Разработка программного модуля ChemPhysRate автоматизированной генерации и редукции кинетических механизмов физико-химических процессов для предсказательного многомасштабного моделирования в авиакосмической промышленности

## Ветчинкин А. С.

Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН 11991, Россия, Москва, Косыгина 4

Одной из важнейших фундаментальных задач является создание многоуровневых моделей и соответствующих программных средств их реализации для исследования неравновесных физико-химических процессов, в частности, в перспективных авиационных двигателях. На основе проведенных фундаментальных исследований нами программный модуль ChemPhysRate высокопроизводительный автоматизированной генерации и редукции кинетических механизмов физико-химических процессов и начата суперкомпьютерах разработка технологии его применения на совместно высокопроизводительным вычислительным комплексом ЛОГОС другими вычислительными системами. Нами созданы программные блоки, автоматически определяющие ключевые реакции из набора элементарных стадий на основе оценок чувствительности коэффициентов скоростей и сравнения результатов расчетов модельных неравновесных течений с имеющимися экспериментальными данными.

Программный комплекс ChemPhysRate проверялся на основе расчетов горения авиационного топлива в потоке воздуха, что находит практическое применение для создания новых авиационных турбин, использующих коммерческие виды авиационного керосина. Нами моделировалось горение в камере сгорания перспективного авиационного двигателя ТРД-500 при помощи многомасштабного моделирования. Такой многоуровневый подход предполагает серию исследований как физики элементарного акта реакции, так и моделирования горения потока в камере. На основе выполненных нами расчетов ab initio коэффициентов скоростей элементарных стадий реакции было выполнено редуцирование кинетического механизма и проведено сравнение результатов с существующими экспериментальными данными.

Использовались методы теории строения и динамики молекулярных систем – квантовой химии, квантовой и классической динамики молекулярных столкновений, статистические методы теории абсолютных скоростей реакций и вероятностей распада реакционных интермедиатов. Нами исследована связь связи скоростей элементарных стадий

процессов, которые определяются квантово-механическими данными интермедиатов, и макроскопическими параметрами в задачах течения многофазных сред с химическими и физическими превращениями при отсутствии термодинамического равновесия. В таких процессах описание химических превращений через статистически усредненные константы скоростей реакций представляется недостоверным и необходимо детальное рассмотрение динамики столкновений с детальным квантово-механическим определением скоростей элементарных стадий для неравновесной среды. С этой целью нами разработан новый метод расчета столкновений со стохастической итерацией. Этот метод не только позволит вычислить кинетические параметры в условиях, недостижимых для лабораторного эксперимента или для экспериментально не наблюдаемых элементарных стадий, но и учесть макроскопических условий ОТ равновесия, отклонения локальных описываемого распределением Максвелла-Больцмана.

Для расчета кинетических коэффициентов нами разработан численный алгоритм на основе статистического приближения и квантовомеханических вычислений. Применялся также метод квазистационарного равновесия и выделение основных реакций на основе анализа чувствительности. Вычисление параметров реагентов и переходных состояний осуществлялось с помощью современных неэмпирических методов квантовой химии.

В качестве примера горения суррогата топлива в воздухе, нами было проведено численное моделирование горения авиационного керосина в камере сгорания ТРД-500. Расчет выполнялся с использованием улучшенного редуцированного кинетического механизма, константы были рассчитаны на нашем комплексе ChemPhysRate [1].

Нами использовался, созданный с помощью программного комплекса ChemPhysRate, улучшенный редуцированный механизм, состоящий из 43 веществ и 90 обратимых реакций. Суррогат топлива состоял из C<sub>10</sub>H<sub>22</sub> 1.64e-2, C<sub>6</sub>H<sub>14</sub> 1.24e-3, C<sub>6</sub>H<sub>6</sub> 2.2e-3, O<sub>2</sub> 2.2e-1 мольных долей.. Полное давление было около 9 атм. Выход по массе составлял 0.1 кг/с. Расчеты выполнялись на программы ANSYS CFX 12.1, использовалось 192 ядра. Количество элементов было около 56 млн., узлов – 26 млн. Производительность кластера была равна 1690 Гфлопс. Результаты представлены на рис. 2. Рассчитанный выход продукта хорошо согласуется с экспериментальными данными. Получено, что радикал ОН играет ключевую роль в скорости процесса, установления распределения температуры и скорости образования продуктов горения, особенно СО, см. рис.2.

(a) (b)

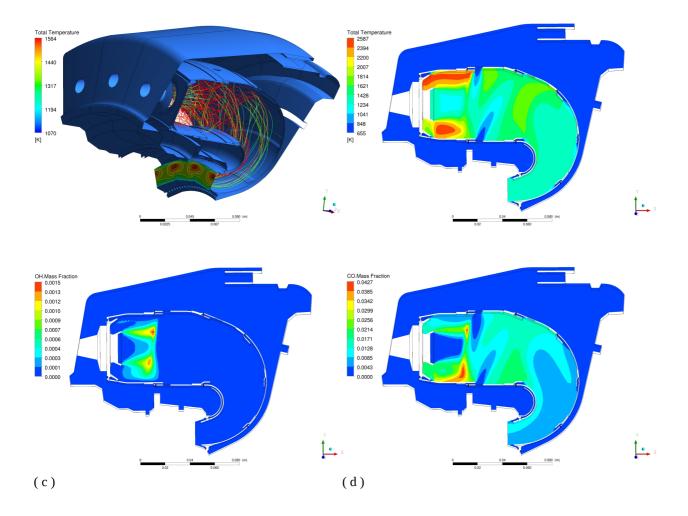


Рис. 2. Сегмент камеры сгорания ТРД-500. Рис. (a) показывает распределение скоростейпотока, (b) дает распределение температуры, K, ( c) – распределение концентраций радиала OH (в нормализованных массовых долях) и ( d) дает выход CO (в нормализованных массовых долях).

Проведенное моделирование позволило дать рекомендации по улучшению конструкции камеры сгорания ТРД-500 и показала эффективность использования комплекса ChemPhysRate.

## Литература

1.Вагнер А.В., Ветчинкин А. С., Ковалев В.Л. Моделирование воспламенения авиационного керосина ударной волной. Вестник Московского университета. Серия 1, Математика. Механика. 2014.№2.С 70-74.