

DOI: 10.15514/ISPRAS-2021-33(6)-16



## Упрощенные кинетические модели горения метана для расширения возможностей пакета OpenFOAM и физико-химических библиотек

<sup>1</sup> Д.С. Кононов, ORCID: 0000-0001-9695-2820 <dr.kononoff@yandex.ru><sup>1</sup> В.Ю. Гидаспов, ORCID: 0000-0002-5119-4488 <gidaspov@mai.ru><sup>2</sup> С.В. Стрижак, ORCID: 0000-0001-5525-5180 <s.strijhak@ispras.ru><sup>1</sup> Московский авиационный институт,  
125993, г. Москва, Волоколамское шоссе, д. 4<sup>2</sup> Институт системного программирования им. В.П. Иванникова РАН,  
109004, Россия, г. Москва, ул. А. Солженицына, д. 25

**Аннотация.** Рассмотрены сокращенные механизмы горения углеводородных топлив, на их основе проведено расширение возможностей пакета OpenFOAM и физико-химических библиотек, применимых для численного моделирования процессов, протекающих в метано-воздушных смесях. На примере метана рассматривается модифицированный механизм горения углеводородного топлива. Выбор данного вещества обусловлен перспективностью и практическим интересом к данному виду топлива в настоящее время. Осуществляется сравнение результатов, полученных в результате применения решателей, созданных в МАИ и ИСП РАН. Приведены физико-математическая модель, численные алгоритмы и результаты расчетов нестационарных физико-химических процессов, протекающих в метано-воздушных смесях. Проводится сравнение процессов эволюции значений температуры и концентраций химических компонент при постоянном давлении и энтальпии, оцениваются время задержки воспламенения и уровень значений величин при достижении состояния термодинамического равновесия. Рассмотрен процесс течения метано-воздушной смеси в трубе с отражением набегающей на стенку ударной волны. Численно решаются нестационарные уравнения газовой динамики, дополненные уравнениями химической кинетики. Эффекты вязкости, теплопроводности и диффузии не учитываются. Получены и проанализированы распределения параметров течения за отраженной ударной волной. Проиллюстрировано распространение детонационной волны в колебательном режиме. Показана согласованность результатов расчетов используемых решателей. Даны оценки дальнейшего возможного применения данного сокращенного механизма горения.

**Ключевые слова:** горение метана; механизмы химических реакций; OpenFOAM; физико-химические библиотеки; reactingPimpleCentralFoam; численное моделирование; смесь совершенных газов

**Для цитирования:** Кононов Д.С., Гидаспов В.Ю., Стрижак С.В. Упрощенные кинетические модели горения метана для расширения возможностей пакета OpenFOAM и физико-химических библиотек. Труды ИСП РАН, том 33, вып. 6, 2021 г., стр. 229-240. DOI: 10.15514/ISPRAS-2021-33(6)-16

## Simplified kinetic models of methane combustion to expand the capabilities of the OpenFOAM package and physicochemical libraries

<sup>1</sup> D.S. Kononov, ORCID: 0000-0001-9695-2820 <dr.kononoff@yandex.ru><sup>1</sup> V.Yu. Gidasпов, ORCID: 0000-0002-5119-4488 <gidaspov@mai.ru><sup>2</sup> S.V. Strijhak, ORCID: 0000-0001-5525-5180 <s.strijhak@ispras.ru><sup>1</sup> Moscow Aviation Institute,

4, Volokolamskoe shosse, Moscow, 125993, Russia

<sup>2</sup> Ivannikov Institute for System Programming of the Russian Academy of Sciences,  
25, Alexander Solzhenitsyn st., Moscow, 109004, Russia

**Abstract.** Simplified mechanisms of combustion of hydrocarbon fuels are considered, on their basis the expansion of the capabilities of the OpenFOAM package and physicochemical libraries, applicable for the numerical simulation of processes occurring in methane-air mixtures, is carried out. A modified mechanism of combustion of hydrocarbon fuel is investigated. The choice of this substance is due to the prospects and practical interest in this type of fuel at the present time. Compares the results obtained by using the solvers created at the MAI and ISP RAS. A physical and mathematical model, numerical algorithms and results of calculations of non-stationary physical and chemical processes occurring in methane-air mixtures are presented. A comparison is made of the values of temperature and concentration of the chemical at constant pressure and enthalpy, the ignition time and the level of values of in are estimated when the state of thermodynamic equilibrium is reached. The process of flow of a methane-air mixture in a tube with reflection of a shock wave incident on the wall is considered. The unsteady equations of gas dynamics are solved numerically, supplemented by the equations of chemical kinetics. The effects of viscosity, thermal conductivity and diffusion are not taken into account. The distributions of the flow parameters behind the reflected shock wave are obtained and analyzed. The propagation of a detonation wave in an oscillatory mode is illustrated. The consistency of the calculation results of the solvers used is shown. Estimates of the possible application of this reduced combustion mechanism are given.

**Keywords:** methane combustion; mechanisms of chemical reactions; OpenFOAM; physicochemical libraries; reactingPimpleCentralFoam; numerical simulation; mixture of perfect gases

**For citation:** Kononov D.S., Gidasпов V.Y., Strijhak S.V. Simplified kinetic models of methane combustion to expand the capabilities of the OpenFOAM package and physicochemical libraries. Trudy ISP RAN/Proc. ISP RAS, vol. 33, issue 6, 2021, pp. 229-240 (in Russian). DOI: 10.15514/ISPRAS-2021-33(6)-16

### 1. Введение

В настоящее время большой практический и научный интерес представляет изучение горения метано-воздушных смесей. Данный вид топлива рассматривается как в контексте использования в перспективных энергетических установках различного назначения, так и в задачах, связанных с обеспечением безопасности труда человека и его жизнедеятельности. Для моделирования процессов, протекающих в метано-воздушных смесях, применяются как детальные кинетические механизмы, так и глобальные брутто-механизмы [1-3].

В данной работе предлагается расширение функционала, предоставляемого открытой библиотекой OpenFOAM и двумя встроенными библиотеками для моделирования физико-химических процессов, для возможности использования модифицированного кинетического механизма окисления метана [4].

В качестве первой тестовой задачи берется стандартный решатель chemFoam, предназначенный для демонстрации протекания химических реакций в расчетной области, состоящей из одной ячейки. В качестве критериев сравнения берутся задержка воспламенения и распределение параметров при достижении состояния термодинамического равновесия. Второй тестовой задачей является исследование течения в ударной трубе после

отражения ударной волны от запаянного торца. Ее численный расчет проводится с использованием разработанного в ИСП РАН решателя reactingPimpleCentralFoam и сравнивается с результатами, полученными путем применения сеточно-характеристического метода и метода Годунова в одномерной постановке в решателях МАИ.

## 2. Математическая модель

### 2.1 Модель химической кинетики

Рассматривается многокомпонентная система переменного состава из  $N$  веществ, в которых протекает  $N_R$  реакций вида:

$$\sum_{i=1}^N \tilde{v}_i^{(r)} M_i \bar{W}^{(r)} \sum_{i=1}^N \tilde{v}_i^{(r)} M_i, \quad \tilde{q}^{(r)} = \sum_{i=1}^N \tilde{v}_i^{(r)}, r = 1..N_R, \quad (1)$$

где  $r$  – порядковый номер реакции,  $\tilde{v}_i^{(r)}$  – стехиометрические коэффициенты,  $\tilde{q}^{(r)}$  – порядок соответствующих элементарных реакций,  $\bar{W}^{(r)}$  – скорость  $(r)$ -ой химической реакции в прямом и обратном направлениях.

Скорость химической реакции прямо пропорциональна произведению объемных концентраций участвующих в ней компонентов и константы скорости реакции  $\vec{K}^{(r)}$ :

$$\bar{W}^{(r)} = \vec{K}^{(r)} \prod_i (\rho \gamma_i)^{\tilde{v}_i^{(r)}} \left[ \frac{\text{моль}}{\text{с} \cdot \text{м}^3} \right], \quad (2)$$

где  $\rho$  – плотность,  $\gamma_i$  – мольно-массовая концентрация  $i$ -того компонента смеси.

Константа скоростей прямых реакций рассчитывается по обобщенной формуле Аррениуса:

$$\vec{K}^{(r)} = A \left( \frac{T}{T_0} \right)^n \left( \frac{P}{P_0} \right)^m \exp \left( -\frac{E}{T} \right) \left[ \frac{(\text{моль}/\text{м}^3)^{\tilde{q}^{(r)}-1}}{\text{с}} \right], \quad (3)$$

где  $A$ ,  $n$ ,  $m$ ,  $E$  – постоянные величины, индивидуальные для каждой реакции,  $T$  – температура смеси.

### 2.2 Модель термодинамики

Рассматривается смесь совершенных газов, термодинамические свойства которой описывались путем задания выражения для потенциала Гиббса [5]:

$$G(P, T, \bar{\gamma}) = \sum_{i=1}^N \gamma_i \left( G_i^0(T) + RT \ln \frac{P_i}{P_0} \right), \quad (4)$$

где  $R$  – универсальная газовая постоянная,  $P_0$  – нормальное давление,  $G_i^0(T)$  – известные зависимости [5], температурная часть молярного потенциала Гиббса отдельного компонента смеси. Внутренняя энергия, плотность смеси выражаются через потенциал Гиббса и его частные производные:

$$E(T, \gamma_i) = G - T \left( \frac{\partial G}{\partial T} \right)_P - P \left( \frac{\partial G}{\partial P} \right)_T = \sum_{i=1}^N \gamma_i E_i(T), \quad (5)$$

$$\rho(P, T, \bar{\gamma}) = \frac{1}{\left( \frac{\partial G}{\partial P} \right)_T} = \frac{P}{RT \sum_{i=1}^N \gamma_i}. \quad (6)$$

## 3. Особенность реализации

Особенностью реализации является доработка имеющегося в стандартном пакете модуля, поскольку имеющиеся библиотеки в OpenFOAM (libspecie и libreactionThermophysicalModels) поддерживает расчет констант скоростей химических реакций как

$$\vec{K}^{(r)} = AT^n \exp \left( -\frac{E}{T} \right) \left[ \frac{(\text{моль}/\text{м}^3)^{\tilde{q}^{(r)}-1}}{\text{с}} \right], \quad (7)$$

что требует доработки как расчетного метода, так и способов задания/считывания параметров, характеризующих химическую реакцию.

## 4. Постановка задач

Итоговый кинетический механизм, полученный по результатам модификации [6], может быть представлен как табл. 1.

Табл. 1 Кинетический механизм горения метана

Table 1 Methane combustion kinetic mechanism

Реакция	$A, \frac{(\text{моль}/\text{м}^3)^{\tilde{q}^{(r)}-1}}{\text{с}}$	n	m	E, K
$\text{CH}_4 + \text{O}_2 \rightleftharpoons 2/3\text{CO} + 4/3\text{H}_2\text{O} + 1/3\text{CH}_4$	6.0E+8	0	-0.2264	1.88406E+5
$\text{H}_2 + \text{H}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O}$	7.0E+7	0	-0.5	8.8E+4
$\text{CO} + \text{CO} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{CO}_2$	8.5E+6	0	-1.5	8.8E+4
$\text{CO}_2 + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$	1.0E+9	0	-1	1.74E+5

Полагалось, что реакции протекают в метано-воздушной смеси.

С данным кинетическим механизмом проведены расчеты в двух задачах.

### 4.1 Моделирование течения химической реакции при постоянных давлении и энтальпии

Предполагается, что система замкнута, однородна по пространству,  $p = \text{const}, H = \text{const}$ . Необходимо определить временные зависимости концентраций химических компонентов, плотности и температуры.

Искомые параметрами являются концентрации и температура, которые могут быть найдены из системы дифференциально-алгебраических уравнений

$$\rho \frac{d\gamma_i}{dt} = W_i(\rho, T, \gamma_1, \dots, \gamma_N), \gamma_i(0) = \gamma_i^0, i = 1, \dots, N,$$

$$\rho(P, T, \bar{\gamma}) = \frac{P}{RT \sum_{i=1}^N \gamma_i}, \quad H = \sum_{i=1}^N \gamma_i H_i(T).$$

Данная задача является отправной точкой для верификации привнесенных изменений в физико-химические библиотеки. В качестве эталонных данных берутся распределения, полученные в ходе проведения расчета в программном комплексе, представленном в работе [6].

### 4.2 Моделирование течения за отраженной ударной волной

Рассматривается течение в ударной трубе, заполненной горючей метано-воздушной смесью, возникающее после отражения ударной волны (УВ) от закрытого торца ударной трубы. Для описания течения в областях непрерывности используются уравнения физической газовой динамики:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j)}{\partial x_j} = 0. \quad (8)$$

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}, \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho h_s)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho h_s u_j)}{\partial x_j} + \frac{\partial(\rho K)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho K u_j)}{\partial x_j} - \frac{\partial P}{\partial t} = \\ = \frac{\partial(u_i \tau_{ij})}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \chi \frac{\partial h_s}{\partial x_j} \right) + \sum_{m=1}^N \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \chi h_{s,m} \frac{\partial Y_m}{\partial x_j} \right) + S_{hc}, \end{aligned} \quad (10)$$

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho k u_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( (\mu + \sigma_k \mu_t) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + \tilde{P}_K - \rho \beta^* k \omega, \quad (11)$$

$$\frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \omega u_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( (\mu + \sigma_\omega \mu_t) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right) + \alpha \rho S^2 - \rho \beta \omega^2 + (1 - F_1) 2 \rho \sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \frac{\partial k}{\partial x_j}, \quad (12)$$

$$\frac{\partial(\rho Y_m)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho Y_m u_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( (\mu + \mu_t) \frac{\partial Y_m}{\partial x_j} \right) + W_m \quad m = 1 \dots N-1 \quad \sum_{m=1}^N Y_m = 1, \quad (13)$$

$$P = \left( \sum_{m=1}^N \frac{Y_m}{M_m} \right) \rho R T, \quad (14)$$

$$h_s = \sum_{m=1}^N Y_m h_{s,m}, \quad (15)$$

$$h_{s,m} = \int_{T_{std}}^T C_{p,m} dT \quad m = 1 \dots N, \quad (16)$$

$$h_c = \sum_{m=1}^N Y_m h_{c,m}, \quad (17)$$

$$\tau_{ij} = (\mu + \mu_t) \left[ \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right], \quad (18)$$

$$S_{hc} = - \sum_{m=1}^N W_m h_{c,m}, \quad (19)$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), S^2 = S_{ij} S_{ij}. \quad (20)$$

Здесь  $\rho$  – плотность,  $u_j$  – скорость,  $P$  – давление,  $T$  – температура,  $h_s$  – энтальпия,  $h_{c,m}$  – энтальпия образования  $m$ -ого компонента при  $T=T_0$ ,  $h=E+P/\rho$ ,  $\tau_{ij}$  – тензор напряжений,  $Y_m$ ,  $M_m$  – массовая концентрация и молекулярный вес той компоненты вещества,  $K$  – удельная кинетическая энергия,  $W_m$  – скорости химических реакций,  $\mu$ ,  $\mu_t$  – молекулярная и турбулентная вязкости,  $k$  и  $\omega$  – турбулентная кинетическая энергия и удельная скорость диссипации турбулентной энергии для  $k-\omega$  SST модели турбулентности,  $S_{ij}$  – тензор деформаций-напряжений,  $\chi$  – коэффициент диффузии,  $N$  – количество компонент смеси.

При отсутствии явлений вязкости, теплопроводности и диффузии величины  $\tau_{ij}$ ,  $\chi$ ,  $\mu$ ,  $\mu_t$ ,  $k$ ,  $\omega$ , положены равными нулю.

На ударной волне выполняются соотношения Ренкина-Гюгонио:

$$\begin{cases} \rho_1 v_1 = \rho_2 v_2, \\ P_1 + \rho_1 v_1^2 = P_2 + \rho_2 v_2^2, \\ E_1 + \frac{P_1}{\rho_1} + \frac{v_1^2}{2} = E_2 + \frac{P_2}{\rho_2} + \frac{v_2^2}{2}, \\ \bar{\gamma}_1 = \bar{\gamma}_2 \end{cases} \quad (21)$$

где индексом «2» помечены величины после ударной волны, индексом «1» – до,  $v = D - u$ ,  $D$  – скорость распространения разрыва.

## 5. Результаты расчета

Решение задачи моделирования протекания химических реакций при постоянных значениях давления и энтальпии возможно с помощью применения стандартного решателя chemFoam в составе библиотеки OpenFOAM v1912 [7].

Поскольку расчетная область в нем состоит только из одной ячейки, единственным фактором, влияющим на эволюцию концентраций веществ и значения температуры, являются химические реакции.

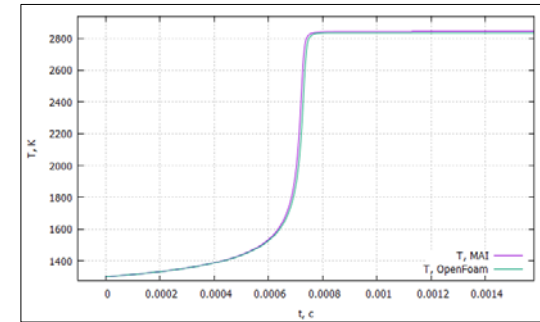


Рис. 1. Сравнение распределения температур  
Fig. 1. Temperature comparison

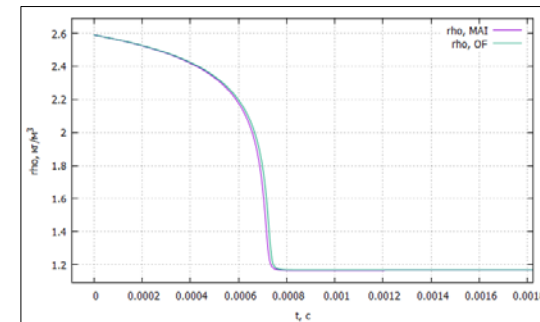


Рис. 2. Сравнение распределения плотностей  
Fig. 2. Density comparison

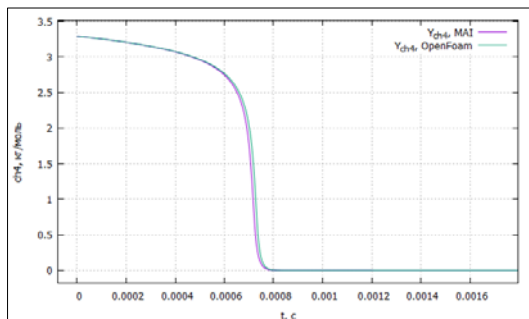


Рис. 3. Сравнение мольно-массовых концентраций метана  
Fig. 3. Mol-mass fraction of methane comparison

При сравнении задержек воспламенения и температуры при достижении состояния термодинамического равновесия наблюдается хорошее согласование (рис. 1-3). В качестве начальных данных брались  $T = 1300$  K,  $p = 1012857$  Па, смесь  $0.091\text{CH}_4 + 0.182\text{O}_2 + 0.727\text{N}_2$ . В chemFoam решателе разностная схема по времени бралась как Euler, шаг по времени принимался равным  $1e-7$  секунд.

Для моделирования течения в ударной трубе задавались два распределения макропараметров: до- ( $u = 0$ ,  $T = 300$  K,  $p = 10000$  Па) и за- ( $u = -1006.993$  м/с,  $T = 950.414$  K,  $p = 152000.602$  Па) координат постановки ударной волны. Концентрации компонентов смеси ( $0.091\text{CH}_4 + 0.182\text{O}_2 + 0.727\text{N}_2$ ) на всем протяжении канала изначально полагались одинаковыми. Граничные условия задавались как неподвижная жесткая стенка:

$$\begin{cases} u_w = -u_1, \\ p_w = p_1, \\ \rho_w = \rho_1. \end{cases}$$

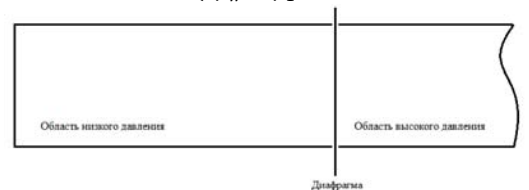


Рис. 4. Эксперимент в ударной трубе  
Fig. 4. Experiment in a shock tube

В одномерной постановке расчеты проводились с использованием сеточно-характеристического метода [8] (решатель «MAI 1») и метода Годунова [9] (решатель «MAI 2»). После удаления диафрагмы образовавшаяся ударная волна перемещалась в сторону закрытого левого торца ударной трубы (рис. 4). После отражения ударной волны от стенки наблюдался рост температуры и давления, которые приводили к воспламенению горючей смеси и образованию волны горения [6]. На некотором расстоянии от стенки происходило взаимодействие волны горения с отраженной ударной волной, в результате которого образовывалась пересжатая детонационная волна. Расчетным путем было получено, что детонационная волна распространялась в колебательном режиме при  $M < 3.9$  (рис. 5), и в режиме с постоянной скоростью при  $M > 3.9$  (рис. 6).

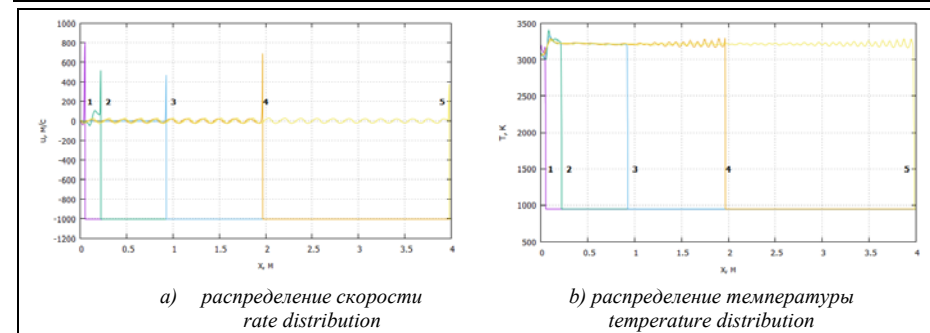


Рис. 5. Колебательный режим распространения отраженной ударной волны, решатель MAI 2  
Fig. 5. Parameters fluctuations of reflected shock wave, MAI 2 solver

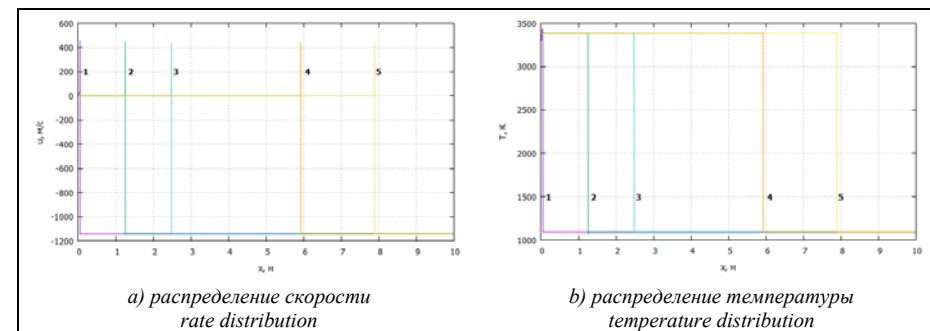


Рис. 6. Режим распространения отраженной ударной волны без колебаний, решатель MAI 2  
Fig. 6. Parameters without fluctuations of reflected shock wave, MAI 2 solver

При задании параметров в решателе reactingPimpleCentralFoam, разработанного в ИСП РАН [11], также наблюдается медленное течение химических реакций до столкновения ударной волны с торцом (рис. 7). Разностная схема по времени в reactingPimpleCentralFoam бралась Euler (явная временная схема), шаг по времени принимался равным  $1e-6$  секунд. Для совместного решения уравнений скорости, давления и температуры использовался алгоритм PIMPLE, для аппроксимации конвективных слагаемых использовались численные схемы vanLeer, vanLeerV (схемы ван Лира), linear (линейная интерполяция). Граничные условия для всех величин полагались zeroGradient для условия типа «стенка». После дискретизации слагаемых уравнений (8-13) получившаяся система линейных алгебраических уравнений решалась с помощью стабилизированного метода сопряженных градиентов (PBICGStab) с предобуславливателем с моделью диагонального LU-разложения (DILU).

Размер расчетной области составляет  $4 \text{ м} \times 2 \text{ м} \times 2 \text{ м}$ . Для одномерного расчета область была разделена на  $10000 \times 1 \times 1$  ячеек, для двумерного расчета – на  $10000 \times 10 \times 1$  ячеек. При сравнении распределения параметров в одномерных нестационарных расчетах наблюдалось хорошее согласование распределения параметров (рис. 7). Во всех трех расчетах наблюдается характерная «ячеистая» структура, колебания значений наблюдаемых параметров осуществляются вокруг значений, соответствующих равновесной отраженной детонационной волне.

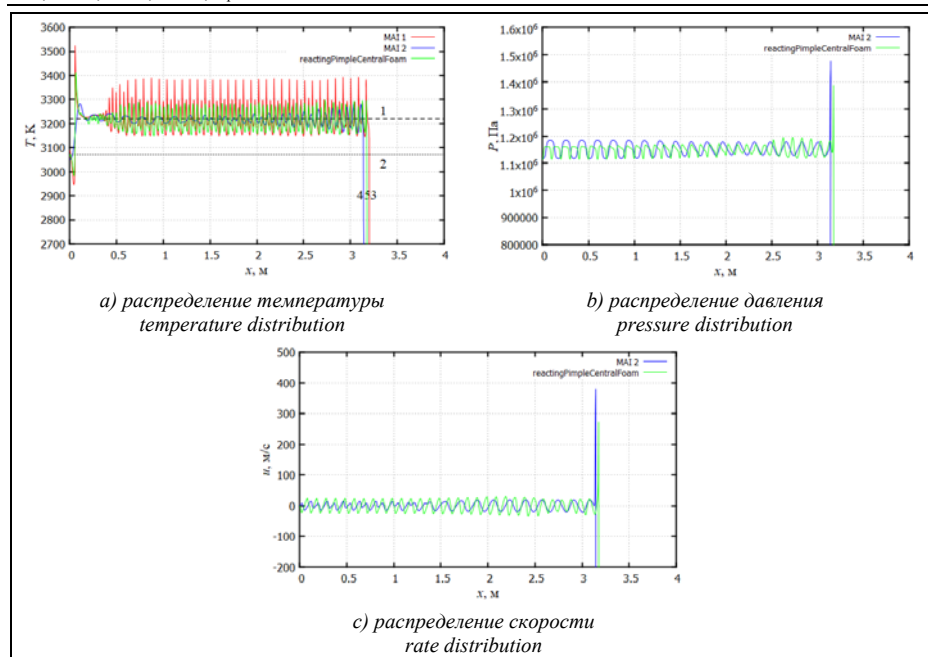


Рис. 7. 1D распределение параметров при  $M_{\infty}=3.6$  при  $t = 0,004$  с, 2 – отраженная детонационная волна, 3 – детонационная волна Чепмена-Жуге

Fig. 7. 1D parameters distribution,  $M_{\infty}=3.6$ ,  $t = 0,004$  sec, 2 – reflected detonation wave, Chapman-Jouguet detonation wave

При задании параметров в трехмерной постановке с использованием решателя reactingPimpleCentralFoam, разработанного в ИСП РАН [11], также наблюдается медленное течение химических реакций до столкновения ударной волны с торцом (рис. 7). Разностная схема по времени в reactingPimpleCentralFoam бралась Euler, шаг по времени принимался равным  $1e-6$  секунд. Для совместного решения уравнений скорости, давления и температуры использовался алгоритм PIMPLE, для аппроксимации конвективных слагаемых использовались численные схемы vanLeer, vanLeerV, linear. Граничные условия для всех величин полагались zeroGradient для условия типа «стенка». После дискретизации слагаемых уравнений (8-13) получившаяся система линейно-алгебраических уравнений решалась с помощью стабилизированного метода сопряженных градиентов (PBiCGStab) с предобуславливателем с моделью диагонального LU-разложения (DILU).

Размер расчетной области составляет  $4 \text{ м} \times 2 \text{ м} \times 2 \text{ м}$ . Для одномерного расчета область была разделена на  $10000 \times 1 \times 1$  ячеек, для двумерного расчета – на  $10000 \times 10 \times 1$  ячеек.

При сравнении распределения параметров в одномерных нестационарных расчетах наблюдалось хорошее согласование распределения параметров (рис. 7). Во всех трех расчетах наблюдается характерная «ячеистая» структура, колебания значений наблюдаемых параметров осуществляются вокруг значений, соответствующих равновесной отраженной детонационной волне.

При сравнении расчетов решателем reactingPimpleCentralFoam в одномерной и двумерной расчетных областях наблюдается сохранение ячеистой структуры [12] распределения и одинаковый уровень колебаний значений параметров (рис. 8).

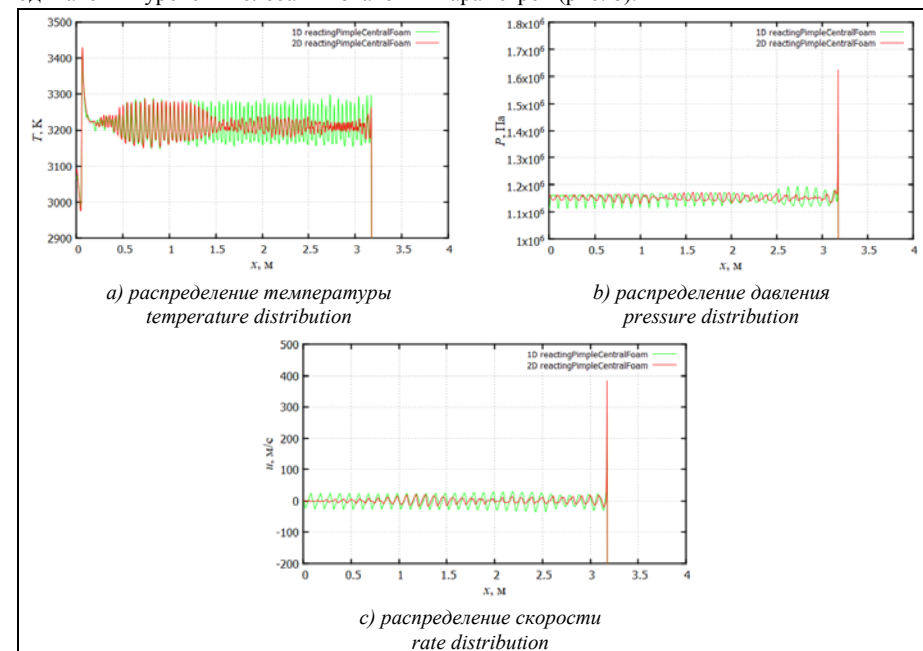


Рис. 8. Распределение параметров при  $M_{\infty}=3.6$  при  $t = 0,004$  с, в расчетах решателем reactingPimpleCentralFoam

Fig. 8. Parameters distribution,  $M_{\infty}=3.6$ ,  $t = 0,004$  sec, reactingPimpleCentralFoam calculations

## 6. Заключение

В работе проведена модификация стандартной химико-физической библиотеки прикладного программного пакета OpenFOAM v1912, позволившая использовать в расчетах обобщенную форму задания химических реакций, протекающих в смесях. Опробовано применение модифицированного сокращенного глобального механизма горения метана в воздухе. Расчеты выполнялись на персональном компьютере и вычислительном кластере UniHUB ИСП РАН.

Получено согласованное распределение параметров в решателях, разработанных в МАИ и ИСП РАН. В дальнейшем рассматриваемый кинетический брутто-механизм может быть применен для проведения расчетов в других видах углеводородных топлив путем модификации реакции, содержащей метан.

## Список литературы / References

- [1]. Peters N. Turbulent Combustion. Cambridge University Press, 2000, 324 p.
- [2]. Poinot T., Veynante D. Theoretical and Numerical Combustion. 2nd edition. Edwards, 2005, 540 p.
- [3]. Warnatz J., Maas U., W. Dibble R.W. Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation. 4th Edition. Springer, 2006, 390 p.

- [4]. Басевич В.Я., Фролов С.М. Глобальные кинетические механизмы, использующиеся при моделировании многостадийного самовоспламенения углеводородов в реагирующих течениях. *Химическая физика*, том 25, no. 6, 2006. стр. 54-62 / Basevich V.Ya., Frolov S.M. Global kinetic mechanisms used in modeling multistage autoignition of hydrocarbons in reacting flows, *Chemical Physics*, vol. 25, no. 6, 2006. pp. 54-62 (in Russian).
- [5]. Гурвич Л.В., Вейц И.В. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание в 4-х томах. М., Наука, 1979-1982 гг. / Gurvich L.V., Veyts I.V. et al. Thermodynamic properties of individual substances. Reference edition in 4 volumes. M., Nauka, 1979-1982 (in Russian).
- [6]. Гидаспов В.Ю., Кононов Д.С., Северина Н.С. Моделирование воспламенения и детонации метано-воздушных смесей за отраженной ударной волной. *Теплофизика высоких температур*, том 58, no. 6, 2020 г., стр. 909-914 / Gidasov V.Y., Kononov D.S., Severina N.S. Simulation of the ignition and detonation of methane-air mixtures behind a reflected shock wave. *High Temperature*, vol. 58, no. 6, 2020, pp. 846-851.
- [7]. Weller H.G., Tabor G. et al. A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques. *Computers in Physics*, vol. 12, 1998, pp. 620–631.
- [8]. Холодов А.С. Сеточно-характеристические численные методы для многомерных задач механики сплошных сред. *Вопросы кибернетики*, вып. 15, 1987 г., стр. 140-163 / Kholodov A.S. Grid-characteristic numerical methods for multidimensional problems of continuum mechanics. *Cybernetics Issues*, issue 15, 1987, pp. 140-163 (in Russian).
- [9]. Годунов С.К., Забродин А.В. и др. Численные решения многомерных задач газовой динамики. М., Наука, 1976 г., 400 стр. / Godunov S.K., Zabrodin A.V. et al. Numerical solution of multidimensional problems of gas dynamics. M., Nauka, 1976, 400 p. (in Russian).
- [10]. Пирумов У.Г. Математическое моделирование в проблемах охраны воздушного бассейна. М., Изд-во МАИ, 2001 г., 340 стр. / Pirumov U.G. Mathematical modeling in the problems of air protection. Moscow, MAI Publishing House, 2001, 340 p. (in Russian).
- [11]. Kraposhin M., Bovtrikova A., Strijhak S. Adaptation of Kurganov-Tadmor Numerical Scheme for Applying in Combination with the PISO Method in Numerical Simulation of Flows in a Wide Range of Mach Numbers. *Procedia Computer Science*. vol. 66, 2015, pp. 43-52.
- [12]. Васильев А.А. Ячеистые структуры многофронтной детонационной волны и иницирование (Обзор). *Физика горения и взрыва*, том 51, вып. 1, 2015 г., стр. 9-30 / Vasil'ev A.A. Cellular structures of a multifront detonation wave and initiation (Review). *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, vol. 51, issue 1, 2015, pp. 1-20.

## Информация об авторах / Information about authors

Дмитрий Сергеевич КОНОНОВ является инженером кафедры Вычислительной математики и программирования. Сфера научных интересов: математическое моделирование, физическая газовая динамика, химическая кинетика.

Dmitry Sergeevich KONONOV is an engineer of the Department of Computational Mathematics and Programming. Research interests: mathematical modeling.

Владимир Юрьевич ГИДАСПОВ – доктор физико-математических наук, доцент, старший научный сотрудник кафедры вычислительной математики и программирования. Сфера научных интересов: математическое моделирование, физическая газовая динамика, многофазные течения, горение и детонация.

Vladimir Yurevich GIDASPOV – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, assistant professor, Senior Researcher of the Department of Computational Mathematics and Programming of the Moscow Aviation Institute. Research interests: mathematical modeling, physical gas dynamics, multiphase flows, combustion and detonation.

Сергей Владимирович СТРИЖАК – кандидат технических наук, ведущий инженер. Сфера научных интересов: вычислительная гидродинамика, многофазные течения, турбулентность, ветроэнергетика, параллельные вычисления.

Sergei Vladimirovich STRIJHAK – candidate of technical sciences, leading engineer. Research interests: computational fluid dynamics, multiphase flows, turbulence, wind power, parallel computing.