990. 664 с.
11. NIST Chemistry WebBook [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://webbook.nist.gov/chemistry/>.

MSC 34G10 58D25

The WENO high-order accuracy algorithm for modeling combustion of an oxygen-hydrogen mixture

R.V. Zhalnin ¹, E.E. Peskova ¹, V.F. Tishkin ²

National Research Ogarev Mordovia State University ¹, Keldysh Institute of Applied Mathematics ²

Abstract: The article states results of numerical modeling of combustion of an oxygen-hydrogen mixture. Modeling was carried with using the developed software for numerical solution of the Navier-Stokes equations in low Mach number approximation. The article presents a scheme for the numerical solution of equations taking into account the processes of diffusion, viscosity, thermal conductivity and chemical reactions.

Keywords: combustion of hydrogen, Navier-Stokes equations, chemical reaction, WENO scheme.

References

1. Borisov V.E., Yakush S.E. Application of Adaptive Hierarchical Grids to Simulation of Reacting Gas Flows, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2015, vol. 16 (2) (in Russian).
URL: <http://chemphys.edu.ru/issues/2015-16-2/articles/544/>
2. 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.
3. Day M.S., Bell J.B. Numerical simulation of laminar reacting flows with complex chemistry *Combustion Theory and Modelling*, pp. 535–556. DOI: 10.1088/1364-7830/4/4/309
4. Rusanov V.V. The calculation of the interaction of non-stationary shock waves and obstacles *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 1962, vol. 1, iss. 2, pp. 304–320
5. Lax P.D. Weak solutions of nonlinear hyperbolic equations and their numerical computation *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 1954, 7, 1, pp. 159–193.
6. Shu C.W. Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws *ICASE Report 97-65*, 1997.
7. Zhalnin R.V., Zmitrenko N.V., Ladonkina M.E., Tishkin V.F. Chislennoye modelirovaniye razvitiya neustoychivosti Rikhtmayyera-Meshkova s ispol'zovaniyem skhem vysokogo poryadka tochnosti // *Matematicheskoye modelirovaniye*. 2007. 19. 10. P. 61–66.
8. Zhalnin R.V., Peskova E.E., Stadnichenko O.A., Tishkin V.F. Matematicheskoye modelirovaniye dinamiki mnogokomponentnogo gaza s ispol'zovaniyem WENO skhem na primere piroliza etana // *Zhurnal Srednevolzhskogo matematicheskogo obshchestva*. 2016. 18. 3. P. 98-106.
9. Nurislamova L.F., Gubaidullin I.M. Redukcija detal'nyh shem himicheskikh prevrashhenij oksilitel'nyh reakcij formal'degida i vodoroda na osnovanii rezul'tatov analiza chuvstvitel'nosti matematicheskoy modeli // *Vychislitel'nye metody i programmirovaniye*. 2014. 15. P. 685–696.

10. Oran Je., Boris Dzh. Chislennoe modelirovanie reagirujushhih potokov. M., Mir, 1990. 664 p.
11. NIST Chemistry WebBook. <http://webbook.nist.gov/chemistry/>.