

Федеральное Государственное Унитарное Предприятие
“Центральный аэрогидродинамический институт
имени профессора Н.Е.Жуковского”

На правах рукописи



Ширяева Анна Александровна

**Моделирование высокоскоростных течений
со смешанными режимами турбулентного горения
на основе трехмерных уравнений Рейнольдса**

01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико–математических наук

Научный руководитель:
д.ф.–м.н. В.В. Власенко

Жуковский – 2018

ОГЛАВЛЕНИЕ

Список обозначений	4
Введение	10
Общая характеристика работы.....	10
Обзор литературы по теме диссертации	17
Содержание диссертации.....	34
ГЛАВА 1. Модели и методы для описания	
трехмерных течений с турбулентным горением	37
§1.1. Моделирование трехмерных течений с горением без учета TCI	
Система уравнений Рейнольдса для течений реагирующего газа	37
§1.2. Структура численного метода	41
§1.3. Моделирование турбулентности.....	42
§1.4. Постановка граничных условий.....	45
§1.5. Моделирование химической кинетики и термодинамики.....	47
§1.6. Проблема учета взаимодействия турбулентности с горением	
и различные подходы к ее решению	48
§1.7. Модель микроламинарных пламен (flamelet)	53
§1.8. Аппроксимация функции плотности вероятности (ФПВ).....	59
§1.9. Учет перемежаемости	62
§1.10. “Классическая модель ФПВ–flamelet”	64
§1.11. Модели реактора частичного перемешивания (PaSR).....	66
§1.12. Модельная задача для анализа модели PaSR.....	70
§1.13. Разработка комбинированного метода	79
§1.14. Проблема “динамического равновесия”	83
Выводы к Главе 1	88
ГЛАВА 2. Тестовые расчеты и моделирование	
сверхзвуковых турбулентных струй с горением	89
§2.1. Моделирование эксперимента A.D. Cutler.....	90
§2.2. Анализ экспериментальных данных J.S. Evans et al. Расчеты без учета TCI	99
§2.3. Анализ эксперимента M.C. Burrows & A.P. Kurkov. Расчеты без учета TCI.....	106
§2.4. Применение подхода “ классической модели ФПВ–flamelet ” к моделированию	
экспериментов J.S.Evans et al. и M.C. Burrows et al.	113

§2.5. Применение комбинированного метода, основанного на flamelet к моделированию экспериментов J.S.Evans et al. и M.C. Burrows et al.	116
§2.6. Применение подхода PaSR к моделированию экспериментов J.S.Evans et al. и M.C. Burrows et al.	122
§2.7. Моделирование эксперимента T.S. Cheng. Расчеты без учета TCI	125
§2.8. Моделирование эксперимента T.S. Cheng. Расчеты с учетом TCI	134
§2.9. Механизм стабилизации пламени в эксперименте T.S. Cheng	136
Выводы к Главе 2	139
ГЛАВА 3. Моделирование дозвукового течения	
в камере сгорания со ступенькой	140
§3.1. Расчетная область, сетка и граничные условия	141
§3.2. Течение в камере без горения.....	142
§3.3. Течение в камере с протеканием химических реакций без учета TCI	145
§3.4. Расчеты с учетом TCI (PaSR, UPaSR).....	149
§3.5. Расчеты по EPaSR и GPaSR.....	155
§3.6. Механизм стабилизации горения в эксперименте P.Magre et al.	159
Выводы к Главе 3	162
ГЛАВА 4. Расчеты течения в модельной камере сгорания (HEXAFLY INT)	163
§4.1. Предыстория и обзор проекта HEXAFLY INT.	
Экспериментальная модель и ее испытания в ЦАГИ	163
§4.2. Выбор режима и определение параметров на входе в камеру	170
§4.3. Граничные условия и расчетная сетка.....	173
§4.4. Моделирование инжекции топлива	175
§4.5. Результаты расчетов	176
Выводы к Главе 4	187
Заключение.....	188
Список использованных источников.....	190
Публикации по теме диссертации.....	205
Приложение А. Модель flamelet: вывод уравнений и алгоритм построения	
нестационарной библиотеки	207
Приложение Б. Проблема “динамического равновесия”	212

СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ

$A(T)$	—	коэффициент в выражении для скорости реакции
c	—	скорость звука
C_{diff}	—	диффузионный аналог числа Куранта
c_p	—	теплоемкость единицы массы газа при постоянном давлении
Cu	—	число Куранта
D	—	коэффициент массовой диффузии
$D_T = \mu_T / Sc_T$	—	турбулентный коэффициент массовой диффузии
Da	—	число Дамкёлера
E	—	полная энергия единицы массы газа
E_A	—	энергия активации реакции;
\vec{F}	—	вектор потоков консервативных переменных сквозь грань ячейки
G	—	расход массы смеси через тонкие структуры G .
h	—	энтальпия единицы массы
H	—	энтальпия торможения единицы массы
h_i	—	энтальпия i -й компоненты смеси
$J_k(f)$	—	суммарный (молекулярный и турбулентный) диффузионный поток параметра f в направлении оси x_k
k	—	кинетическая энергия турбулентности
k	—	коэффициент теплопроводности;
L	—	длина
$\vec{l} = (l_x, l_y)$	—	вектор длины грани ячейки сетки
L_0	—	массовый стехиометрический коэффициент окислителя
Le	—	число Льюиса $Le = \frac{\lambda}{D} = \frac{Sc}{Pr}$
m_i	—	молекулярная масса i -й компоненты;
M	—	число Маха

$\vec{n} = (n_x, n_y)$	—	единичный вектор нормали
n	—	переменная в направлении вектора нормали \vec{n}
N	—	скорость скалярной диссипации
N_{comp}	—	количество дифференциальных уравнений для компонент смеси, $N_{comp} = N_{sp} - 1$
N_{sp}	—	количество компонент реагирующей смеси
N_{turb}	—	количество параметров турбулентности
p	—	статическое давление
$P(z)$	—	функция плотности вероятности реализаций различных значений z ;
p_t	—	давление, измеряемое с помощью насадка Пито
pdf	—	функция плотности вероятности
Pr	—	число Прандтля
Pr_T	—	турбулентное число Прандтля;
p_m^t	—	параметры дифференциальной модели турбулентности, $m = 1, \dots, N_{turb}$
$q = \sqrt{k}$	—	параметр турбулентности, пропорциональный характерной величине пульсаций скорости
Q	—	полное количество теплоты, выделившееся в канале, или безразмерное тепловыделение $q / (c_p T)_{нач}$
q_k	—	молекулярные потоки тепловой энергии газовой смеси вдоль оси x_k
$q_{хим}$	—	химическое тепловыделение на единице массы
$\vec{r} = (x; y; z)^T$	—	радиус-вектор точки
R_{ik}	—	элемент тензора напряжений Рейнольдса
R_0	—	универсальная газовая постоянная, $R_0 = 8.31 \text{ Дж}/(\text{моль} \cdot \text{К})$
Re	—	число Рейнольдса
Re_T	—	турбулентное число Рейнольдса
s_i	—	энтропия i -й компоненты смеси
$S(f)$	—	источниковый член в уравнении для параметра f
$\vec{S}^{хим}$	—	источниковые члены в уравнениях для компонент смеси
SY^{ICI}	—	итоговый источниковый член в комбинированном методе
Sc	—	число Шмидта
Sc_T	—	турбулентное число Шмидта

t	—	время
T	—	температура
u	—	продольная скорость
u_k	—	компоненты скорости, ($u_1 = u, u_2 = v, u_3 = w$)
u_τ	—	динамическая скорость
U	—	модуль вектора скорости
\vec{U}	—	набор консервативных переменных
V	—	объем или модуль вектора скорости
$\vec{V} = (u, v, w)$	—	вектор скорости
W_l	—	скорости химических реакций
x_k	—	декартовы координаты ($x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z$)
y^+	—	безразмерная пристенная координата, $y_w u_\tau / \nu_w$
y_w	—	расстояние до ближайшей стенки с прилипанием
Y_k	—	массовые концентрации компонентов смеси
z	—	переменная смешения (концентрация инертной примеси)
z_1	—	энтропийный инвариант Римана ($z_1 = p / \rho^\gamma$)
$z_{2,3}$	—	тангенциальные компоненты скорости (инварианты Римана для одномерного течения вдоль оси n , $z_2 = V_{\tau 1}, z_3 = V_{\tau 2}$)
$z_{4,5}$	—	акустические инварианты Римана ($z_4 = V_n + \int \frac{dp}{\rho c}, z_5 = V_n - \int \frac{dp}{\rho c}$)

Греческие символы

α	—	коэффициент избытка окислителя
β, γ	—	коэффициенты, определяющие положение максимума функции $P(z)$;
$B(x, y)$	—	бета-функция;
γ	—	коэффициент перемежаемости
γ^*	—	объемная доля тонких структур
$\Gamma(x)$	—	гамма-функция.
ε	—	скорость диссипации кинетической энергии турбулентности
η	—	полнота сгорания, тепловая эффективность
$\kappa = c_p / c_v$	—	отношение теплоемкостей для воздуха
λ_K	—	микромасштаб Колмогорова
μ	—	динамический коэффициент молекулярной вязкости
μ_t	—	динамический коэффициент турбулентной вязкости
ν_{ik}	—	массовый коэффициент при i -м веществе в уравнении для k -й реакции;
ν_w	—	кинематическая вязкость на стенке
$\bar{\xi} = (\xi_i, \xi_j)$	—	координаты вдоль сеточных линий
ρ	—	плотность
σ_k	—	турбулентный поток тепла вдоль оси x_k
$\sigma = \widetilde{z'^2}$	—	среднеквадратичное значение пульсаций переменной смещения
$\vec{\sigma}$	—	компоненты вектора примитивных переменных $\vec{\sigma} = [T; u; v; w; p; Y_k; P_m^t]^T$
τ	—	величина шага по времени
τ_{ik}	—	элемент тензора вязких напряжений
τ^*	—	характерное время пребывания газа в реакторе
τ_K	—	характерное времени жизни мельчайших турбулентных вихрей
$\tau_{хим}$	—	характерный масштаб времени химических процессов
τ_{res}	—	характерное конвективное время пребывания газа в тонких структурах
$\omega = \varepsilon / k$	—	параметр турбулентности, пропорциональный характерной частоте турбулентных пульсаций

Верхние индексы

n	—	номер шага по времени
t	—	параметры турбулентности
f	—	относящийся к прямой реакции;
b	—	относящийся к обратной реакции.
eq	—	относящийся к равновесному состоянию
$хим$	—	связанный с химическими реакциями
st	—	относящийся к стехиометрической поверхности
flamelet	—	относящийся к библиотеке микроламинарных пламен
pdf	—	осредненный с помощью функции плотности вероятности
*	—	параметры газа внутри тонких структур (в модели PaSR)
0	—	параметры газа в окружающем пространстве (в модели PaSR)

Нижние индексы

0	—	параметры торможения
∞	—	параметры невозмущенного течения
n	—	параметры вдоль нормали \vec{n}
(i, j, k)	—	нумерация центра ячейки
W	—	параметры газа на стенке с прилипанием потока
O	—	значение, соответствующее чистому окислителю;
F	—	значение, соответствующее чистому топливу

Черта сверху означает осреднение по времени; штрих означает пульсацию.

Аббревиатуры и сокращения

ГУ, ВС	—	граничные условия
ПС	—	пограничный слой
ФПВ	—	функция плотности вероятности
ПВРД	—	прямоточный воздушно–реактивный двигатель
эксп.	—	эксперимент
вар.	—	вариант
EDC	—	модель Eddy Dissipation Concept Магнуссена
flamelet	—	модель микроламинарных пламен
TCI	—	взаимодействие турбулентности и горения (Turbulence–Combustion Interaction)
PaSR	—	модель реактора частичного перемешивания
UPaSR	—	нестационарная модель реактора частичного перемешивания
EPaSR	—	расширенная модель реактора частичного перемешивания
GPaSR	—	обобщенная модель реактора частичного перемешивания
RANS	—	уравнения Рейнольдса (Reynolds Averaged Navier–Stokes equations)
LES	—	метод моделирования крупных вихрей (Large Eddy Simulations, LES)
DNS	—	прямое численное моделирование (Direct Numerical Simulation)
CFD	—	вычислительная аэродинамика (Computational Fluid Dynamics)

ВВЕДЕНИЕ

Общая характеристика работы

Настоящее исследование направлено на совершенствование известных и разработку новых физических моделей турбулентного горения в высокоскоростных камерах сгорания, ориентированных на расчеты в рамках подхода трехмерных уравнений Рейнольдса (RANS) и их реализацию в компьютерных программах. Акцент в работе делается на оценку влияния учета взаимодействия турбулентности и горения (Turbulence–Combustion Interaction, TCI).

Разработка высокоскоростных летательных аппаратов должна стать приоритетным направлением развития авиации на несколько ближайших десятилетий. Ключевым элементом транспортных систем, предназначенных для полета в атмосфере с большими скоростями, является высокоскоростной прямоточный воздушно–реактивный двигатель (ПВРД). Если в традиционном ПВРД поступающий в воздухозаборник сверхзвуковой воздушный поток тормозится до дозвуковой скорости скачками уплотнения – ударными волнами, образуемыми за счет определенной геометрии воздухозаборника, то в высокоскоростном ПВРД поток на входе в камеру сгорания в основном является сверхзвуковым. При больших скоростях потока в камере сгорания возникают проблемы эффективного смешения, воспламенения и стабилизации горения. При малых временах пребывания в камере температура на входе может быть недостаточно высокой для самовоспламенения при приемлемых длинах.

Эксперименты в высокоскоростных камерах сгорания очень дороги и обычно не обеспечивают достаточной точности из-за взаимодействия большого числа разных физических эффектов. Поэтому наличие инструмента для численного моделирования может позволить получить предварительные оценки течения в камере, оптимизировать геометрию, подобрать параметры течения и инъекции топлива, обеспечивающие лучшие характеристики, и тем самым уменьшить затраты на проведение эксперимента. Также расчет позволяет дополнить данные эксперимента. Процесс горения в значительной степени определяется турбулентным смешением горючего и воздуха, но это смешение происходит в присутствии других физических процессов (течение в пограничных слоях с теплообменом на твердых поверхностях, отрывы пограничного слоя, ударные волны и др.). Характерные масштабы протекающих явлений могут отличаться на несколько порядков величины. Это неизбежно приводит к трудностям численного моделирования, требует использования очень подробных расчетных сеток и приводит к большим затратам компьютерной памяти и большим временам счета. Поэтому при разработке математических моделей для описания течений данного класса необходимо искать

оптимальный компромисс между достоверностью модели и ее вычислительной эффективностью.

Следует отметить, что нет однозначности в выборе оптимального подхода при моделировании горения в высокоскоростном потоке. Большинство моделей настроено на дозвуковых течениях и только в некоторых работах предлагаются модели горения, специфичные для сверхзвукового течения. В ЦАГИ имеется многолетний опыт численного моделирования течений с горением на базе модели многокомпонентного неравновесно реагирующего газа на базе уравнений Рейнольдса (Reynolds Averaged Navier–Stokes equations, RANS) в двумерной постановке, без учета влияния турбулентности на средние скорости реакций. Также накоплен большой опыт расчетов трехмерных течений без горения – на базе подходов RANS и LES (Large Eddy Simulation, прямое численное моделирование крупномасштабной турбулентности). Мотивация подготовки данной диссертационной работы определяется необходимостью создания практического инструмента для проведения трехмерных расчетов с горением, а также актуальностью исследования вопроса о влиянии учета взаимодействия турбулентности и горения (TCI).

Несмотря на то, что в последнее время широкое распространение получили расчеты на основе метода LES, в настоящей работе для описания течений с горением используется только решение уравнений RANS. Дело в том, что в турбулентном горении существенную роль играет молекулярное смешение топлива с окислителем и молекулярная диффузия тепла, которые происходят на масштабах мельчайших турбулентных вихрей. Поскольку LES не позволяет опуститься до столь мелких масштабов, то даже в LES приходится использовать полуэмпирические модели микросмешения и горения. Это снижает эффективность подхода LES, и во многих случаях подход RANS способен обеспечить сопоставимое или даже более высокое качество решения.

Актуальность темы исследования определяется тем, что проведение экспериментальных исследований газовой динамики и горения в камерах сгорания высокоскоростных ПВРД требует больших финансовых затрат и сталкивается с множеством технических трудностей, которые препятствуют достоверному определению совокупности необходимых характеристик. Поэтому важную роль играют расчетно–теоретические исследования процессов горения в условиях больших скоростей потока и смешанных режимов горения в камерах сгорания. Остро стоит проблема создания физико–математических моделей, корректно описывающих смешение топлива и окислителя, воспламенение, стабилизацию и срыв горения. Стоит отметить важность правильного описания взаимодействия турбулентности и горения и неоднозначность в выборе оптимального подхода при моделировании

высокоскоростных течений с тепловыделением. Особую трудность представляют смешанные режимы горения, в которых есть области с разными механизмами стабилизации пламени. Разработка вычислительных моделей для описания высокоскоростных течений с турбулентным горением и соответствующих численных методов является в настоящее время весьма актуальной задачей.

Степень разработанности темы определяется тем, что турбулентное горение стало объектом детальных исследований примерно с середины XX века. Много внимания было уделено структуре турбулентного пламени и механизмам горения. Применяются как инженерные, так и теоретические подходы. В турбулентном пламени были выделены несколько принципиально различных режимов горения. Выполнено большое количество работ по созданию математических моделей для численного моделирования турбулентного горения. Достигнуты значительные успехи в понимании механизмов смешения и горения ламинарных и турбулентных потоков. На их основе разработаны рекомендации по осуществлению горения в камерах сгорания высокоскоростных ЛА. Разработаны различные классы моделей взаимодействия турбулентности и горения (TCI): методы моментов, функции плотности вероятности (ФПВ), модели микроламинарных пламен (flamelet), модели реактора частичного перемешивания (Partially Stirred Reactor, PaSR) и др. Вместе с тем, на данный момент разработанные методы учета TCI требуют значительных компьютерных ресурсов, а точность описания течений с турбулентным горением остается довольно низкой. Разработанные методы описания TCI реализованы в коммерческих пакетах вычислительной аэродинамики (ANSYS CFX, FASTRAN и др.), но применение этих методов для решения сложных практических задач требует высокой квалификации вычислителя, глубокого понимания физики течения, умения вносить правки в программу для повышения ее устойчивости и качества.

Цель работы:

1. Разработка и валидация метода моделирования высокоскоростных течений со смешанными режимами турбулентного горения на основе трехмерных уравнений Рейнольдса.
2. Применение этого метода к анализу влияния взаимодействия турбулентности с горением на структуру пламени в областях преимущественно сверхзвукового течения.

Решены следующие задачи:

1. Анализ моделей взаимодействия турбулентности с горением и разработка алгоритмов их реализации. Разработка комбинированного метода для расчета смешанных режимов турбулентного горения.
2. Разработка и тестирование программ для описания высокоскоростных течений на основе трехмерных уравнений Рейнольдса.
3. Применение различных моделей взаимодействия турбулентности с горением к описанию классических экспериментов по турбулентному горению.
4. Исследование механизмов стабилизации горения. Анализ влияния взаимодействия турбулентности с горением на структуру пламени.
5. Применение разработанного метода к описанию течения в высокоскоростной камере сгорания.

Научная новизна работы состоит в том, что:

1. Впервые разработан и реализован комбинированный метод расчета смешанных режимов горения. При этом модели взаимодействия турбулентности с горением используются только для оценки химических источников членов в уравнениях движения газа.
2. Новый метод учета взаимодействия турбулентности с горением (обобщенная модель реактора частичного перемешивания – Generalized PaSR) реализован в программе и применен к решению тестовых и практических задач.
3. Впервые дан сравнительный физический анализ результатов применения различных моделей взаимодействия турбулентности с горением.
4. Сформулировано и реализовано оригинальное граничное условие для моделирования инъекции из отверстия при использовании сетки, не согласованной с его формой.
5. Обнаружено и объяснено нефизичное “динамическое” равновесие, возникающее при расчете реагирующих течений с использованием многостадийных кинетических схем.

Теоретическая значимость работы заключается в следующем:

1. Установлены границы области применимости метода назначенной функции плотности вероятности (ФПВ) при описании течений в высокоскоростных камерах сгорания.
2. Для классических тестов по сверхзвуковому горению, широко используемых при валидации и настройке моделей взаимодействия турбулентности с кинетикой, показана существенная роль корректного описания газодинамических эффектов (ударно–волновая структура течения, теплообмен на стенках канала, вытесняющее действие пограничных слоев).

3. На основе модельных систем уравнений и на основе расчетов классических тестов дан сравнительный анализ различных вариантов метода реактора частичного перемешивания. Рекомендовано использовать расширенную и обобщенную модели реактора частичного перемешивания, которые учитывают предысторию течения.
4. Дано объяснение нефизичного “динамического равновесия” реагирующей смеси газов, предложен способ его устранения и дано доказательство получения физически корректного решения при использовании этого способа.

Практическая значимость работы заключается в том, что разработанные физические модели и численные методы реализованы в программных модулях и могут быть применены для численного моделирования камер сгорания, для оценки интегральных характеристик воздушно–реактивных двигателей, а также для предварительного проектирования силовых установок летательных аппаратов и сопровождения их испытаний.

Методология и метод исследования. Для описания турбулентных течений с горением в диссертации применяется подход, основанный на решении осредненной по времени системы уравнений Навье-Стокса (системы Рейнольдса). Для оценки средних скоростей реакций используется статистический подход, основанный на предписанной функции плотности вероятности. Для численного решения уравнений Рейнольдса используется конечно–объемный метод второго порядка аппроксимации по всем переменным. Стационарные решения получаются методом установления. При решении жестких уравнений химической кинетики применяются методы расщепления по физическим процессам, итерационные методы Ньютона и секущих. Для выбора устойчивых алгоритмов используется анализ на основе модельного уравнения. При доказательстве невозможности “динамического равновесия” использован принцип независимого протекания химических реакций.

Достоверность результатов обосновывается сопоставлением полученных численных результатов с опубликованными в научной литературе детальными экспериментальными данными и расчетами других авторов; использованием компьютерных программ, протестированных на большом наборе задач, охватывающих все рассматриваемые в диссертации физические эффекты; проверкой сходимости численных решений по шагу расчетной сетки. Особое внимание в диссертации уделяется согласованию с экспериментом результатов расчетов по нескольким параметрам течения, отражающим влияние разных физических факторов. В диссертации дано строгое математическое доказательство теоремы о единственности стационарного состояния реагирующей смеси газов, совпадающего с термодинамически равновесным состоянием.

На защиту выносятся:

- новые элементы метода моделирования турбулентных течений вязкого газа с неравновесными химическими реакциями: алгоритмы реализации различных моделей взаимодействия турбулентности с горением и комбинированный метод описания смешанных режимов горения;
- сравнительный анализ различных моделей учета взаимодействия турбулентности с горением на основе модельных систем уравнений и на основе расчета классических тестовых задач;
- анализ механизмов стабилизации горения в классических тестовых задачах и анализ влияния взаимодействия турбулентности с горением на структуру пламени в областях преимущественно сверхзвукового течения.

Личный вклад автора:

- разработка и настройка всех новых элементов метода;
- проведение всех расчетов и физический анализ их результатов;
- математический анализ проблемы “динамического равновесия”;
- разработка расчетного модуля *ZEUS-S3pp* и программная реализация разработанного метода в модуле *zFlare*.

Соответствие паспорту специальности. Содержание диссертации соответствует задачам, указанным в паспорте специальности 01.02.05: “Задачей механики жидкости, газа и плазмы является построение и исследование математических моделей для описания параметров потоков движущихся сред в широком диапазоне условий, проведение экспериментальных исследований течений и их взаимодействия с телами и интерпретация экспериментальных данных с целью прогнозирования и контроля природных явлений и технологических процессов, включающих движения текучих сред, а также разработки перспективных космических, летательных и плавательных аппаратов.” В работе анализируются классы задач механики жидкости и газа, соответствующие областям исследований, перечисленным в паспорте специальности: “3) ламинарные и турбулентные течения; 4) течения сжимаемых сред и ударные волны; 8) физико–химическая гидромеханика (течения с химическими реакциями, горением, детонацией, фазовыми переходами, при наличии излучения и др.); 11) пограничные слои, слои смешения, течения в следе; 12) струйные течения. Кавитация в капельных жидкостях; 15) тепломассоперенос в газах и жидкостях; 18) аналитические, асимптотические и численные методы исследования уравнений кинетических и континуальных моделей однородных и многофазных сред (конечно–разностные, спектральные, методы конечного объема, методы прямого моделирования и др.)”.

Апробация работы. Результаты работы прошли апробацию на 16 международных и отраслевых конференциях. Наиболее значимые из них:

- 1) EUCASS 2011 (4–8 июля 2011, Россия, г. Санкт–Петербург)
- 2) Научная конференция по горению и взрыву, организуемая отделом горения и взрыва ИХФ РАН (8–10 февраля 2014 г., Россия, г. Москва)
- 3) Space Propulsion 2014 (19–22 мая 2014 г., Koln, Germany)
- 4) ICAS 2014, 7–12 сентября 2014 г. (Россия, г. Санкт–Петербург)
- 5) 20th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference (16 – 20 June 2014, Atlanta, Georgia, USA)
- 6) EUCASS 2015 (29 June – 3 July 2015, Krakow, Poland)
- 7) 20th AIAA International Conference on Spaceplanes, Hypersonic Systems and Technologies (6 – 9 July 2015, Glasgow, Scotland)
- 8) ISMAR 2018 (13–18 августа 2018, Россия, г. Новосибирск)
- 9) Видеосеминар по аэромеханике ЦАГИ — ИТПМ СО РАН — СПбПУ — НИИМ МГУ — ОИВТ РАН (18 сентября 2018 г.)

Представленные в диссертации исследования проводились, в том числе, в ходе европейского Проекта HEXAFLY–INT (контракт № АСРЗ–GA–2014–620327), при поддержке Министерства промышленности и торговли РФ; были поддержаны грантом РФФИ №14–01–31546 и грантом Министерства образования и науки РФ (договор №14.G39.31.0001).

Структура и объём диссертации. Диссертация включает список обозначений, введение, основной текст из 4 глав, заключение, выводы, 2 приложения и список литературы. Содержание работы изложено на 206 страницах основного текста (включая иллюстрации) и 11 страницах приложений. Список литературы содержит 207 наименований. В работе содержится 105 иллюстраций.

Публикации по теме диссертации. Основные результаты диссертации получены автором лично. По теме диссертации опубликовано 20 печатных работ, из которых 4 статьи помещены в изданиях, рекомендованных ВАК. Перечень этих работ приведен на стр. 205–206.

Обзор литературы по теме диссертации

Рождение современной науки о горении можно отнести примерно к последней половине девятнадцатого века [198]. Предпосылкой для этого были первые экспериментальные исследования процессов горения Антуана Лорана Лавуазье (1772). Они отчетливо показали активную роль кислорода воздуха в процессах горения, дискредитируя полуколичественную теорию, действующую в эти годы (теорию флогистона) и давая начало современной науке о химии [120]. Позже последовали эксперименты сэра Хамфри Дэви (1815) Роберта Бунзена (1866), Клода Луи Бертелло и Пола Мари Эжена Вьё (1881, 1882), а также Эрнста Малларда и Генри Луи Ле Шателье (1881, 1883) и теории Владимира Александровича Михельсона (1890), Дэвида Леонарда Чепмена (1899) и Жака Шарля Эмиля Жуге (1905), способствующие появлению и развитию науки о горении.

Фактически, изучение процессов горения подразумевает глубокое знание четырех фундаментальных или «чистых» отраслей науки: термодинамики, химической кинетики, механики жидкости и процессов переноса. Из этих четырех дисциплин можно вывести все уравнения, описывающие горение. Однако решение этих уравнений и последующая интерпретация результатов оказываются совсем не тривиальными. В подавляющем большинстве случаев экзотермические химические реакции, связанные с потреблением топлива, протекают в турбулентной среде. Оба эти явления нелинейны и влияют друг на друга. Как подчеркивают Т. Poincot и D. Veynante в своей книге [165], сложность моделирования турбулентного горения может быть резюмирована тремя пунктами:

- В пламени, даже без влияния турбулентности, протекающие физические и химические процессы являются очень сложными. Присутствуют огромные градиенты температур и концентраций, что приводит соответственно к большой теплопроводности, массовой диффузии компонент, ускорению потока и множеству неравновесных и неустойчивых состояний. Процессы горения протекают в широком диапазоне характерных химических времен и масштабов длины. Подробные химические механизмы могут даже в простейшем случае содержать сотни реагирующих компонент и тысячи отдельных реакций.

- Сама по себе турбулентность по-прежнему остается одним из наименее понятных явлений физики. Здесь тоже задействованы различные масштабы времени и длины, и подробное описание этого хаотического явления все еще остается открытым вопросом.

- Турбулентность и химические реакции при турбулентном горении сильно влияют друг на друга. Когда пламя взаимодействует с турбулентным потоком, тепловыделение и связанные с ним градиенты температуры изменяют турбулентные структуры за счет ускорения потока и изменения кинематической вязкости. Этот механизм может усилить турбулентность (турбулизация за счет пламени) или наоборот, ослабить ее (реламинаризация вследствие

сгорания). С другой стороны, турбулентность может изменить структуру пламени и скорость реакции. Например, большие низкочастотные турбулентные структуры могут увеличить активный фронт пламени и, следовательно, усилить горение. Напротив, в случае сильной интенсивности турбулентности скорость выноса тепла из зоны реакции может превысить его производство за счет химических реакций, приводя к частичному или полному погасанию пламени. Связь между турбулентным движением реагирующего потока и химическими реакциями, вероятно, является самой сложной задачей при исследовании горения. Она также представляет собой наиболее серьезное узкое место между наукой и ее приложениями [65]

Революция в технических возможностях изучения турбулентного горения началась около 50–60 лет назад. Во-первых, были разработаны первые бесконтактные методы для экспериментального измерения характеристик пламени в лаборатории. Во-вторых, с появлением ЭВМ произошла революция во многих областях науки. Первые электронные компьютеры для гражданского использования были построены в начале 1950-х годов [195], а первыми прикладными темами были метеорология, астрофизика, физика плазмы и позднее – горение. С тех пор был достигнут невероятный рост вычислительной мощности ЭВМ, который позволил ученым выполнять численное моделирование развития структуры пламени в турбулентном потоке. Но даже с огромным развитием ЭВМ численное разрешение всех масштабов в реальном турбулентном пламени по сей день остается неподъемной задачей. Для «обхода» этой невыполнимой задачи разрабатываются специальные модели. При численном анализе пламени с помощью CFD можно выделить три уровня разрешения:

- В первой категории все мгновенные уравнения сохранения, описывающие турбулентные реагирующие потоки, усредняются. В этом подходе любая мгновенная величина разлагается на составляющую, осредненную по времени или по ансамблю, и пульсационную составляющую. Замыкание уравнений достигается использованием моделей турбулентности и горения. Модели, применяющие эту методологию, называются RANS (Reynolds Average Navier Stokes). Модели RANS были первыми возможными подходами, и сегодня они все еще широко используются, особенно для практических промышленных расчетов. Основное преимущество этих подходов состоит в уменьшении вычислительных затрат. Производительность этих моделей сильно зависит от качества выполняемых замыканий.

- Полное описание турбулентности в пламени осуществляется при прямом численном моделировании (DNS). В этом случае полные мгновенные уравнения Навье–Стокса решаются без какой-либо модели для турбулентного движения: все масштабы, участвующие в турбулентных процессах и их влияние на процессы горения, определяются явным образом. DNS – это самый простой и непревзойденный по точности подход. Однако он оказывается чрезвычайно дорогостоящим, и сегодня этот метод неприменим к моделированию задач

практического характера, в особенности, к течениям с высоким числом Рейнольдса. В качестве инструмента исследования DNS может использоваться для получения информации, необходимой для понимания процесса горения и развития моделирования.

- Промежуточное место между RANS и DNS занимает метод моделирования крупных вихрей (Large Eddy Simulations, LES). В этом подходе явно вычисляются крупные турбулентные структуры, которые больше, чем размер расчетной ячейки поля течения, тогда как эффекты от наименьших вихрей моделируются с использованием подсеточных моделей. Вычислительно LES обходится заметно дешевле DNS. LES в последние годы стал очень популярным подходом за счет увеличения вычислительных возможностей. В течениях идеального нереагирующего газа LES позволяет при описании обтекания реальных геометрий получать хорошее согласование с экспериментом без специальной настройки полуэмпирических моделей (в отличие от RANS, где такая настройка необходима) [6]. Не так обстоит дело при описании горения. Процессы горения связаны с молекулярным смешением и протекают на уровне мельчайших турбулентных вихрей, которые в LES явным образом не воспроизводятся. Поэтому для описания турбулентного горения, так же как и в подходе RANS, требуются полуэмпирические модели. LES способен лишь уточнить локальные условия протекания процессов смешения и горения за счет детализации вихревой структуры течения. Но для описания самих этих процессов, как и в RANS, приходится использовать полуэмпирические модели. Поэтому в задачах горения LES не гарантирует качество описания горения и не является панацеей в теории горения.

На рис. 1, взятом из работы [64], сопоставлены результаты численного моделирования эксперимента Cheng et al. [72] (графики распределения статической температуры (K) в двух поперечных сечениях), выполненные в рамках подхода LES тремя разными авторами: [152] с учетом TCI и две работы без учета TCI: [62] и [64] (с использованием трех разных расчетных сеток). Можно видеть, что расчеты до сих пор далеки от экспериментальных данных, а увеличение сеточного разрешения на два порядка лишь немного приближает к эксперименту. Результаты [64] более близки к [152], несмотря на отсутствие учета TCI в [64]. В работе [64] сделан вывод о том, что численная схема и сеточное разрешение имеют большее влияние на результаты, чем подсеточная модель (учет TCI) или модель кинетики. Это объясняет большой разброс результатов численного моделирования, доступных в литературе. Кроме того, на основе анализа структуры течения и пламени утверждается о большей значимости корректного описания газодинамики течения, чем учета TCI. Автор работы [64] считает полученное согласование с экспериментом хорошим. Следует отметить, что в эксперименте [4] на симметричной установке с коаксиальными струями топлива и окислителя были получены несимметричные данные. Если учесть уровень несимметрии экспериментальных данных, то

ошибка расчетов не превышает различие в экспериментальных данных между двумя половинами струи. Это подводит к еще одной проблеме – выбора подходящих экспериментальных данных для валидации физических моделей и численных методов.

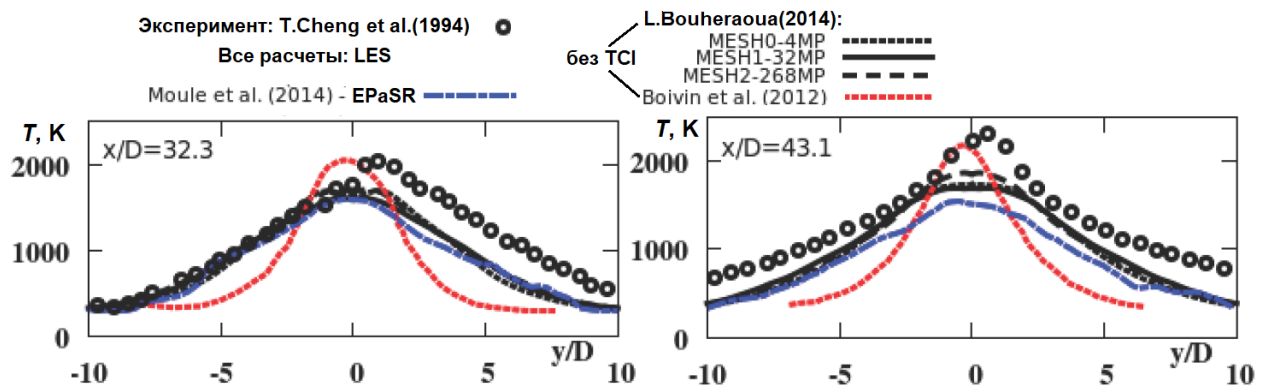


Рисунок 1 – Результаты численного моделирования [64] эксперимента Cheng et al. [72], полученные разными авторами при использовании подхода LES

В связи с тематикой настоящей работы ограничимся обзором экспериментов по высокоскоростным течениям, в которых поток воздуха на входе в исследуемую область течения является сверхзвуковым. При этом будем рассматривать не промышленные эксперименты, в которых основное внимание уделяется интегральным характеристикам модели (полнота сгорания, тяговый баланс двигателя и пр.), а экспериментам, ориентированным на валидацию физико–математических моделей течения и программ, основанных на этих моделях.

К таким экспериментам со стороны вычислителя можно предъявить ряд требований: нужны визуализация структуры течения и детальные замеры разных параметров течения, включая концентрации компонент смеси и характеристики турбулентности, предпочтительно бесконтактными методами. Кроме того, для полного воспроизведения условий эксперимента и корректной постановки граничных условий, важно наличие данных по геометрии подводящих сопел и каналов, располагающихся выше по течению от основной области эксперимента, а также детальных измерений тепловых потоков в стенку или ее температуры.

За последние полвека опубликовано много экспериментальных работ по горению в высокоскоростных течениях – как в России, так и за рубежом. Большинство работ посвящено высокоскоростным камерам сгорания. Приведем лишь наиболее значимые примеры.

Исследования физики течения в камерах сгорания со ступенчатым расширением на водородном топливе в течение многих лет проводились в ИТПМ СО РАН В.К.Баевым, П.К.Третьяковым, В.А.Константиновским и др. [3, 4, 37]. Одна из рассмотренных геометрий показана на рис. 1. Число Маха втекающего потока воздуха было равно $M=2$. Водород подмешивался в рециркуляционную зону за уступом канала. Возникало двухслойное

течение, что при определенных условиях приводило к колебательным процессам с частотой 200–350 Гц. Измерения включали отбор проб на газовый анализ, высокоскоростную фоторегистрацию прибором Теплера, оптические методы для оценки степени выгорания водорода и для оценки времени пребывания в зоне рециркуляции. Получены интересные физические результаты, но картина течения слишком сложна для валидации моделей.

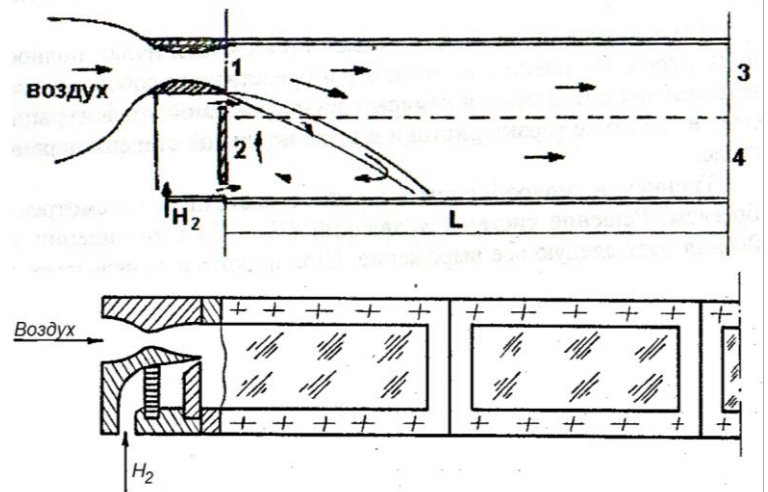


Рисунок 2 – Камера сгорания с уступом, которая исследовалась в ИТПМ СО РАН

В МАИ В.Н.Аврашковым и др. [2] проводились исследования стабилизации горения в расширяющейся камере сгорания на водородном топливе (рис. 3) с параметрами на входе: $M = 2.1$, $T_0 = 1320$ К. Помимо измерений статического давления по стенкам камеры, проводилась визуализация течения через кварцевые окна. Коэффициент избытка окислителя α менялся от 2 до 6.7. При уменьшении α сверхзвуковое горение переходило в дозвуковое (с запиранием канала и горением в псевдоскачке).

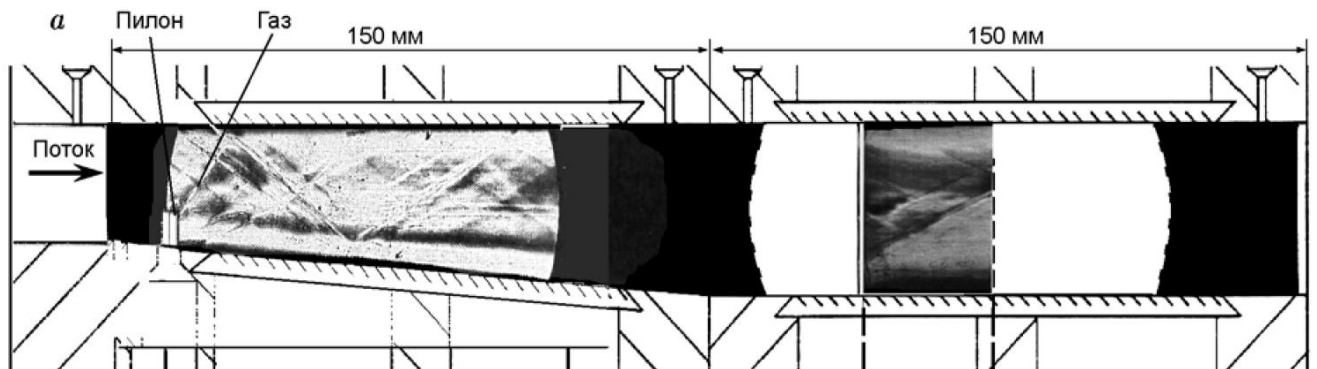


Рисунок 3 – Высокоскоростная камера, которая исследовалась в МАИ

Эксперимент *SCHOLAR* [83, 84] (NASA Langley Direct-Connect Supersonic Combustion Test Facility) является одним из экспериментов, одобренных NATO Research and Technology Organization для валидации CFD кодов. В камеру сгорания (рис.4) поступает подогретый за счет предварительного сжигания водорода поток воздуха, который ускоряется в расширяющемся сопле до $M=2$, что соответствует режиму полета $M \sim 6 \dots 7$. Полное давление на входе в камеру составляло около $p_0 \sim 7.7$ атм, температура торможения на входе в камеру: $T_0 \sim 1828$ К. Топливо (водород) подавалось со стенок из 5 форсунок перед уступом – перпендикулярно потоку и из

одной большой форсунки за уступом – под углом 30 градусов к потоку. Все это создает сложную картину течения. В эксперименте произведены измерения распределений давления на стенках и камеры и потоков тепла к стенке. Также с помощью комбинационного рассеяния (CARS) производились измерения мольных долей N_2 , O_2 и H_2 . Экспериментальные результаты [83, 84] анализировались в ряде расчетно–теоретических работ [69, 79, 80, 90, 129, 171, 172, 177, 183].

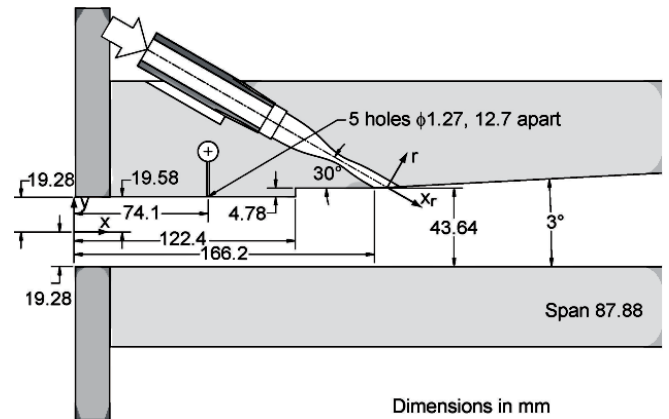


Рисунок 4 – Геометрия камеры сгорания SCHOLAR [83, 84]

Еще одна серия экспериментов с модельной камерой сгорания высокоскоростного ПВРД проведена Waidmann et al. [191] в DLR. Схема установки приведена на рис. 5. На вход в камеру сгорания высотой 50 мм и шириной 40 мм поступает подогретый поток воздуха. В камере имеется участок одностороннего расширения с углом 3°. Внутри канала установлен клиновидный пилон длиной 32 мм, высотой 6 мм и углом полураствора 6°. Водород закачивается параллельно воздушному потоку через 15 отверстий диаметром 1 мм у основания клина. Данный эксперимент численно моделировался в двумерной постановке в работах [59, 70, 111, 142, 205].

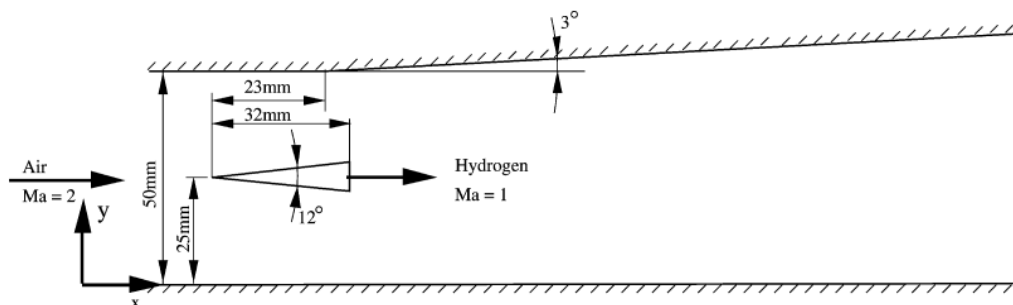
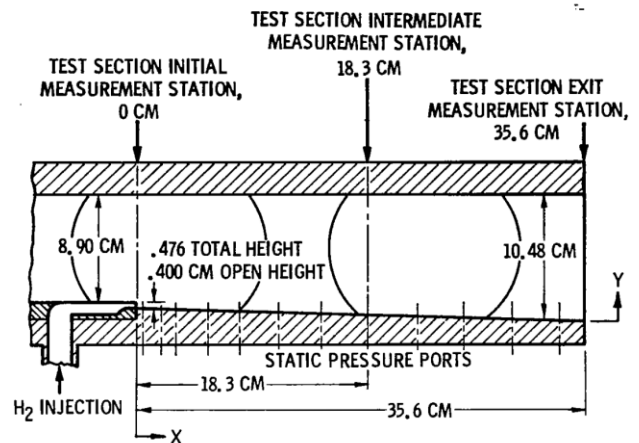


Рисунок 5 – Геометрия камеры сгорания DLR [191]

В камерах сгорания трудно обеспечить корректную постановку начальных и граничных условий. Взаимодействие многих эффектов делает картину течения сложной и затрудняет интерпретацию результатов. Вычислительные затраты при моделировании течений в камерах сгорания также велики. Все это делает перечисленные эксперименты неудобными для валидации и настройки моделей горения.

Из экспериментальных данных такого типа классической простотой отличается лишь эксперимент 1973 г. *M.C. Burrows & A.P. Kurkov* [67] с горением водорода в плоской пристеночной струе. Водород инжектировался параллельно спутному потоку подогретого обедненного кислородом воздуха ($M=2.44$, $T=1270$ K, $p=1$ атм) в камеру прямоугольного

сечения. Геометрия камеры показана на рис.6. В эксперименте замерялись концентрации и температура торможения в выходном сечении. В большинстве расчетных работ [60, 96, 98, 99, 130, 136, 193], в которых выполнено моделирование этого эксперимента, авторы ограничиваются лишь его двухмерным приближением. Недостатками эксперимента являются отсутствие неконтактных измерений концентраций и неопределенность в постановке граничных условий.



**Рисунок 6 – Эксперимент
M.C. Burrows & A.P. Kurkov**

Поэтому более привлекательными для валидации являются сверхзвуковые реагирующие струи, истекающие в открытое пространство. Это обеспечивает хорошую доступность для оптических измерений и визуального наблюдения, а также сокращает число точек замера (за счет осевой симметрии). К сожалению, число таких работ невелико. Наиболее известными, классическими исследованиями этого типа являются эксперимент 1975–1978 гг. J.S. Evans et al. [57] [100] и эксперимент 1994 г. T.S. Cheng et al. [72]. Эти данные широко используются для валидации CFD программ до сих пор (к примеру, [52, 56, 61, 68, 88, 91, 94, 97, 101, 106, 114, 126, 134, 147, 149, 157, 158, 188, 204]).

В экспериментах J.S. Evans et al. [57] [100] исследовалось горение водорода в круглой сверхзвуковой струе ($M=1.9$, $T=251$ K, $p=1$ атм), истекающей в спутный сверхзвуковой поток воздуха ($M=2$, $T=1495$ K, $p=1$ атм), содержащего водяной пар. Схема эксперимента показана на рис. 7,а. В эксперименте [100] проводились замеры концентраций всех молекул (H_2 , H_2O , O_2) в ряде поперечных сечений, основанные на заборе образцов газа. К сожалению, использование контактных методов оказывает локальное влияние на процессы горения за счет внесения в поток возмущений, охлаждения потока и каталитических эффектов на поверхности зонда.

Другая экспериментальная работа по изучению свободного истечения сверхзвуковой струи водорода в спутный поток горячего загрязненного воздуха из сопла $M=2$ была проведена T.S. Cheng et al. и обобщена в [72]. В этих экспериментах для измерения температуры и концентраций применялись неконтактные методы: спонтанное комбинационное рассеяние (SRS) и лазерная индуцированная флуоресценция (LIF). Благодаря большому объему измеренных данных, этот эксперимент широко применяется для валидации расчетных программ для сверхзвукового горения. Данные анализировались в ряде расчетно–теоретических работ [52, 55, 57, 110, 115, 117, 141, 192].

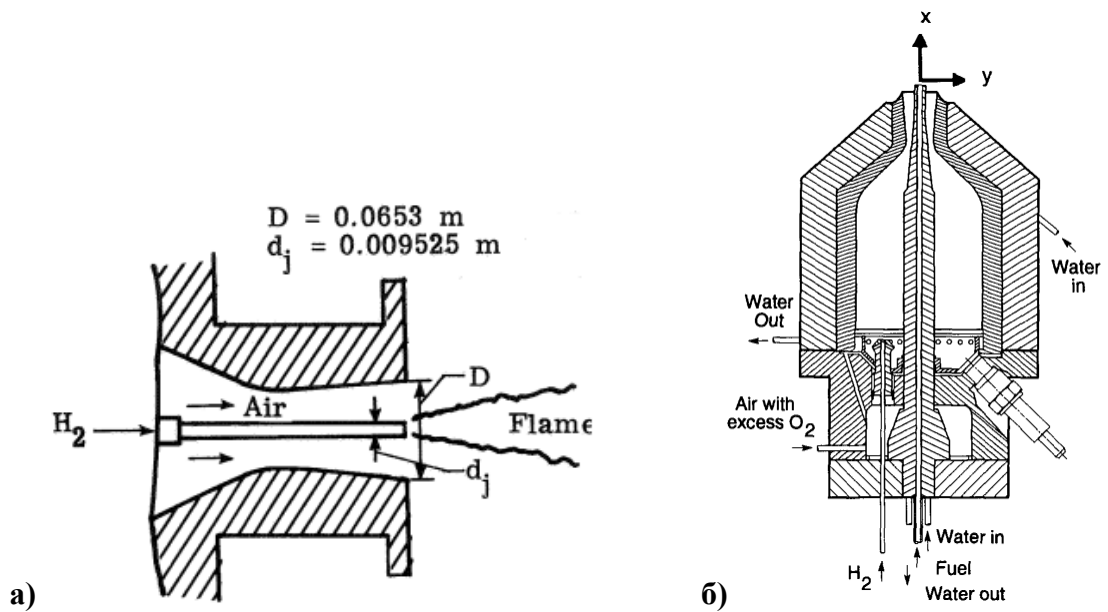


Рисунок 7 – Схемы классических экспериментов с осесимметричными сверхзвуковыми соосными струями: а) J.S. Evans et al. [57] [100]; б) T.S. Cheng et al. [72]

Исходя из соображений о необходимости предельной простоты эксперимента для минимизации взаимодействия различных физических эффектов, в настоящей диссертации для валидации моделей турбулентного горения используются только эксперименты *M.C. Burrows & A.P. Kurkov*, *J.S. Evans et al.* и *T.S. Cheng et al.*

Теперь рассмотрим типичные примеры моделирования высокоскоростных течений с турбулентным горением в расчетных исследованиях. В этих работах можно встретить различные подходы к учету взаимодействия турбулентности с горением (TCI):

1. **“Квазиламинарный подход” (без учета TCI)** использовался в работах Engblom et al. [99] (RANS), Edwards et al. [95] (LES–RANS), Cocks et al. [79] (RANS), Berglund et al. [59] (LES), Genin [112] (LES), В.И.Копченова и О.В.Гуськова (ЦИАМ) [60, 61, 201], Е.А.Мещерякова [14, 28], О.М.Колесникова [23, 24], В.В.Власенко [11, 14, 15] (ЦАГИ), С.М.Фролова и др. (ИХФ РАН) [19, 20, 39].
2. **Статистический подход** с вычислением химических источниковых членов путем введения функции плотности вероятности параметров реагирующего потока использовались в работах Borghi [63, 150], Klimenko & Bilger [132], Kronenburg & Mastorakos [140], Mobus et al. [147], Hsu et al. [126], Gerlinger [113], Baurle & Girimaji [55], С.М.Фролова [38] (ИХФ РАН), А.М.Молчанова [149] (МАИ), В.А.Сабельникова, В.Л.Зимонта и Е.А.Мещерякова [206] (ЦАГИ), О.М.Колесникова [22] (ЦАГИ).
3. **Модель квазистационарных микроламинарных пламен (flamelet)** применялась Zheng & Bray [204] (RANS), Oevermann [159] (RANS), В.А.Сабельниковым и

Е.А.Мещеряковым (ЦАГИ) [144, 145], В.И.Копченовым и О.В.Гуськов (ЦИАМ) [60, 201];

4. **Нестационарные модели микроламинарных пламен** встречаются в работах Pitch [164], Ferreira [104], Piffaretti [163], Ramaekers [169, 194].
5. **Квазиравновесные модели Реактора Частичного Перемешивания (PaSR)** применялись Magnussen [118, 137, 138, 155], Chomiak [73–75], V.Sabelnikov, Fureby, Berglund [58, 59, 108, 109, 176] (RANS/LES).
6. **Неравновесные и нестационарные модели PaSR** были использованы Moule et al. [152–154] (LES), V.Sabelnikov & N.Petrova [161, 162] (RANS).

Перечисленные модели TCI будут подробно рассмотрены в Главе I диссертации. Здесь рассмотрим характерные примеры результатов применения этих моделей другими авторами.

Имеет смысл начать с результатов моделирования простых классических экспериментов.

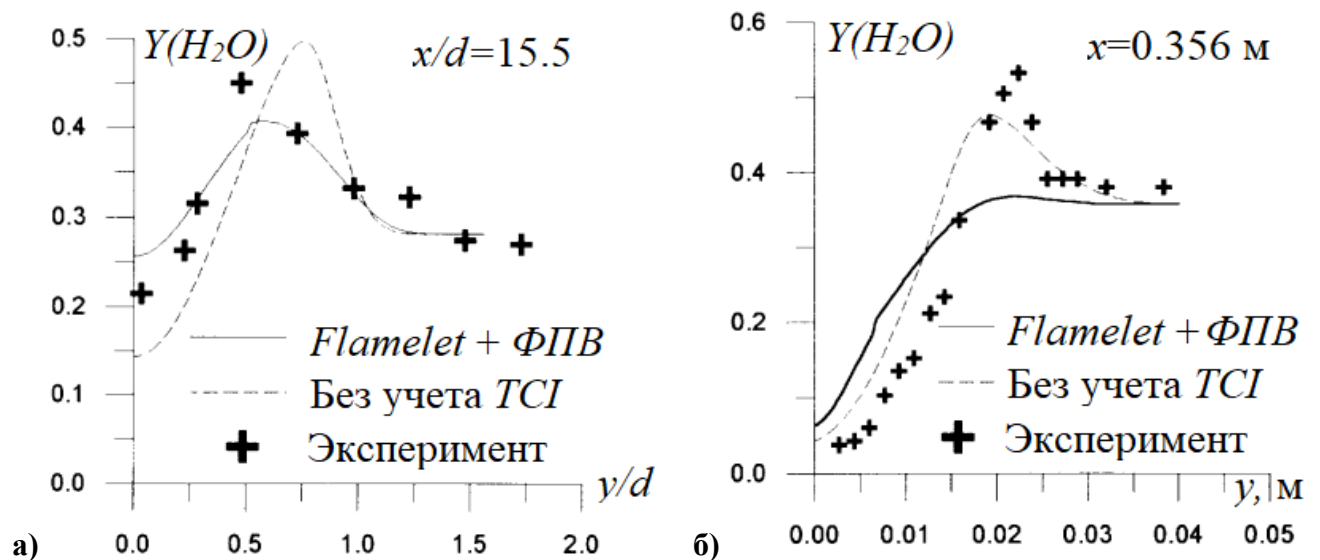


Рисунок 8 – Расчеты экспериментов J.S. Evans et al. [100] (а) и М.С. Burrows & А.Р. Kurkov [67] (б) из работы В.И.Копченова и др. [60]

В работах В.И.Копченова и др. (ЦИАМ) [60, 201], выполненных в 1996–1997 гг., сопоставлены результаты моделирования экспериментов J.S. Evans et al. и М.С. Burrows & А.Р. Kurkov в квазиламинарном приближении (без учета TCI) и на основе модели квазиламинарных микроламинарных пламен. Результаты показаны на рис. 8,а (эксперимент J.S. Evans et al.) и на рис. 8,б (М.С. Burrows & А.Р. Kurkov). Можно видеть, что учет TCI в первом эксперименте (рис. 8,а) позволяет несколько приблизиться к экспериментальным данным по положению максимума в профиле концентрации паров воды, но количественное расхождение в экстремумах остается значительным. Во втором эксперименте (рис. 8,б) улучшений за счет учета TCI не обнаружено.

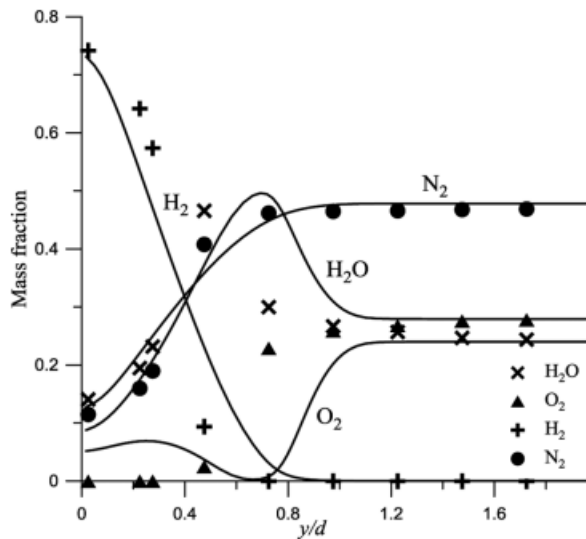


Рисунок 9 – Расчеты экспер. Evans et al. [100] из работы В.И. Копченова и др. [61]

В более поздней работе тех же авторов [61] модель для учета ТСИ уже не используется при описании эксперимента J.S. Evans et al. (рис. 9). Вместо этого применен более подробный кинетический механизм. Как видно из сравнения рис. 8,а с рис. 9, уточнение кинетики позволило авторам приблизить значения экстремумов к эксперименту.

Ряд работ по моделированию турбулентного горения был выполнен А.М.Молчановым и др. из МАИ. В работе [148] предложена дифференциальная модель для вычисления переменных чисел Pr_t и Sc_t .

На рис. 10 сопоставлены осевые и радиальные распределения, полученные в расчетах эксперимента J.S. Evans et al. Авторы заключают об улучшении согласования с экспериментальными данными по сравнению с расчетом при постоянных Pr_t и Sc_t , а также о сильном изменении этих величин в поле реагирующего течения.

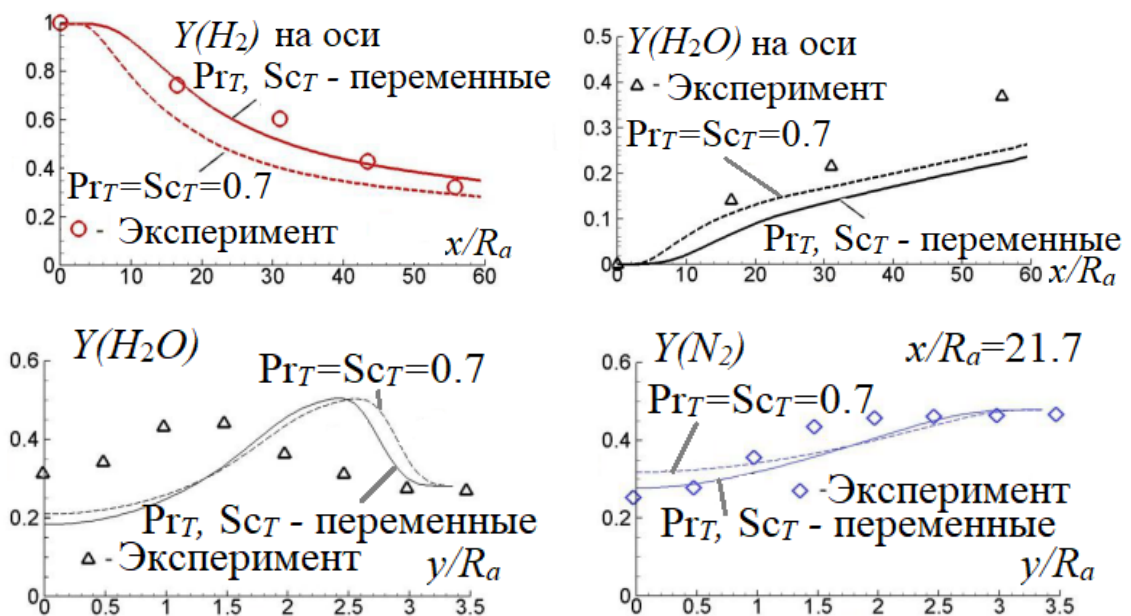


Рисунок 10 – Расчеты эксперимента J.S. Evans et al. из работы А.М.Молчанова и др. [148]

В другой работе [149] применяется статистический подход, основанный на назначенной функции плотности вероятности (ФПВ) распределения температуры и концентраций. Для определения параметров ФПВ решаются уравнения в частных производных для вторых моментов. На рис. 11 сравниваются осевые распределения массовых долей H_2 и H_2O ,

полученные в расчетах эксперимента J.S.Evans et al. без учета TCI и с использованием статистического подхода. Авторы указывают на лишь незначительное изменение в распределениях. При этом существенный сдвиг происходит в месте стабилизации пламени. Аналогичные результаты получены при моделировании эксперимента Burrows & Kurkov [67].

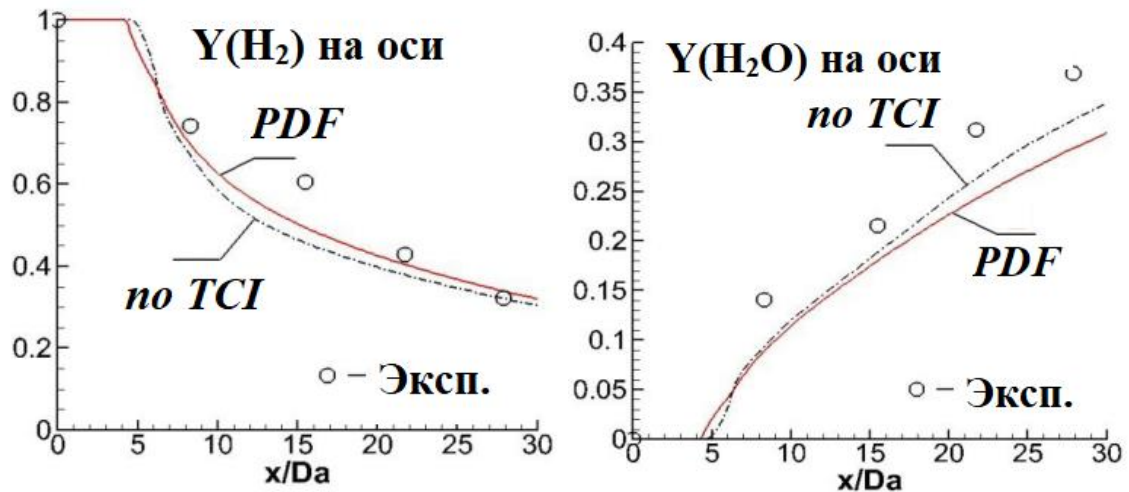


Рисунок 11 – Расчеты эксперимента Evans et al. [100] из работы А.М.Молчанова и др. [149]

В работе [202] представлены результаты моделирования эксперимента M.C. Burrows & A.P. Kurkov. В этой работе предполагается, что эффект TCI заключается в уменьшении скоростей реакций за счет перемежаемости турбулентности. Коэффициент, определяющий понижение скорости реакций, определяется по величинам пульсаций концентраций компонент, пропорциональных локальным градиентам концентраций и длине смешения. Получено очень хорошее согласование с экспериментом не только по мольным долям компонент смеси, но и по полной температуре (рис. 12,а) – результат, который не удалось достичь во всех расчетах других авторов. Но применение той же модели к эксперименту J.S. Evans et al. [203] дало совсем не впечатляющие результаты (рис. 12,в).

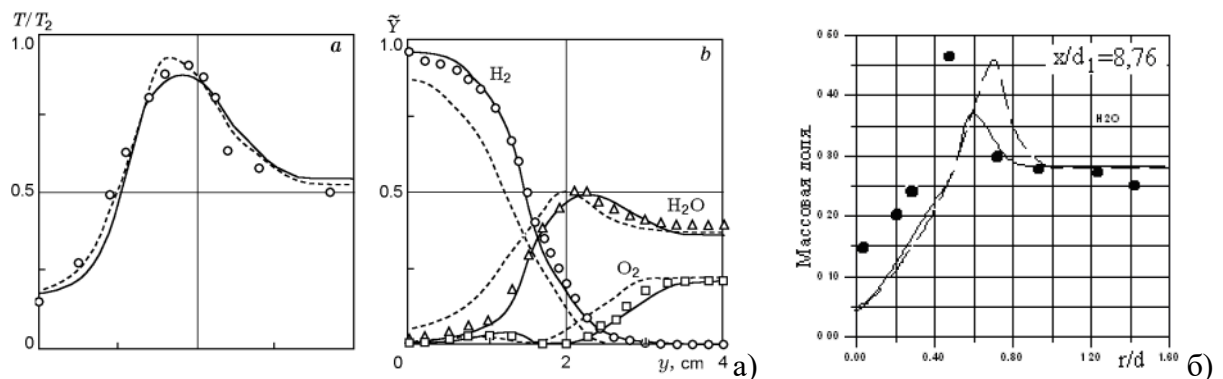


Рисунок 12 – Моделирование J.S. Evans et al. (а) и M.C. Burrows & A.P. Kurkov (б)
из работ У.К. Жапбасбаева и Е.П. Макашева

J. Drummond et al. [106] использовали при моделировании эксперимента J.S. Evans et al. статистический способ учета TCI, учитывающий только пульсации температуры. “Квазиламинарные расчеты” (“no TCI”) сопоставлены с расчетами на основе назначенной ФПВ в виде функции Гаусса или функции бета-распределения. Результаты всех расчетов практически совпали – см. рис. 13.

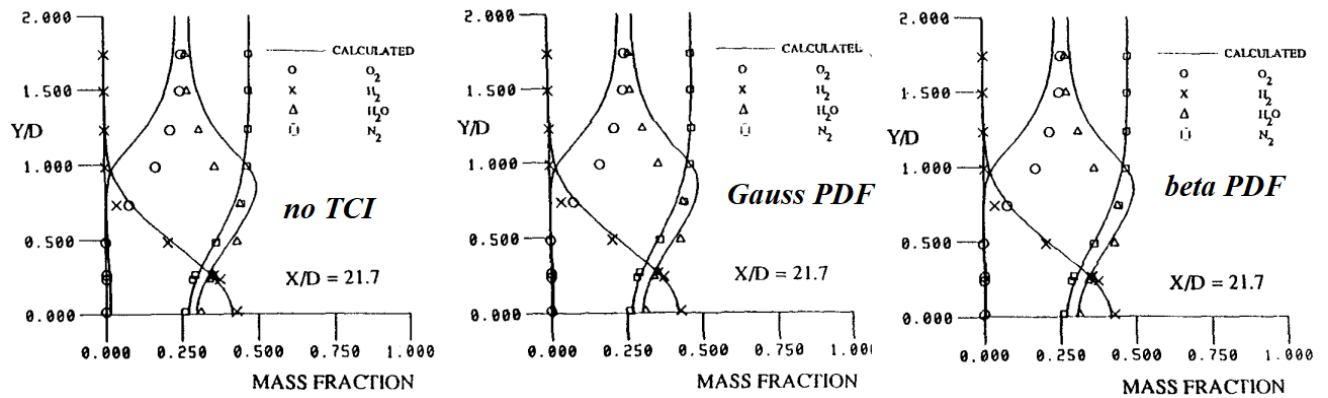


Рисунок 13 – Моделирование J.S. Evans et al. в работе J.Drummond et al. [106]

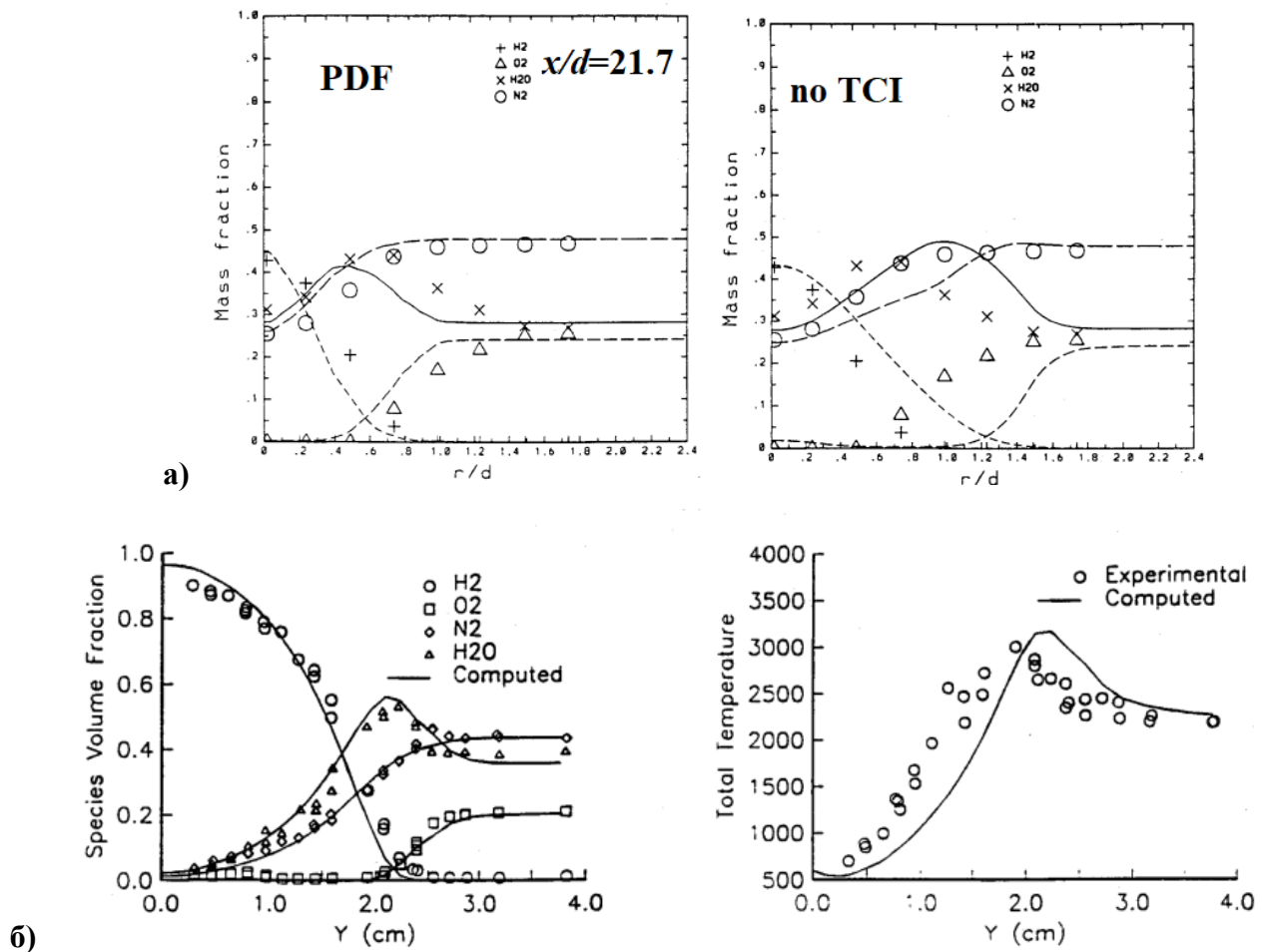


Рисунок 14 – Моделирование эксперимента J.S. Evans et al. (a)

и M.C. Burrows & A.P. Kurkov (б) из работы Hsu A. T. et al. [125]

Авторы работы [125] применили для учета TCI дорогостоящий статистический подход, в котором ФПВ распределения концентраций и энтальпии определялась методом Монте–Карло. По мнению авторов, при описании экспериментов J.S. Evans et al. (a) и M.C. Burrows & A.P. Kurkov учет TCI позволил улучшить предсказание полей концентраций по сравнению с квазиламинарным подходом (рис. 14). Однако по профилям полной температуры (рис. 14,б справа) согласование с экспериментом не было достигнуто.

В работе [156] эксперимент M.C. Burrows & A.P. Kurkov моделировался без учета TCI. Расчеты проводились с использованием модель турбулентности $k-\epsilon$ с коррекцией на сжимаемость и 7-компонентной кинетической схемы. В работе не описаны использованные авторами профили параметров во входном сечении. Достигнуто очень хорошее согласование по концентрациям при неудовлетворительном по температуре торможения – рис.15.

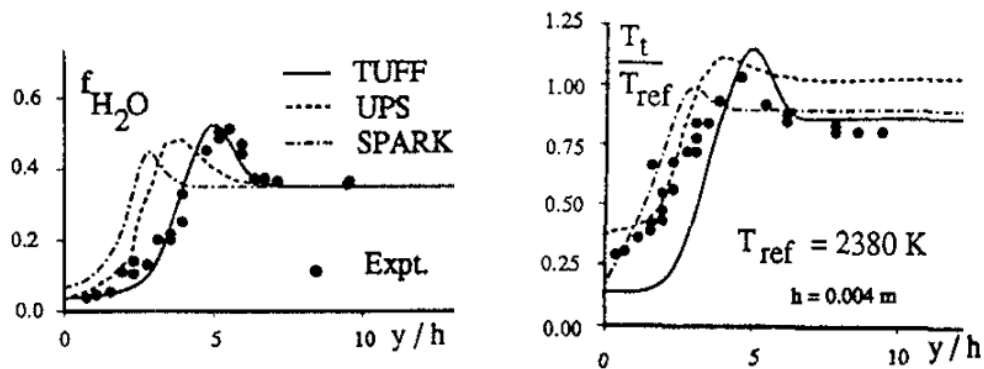


Рисунок 15 – Моделирование эксперимента M.C. Burrows & A.P. Kurkov (б) из работы Narayan J. et al. [156]

Авторы работы [147] сравнили результаты моделирования эксп. Evans et al., полученные на основе квазиламинарного подхода и с использованием двух вариантов статистического

подхода, в которых решалось транспортное уравнение для ФПВ. При использовании совместной ФПВ скорости, энтальпии и состава были достигнуты некоторые улучшения, а в расчете на основе обычной модели турбулентности в сочетании с совместной ФПВ энтальпии и состава улучшения были минимальны. Это означает, что модель турбулентности может иметь более существенное влияние на полученные результаты, чем модель TCI.

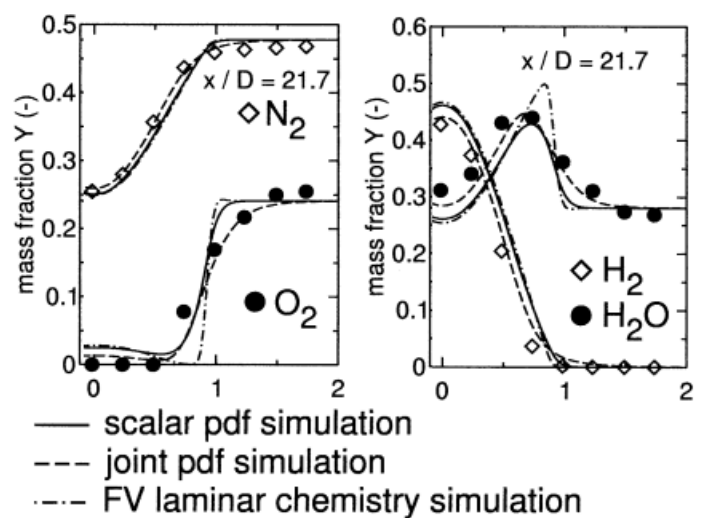


Рисунок 16 Моделирование эксп. Evans et al. без учета TCI и с методом ФПВ в работе [147]

В работе [68] для учета TCI применяется модель переменных чисел Pr_t и Sc_t с решением дополнительных дифференциальных уравнений для их определения. Сделан вывод о достигнутом улучшении результатов (рис. 16) при описании экспериментов М.С. Burrows & А.Р. Kurkov (а) и J.S. Evans et al. (б). Однако упоминается о специально настраиваемых коэффициентах модели. При этом приближение к эксперименту – незначительное.

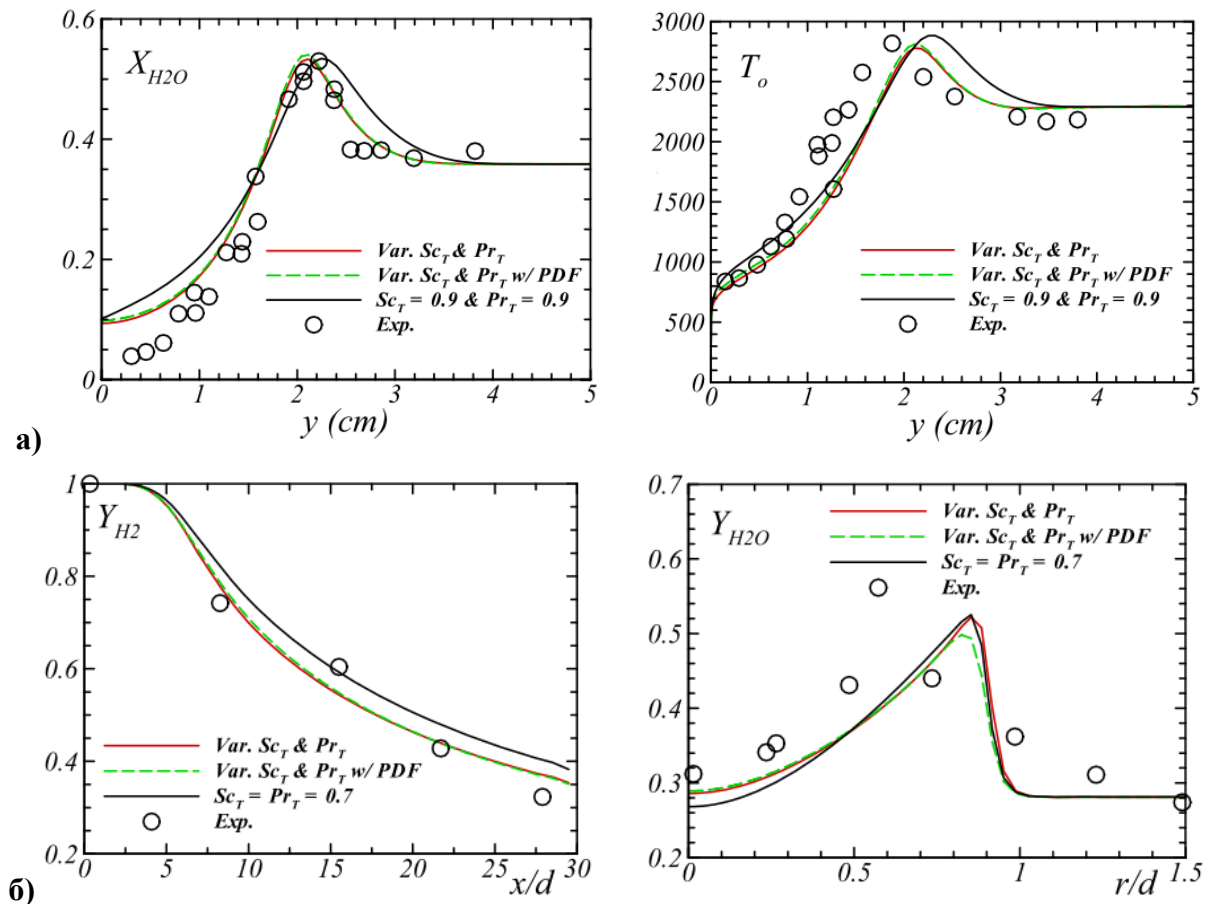


Рисунок 16 – Моделирование эксперимента М.С. Burrows & А.Р. Kurkov (а) и J.S. Evans et al. (б) из работы Calhoon et al. [68]

Все описанные выше расчеты были выполнены в рамках подхода RANS. В качестве типичного примера применения LES можно привести моделирование эксперимента М.С. Burrows & А.Р. Kurkov в работе [93]. Использовались разные модели кинетики и два варианта упрощенных аппроксимаций химических источников членов. В работе сопоставлены расчеты в 2D приближении и в 3D постановке. В 3D расчете получен сдвиг максимумов концентрации воды и температуры торможения дальше вверх от нижней стенки относительно 2D расчетов – см. рис. 17. Это говорит о существенном влиянии газодинамики. Согласование по концентрациям при этом, улучшилось, но профиль температуры торможения удалился от эксперимента. По мнению автора настоящей диссертации, рассогласованность экспериментальных профилей T_0 и Y_{H_2O} похожа на

особенность, невозпроизводимую в расчетах ввиду недостатка данных об условиях эксперимента.

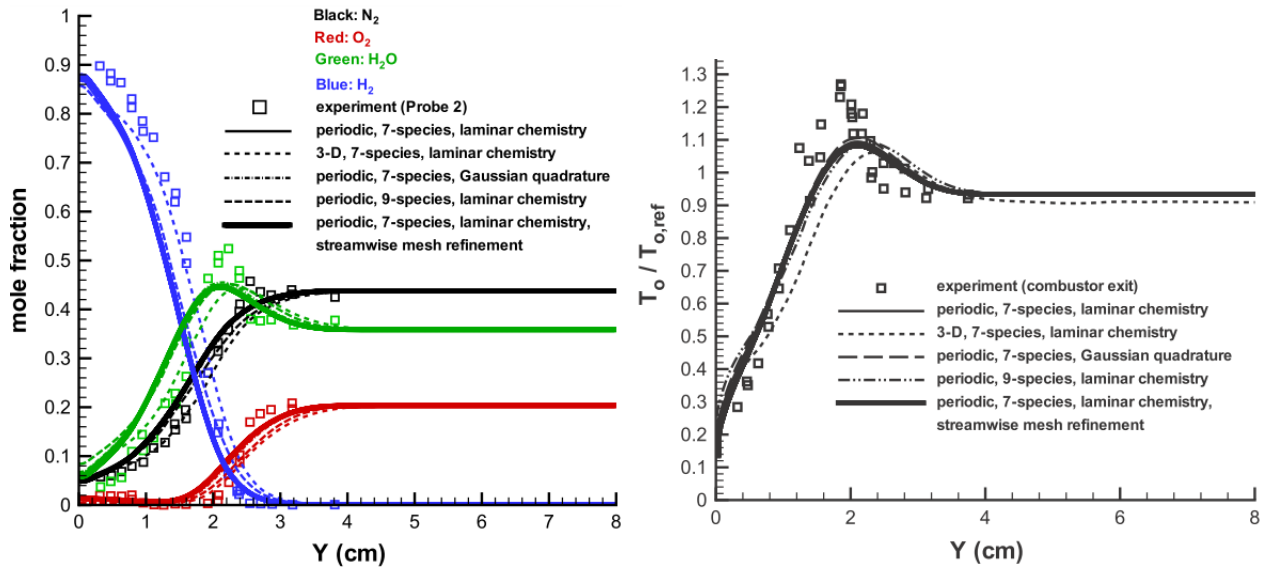


Рисунок 17 – Расчет эксперимента Burrows & Kurkov [67] из работы Edwards et al. [93]

В заключение обзора литературы рассмотрим некоторые примеры моделирования течений в высокоскоростных камерах сгорания.

В работе [111] на базе уравнений RANS без учета TCI, а также с использованием модели flamelet выполнено моделирование сверхзвукового турбулентного течения с горением в камерах сгорания высокоскоростных ПВРД. На основе моделирования течения в камере DLR [191] сделан вывод о завышении температуры при отсутствии учета TCI (рис. 18). Максимальная температура становится ниже (по сравнению с расчетом без учета TCI) при использовании

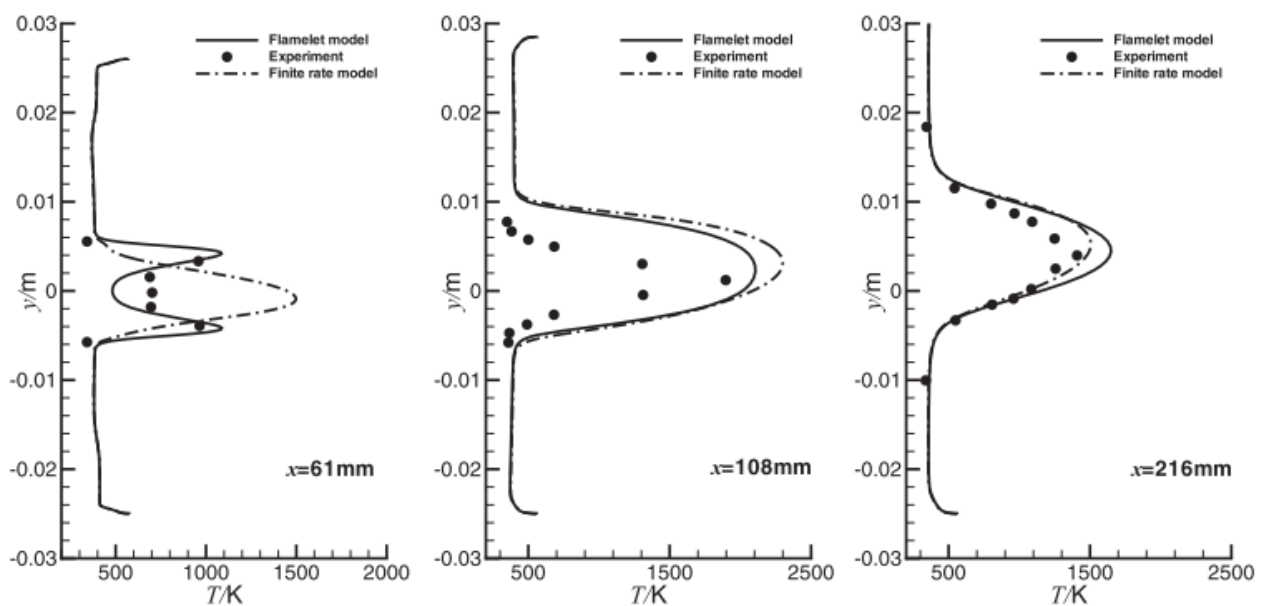


Рисунок 18. Сопоставление результатов [111] численного моделирования эксперимента [191], полученных без учета TCI и с моделью flamelet

модели flamelet для учета TCI и ближе к экспериментальным данным. Это объясняется тем, что в квазиламинарном подходе по сравнению с моделью flamelet неявно учитывается только крупномасштабная турбулентность при полном отсутствии учета неравновесных эффектов от мелких вихрей.

Влияние TCI в условиях течения в модельной камере сгорания SCHOLAR было исследовано в [128]. Результаты, полученные с моделью переменных чисел Прандтля и Шмидта, были сопоставлены с результатами без учета TCI. Сделан вывод о важной роли TCI при описании сверхзвукового горения. Однако результаты, полученные с учетом TCI, хуже согласуются с экспериментальными данными, чем полученные с квазиламинарным подходом, для которого получено удовлетворительное согласование – см. рис. 19. Во многих работах [69, 171, 199] получено хорошее согласование с экспериментальными данными при использовании подхода без учета TCI.

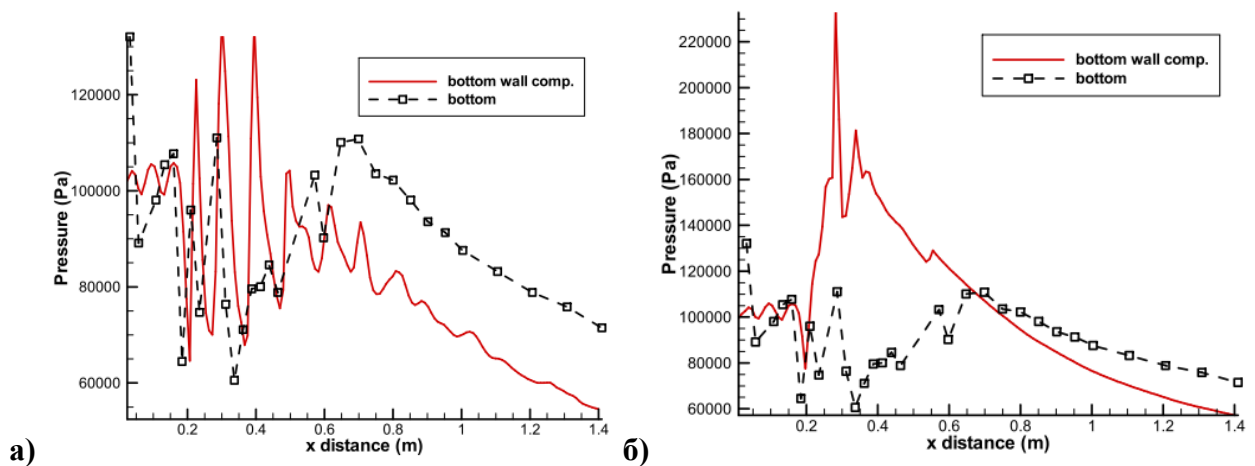


Рисунок 19 – Сопоставление результатов численного моделирования [128] эксперимента SCHOLAR [83, 84], полученные а) без учета TCI и б) с учетом TCI

В [79] сделан вывод, подтвержденный рядом расчетов других авторов, о незначительности роли TCI в сверхзвуковых течениях простой геометрии. Для анализа роли этого явления в условиях более сложного течения в камере сгорания, автор работы [79] сравнивает результаты моделирования такого течения, полученные с квазиламинарным подходом и с использованием модели учета TCI (статистический подход с назначенной ФПВ) в рамках подхода RANS.

На рис. 20,а приведено сопоставление по давлению на верхней и нижней стенке камеры сгорания для четырех расчетов. Можно видеть, что согласование расчетов с экспериментом находится на приемлемом уровне, но пик давления в области воспламенения воспроизведен плохо. Часть несоответствия обусловлена ранним зажиганием, предсказанным в расчетах, и, следовательно, профили давления лежат ниже экспериментальных данных ниже по течению. Во

всех расчетных распределениях хорошо видны колебания, вызванные наличием ударных волн, которые отсутствуют в экспериментальных данных. Возможно, что точки взаимодействия пограничного слоя с ударными волнами располагались между экспериментальными точками измерения давления, но более вероятна повышенная интенсивность этого взаимодействия, предсказанная вычислительными методами.

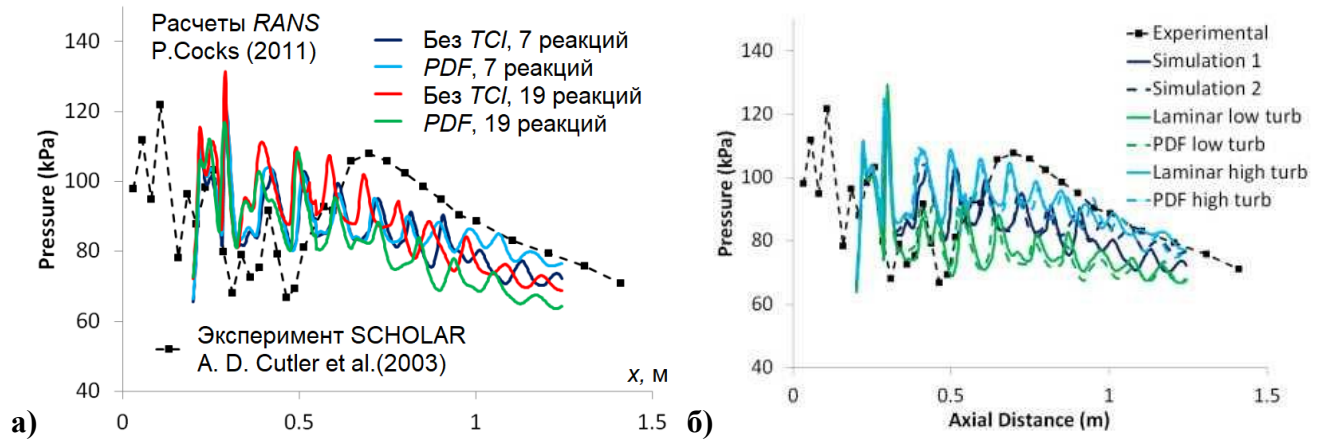


Рисунок 20 – Результаты моделирования эксперимента SCHOLAR [83, 84] из работы [21]:

а) влияние учета TCI; б) влияние турбулентных пульсаций на входе в камеру

В [79] сделан вывод о несущественной роли моделей TCI в рассмотренном течении. При этом согласование результатов, полученных с использованием обоих подходов, он считает вполне удовлетворительным. Автор предполагает, что вывод о малом влиянии TCI мог быть следствием предположений, сделанных при построении моделей учетов TCI, таких как статистическая независимость температуры и состава, предписанная форма ФПВ и др. Однако, в [79] продемонстрировано малое отличие результатов расчетов, полученных по модели переносной ФПВ и без учета TCI.

Для объяснения полученных результатов, доказательства корректности использования моделей или построения новых требуется более глубокое понимание физики сверхзвукового горения, турбулентности сжимаемого потока и эффектов их взаимодействия. Вероятно, физика сверхзвукового горения отличается значительным образом от более хорошо изученного дозвукового случая, так что простое обобщение существующих подходов на случай $M > 1$ не позволяет описать существующего взаимодействия. Подходы, основанные на прямом численном моделировании (DNS) были бы подходящим инструментом для таких исследований, но доступность такого моделирования при высоких числах Рейнольдса ставится под вопрос.

Следует заметить, что турбулентность (а, следовательно, и TCI) сильно зависит от конфигурации и условий течения. В [79] показано влияние уровня турбулентности на срезе сопла (рис.20,б): более высокая интенсивность турбулентных пульсаций и турбулентная вязкость приводит к усилению смешения, повышению тепловыделения и росту давления на

стенках камеры. Это влияние оказывается значительно сильнее, чем учет TCI, малый эффект которого сохраняется при изменении параметров турбулентности потока. Это демонстрирует важность экспериментальных замеров параметров турбулентности для корректного численного моделирования.

В настоящей диссертации исследовано влияние моделей TCI на результаты моделирования высокоскоростных течений с горением в областях преимущественно сверхзвукового течения. Для описания течений использованы более экономичные уравнения RANS, т.к. подход LES намного затратнее и при этом не гарантирует качества результатов. Помимо экспериментов M.C. Burrows & A.P. Kurkov и J.S. Evans et al., рассмотрен более современный эксперимент T.Cheng et al. Для ответа на вопрос о роли эффектов TCI сопоставляются результаты применения моделей TCI, основанные на двух сильно отличающихся подходах – flamelet и PaSR. В последней главе диссертации представлены результаты моделирования эксперимента в высокоскоростной камере сгорания.

Содержание диссертации

В **Главе 1** рассматриваются физико–математические модели и численный метод, применяемые далее для описания трехмерных течений с турбулентным горением. Представлена полная система уравнений Рейнольдса для нестационарных трехмерных течений многокомпонентного вязкого газа с неравновесными химическими реакциями. На уровне ключевых слов описан численный метод решения этой системы. Представлена полная система уравнений Рейнольдса для нестационарных трехмерных течений многокомпонентного вязкого газа (смеси идеальных газов) с неравновесными химическими реакциями. На уровне ключевых слов описан численный метод решения этой системы. Дано описание используемых в работе моделей турбулентности ($q-\omega$ и SST). Рассмотрена постановка граничных условий. Выписаны формулы для описания вклада от химических реакций, а также используемые аппроксимации термодинамических функций. Затем представлено общее описание проблемы учета взаимодействия турбулентности с горением (TCI) и дан краткий обзор основных подходов к ее решению. Далее подробно изложена модель микроламинарных пламен (flamelets). Выводятся уравнения, описывающие распределение параметров в микроламинарном пламени. Для получения средних параметров течения используется функция плотности вероятности (ФПВ) бета–распределения, для определения параметров которой решаются два дополнительных уравнения в частных производных. Анализируется область определения ФПВ. Для устранения проблем, возникающих при приближении к границам турбулентной области, учитываются

эффекты перемежаемости. Описывается классический вариант модели ФПВ–flamelet, в котором средние температура и концентрации находятся при помощи ФПВ, а не из решения уравнений в частных производных. После этого рассмотрен подробно другой класс моделей учета TCI – модели реактора частичного перемешивания (PaSR). Представлено несколько моделей этого класса, одна из которых (GPaSR) рассматривается впервые. Предложена локальная модельная задача о системе из двух взаимодействующих реакторов, которая позволяет дать физически обоснованный вывод уравнений моделей PaSR, выбрать устойчивый численный алгоритм для их программной реализации, исследовать зависимость модели от ее параметров. Далее предложен комбинированный метод для описания смешанных режимов турбулентного горения, в которых механизм горения меняется при переходе от одной области пространства к другой. Такие режимы часто встречаются в реальных камерах сгорания. В конце Главы I дан физический анализ побочного эффекта, обнаруженного автором при реализации описанных моделей TCI – т.н. “динамического равновесия”, когда в стационарном состоянии системы идут с конечными скоростями кольцевые цепочки реакций.

Глава 2 посвящена тестовым расчетам и моделированию турбулентных сверхзвуковых струй с горением. Вначале кратко описаны программы **ZEUS-S3pp** и **zFlare**, которые используются в расчетах. Перечислены тестовые расчеты без применения моделей TCI, которые были использованы автором для проверки этих программ. В качестве примера подробно рассмотрено моделирование эксперимента A.D. Cutler. Этот эксперимент геометрически подобен тестам с горением, которые рассматриваются далее, и позволяет исследовать качество описания турбулентного переноса в таких течениях.

Далее рассмотрено моделирование классических экспериментов по сверхзвуковому турбулентному горению – экспериментам с соосными струями водорода и воздуха (J.S. Evans et al., 1978; T.Cheng et al., 1994) и эксперименту с пристенной струей водорода (M.C. Burrows & A.P. Kurkov, 1971). Дано подробное описание этих экспериментов и использованных в них средств измерений. Сначала рассмотрены старые эксперименты – J.S.Evans et al. и M.C. Burrows & A.P. Kurkov. Выполнено моделирование этих экспериментов без учета TCI. Исследовано влияние граничных условий и геометрии эксперимента. Затем рассматривается применение к этим экспериментам классического подхода ФПВ–flamelet, а далее – комбинированного метода. На основе представленного опыта дан критический анализ подхода flamelet. Представлены также результаты применения модели PaSR к тем же двум экспериментам. Далее рассматривается более современный эксперимент T.Cheng et al. Опять сначала описаны результаты расчетов без учета TCI, а затем – с учетом TCI. Поскольку результат применения моделей класса flamelet был в значительной степени отрицательным, для описания третьего эксперимента привлекаются только модели PaSR. В заключение на основании расчетов

предлагается физическое объяснение механизма стабилизации горения в эксперименте T.Cheng et al., которое объясняет полученные результаты.

Во всех экспериментах со сверхзвуковым горением, рассмотренных в Главе 2, не было обнаружено существенного вклада от моделей учета TCI. Чтобы убедиться, что этот результат не связан с некорректной реализацией моделей TCI, необходимо было провести валидацию программы на тестовых задачах, в которых TCI проявляется существенным образом. Поэтому в **Главе 3** с использованием различных моделей класса PaSR рассматривается эксперимент с горением метана в дозвуковом потоке – камера сгорания с обратной ступенькой, экспериментальные исследования которой проводились в ONERA (P.Magre, et al., 1988). Дано описание экспериментальных измерений и организации расчетов. Сначала с холодным экспериментом сравниваются результаты расчетов без горения. Далее представлены результаты моделирования горячих экспериментов без учета TCI. Затем к описанию экспериментов применяются локальные модели класса PaSR (базовая модель и UPaSR). Наконец, то же течение моделируется с помощью нелокальных моделей класса PaSR (EPaSR и GPaSR). Дается физический анализ полученных результатов, и на его основе объясняется смешанный механизм стабилизации горения, который реализуется в этом эксперименте. Главный результат этой Главы – доказательство работоспособности моделей PaSR, которая в Главах 2 и 4 применяется к преимущественно сверхзвуковым течениям.

В **Главе 4** разработанные методы и программы применяются к моделированию экспериментальных исследований реальной высокоскоростной камеры сгорания, которые были выполнены на высокоэнтальпийном стенде Т-131 ЦАГИ в рамках международного проекта HEXAFLY-INT. Представлены результаты расчетов без учета TCI и на основе комбинированного метода. Дан анализ физической картины течения. Делается вывод о роли эффектов TCI в высокоскоростных течениях с преимущественно сверхзвуковым горением.

В **Приложении А** приводится вывод уравнения энергии для модели flamelet, дополнительного дифференциального уравнения для определения формы ФПВ, а также алгоритм построения нестационарной библиотеки микроламинарных пламен.

В **Приложении Б** выполнен математический анализ проблемы “динамического равновесия”. Представлен пример реализации “динамического равновесия”. Для кинетического механизма Моретти дано строгое математическое доказательство теоремы о том, что при выполнении условий, выведенных в §1.14, стационарное состояние единственно и соответствует истинному термодинамическому равновесию.

ГЛАВА 1. МОДЕЛИ И МЕТОДЫ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ТРЕХМЕРНЫХ ТЕЧЕНИЙ С ТУРБУЛЕНТНЫМ ГОРЕНИЕМ

§1.1. Моделирование трехмерных течений с горением без учета TCI

Система уравнений Рейнольдса для течений реагирующего газа

Для описания течений в высокоскоростных камерах сгорания в диссертации используется трехмерная нестационарная система уравнений Рейнольдса для многокомпонентного неравновесно реагирующего газа, замкнутая моделью химической кинетики и дифференциальной моделью турбулентности.

“Системой уравнений Рейнольдса” (RANS – Reynolds Averaged Navier–Stokes equations [27, 124]) далее будет называться система уравнений Навье–Стокса для сжимаемого газа [27, 43], осредненная по времени с целью отфильтровать хаотические турбулентные пульсации параметров. Стандартный способ осреднения, который был использован самим О.Рейнольдсом [170], обычно используется, когда влиянием эффектов сжимаемости на турбулентность можно пренебречь. Этот способ осреднения представляет собой интегральное среднее по времени за промежуток времени T , который должен быть гораздо больше характерного времени турбулентных пульсаций, но гораздо меньше характерного времени упорядоченных нестационарных процессов в данном течении газа:

$$\bar{a}(\vec{x}, t) = \frac{1}{T} \int_{t-T/2}^{t+T/2} a(\vec{x}, \tau) d\tau. \quad (1.1)$$

Осреднение по Рейнольдсу (1.1) применяется к системе уравнений Навье–Стокса, в которой все параметры газа представляются в виде $a(\vec{x}, t) = \bar{a}(\vec{x}, t) + a'(\vec{x}, t)$, где a' – пульсация по Рейнольдсу.

Для высокоскоростных течений газа, которые рассматриваются в настоящей диссертации, необходимо учитывать пульсации плотности и другие эффекты сжимаемости в турбулентном потоке [107]. В таких задачах осреднение по Рейнольдсу (1.1) приводит к слишком громоздкой системе уравнений, создающей большие трудности при замыкании. Более эффективным является подход, предложенный Фавром [102]. В этом случае ко всей системе Навье–Стокса по-прежнему применяется осреднение (1.1), но параметры представляются в виде $a(\vec{x}, t) = \tilde{a}(\vec{x}, t) + a''(\vec{x}, t)$, где $\tilde{a} \equiv \overline{\rho a} / \bar{\rho}$. Данный прием применяется ко всем параметрам газа, кроме p и ρ . Это позволяет получить систему уравнений такой же структуры, как и в случае $\rho' = 0$. Благодаря этому способы замыкания, разработанные для несжимаемых течений,

сравнительно легко обобщаются на случай сжимаемого течения. Далее используется осреднение по Фавру. Знак осреднения над параметрами газа будет опускаться, за исключением тех случаев, когда осредняемая величина зависит от пульсационных величин a'' .

Решается полная система уравнений Рейнольдса для нестационарных трехмерных течений многокомпонентного вязкого газа (смеси идеальных газов) с неравновесными химическими реакциями:

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{F}_i}{\partial x_i} = \vec{W}. \quad (1.2)$$

где \vec{U} – вектор консервативных переменных, \vec{F}_i – поток вектора \vec{u} в направлении оси x_i , а \vec{W} – источниковый член, описывающий локальное производство или расходование вектора \vec{U} . Используется декартова прямоугольная система координат с осями $x_1 = x$, $x_2 = y$ и $x_3 = z$. Неизвестными величинами в системе уравнений (1) являются компоненты вектора примитивных переменных $\vec{\sigma} = [T; u; v; w; p; Y_k; p_m^t]^T$, где T – температура, u_i – компоненты скорости газа \vec{V} ($u_1 = u$, $u_2 = v$, $u_3 = w$), p – давление, Y_k – массовая концентрация k -й компоненты газовой смеси ($k = 1, \dots, N_{sp}$), p_m^t – параметры турбулентности ($m = 1, \dots, N_{turb}$). Предполагается суммирование по повторяющимся индексам. Все параметры предполагаются осредненными по времени. Векторы \vec{U} , \vec{F}_i и \vec{W} выражаются следующими формулами:

$$\vec{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u_j \\ \rho E \\ \rho Y_k \\ \rho p_m^t \end{bmatrix}, \quad \vec{F}_i = \begin{bmatrix} \rho u_i \\ \rho u_j u_i + p \delta_{ij} + (\tau_{ji} + \rho R_{ji}) \\ \rho E u_i + p u_i + (\tau_{ni} + \rho R_{ni}) u_n + (q_i + q_i^t) + T_i(k) \\ \rho Y_k u_i + J_i(Y_k) \\ \rho p_m^t + T_i(p_m^t) \end{bmatrix}, \quad \vec{W} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ S_k^{хим} \\ S_m^{турб} \end{bmatrix}, \quad (1.3)$$

где ρ – плотность, E – полная энергия единицы массы газа, τ_{ji} – компоненты тензора вязких напряжений, R_{ji} – компоненты тензора напряжений Рейнольдса, q_i – молекулярный поток тепловой энергии в направлении оси x_i , ρq_i – турбулентный поток тепловой энергии в направлении оси x_i , $T_i(k)$ – полный диффузионный поток (сумма молекулярного и турбулентного потоков) кинетической энергии турбулентности k в направлении оси x_i , $J_i(Y_k)$ – полный поток массы k -й компоненты газовой смеси в направлении оси x_i , $T_i(p_m^t)$ – полный диффузионный поток m -го параметра турбулентности вдоль оси x_i , $\vec{S}^{хим} = [S_1^{хим}; S_2^{хим}; \dots; S_{N_{comp}}^{хим}]$ ($N_{comp} = N_{sp} - 1$) и $\vec{S}^{турб} = [S_1^{турб}; S_2^{турб}; \dots; S_{N_{turb}}^{турб}]$ – источниковые члены в уравнениях для компонент смеси и в уравнениях для параметров турбулентности, соответственно.

Набор параметров p_m^t определяется выбором полуэмпирической модели турбулентности. В настоящей работе используются модель турбулентности $(q - \omega)$ Коукли [77, 78] в модификации [30] и с поправками на сжимаемость, основанными на работе [86], а также модель турбулентности SST Ментера [143, 187].

Замыкающие соотношения:

$$1) \quad p = \rho \frac{R_0}{m} T - \text{уравнение состояния } (R_0 = 8.3144126 \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}} - \text{значение универсальной}$$

газовой постоянной);

$$2) \quad Y_{N_{sp}} = 1 - \sum_{k=1}^{N_{comp}} Y_k ;$$

$$3) \quad m = \left[\sum_{l=1}^{N_{sp}} \frac{Y_l}{m_l} \right]^{-1} - \text{молекулярный вес смеси } (m_i - \text{молекулярная масса } i\text{-й компоненты});$$

$$4) \quad E = \frac{u_i u_i}{2} + k + h - \frac{p}{\rho} - \text{выражение для полной энергии } (k = \frac{1}{2} \widetilde{u_i'' u_i''} - \text{кинетическая энергия}$$

турбулентности, $h = \sum_{i=1}^{N_{sp}} Y_i h_i(T)$ – энтальпия смеси, $h_i(T)$ – энтальпия i -й компоненты смеси);

$$5) \quad \tau_{ki} = -\mu \left[\frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_k} - \frac{2}{3} d \delta_{ik} \right] - \text{компоненты тензора вязких напряжений (молекулярные}$$

потоки импульса), $d = \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \frac{\partial u_3}{\partial x_3}$ – дивергенция скорости;

$$6) \quad \rho R_{ki} = \rho \widetilde{u_k'' u_i''} \approx \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} - \mu_T \left[\frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_k} - \frac{2}{3} d \delta_{ik} \right] - \text{компоненты тензора напряжений}$$

Рейнольдса (турбулентные потоки импульса);

$$7) \quad J_i(Y_m) = -D \frac{\partial Y_m}{\partial x_i} - \text{диффузионные потоки массы } m\text{-й компоненты газовой смеси в}$$

направлении оси x_i за счет молекулярной диффузии. $D = \mu / Sc$ – коэффициент массовой диффузии, Sc – число Шмидта. В общем случае числа Шмидта зависят и от того, какое вещество распространяется за счет диффузии, и по какому веществу оно распространяется [26]. В настоящей работе по умолчанию предполагается, что для всех компонент смеси число Шмидта $Sc=0.9$. Для молекулярной вязкости используется формула Сазерленда [122];

$$8) \quad J_{mi}^{турб} = \rho \widetilde{Y_m'' u_i''} \approx -D_T \frac{\partial Y_m}{\partial x_i} - \text{турбулентные потоки массы } m\text{-й компоненты газовой смеси в}$$

направлении оси x_i ($D_T = \mu_T / Sc_T$ – турбулентный коэффициент массовой диффузии, Sc_T – турбулентное число Шмидта, по умолчанию полагается $Sc_T = 1$);

$$9) \quad q_i = -K \frac{\partial T}{\partial x_i} - \sum_{m=1}^{N_{sp}} h_m(T) J_{mi} - \text{молекулярные потоки тепловой энергии газовой смеси вдоль}$$

ос x_i . Первый член в этой сумме – поток тепла за счет теплопроводности, обусловленный наличием градиента температуры (закон Фурье). $K = \mu c_p(T)/Pr$ – коэффициент теплопроводности, $c_p = \sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_k \frac{dh_k}{dT}$ – теплоемкость смеси при $p = const$, число Прандтля полагается $Pr=0.72$. Второй член выражает дополнительный поток тепла, связанный с неоднородностью состава и диффузией массы различных компонент смеси.

$$10) \quad q_i^{турб} = \rho \widetilde{h'' u_i''} \approx -K_T \frac{\partial T}{\partial x_i} - \sum_{m=1}^{N_{sp}} h_m(T) J_{mi}^{турб} - \text{турбулентные потоки тепловой энергии газовой}$$

смеси вдоль оси x_i . $K_T = \frac{\mu_T c_p(T)}{Pr_T}$ – турбулентный коэффициент переноса тепла, турбулентное число Прандтля принимается равным $Pr_T = 0.9$.

$$11) \quad T_i(p_m^t) - \text{диффузионные потоки параметров турбулентности вдоль оси } x_i:$$

$$T_i(p_m^t) = - \left(\frac{\mu}{Pr(p_m^t)} + \frac{\mu_t}{Pr_t(p_m^t)} \right) \cdot \frac{\partial p_m^t}{\partial x_i}.$$

$$12) \quad T_i(k) = \kappa_i + \kappa_i^{турб} = \widetilde{\tau_{il}'' u_i''} + \rho \frac{1}{2} \widetilde{u_i'' u_i''} - \left(\mu + \frac{\mu_T}{Pr_T^k} \right) \cdot \left[\frac{\partial k}{\partial x_i} + \frac{\partial R_{il}}{\partial x_i} \right] \approx - \left(\mu + \frac{\mu_T}{Pr_T^k} \right) \cdot \left[\frac{\partial k}{\partial x_i} + \frac{R_{il}}{k} \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] -$$

молекулярные и турбулентные потоки кинетической энергии турбулентности k . Турбулентное число Прандтля для кинетической энергии турбулентности принимается равным $Pr_T^k=0.81$ [22];

Конвективные потоки являются функциями от значений примитивных переменных, а диффузионные потоки – функциями от значений молекулярного и турбулентного коэффициентов вязкости, а также от градиентов усеченного вектора примитивных переменных $\vec{\sigma}' = [T; u; v; w; Y_k; p_m^t]^T$. В целом потоки представляют собой функции следующего вида:

$$\vec{F}_i = \vec{F}_i \left(\vec{\sigma}, \mu, \mu_t, \frac{\partial \vec{\sigma}'}{\partial x_n} \right), \quad n = 1, 2, 3$$

13) Источниковые члены в уравнениях для компонент смеси (см. §1.5) зависят только от примитивных переменных в ячейке: $\vec{S}^{хим} = \vec{S}^{хим}(\vec{\sigma})$. $S(Y_k)$ описывает производство либо расходование массы k -го компонента газовой смеси из-за химических реакций.

14) Источниковые члены в уравнениях для параметров турбулентности $S(p_m^t)$ (см. §1.4) описывают производство параметров турбулентности (которое связано с передачей энергии среднего движения крупнейшим турбулентным вихрям) и их диссипацию на уровне мельчайших вихрей (переход кинетической энергии турбулентности в энергию теплового

движения молекул). $\vec{S}^{турб}$ зависят от примитивных переменных в ячейке и от компонент тензора градиентов скорости $\left\| \frac{\partial u_l}{\partial x_n} \right\|$: $\vec{S}^{турб} = \vec{S}^{турб} \left(\vec{\sigma}, \frac{\partial u_l}{\partial x_n} \right)$, $l, n = 1, 2, 3$.

§1.2. Структура численного метода

В основу численного метода для решения трехмерной системы уравнений (1.1)–(1.2), был положен явный численный метод [12], на базе которого написана программа *SOLVER3* для двумерных расчетов течений с горением. Метод [12] был обобщен на случай трехмерных течений и реализован в программе автора *ZEUS-S3pp* [42], а затем в программе *zFlare*, которая была разработана С.С.Молевым при участии автора. Эти программы разрабатывались на базе инфраструктуры программы С.В.Михайлова *ZEUS* [29, 31], которая входит в пакета прикладных программ *EWT-ЦАГИ* [7, 8]. Программа *ZEUS* предназначена для трехмерных расчетов течений однокомпонентного газа и основана на численном методе [10]. При разработке программ получился метод, родственный методам [12] и [10], но несколько отличающийся от обоих.

Метод основан на конечно–объемном подходе и номинально имеет 2-й порядок аппроксимации по всем пространственным переменным. Для аппроксимации конвективных потоков используется явная монотонная схема, основанная на схеме Годунова–Колгана–Родионова [17, 21, 33]. Для диффузионных потоков используется явная центрально–разностная аппроксимация, модифицированная на случай неравномерных сеток. Для источниковых членов $\vec{S}^{хим}$, $\vec{S}^{турб}$ применяется локально–невная аппроксимация (в которой неизвестные величины в данной ячейке не связаны с соседними ячейками). Для совершения одного шага по времени в каждой ячейке используется двухшаговая процедура “предиктор–корректор”. Расчеты ведутся на многоблочных структурированных сетках, состоящих из шестигранных ячеек.

В используемом численном методе для моделирования течений с химическими реакциями используется расщепление по физическим процессам. Нелинейная система уравнений для компонент смеси $\vec{Y}_{i,j,k}^{n+1}$ решается независимо от нелинейной системы уравнений для параметров турбулентности $(\vec{p}^t)_{i,j,k}^{n+1}$. При итерационном решении системы уравнений для $\vec{Y}_{i,j,k}^{n+1}$ используются значения температуры T^{n+1} , определяемые в предположении, что кинетическая энергия турбулентности $k^{n+1} = k^n$. Когда значения $\vec{Y}_{i,j,k}^{n+1}$ определены, решается система уравнений для $(\vec{p}^t)_{i,j,k}^{n+1}$. После нахождения $(\vec{p}^t)_{i,j,k}^{n+1}$ значение температуры T^{n+1} уточняется. Нелинейная система уравнений для $\vec{Y}_{i,j,k}^{n+1}$ решается точно – итерационным методом Ньютона

(детали см. в [12]). Нелинейная система уравнений для $(\vec{p}^t)_{i,j,k}^{n+1}$ решается приближенно – с помощью одной итерации метода Ньютона (обоснование см. в [10]).

Формулы для ограничений на шаг по времени можно найти в работах [10], [12].

Расчет может производиться с глобальным, локальным или дробным шагом по времени (см. [10]). При глобальном шаге по времени во всех ячейках используется одно и то же значение шага по времени. Для ускорения получения стационарного решения может быть использован локальный шаг по времени, при котором в каждой ячейке используется собственное значение шага по времени, определяемое локальным условием устойчивости. Локальный шаг по времени неприменим для описания нестационарных процессов. Для ускорения описания нестационарных процессов используется технология дробного шага по времени, при которой в разных ячейках расчет ведется с разным шагом по времени, но периодически все ячейки достигают одного и того же момента физического времени. Такие моменты считаются завершением глобального шага по времени. В промежутках между этими моментами производится синхронизация процессов в ячейках при помощи линейной интерполяции по времени. Полное описание алгоритма реализации дробного шага по времени можно найти в [12].

§1.3. Моделирование турбулентности

В основе используемых в настоящей работе методов моделирования турбулентности лежит гипотеза Буссинеска: хаотическое движение объемов газа в турбулентном течении подобно хаотическому движению молекул. Поэтому оба процесса должны описываться функционально подобными уравнениями. Именно поэтому в системе уравнений, выписанной в предыдущем разделе, турбулентные диффузионные потоки аппроксимированы такими же формулами, как и молекулярные диффузионные потоки, только коэффициент молекулярной вязкости μ заменен на коэффициент турбулентной вязкости μ_t . Для окончательного замыкания системы уравнений движения газа необходимо выразить μ_t через основные переменные задачи.

Модель $q-\omega$ Коукли [21, 22] включает два дополнительных дифференциальных уравнения для характерной величины пульсаций скорости $p_1^t = q \equiv \sqrt{k}$ и для характерной частоты турбулентных пульсаций $p_2^t = \omega_{q-\omega} \equiv \varepsilon/k$, где ε – средняя скорость диссипации параметра k . Турбулентная вязкость вычисляется по формуле $\mu_t = C_\mu F_{wall} F_{Dash} \rho \frac{q^2}{\omega}$, где

$C_\mu = 0.09$, $F_{wall} = 1 - \exp\left[-0.02 \cdot \frac{\rho q y_{wall}}{\mu}\right]$ – пристенная функция, учитывающая влияние молекулярной вязкости на турбулентные пульсации, а $F_{Dash} = 0.25 + \frac{0.75}{1 + \exp[24.73 \cdot (M_t - 0.2)]}$ – поправка на сжимаемость, основанная на работе [27]. В функции F_{wall} и F_{Dash} входят параметры y_{wall} – расстояние от данной точки до ближайшей твердой поверхности и $M_t = \sqrt{2}q/c$ – турбулентное число Маха. Источниковые члены в уравнениях модели $q-\omega$ имеют следующий вид:

$$S(q) = \frac{1}{2q} \cdot (\mu_t |\vec{G}|^2 - \rho \varepsilon), \quad S(\omega) = \frac{\omega}{q^2} \cdot \left\{ \left(\frac{C_{\omega 11}}{F_{wall}} + C_{\omega 12} \right) \mu_t |\vec{G}|^2 - C_{\omega 2} \rho \varepsilon \right\}.$$

В отличие от оригинальной версии модели турбулентности $q-\omega$, здесь использована коррекция к производству турбулентности, описанная в [9]. Эта коррекция существенно снижает нефизичное перепроизводство турбулентности в нетонкослойных течениях (в частности, на скачках уплотнения и на передней кромке крыла). Для этой цели в выражении для производства турбулентности используется “тонкослойная” часть градиента модуля скорости, полученная проецированием градиента модуля скорости $\vec{g} = \nabla |\vec{V}|$ на плоскость, перпендикулярную вектору скорости $\vec{e} = \vec{V} / |\vec{V}|$: $\vec{G} = \vec{g} - \vec{e} \cdot (\vec{e}, \vec{g})$.

Существуют две версии модели турбулентности $q-\omega$. Версия из [22] лучше описывает свободную турбулентность, а из [21] – турбулентные пограничные слои. Эти версии отличаются наборами коэффициентов. В настоящей работе используется переходная функция, которая описана в [30] и является упрощенным вариантом функции из модели SST [187]:

$$F = \text{th} \left\{ \left(\frac{q}{\omega y_{wall}} \right)^4 \right\}. \text{ Она близка к единице на твердой поверхности и обращается в нуль в}$$

свободной турбулентности. Окончательные значения коэффициентов модели $C_{\omega 11}$, $C_{\omega 12}$, $C_{\omega 2}$, $\text{Pr}_t(q)$, $\text{Pr}_t(\omega)$ вычисляются по формуле $C = (1 - F)C_1 + FC_2$, где C_1 – любой коэффициент из версии модели $q-\omega$, описанной в работе [22], а C_2 – аналогичный коэффициент из [21]. Значения коэффициентов приведены в Таблице 1.1.

Таблица 1.1 Значения коэффициентов модели $q-\omega$

	$C_{\omega 11}$	$C_{\omega 12}$	$C_{\omega 2}$	$\text{Pr}_t(q)$	$\text{Pr}_t(\omega_{q-\omega})$
C_1	0.045	0.395	0.92	1	1.13
C_2	0.055	0.5	0.833	2	2

Модель SST Ментера [96] является комбинацией моделей $k-\omega$ [196] в пристенной области и $k-\varepsilon$ [135] в остальной части расчетной области. Она включает два дополнительных дифференциальных уравнения для кинетической энергии турбулентности $p_1^t = k$ и для характерной частоты турбулентных пульсаций $p_2^t = \omega_{SST} \equiv \varepsilon / (0.09k)$. (Таким образом,

$\omega_{q-\omega} = 0.09\omega_{SST}$.) Турбулентная вязкость вычисляется по формуле $\mu_t = \rho \frac{k}{\omega} F_{wall}$, где

$F_{wall} = \min\left(1, \frac{0.31\omega}{\Omega F_2}\right)$ – пристенная функция, которая позволяет учесть эффекты переноса

сдвиговых напряжений (shear stress transport, SST) – см. [197]. В выражении для F_{wall} введены

параметры $\Omega = \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right) \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right)}$ и $F_2 = \text{th}(\arg_2^2)$, $\arg_2 = \max \left\{ \frac{2\sqrt{k}}{0.09\omega y_{wall}}; \frac{500\mu}{\rho \omega y_{wall}^2} \right\}$.

Источниковые члены в уравнениях модели SST можно представить в виде:

$$S(k) = \rho \cdot (\min(P; 10\varepsilon) - \varepsilon), \quad S(\omega) = \rho \cdot \left\{ \frac{\gamma}{\mu_t} P - \frac{\beta\omega}{k} \varepsilon + (1 - F_1) \cdot CD \right\}.$$

Здесь $P = \mu_t \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right)^2 - \frac{2}{3} \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \left(\frac{\omega}{F_{wall}} + \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right) \right\}$ – производство кинетической

энергии турбулентности, $CD = \frac{2}{1.168\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}$ – т.н. перекрестная диффузия [197],

$$F_1 = \text{th}(\arg_1^4), \quad \arg_1 = \min \left\{ \max \left\{ \frac{\sqrt{k}}{0.09\omega y_{wall}}; \frac{500\mu}{\rho \omega y_{wall}^2} \right\}; \frac{4\rho k}{\min(10^{-10}; \rho \cdot CD) \cdot 1.168 \cdot y_{wall}^2} \right\}.$$

Функция F_1 используется для плавного перехода от модели $k-\omega$ к модели $k-\varepsilon$. Коэффициенты модели SST β , $\text{Pr}_t(k)$, $\text{Pr}_t(\omega)$ вычисляются по формуле $C = (1 - F_1)C_{k-\varepsilon} + F_1C_{k-\omega}$, где C – любой из этих коэффициентов, $C_{k-\varepsilon}$ – значения этих коэффициентов в модели $k-\varepsilon$, $C_{k-\omega}$ – их значения в модели $k-\omega$. Список значений коэффициентов дан в Таблице 1.2. Коэффициент γ вычисляется по формуле

$$\gamma = \frac{\beta}{0.09} - \frac{1}{\text{Pr}_t(\omega)} \cdot \frac{0.41^2}{\sqrt{0.09}}.$$

Таблица 1.2 – Значения коэффициентов модели SST

	β	$\text{Pr}_t(k)$	$\text{Pr}_t(\omega_{SST})$
C_1	0.075	1	1.168
C_2	0.0828	2	2

§1.4. Постановка граничных условий

В работе используются в основном два типа граничных условий: границы свободного протекания потока и твердые стенки.

В [10] показано, что если внешняя граница расчетной области удалена от интересующей нас области течения на достаточное расстояние, большее $L_{diff} \sim \frac{10D}{||V_n| - c|}$, то информация, переносимая от границы диффузией, не влияет на эту область течения. На такой границе краевые условия для системы уравнений Навье–Стокса можно ставить так же, как и для системы уравнений Эйлера. Этот и другие вопросы постановки ГУ раскрыты в деталях в статье [10]. Поскольку источниковые члены описывают локальные эффекты, они не влияют на распространение возмущений по пространству и, следовательно, не влияют на постановку граничных условий. Благодаря использованию гипотезы Буссинеска, система уравнений Рейнольдса относится к тому же математическому типу, что и система уравнений Навье–Стокса, поэтому принципы постановки граничных условий для этих систем одинаковы.

Для постановки корректной краевой задачи выполняется анализ характеристик вблизи границы расчетной области. Если информация о параметре газа поступает от границы внутрь расчетной области, параметр нужно задавать, т.к. эта информация влияет на течение внутри. В случае невязкого течения, описываемого системой уравнений Эйлера, информация передается вдоль характеристик (перенос инвариантов Римана); соответственно, на границе нужно задавать столько параметров, сколько инвариантов Римана передаются от границы внутрь расчетной области. Будем полагать, что течение в окрестности границы можно локально описать как одномерное ($\partial/\partial x_{2,3} = 0$). В качестве направления оси x_1 выберем направление внешней нормали к границе. Обозначим $x_1 = n$, $u_1 = V_n$.

Ниже перечислены самые распространенные варианты границ:

1. *Граница сверхзвукового вытекания потока* ($V_n > c$). Информация о всех инвариантах передается из расчетной области. На границе не нужно задавать ни одного параметра.
2. *Граница дозвукового вытекания потока* ($0 < V_n < c$). Внутри по характеристике $\frac{dn}{dt} = V_n - c$ передается информация об одном инварианте – z_2 . На границе нужно задать один параметр газа.
3. *Граница дозвукового втекания потока* ($-c < V_n < 0$). Внутри по характеристикам $\frac{dn}{dt} = V_n$ и $\frac{dn}{dt} = V_n - c$ передается информация о всех инвариантах, кроме z_1 . На границе нужно задать значения $(3 + N_{comp} + N_{turb})$ параметров газа.

4. *Граница сверхзвукового втекания потока* ($V_n < -c$). Информация о всех инвариантах передается внутрь расчетной области. На границе нужно задавать значения всех $(4 + N_{comp} + N_{turb})$ параметров газа.
5. *Твердая поверхность* ($V_n = 0$). Внутри по характеристике $\frac{dn}{dt} = V_n - c$ передается информация лишь об инварианте z_2 . На границе нужно задать один параметр. Для твердой границы это условие непротекания $V_n = 0$.

Исключение составляют твердые границы (поверхности обтекаемых тел), которые находятся внутри интересующей области течения. Именно они формируют структуру течения. На таких стенках должны быть заданы условия на $(3 + N_{comp} + N_{turb})$ параметров газа.

При вязком обтекании тела из-за прилипания потока на его поверхности нарастает пограничный слой, который в рассматриваемых в диссертации течений является турбулентным. Для турбулентных пограничных слоев характерна наполненная форма профиля скорости, при которой на стенке можно пренебречь всеми градиентами параметров, кроме производных по нормали к поверхности. При ГУ прилипания решение ищется во всем пограничном слое вплоть до стенок. Поверхности обтекаемых тел рассматриваются как непроницаемые стенки, поэтому на них ставится условие прилипания $u = v = w = 0$ и условие равенства нулю диффузионных потоков массы через стенку $J_w(Y_k) = 0$. Также ставятся граничные условия на все параметры турбулентности (эти условия являются элементами каждой модели турбулентности). Рассматриваются два типа стенок, которые отличаются характером теплообмена на стенке: 1) *теплоизолированная стенка* ($q_w = 0$); 2) *стенка с заданной температурой* T_w

Кроме расчетов с условием прилипания на поверхности модели, значительная часть описанных ниже расчетов была выполнена с граничным условием “закон стенки”. Это оригинальный вариант граничного условия из класса пристеночных функций, опубликованный для модели $q - \omega$ в работе [12]. Если при использовании условия прилипания первые пристенные ячейки сетки должны попадать в вязкий подслой турбулентного пограничного слоя ($y^+ \sim 1$), то граничные условия класса пристеночных функций позволяют располагать их гораздо дальше от стенки (допускается $y^+ \sim 100$). Для определения потоков различных параметров на стенке обычно предполагают, что касательная скорость в первой пристенной ячейке удовлетворяет универсальному профилю скорости, характерному для турбулентного ПС на пластине.

В некоторых случаях возможно применение ГУ непротекания, которое по сути совпадает с условием симметричного отражения потока, кроме некоторых деталей, связанных с

параметрами турбулентности. К таким случаям относятся течения, плохо описываемые моделями турбулентности, когда корректное использование ГУ прилипания требует слишком сильного сгущения сетки, когда ПС локально допускается пренебречь. Например, такое ГУ ставится в течении с уступом на поверхности угла в рециркуляционной области.

§1.5. Моделирование химической кинетики и термодинамики

При условиях, когда характерное время протекания химических реакций не является бесконечно малым относительно других характерных времен задачи (особенно времени смешения), необходимо учитывать конечную скорость протекания реакции. Для этого необходимо решать дифференциальные уравнения в частных производных для каждого реагирующего компонента газовой смеси – уравнения для массовых долей Y_k . Для замыкания этой системы уравнений требуются модель химической кинетики (кинетическая схема), которая включает набор химических реакций и аппроксимации скоростей этих реакций, и модель термодинамики, включающая аппроксимации термодинамических функций всех компонентов.

Если представить j -ю химическую реакцию в виде: $\sum_k v_{kj}^f X_k \rightleftharpoons \sum_k v_{kj}^b X_k$, то скорости прямой и обратной реакции выражаются соотношением:

$$W_j^{f,b} = K_j^{f,b}(T) \cdot \rho^{\sum_k v_{kj}^{f,b}} \cdot \prod_k \left(\frac{\bar{Y}_k}{m_k} \right)^{v_{kj}^{f,b}}. \quad (1.4)$$

где X_k – k -й компонент реагирующей смеси, v_{kj}^f и v_{kj}^b – коэффициенты при этом веществе в уравнениях прямой и обратной реакций, $n_j = \sum_{k=1}^{N_{sp}} v_{kj}^{f,b}$ – порядок реакции ($n_j=2$ – бимолекулярная реакция, $n_j=3$ – тримолекулярная). “Константа” скорости реакции $K_j^{f,b}(T)$ представляет собой следующую функцию температуры: $K_j^{f,b}(T) = A_j^{f,b} \cdot T^{\alpha_j} \cdot \exp\left(-\frac{E_j^{f,b}}{RT}\right)$, где $A_j^{f,b}, \alpha_j$ – постоянные величины, задаваемые моделью кинетики, $E_j^{f,b}$ – энергия активации реакции. Вообще, в модели кинетики могут приводиться только аппроксимации констант скоростей прямых реакций. В этом случае константы скоростей обратных реакций можно выразить через константы равновесия по формуле $K^b(T) = K^f(T) / K^{eq}(T)$, а константы равновесия можно определить по термодинамическим свойствам реагентов [41, 48].

Источниковые члены в уравнениях для k -й компоненты смеси Y_k являются линейными комбинациями скоростей всех протекающих реакций с коэффициентами $\Delta v_{kl} = v_{kl}^f - v_{kl}^b$:

$$S_k^{хим} = S(Y_k) = -m_k \sum_{l=1}^{N_{react}} \Delta \nu_{kl} \cdot (W_l^f - W_l^b). \quad (1.5)$$

куда входит ν_{kl}^f, ν_{kl}^b – массовые коэффициент при k -м веществе в уравнениях для прямой и обратной j -й реакции, W_j^f и W_j^b – скорость прямой и обратной j -й реакции (число актов реакции в единице объема в единице времени, деленное на число Авогадро). N_{react} – число химических реакций в рассматриваемой модели химической кинетики.

В настоящей работе рассматриваются горение водорода в воздухе (Главы 1–2, 4) и горение углеводородных топлив в воздухе (Глава 3–4).

Для аппроксимации термодинамических функций в настоящей работе энтальпии $h_k(T)$ и энтропии $s_k(T)$ компонентов смеси, взятые из базы данных CHEMKIN [127], аппроксимированы полиномами 2-го порядка:

$$\begin{aligned} h_k(T) &= A_k + B_k \tilde{T} + C_k \tilde{T}^2, \\ s_k(T) &= D_k + E_k \tilde{T} + F_k \tilde{T}^2, \end{aligned}$$

где $\tilde{T} = T [K] / 1000 K$. Константы полиномов обеспечивают хорошее согласование с данными CHEMKIN в диапазоне $T \in [200 K; 3000 K]$. Теплоемкости компонентов смеси вычисляются по формуле $c_{p_k}(T) = dh_k / dT$, т.е. оказываются линейными функциями от температуры. При этом точность аппроксимации теплоемкостей уступает точности аппроксимации энтальпий, но это допустимо с точки зрения точности всего расчета.

§1.6. Проблема учета взаимодействия турбулентности с горением и различные подходы к ее решению

Уравнения переноса для компонент реагирующей смеси (строки 6...(5 + N_{comp}) в системе уравнений Рейнольдса (1.1)–(1.2) могут быть записаны в следующем виде:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}_k) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_k + \bar{\rho} \widetilde{u_i'' Y_k''} - \frac{\bar{\mu}}{Sc} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \right) = -m_k \sum_{j=1}^{N_{реакций}} \Delta \nu_{kj} (\overline{W_j^f} - \overline{W_j^b}). \quad (1.6)$$

Данное уравнение содержит два члена, которые зависят от турбулентных пульсаций параметров газа и которые необходимо выразить через основные неизвестные задачи (т.е. через $\bar{\sigma} = [T; u; v; w; p; Y_k; p'_m]^T$):

- 1) турбулентные потоки массы k -й компоненты реагирующей смеси $\bar{\rho} \widetilde{u_i'' Y_k''}$;
- 2) осредненные по времени скорости химических реакций $(\overline{W_j^f} - \overline{W_j^b})$.

Поиск подходящих замыкающих соотношений для этих двух членов и составляет проблему учета взаимодействия с горением (*Turbulence–Combustion Interaction, TCI*).

Член $\bar{\rho} \widetilde{u_i'' Y_k''}$ связан с турбулентным переносом по пространству, и для его моделирования можно пользоваться всем арсеналом, накопленным при построении обычных моделей турбулентности. Например, если оставаться в рамках гипотезы Буссинеска, то для этих потоков можно предложить градиентную модель:

$$\bar{\rho} \widetilde{u_i'' Y_k''} = -\frac{\mu_T}{Sc_T} \frac{\partial Y_k}{\partial x_i}.$$

Правда, если для течений без горения можно принять $Sc_T = 1$ без особого ущерба для качества решения, то для течений в камерах сгорания, с большими градиентами концентраций и температуры, турбулентное число Шмидта может меняться в широких пределах – примерно от 0.5 до 2 [66]. Опыт других авторов показывает, что для улучшения согласования результатов расчетов и эксперимента лучше подстраивать значения Sc_T к структуре течения. Разработаны модели для определения локальных значений Sc_T – см., напр. [66, 130, 148]. В настоящей работе проблема моделирования пространственного изменения Sc_T не рассматривается (хотя в некоторых случаях влияние этого параметра будет показано).

Основное внимание в диссертации уделяется проблеме вычисления осредненных по времени скоростей химических реакций. Скорость реакции выражается следующей зависимостью: $W = \rho^{\sum v_k^f} \cdot \prod \left(\frac{Y_k}{m_k} \right)^{v_k^f} \cdot A \cdot T^\beta \cdot \exp \left(-\frac{E_A}{R_0 T} \right)$. В уравнения (1.1)–(1.2) входит среднее по времени от этой функции, т.е.

$$\bar{W} = (\bar{\rho} + \rho')^{\sum v_k^f} \cdot \prod \left(\frac{\bar{Y}_k + Y'_k}{m_k} \right)^{v_k^f} \cdot A \cdot (\bar{T} + T')^\beta \cdot \exp \left(-\frac{E_A}{R_0 (\bar{T} + T')} \right).$$

Для замыкания уравнений движения необходимо выразить это среднее через основные переменные задачи – $\bar{T}, \bar{p}, \bar{Y}_m$. Самый простой способ заключается в том, чтобы заменить

$$\bar{W}(\bar{T}, \bar{Y}_m) \text{ на } W(\bar{T}, \bar{Y}_m): \quad \bar{W} \approx \rho^{\sum v_k^f} \cdot \prod \left(\frac{\bar{Y}_k}{m_k} \right)^{v_k^f} \cdot A \cdot \bar{T}^\beta \cdot \exp \left(-\frac{E_A}{R_0 \bar{T}} \right) \quad (\text{т.н. квазиламинарное}$$

приближение [58]). Фактически, этот способ означает, что мы пренебрегаем влиянием турбулентных пульсаций Y'_m, T' на средние скорости реакций. Однако хорошо известно, что для нелинейных функций оператор осреднения и оператор, применяющий функцию, в общем случае нельзя менять местами (среднее от функции не равно значению функции при средних значениях ее аргументов). А данная функция как раз является сильно нелинейной, и в окрестности фронта пламени она сильно меняется даже при небольших изменениях аргументов.

Кроме того, в окрестности фронта пламени величины пульсаций могут быть сопоставимы со средними параметрами. Поэтому неудивительно, что в таких случаях этот подход работает плохо и дает результаты, далекие от эксперимента.

Для уточнения результатов необходимо каким-то образом учесть влияние турбулентных пульсаций Y'_m, T' на средние скорости реакций. Это непростая задача, поскольку $\overline{W(T, Y_m)}$ не описывает потоки каких-либо величин по пространству, и нельзя воспользоваться разнообразными методами, разработанными в полуэмпирических моделях турбулентности. К тому же $W = W(T, Y_m)$ – сложная, сильно меняющаяся нелинейная функция, и трудно представить с физической точки зрения, как пульсации будут влиять на значения этой функции. Источниковые члены в уравнениях для компонент смеси представляют собой линейные комбинации от скоростей химических реакций – суммы членов вида $\overline{W(T, Y_m)}$ с какими-то коэффициентами. Поэтому ошибки, которые возникают при моделировании каждого такого члена, складываются с различными коэффициентами и почти непредсказуемым образом влияют на решение уравнений для компонент смеси.

Насколько можно судить по имеющейся литературе, существуют различные подходы к построению моделей TCI. Они подробно описаны и рассмотрены, например, в работах [36, 186] [173].

На первых порах настоящего исследования рассматривался самый простой подход – *метод моментов*. В этом случае делается предположение о малости турбулентных пульсаций, и выражение для скорости химической реакции раскладывается в ряд Тейлора относительно $W(\overline{T}, \overline{Y_m})$ вплоть до квадратичных членов, а затем уже осредняется по времени. В результате для средней скорости получается выражение вида:

$$\overline{W} \approx \bar{p} \sum_k^{v_k^f} \cdot \prod \left(\frac{Y_k}{m_k} \right)^{v_k^f} \cdot A(\overline{T}) \cdot T^\beta \cdot \exp \left(-\frac{E_A}{R_0 \overline{T}} \right) + \sum_{k_1, k_2} \alpha_{k_1, k_2} \overline{Y'_{k_1} Y'_{k_2}} + \sum_k \beta_k \overline{Y'_k T'} + \gamma \overline{T'^2}$$

В него уже помимо члена $W(\overline{T}, \overline{Y_m})$ входят *вторые моменты* – двойные корреляции пульсаций: $\overline{Y'_{k_1} Y'_{k_2}}$, $\overline{Y'_k T'}$, $\overline{T'^2}$, с некоторыми известными коэффициентами α_{k_1, k_2} , β_k , γ , зависящими от средних параметров течения. Как правило, в методе моментов записываются дополнительные дифференциальные уравнения для этих корреляций, которые решаются совместно с основной системой уравнений и с уравнениями модели турбулентности [49]. Был предложен более простой способ вычисления этих корреляций, основанный на оценке Прандтля для турбулентных пульсаций: $\overline{f'g'} = C_{PUL} \frac{\overline{R_{kj}}}{\omega^2} \frac{\partial \overline{f}}{\partial x_k} \frac{\partial \overline{g}}{\partial x_j}$, где C_{PUL} – эмпирическая постоянная, а в роли f и g могут выступать Y_k или T . Эта идея была реализована на практике.

Простая модель для учета влияния турбулентности на средние скорости химических реакций, была применена к задаче об одномерном сверхзвуковом горении, которая рассмотрена в разделе 2.6, и к моделированию эксперимента Эванса, Шекснайдера и Бича, рассмотренного в разделе 3.1. Однако результаты применения модели оказались неудовлетворительными. Это связано с высоким уровнем турбулентности, характерным для рассматриваемого класса задач. При этом нарушается одно из основных предположений, лежащих в основе оценки Прандтля. Кроме того, при сильной турбулентности не корректно разложение скорости реакции в ряд Тейлора, на котором базируется простая модель.

Широко распространен *статистический* подход к описанию турбулентного горения. Он полностью основан на определении *функций плотности вероятности* (ФПВ) в каждой точке этого потока. Это один из наиболее известных и используемых в настоящее время способов учета влияния турбулентности на средние скорости реакций. Предположим, что мы знаем функцию плотности вероятности реализации различных значений концентраций компонент смеси и температуры. Такая ФПВ $\text{pdf}(\psi^*)$, связанная с переменной ψ^* , означает вероятность нахождения переменной ψ в интервале $[\psi^* - \Delta\psi, \psi^* + \Delta\psi]$ в данной точке пространства и в рассматриваемый момент времени. Средняя величина скорости химической реакции оценивается согласно формуле:

$$\overline{W}_k(\bar{x}, t) = \int \int \dots \int_{T, Y_1, Y} W_k(T, Y_1^*, \dots, Y_N^*) \text{pdf}(T, Y_1^*, \dots, Y_N^*; \bar{x}, t) dY_N^* \dots dY_1^* dT, \quad (1.7)$$

Проблема заключается в том, что очень сложно найти адекватное аналитическое выражение для ФПВ, зависящее от структуры течения. Например, в работах [18, 71, 133, 188] решается дополнительное дифференциальное уравнение для параметра, характеризующего форму ФПВ. Однако одного параметра для описания формы ФПВ, вообще говоря, недостаточно; вообще говоря, форма совместной ФПВ $\text{pdf}(T, Y_1, \dots, Y_N; \bar{x}, t)$ должна зависеть от локальных характеристик турбулентных полей всех аргументов этой функции, а также учитывать взаимодействие этих полей. В последнее время для нахождения ФПВ часто используются методы Монте–Карло [123, 175, 185]. Такие подходы весьма перспективны, однако требуют больших вычислительных ресурсов. Широко распространены подходы, в которых предполагается, что внутри турбулентного диффузионного пламени химическая реакция сосредоточена в некоторой узкой окрестности фронта горения (который, впрочем, может иметь сколь угодно сложную, неодносвязную форму и притом хаотически пульсировать во времени). Это предположение справедливо, если скорость горения достаточно велика по сравнению со скоростью смешения и, таким образом, процесс горения полностью контролируется смешением. В таких случаях удастся выразить концентрации всех компонент смеси через концентрацию инертной примеси и, в более сложных случаях, через еще один

параметр, характеризующий степень развития реакции [49]. После этого задача сводится к нахождению только одной ФПВ для этих двух параметров. Это сокращает объем вычислений при реализации метода и исключает интерференцию ошибок аппроксимации разных ФПВ, но сохраняет проблему отыскания вида ФПВ. К этому классу относятся различные варианты метода *flamelet* [160, 164, 173, 174], которые будут подробно описаны в следующих разделах.

В предельном случае, когда число Дамкёлера $Da = t_t/t_c$, равное отношению турбулентного (t_t) к химическому (t_c) характерному времени, стремится к бесконечности, скорость реакции определяется турбулентным перемешиванием, описываемым через скорости скалярной диссипации [65]. В таком предельном случае средний источниковый член удастся выразить через скорость скалярной диссипации, и можно не вводить ФПВ (*Eddy Breakup Model* [178, 179]).

Весьма распространенным методом описания турбулентного горения, не требующим введения ФПВ, является модель *реактора частичного перемешивания* – PaSR (Partially Stirred Reactor). В этом методе предполагается, что в развитой турбулентности горение протекает в микроскопических зонах, которые можно рассматривать как гомогенные реакторы. Молекулярная диффузия подводит к этим зонам исходные вещества и отводит от них продукты сгорания. Пионерские работы в этой области были выполнены Л.А.Вулисом [16] и Е.С.Щетинковым [44]. В работах Магнуссена [119, 137, 138] зоны горения были названы “тонкими структурами”, и было сделано предположение о том, что объемная доля тонких структур полностью определяется характеристиками мельчайших турбулентных вихрей. В работах Хомяка [73, 75, 116] был введен альтернативный подход, близкий к идеям Л.А.Вулиса. В этом подходе при оценке доли тонких структур были учтены характерные времена химических реакций. Методы данного класса, наряду с методами *flamelet* [160, 164, 173, 174], также используются в настоящей работе и будут подробно рассмотрены далее.

При *геометрическом* или *топологическом* подходе фронт пламени описывается как геометрический объект (поверхность). Этот анализ, как правило, связан с предположением о достаточно тонком пламени (по сравнению со всеми масштабами потока), рассматриваемом как поверхность между газами до реакции и продуктами горения в предварительно перемешанном режиме или поверхностью между топливом и окислителем в случае диффузионного горения. Предложены два варианта модели: уравнение поля или концепция плотности поверхности пламени [105, 131, 166, 184]. Данный подход, вообще говоря, требует использования подхода Лагранжа к описанию течения и потому в данной работе не рассматривается.

§1.7. Модель микроламинарных пламен (flamelet)

В воздушно–реактивных двигателях горючее и окислитель обычно предварительно не перемешаны; при этом время химической реакции или гораздо меньше, чем время смешения ($\tau_{хим} \ll \tau_{дифф}$), или сопоставимо с ним ($\tau_{хим} \sim \tau_{дифф}$). Тогда развитие горения существенным образом зависит от процесса смешения. Это диффузионное горение.

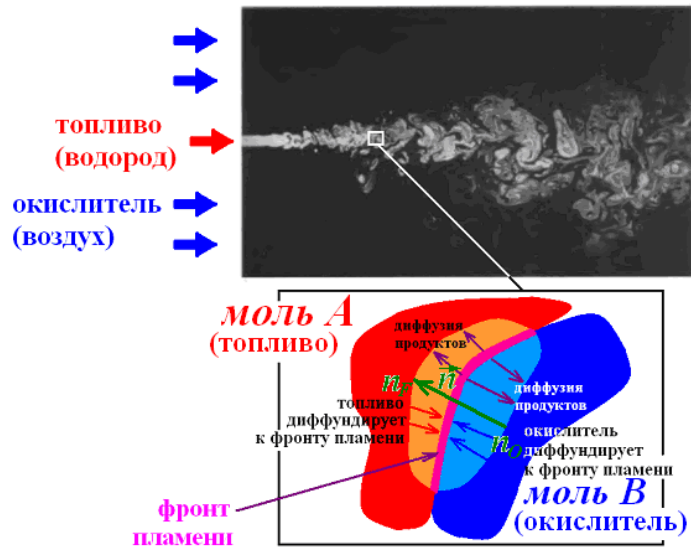
В случае турбулентного диффузионного горения мы имеем зону турбулентности (например, струю), состоящую из многих вихрей разных масштабов, которые взаимодействуют друг с другом и порождают неустойчивое, нестационарное случайное движение газа. Вихри “затягивают” топливо из струи топлива и окислитель из спутного потока воздуха, вовлекают их в хаотическое движение в зоне смешения, дробят на моли и заставляют их хаотически двигаться по зоне смешения.

Один из наиболее распространенных подходов к моделированию турбулентного диффузионного горения – модель микроламинарных пламен (*laminar flamelet*) [160, 164, 174]. При этом подходе зона реакции турбулентного горения представляется совокупностью фрагментов ламинарного пламени (flamelets), погруженных в турбулентное поле скорости и деформированных им, но сохраняющих свою внутреннюю структуру такой, какой она была бы в ламинарном потоке. Упрощение моделирования взаимодействия турбулентности и горения (ТСГ) базируется при этом на предположении, что химические процессы в основном сосредоточены в локальной близости от стехиометрической поверхности. Это позволяет сократить мгновенные уравнения сохранения для реагирующих компонент до системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Преимущество этого подхода состоит в том, что он позволяет разделить сложные расчеты химии от описания турбулентного течения.

Пусть в данной точке пространства–времени мы имеем контакт двух молей топлива и окислителя (рис.1). На поверхности контакта протекают процессы молекулярного смешения и химические реакции. Молекулярное смешение размывает, сглаживает поверхность контакта молей, и возникает область непрерывного изменения концентраций. В том месте, где создаются условия для горения, формируется фронт пламени.

Рассмотрим характерное время контакта движущихся молей топлива и окислителя $\tau_{конт}$. Оно связано с характерным временным масштабом турбулентности, которая приводит к случайному движению объемов газа и таким образом стремится развести моли топлива и окислителя. Если $\tau_{конт}$ гораздо больше, чем характерные времена смешения и химических реакций ($\tau_{хим}, \tau_{дифф} \ll \tau_{конт}$), то можно пренебречь движением газа как сплошной среды, считать, что моли топлива и окислителя стоят на месте, а на поверхности их контакта протекают процессы смешения и горения.

Топливо и окислитель с разных сторон диффундируют по направлению к фронту пламени. А продукты реакции, образующиеся во фронте пламени, диффундируют в противоположном направлении. Естественнo предположить, что градиент концентраций и температуры по нормали к поверхности контакта молей гораздо больше, чем градиент вдоль касательной к этой поверхности. Тогда можно рассматривать процесс как одномерный.



**Рисунок 1.1 – Взаимодействие молей топлива и окислителя
внутри турбулентной струи**

В работе [40] показано, что можно ввести некоторую характерную конечную скорость распространения информации за счет диффузии. Поэтому можно считать, что за время $\tau_{\text{конт}}$ процесс смешения успеет охватить некоторую конечную область в окрестности поверхности контакта молей топлива и окислителя (рис. 3). Тогда введем координату n по нормали к границе контакта молей, принимающую значения n_F и n_O на границах зоны смешения – там, где мы имеем чистое топливо ($n = n_F$) и чистый окислитель ($n = n_O$).

Предполагается, что, т.к. $\tau_{\text{дифф}} \ll \tau_{\text{конт}}$, то наступило состояние, когда структура зоны смешения в ближайшей окрестности контакта молей топлива и окислителя уже мало меняется во времени. Это предположение оправдывается тем фактом, что характерная скорость распространения информации за счет диффузии падает со временем примерно как $\frac{1}{\sqrt{t-t_0}}$, где t_0 – момент начала смешения (момент начала взаимодействия молей) [10]. Кроме того, полагается, что коэффициенты молекулярной диффузии массы i -й компоненты смеси D_i одинаковы и равны D для всех i . Наконец, все коэффициенты диффузии приближенно считаются постоянными в пределах флеймлета. Уравнение для Y_i при выполнении выше указанных предположений сводится к уравнениям модели flamelet:

$$D \frac{d^2 Y_i}{dn^2} + S_i = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N_{comp}, \quad (1.8)$$

где n – переменная, изменяющаяся вдоль нормали к поверхности контакта молей,

$S_i = -m_i \sum_{k=1}^{N_{react}} \Delta v_{ik} (W_k^f - W_k^b)$ – источниковый член, описывающий вклад химических реакций в

уравнения для активных компонент реагирующего газа.

Следует отметить, что зона смешения, возникающая при контакте двух молей, развивается вглубь этих молей, т.е. является нестационарным образованием и, строго говоря, описывается нестационарными уравнениями: $\frac{\partial Y_i}{\partial t} = D \frac{\partial^2 Y_i}{\partial n^2} + S_i$. Однако производная по времени играет главную роль на границах зоны смешения, где происходит развитие зоны вглубь молей. Наоборот, в окрестности зоны максимального тепловыделения можно пренебречь производной по времени по сравнению с S_i и перейти к уравнению (1.8). Можно показать, что зона максимального тепловыделения находится в окрестности стехиометрической поверхности n_{st} , на которой достигается состав смеси, соответствующий уравнению реакции [36].

При выводе уравнения энергии дополнительно предполагается, что нестационарные флуктуации давления и вязкая диссипация малы; числа Шмидта для всех компонент смеси одинаковы ($Sc_i = Sc$), а число Льюиса $Le = \frac{\lambda}{D} = \frac{Sc}{Pr} = 1$, где $\lambda = \frac{\mu}{Pr}$ – коэффициент молекулярной диффузии тепловой энергии (который также называют коэффициентом температуропроводности [45]), а Pr – число Прандтля. Это означает, что все коэффициенты диффузии одинаковы и равны D : $D_i = \lambda = D$. В итоге уравнение энергии приводится к виду (см. Приложение А.1):

$$D \frac{d^2 H}{dn^2} = 0 \quad (1.9)$$

где $H = \sum_{i=1}^{N_{sp}} h_i + \frac{(\vec{U} \cdot \vec{U})}{2}$ – полная энтальпия, $h_i = \int_{T_0}^T c_{pi} dT + \Delta h_i(T_0)$ – удельная энтальпия i -й

компоненты смеси), которая включает в себя тепловую энергию смеси и энергию связей молекул – $\Delta h_i(T_0)$ – удельную теплоту образования i -й компоненты смеси при $T = T_0$.

Рассмотрим вспомогательную задачу, когда моли A и B (рис. 2.1) состоят не из топлива и окислителя, а из разных инертных газов. Пусть z – концентрация инертного газа из моля A , которая равна 1 в моле A и равна 0 в моле B . Это позволяет рассматривать z как переменную, которая характеризует процесс смешения. Примем по аналогии с (1.8), что распределение z в окрестности стехиометрической поверхности можно считать стационарным. В окрестности

стехиометрической поверхности $z = z_{st} + \left(\frac{\partial z}{\partial n} \right)_{st} (z - z_{st}) + O((z - z_{st})^2)$. Например, в [36]

показано, что на стехиометрической поверхности $z = z_{st} = 1/(1 + St)$ (St – массовый стехиометрический коэффициент, который показывает, какая масса окислителя расходуется при сгорании 1 кг топлива). Перейдя в уравнениях (1.8–1.9) от переменной n к переменной z , получим

$$\begin{cases} N^{st} \frac{d^2 Y_i}{dz^2} + S_i = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N_{comp}, \\ N^{st} \frac{d^2 H}{dz^2} = 0, \end{cases} \quad (1.10)$$

где $N^{st} = D(\nabla z)_{st}^2$ – значение величины мгновенной *скалярной диссипации* на поверхности стехиометрического состава смеси. Она определяется молекулярными потоками реагирующих компонент к зонам реакций. Название “скалярная диссипация” связано с тем, что $\bar{N} = \overline{D(\nabla z)^2}$ возникает как источниковый член (диссипация) в уравнении переноса для \tilde{z}^2 .

Граничные условия для уравнений модели flamelet задаются при $z = 1$ (чистое топливо) и при $z = 0$ (чистый окислитель):

$$\begin{cases} z = 1: & H = H^{ox}; \quad Y_i = Y_i^{ox}, \quad i = 1, 2, \dots, N_{comp}, \\ z = 0: & H = H^f; \quad Y_i = Y_i^f, \end{cases} \quad (1.11)$$

Второе уравнение системы (6) показывает, что H линейно зависит от z :

$$H(z) = H_O + (H_F - H_O) \cdot z. \quad (1.12)$$

Заметим далее, что источниковые члены для химических элементов должны быть равны нулю, т.к. в ходе химических реакций превращения химических элементов не происходит. Поэтому даже в случае конечных скоростей химических реакций уравнения для химических элементов также представляют собой уравнения, аналогичные (1.9). Рассмотрим для примера горение водорода в воздухе. В этой системе реакций все вещества состоят из элементов H, O и N. Поэтому справедливы уравнения:

$$N^{st} \frac{d^2 Y_{эл.H}}{dz^2} = 0, \quad N^{st} \frac{d^2 Y_{эл.O}}{dz^2} = 0. \quad (1.13)$$

Аналогичное уравнение можно было бы записать и для $Y_{эл.N}$, но $Y_{эл.N}$ выражается через концентрации элементов H и O: $Y_{эл.N} = 1 - Y_{эл.H} - Y_{эл.O}$. Согласно (1.12), концентрации элементов также должны быть линейно связаны с z :

$$\begin{aligned} Y_{эл.H}(z) &= (Y_{эл.H})_O + [(Y_{эл.H})_F - (Y_{эл.H})_O] \cdot z, \\ Y_{эл.O}(z) &= (Y_{эл.O})_O + [(Y_{эл.O})_F - (Y_{эл.O})_O] \cdot z. \end{aligned} \quad (1.14)$$

В результате уравнения модели представляются в виде:

$$\left\{ \begin{array}{l} N^{st} \frac{d^2 Y_i}{dz^2} + R_i = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N_{comp} - 2 \\ H = (H^f - H^{ox}) \cdot z + H^{ox} \\ Y_{\varepsilon, O}(z) = (Y_{\varepsilon, O})_O + [(Y_{\varepsilon, O})_F - (Y_{\varepsilon, O})_O] \cdot z \\ Y_{\varepsilon, H}(z) = (Y_{\varepsilon, H})_O + [(Y_{\varepsilon, H})_F - (Y_{\varepsilon, H})_O] \cdot z \cdot \\ Y_{\varepsilon, N} = 1 - Y_{\varepsilon, H} - Y_{\varepsilon, O} \\ p = \rho R_0 T \sum_{i=1}^{N_{sp}} \frac{Y_i}{m_i} = p_{st} \end{array} \right. \quad (1.15)$$

Для замыкания системы уравнений используется предположение о постоянстве давления $p(z) = const = p_{st}$ (где p_{st} – давление в зоне протекания реакций), т.к. градиент давления на расстояниях порядка размера флеймлета вызвал бы движение газа в сторону убывания давления, что противоречило бы гипотезе об отсутствии конвективных процессов. Для оценки типичных характеристик флеймлетов давление (которое в реальности случайно изменяется во времени) принимается равным среднему по времени давлению в данной точке течения: $p_{st} \approx \bar{p}$. Аналогично, значение скалярной диссипации принимается равным $\overline{N^{st}}$, где $\overline{N^{st}}$ – условное среднее по времени значение скалярной диссипации, полученное осреднением по тем моментам времени, когда через данную точку пространства проходит стехиометрическая поверхность. Способы вычисления этого условного среднего будут описаны в разделе 1.10.

Первые два уравнения системы (1.15) решаются методом установления по времени. При этом находится стационарный предел решения следующих уравнений:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial Y_i}{\partial t} - N^{st} \frac{d^2 Y_i}{dz^2} - S_i = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N_{comp} - 2, \\ \frac{\partial H}{\partial t} - N^{st} \frac{d^2 H}{dz^2} = 0. \end{array} \right. \quad (1.16)$$

Существенным недостатком модели flamelet является предположение об однородности граничных условий. В реальных течениях поток является, как правило, неоднородным, в частности, с пограничными слоями. При этом значения температуры, скорости, а также и состав могут существенно отличаться в ядре потока и около стенки. В таком случае нет однозначности в определении граничных условий для уравнений флеймлета, то есть невозможно определить, из какой именно точки границы пришел объем окислителя/топлива. Кроме того, по мере движения объема газа от границы с ним происходят изменения в состоянии – так что к моменту контакта рассматриваемых произвольных объемов, мы не можем использовать в качестве граничных условий то состояние газа, которое было на границе. Но для более корректного учета нестационарных и неоднородных эффектов необходима доработка и усложнение модели, так что она потеряет свою изначальную простоту, а дополнительные надстройки внесут и аккумулируют ошибки.

В настоящей работе предлагается самый простой способ учета неравномерности входных потоков: предполагается, что осредненная по Фавру энтальпия в данной точке \tilde{H} определяется по энтальпии топлива и энтальпии окислителя \tilde{H}^{ox} , соответствующей энтальпии точки с границы, из которой пришел данный объем окислителя, из соотношения $\tilde{H} = H^f \cdot \tilde{z} + \tilde{H}^{ox} \cdot (1 - \tilde{z})$. Отсюда искомая энтальпия окислителя

$$\tilde{H}^{ox} = (\tilde{H} - H^f \cdot \tilde{z}) / (1 - \tilde{z})$$

В результате решения задачи (1.15) с краевыми условиями (1.11) концентрации Y_i и статическая температура T представляются в виде параметрических зависимостей:

$$\begin{cases} Y_i = Y_i \left(z, N^{st}, \bar{p}, \frac{U^2}{2}, BC \right), i = 1, 2, \dots, N_{comp} \\ T = T \left(z, N^{st}, \bar{p}, \frac{U^2}{2}, BC \right) \end{cases}, \quad (1.17)$$

где BC – граничные условия (эти дополнительные параметры входят как переменные величины только в случае учета неравномерности потока окислителя на входе; в остальных случаях эти параметры постоянны во всем поле течения). Обычно модель flamelet используется в низкоскоростных течениях, и скоростью U пренебрегают. Автору неизвестны работы, где учитывалась бы неоднородность граничных условий. Эти упрощения позволяют сократить число параметров библиотеки до трех: $f_i^{flamelet}(z, \bar{p}, N^{st})$, где $f_i^{flamelet}$ – концентрации либо температура. Сразу заметим, что в рассмотренных тестах учет скорости и неоднородности потока не позволил приблизить расчетные кривые к экспериментальным данным, поэтому далее будет рассматриваться библиотека, зависящая от трех параметров: z, \tilde{p}, N^{st} .

При $N^{st} = 0$ решение соответствует химическому равновесию. Рост N^{st} усиливает неравновесность химических процессов (за счет увеличения потоков реагентов в зоны реакций). Когда величина N^{st} становится слишком велика, пламя затухает и модель flamelet дает решение, соответствующее чистому смешению:

$$Y_i = Y_i^{ox} + (Y_i^f - Y_i^{ox})z, \quad i = 1, 2, \dots, N_{comp}. \quad (1.18)$$

Это решение получается из уравнений (1.16) при условии, что химические источниковые члены полагаются равными нулю. Значение величины скалярной диссипации, соответствующее затуханию, называется критическим значением этой величины N_{cr} . Решение с горением существует только при условии $N^{st} < N_{cr}$. Это означает, что пламя затухает, когда скорость смешения становится слишком большой по сравнению с потреблением топлива и воздуха внутри зоны реакции за счет ограничений, связанных с конечными скоростями химических реакций. N_{cr} является чисто химическим свойством, зависящим только от деталей химических

процессов окисления топлива и от граничных условий: $N_{cr} = N_{cr}(p_{st}, BC)$. Величина N_{cr} растёт с ростом температуры и давления входящих потоков. За счёт этого область значений параметра N^{st} ограничена областью $[0, N_{cr})$. Для больших значений N^{st} параметры смеси можно брать из решения, соответствующего смешению без горения. При этом возможны гистерезисные эффекты [36]. Уравнения, описывающие структуру flamelet, отделены от уравнений движения газа. Это позволяет составить библиотеку до проведения основного расчёта.

§1.8. Аппроксимация функции плотности вероятности (ФПВ)

До сих пор, при рассмотрении модели flamelet, рассматривались микроскопические детали структуры турбулентного пламени. Взаимодействующие моли топлива и окислителя, образующие микроламинарное пламя (flamelet), должны иметь размер, сопоставимый с мельчайшими турбулентными вихрями, т.к. именно на уровне таких вихрей существенны эффекты молекулярного смешения. Характерный размер таких вихрей называется *микромасштабом Колмогорова* и оценивается как $\lambda_K = L/Re_L^{3/4}$, где L – характерный линейный размер турбулентной зоны (например, толщина струи) [197]. Для развитых турбулентных течений $Re_L \sim 10^5$, и $\lambda_K \sim 10^{-4}L$.

Но предметом интереса настоящей работы являются осредненные по времени (по Фавру) параметры течения. Очевидно, что за время осреднения через данную точку пространства пройдет огромное количество молей топлива и окислителя, и данная точка будет попадать в различные области зон смешения микроламинарных пламен – как в области, где горения нет, так и в области существенного тепловыделения. Положение данной точки пространства внутри зоны смешения микроламинарного пламени, проходящего в данный момент через эту точку, можно охарактеризовать мгновенным значением переменной смешения z . Эти мгновенные значения z изменяются во времени случайным образом.

Предположим, что мы знаем функцию плотности вероятности реализации различных значений переменной смешения z :

$$\text{pdf}(Z) = \lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{P\{z \in [Z - \Delta z, Z + \Delta z]\}}{\Delta z}. \quad (1.19)$$

где в числителе стоит вероятность того, что в данной точке пространства–времени реализуются значения $z \in [Z - \Delta z, Z + \Delta z]$. ФПВ должна удовлетворять условию нормировки: $\int_0^1 \text{pdf}(z) dz = 1$.

Если такая ФПВ нам известна, то можно вычислить среднее значение любой характеристики течения, зависящей от z , по формуле:

$$\tilde{f} = \int_0^1 f(z) \text{pdf}(z) dz. \quad (1.20)$$

Но в предыдущем разделе было показано, что в методе микроламинарных пламен концентрации всех компонент смеси и температура являются однозначными функциями от z и от некоторого набора определяющих параметров (скалярной диссипации на поверхности стехиометрической смеси, локальной величины среднего давления потока). Следовательно, их средние значения могут быть рассчитаны по формулам:

$$\tilde{f}_i = \int_0^1 f_i(z, N^{st}, p) \text{pdf}(z) dz. \quad (1.21)$$

Функция $\text{pdf}(z)$ может быть найдена различными способами. Форма зависимости $\text{pdf}(z)$ определяется характером смешения компонентов в данной точке потока. Можно подобрать функцию, зависящую от некоторых параметров и от z , которая при надлежащем выборе параметров имеет требуемую форму. Такую ФПВ называют *предписанной*.

Основными требованиями к *предписанной* ФПВ являются ее способность принимать требуемую форму, соответствующую наблюдаемой в экспериментах, и малое число управляющих параметров. Достаточно очевидно, что чаще всего реализуются значения z , расположенные внутри зоны смешения, а реализация чистого топлива ($z=1$) или чистого окислителя является маловероятной, если мы находимся в глубине турбулентной струи. Поэтому чаще всего в качестве предписанной ФПВ предлагается использовать плотность вероятности β -распределения. При этом $\text{pdf}(z)$ вычисляется по формуле:

$$\text{pdf}(z) = z^\beta (1-z)^\gamma / \int_0^1 z^\beta (1-z)^\gamma dz. \quad (1.22)$$

Такое определение обеспечивает выполнение основных свойств функции $\text{pdf}(z)$: $\text{pdf}(0) = \text{pdf}(1) = 0$ и $\int_0^1 \text{pdf}(z) dz = 1$. Коэффициенты β и γ определяют положение максимума и ширину купола функции $\text{pdf}(z)$. Эти коэффициенты можно определить из условий:

$$\begin{cases} \int_0^1 z \cdot \text{pdf}(z) dz = \tilde{z}, \\ \int_0^1 (z - \tilde{z})^2 \cdot \text{pdf}(z) dz = \tilde{z'^2}, \end{cases} \quad (1.23)$$

где \tilde{z} и $\tilde{z'^2}$ – среднее по времени значение переменной смешения и среднеквадратичное значение пульсаций переменной z в данной точке пространства. Способ определения этих величин будет описан ниже. Решив уравнения (1.23), найдем β и γ . Таким образом,

$\text{pdf} = \text{pdf}(z, \tilde{z}, \tilde{z}^2)$. В работах [36, 163] предлагаются простые приближенные выражения для коэффициентов β и γ , как функций от \tilde{z} и \tilde{z}^2 :

$$\beta \approx \tilde{z} \cdot \left(\frac{\tilde{z}(1-\tilde{z})}{\tilde{z}^2} - 1 \right) - 1, \quad \gamma \approx (1-\tilde{z}) \cdot \left(\frac{\tilde{z}(1-\tilde{z})}{\tilde{z}^2} - 1 \right) - 1. \quad (1.24)$$

Для сравнения на рис. 2 приведены поля зависимости $\gamma(\tilde{z}, \tilde{z}^2)$, полученные автором путем численного интегрирования по формулам (1.23) и по формулам (1.24). Сравнение показывает, что формулы (1.24) дают хорошее приближение к (1.23). На рис. 2 приводятся только данные для коэффициента \tilde{z}, \tilde{z}^2 , т.к. β и γ симметричны относительно $z=0.5$.

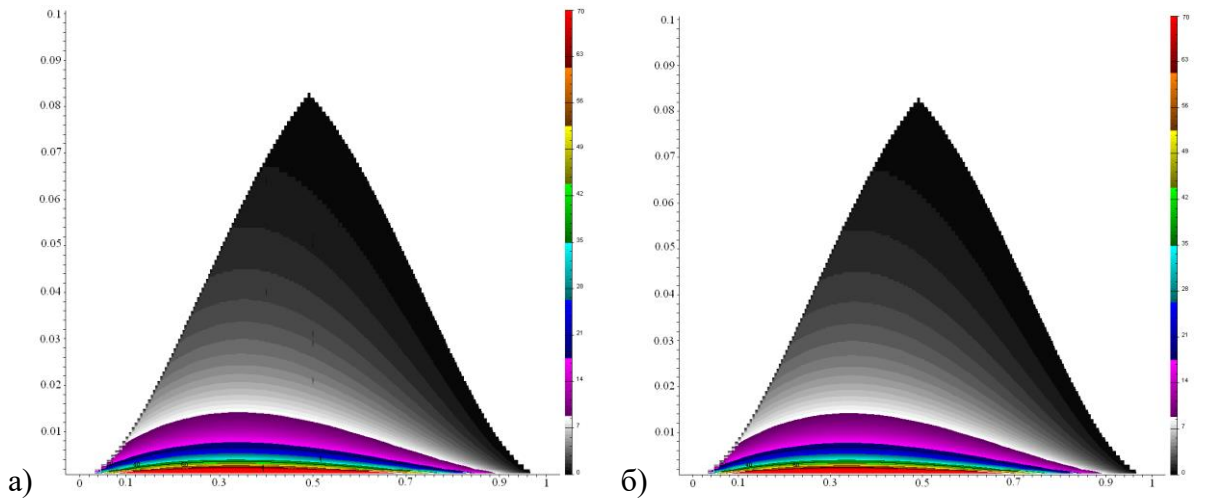


Рисунок 1.2 – Поля коэффициента $\gamma(\tilde{z}, \tilde{z}^2)$: а) рассчитанные из решения системы (1.23) и б) и полученные по формуле (1.24)

Знания величин \tilde{z} и \tilde{z}^2 достаточно для построения $\text{pdf}(z)$ в каждой точке пространства. Затем, используя $\text{pdf}(z)$, по формулам (1.21) рассчитываются поля средних концентраций и температуры. Заметим, что можно не вычислять интегралы (1.21) одновременно с основным расчетом, сделать это заранее при дискретных значениях $\bar{\rho}$, \tilde{z} и \tilde{z}^2 с некоторым шагом внутри областей их изменения и сохранить в виде таблиц. Затем в ходе основного расчета искомое среднее значение находить интерполяцией табличных данных для требуемых значений $\bar{\rho}$, \tilde{z} и \tilde{z}^2 . Именно такой подход и был реализован в настоящей работе.

Итак, используемая аппроксимация ФПВ (1.22) определяется локальными значениями среднего по времени значения переменной смещения \tilde{z} и среднеквадратичного значения пульсаций переменной смещения – $\sigma = \tilde{z}^2$. Для определения этих двух параметров решаются дополнительные дифференциальные уравнения, вывод второго из которых приведен в Приложении А.2:

$$\frac{\partial}{\partial t}[\bar{\rho}\tilde{z}] + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\bar{\rho}\tilde{u}_k\tilde{z} - \left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_T}{Sc_T^z} \right) \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_k} \right] = 0. \quad (1.25)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}[\bar{\rho}\sigma] + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\bar{\rho}\tilde{u}_k\sigma - \left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_T}{Pr_T^\sigma} \right) \frac{\partial \sigma}{\partial x_k} \right] = 2 \frac{\mu_T}{Sc_T^\sigma} \left(\frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_k} \right)^2 - 2\bar{N}. \quad (1.26)$$

Скалярная диссипация полагается пропорциональной скорости диссипации кинетической энергии турбулентности:

$$\bar{N} \approx C_\sigma \frac{\sigma}{k} \cdot \bar{\varepsilon}. \quad (1.27)$$

В уравнения (1.25)–(1.26) входят три новых неизвестных эмпирических коэффициента – Sc_T^z , Pr_T^σ и C_σ , их значения должны быть найдены из соотнесения с теорией и экспериментом. Обычно принимается $Sc_T^z = 1$, $Pr_T^z = 1$, $C_\sigma = 1$. При решении уравнений необходимо контролировать, что $\tilde{z}, \sigma \in [0; 1]$.

§1.9. Учет перемежаемости

Перемежаемость – характеристика многих турбулентных течений, играющая важную роль в поведении течений, независимо от того, происходят в них химические реакции или нет [49]. Явление перемежаемости заключается в том, что через одну и ту же точку пространства в разные моменты времени могут проходить как ламинарные, так и турбулентные объемы жидкости или газа с принципиально различными свойствами по физическим, химическим, термодинамическим качествам. Причина такой перемежаемости режимов течения заключается в том, что турбулентность образуется вначале в дискретных областях потока. Основной количественной характеристикой явления перемежаемости служит доля времени существования турбулентного режима в данной точке пространства. Оно иллюстрируется на рис. 1.3, заимствованным из [103]. Показан турбулентный пограничный слой, завихренная часть которого подкрашена дымом, а граничащее с ней незавихренное течение – прозрачно.



Рисунок 1.3 – Визуализация пограничного слоя с помощью дыма [103]

При наличии перемежаемости через данную точку пространства в течение части времени проходят объемы газа, вообще не охваченные турбулентным смешением. В такие моменты горения нет.

В настоящей работе для учета перемежаемости средние значения температуры и концентраций вычисляются не по формулам (1.21), а по подправленным формулам:

$$\begin{aligned}\tilde{T} &= \gamma \cdot \int_0^1 T(z, \bar{p}, \overline{N^{st}}) \text{pdf}(z) dz + (1-\gamma) \cdot \{(1-\tilde{z}) \cdot T_O + \tilde{z} \cdot T_F\}, \\ \tilde{Y}_i &= \gamma \cdot \int_0^1 Y_i(z, \bar{p}, \overline{N^{st}}) \text{pdf}(z) dz + (1-\gamma) \cdot \{(1-\tilde{z}) \cdot (Y_i)_O + \tilde{z} \cdot (Y_i)_F\},\end{aligned}\quad (1.28)$$

где γ – коэффициент перемежаемости. Величины в фигурных скобках соответствуют т.н. “черно–белому смешению”, когда молекулярного смешения топлива и окислителя нет, но отличные от нуля и единицы значения \tilde{z} достигаются за счет осреднения по времени хаотического движения объемов топлива и окислителя. Для нахождения γ решается дополнительное дифференциальное уравнение, предложенное в работе [89]:

$$\frac{\partial \gamma}{\partial t} + \frac{\partial(\gamma u_i)}{\partial x_k} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k} [\gamma(1-\gamma)(\bar{u}_{i(t)} - \bar{u}_{i(nt)})]}_{D_g} = S_g \quad (1.29)$$

Для последнего члена в левой части используется диффузионная модель:

$$D_g = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[(1-\gamma) \frac{v_t}{\sigma_g} \frac{\partial \gamma}{\partial x_k} \right]$$

где коэффициент $\sigma_g = 1$. Турбулентная вязкость вычисляется по формуле:

$$D_g = C_\mu \left[1 + C_{\mu g} \frac{k^3}{\varepsilon^2} \gamma^{-m} (1-\gamma) \frac{\partial \gamma}{\partial x_k} \frac{\partial \gamma}{\partial x_k} \right] \frac{k^2}{\varepsilon} = C'_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}$$

где предлагается использовать $m=3$, $C_{\mu g}=0.1$. Источниковый член в правой части моделируется в виде: $S_g = S'_g + S_\gamma$, где

$$S'_g = C_{g1} \gamma (1-\gamma) \frac{P_{k,s} + P_{k,n}}{k} + C_{g2} \frac{k^2}{\varepsilon} \frac{\partial \gamma}{\partial x_j} \frac{\partial \gamma}{\partial x_j}$$

$$P_{k,s} \langle P_{k,shear\ strains} \rangle = -\widetilde{u'_i u'_j} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \quad (i \neq j), \quad P_{k,n} \langle P_{k,normal\ strains} \rangle = -\widetilde{u'_i u'_j} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \quad (i = j)$$

$$S_\gamma = C_{g3} \frac{k^{1/2}}{|\tilde{u}|} \nabla \left(\frac{1}{2} \tilde{u} \cdot \tilde{u} \right) (-\nabla \gamma) \frac{k}{\varepsilon} \gamma (1-\gamma) = C_{g3} \gamma (1-\gamma) \frac{\varepsilon}{k} \Gamma$$

$$\Gamma \equiv \frac{k^{5/2}}{\varepsilon^2} (\nabla |\tilde{u}|) (\nabla \gamma) = \frac{k^{5/2}}{\varepsilon^2} \frac{\tilde{u}_i}{(\tilde{u}_k \tilde{u}_k)^{1/2}} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \gamma}{\partial x_j}$$

Значения констант задаются следующими: $C_{g1}=1.6$, $C_{g2}=0.15$, $C_{g3}=0.16$, $\sigma_g=1$.

§1.10. “Классическая модель ФПВ–flamelet”

Чаще всего в литературе встречается "классическая модель ФПВ–flamelet", в которой из предварительно рассчитанной библиотеки напрямую определяются средние значения температуры и массовых долей реагирующих компонент газовой смеси, что позволяет уменьшить количество решаемых дифференциальных уравнений в частных производных. В настоящей работе расчеты на основе “классической модели ФПВ–flamelet” сопоставлялись с данными работ [60, 201], также полученными при помощи этой модели.

Модель включает в себя использование flamelet–библиотек $f_i^{flamelet}(z, p, N^{st})$ (f_i – массовые доли реагирующих компонент и температура), которые находятся из решения системы (1.15). Давление приближенно принимается равным среднему давлению в данной точке потока ($p \approx \bar{p}$), а в качестве N^{st} используется условное среднее значение скалярной диссипации, осредненное по моментам времени, когда через данную точку проходит стехиометрическая поверхность, – $\overline{N^{st}}$.

Условно осредненная величина скалярной диссипации на стехиометрической поверхности аппроксимируется соотношением:

$$\overline{N}_t^{st} = \frac{\overline{N}|_{\bar{z}=z_{st}}}{\gamma|_{\bar{z}=z_{st}}} \quad (1.30)$$

где $\overline{N}|_{\bar{z}=z_{st}}$ и $\gamma|_{\bar{z}=z_{st}}$ – средние величины скалярной диссипации N и перемежаемости γ , вычисленные при условии, что среднее значение переменной смещения $\bar{z} = z_{st}$. В настоящей работе пренебрегается флуктуациями скалярной диссипации в процедуре осреднения, как это делается в [60, 201]. Параметры потока, хранимые в библиотеке (f_i^{lib}), определяются осреднением с помощью ФПВ переменной смещения z по формуле (1.21).

Для нахождения \bar{z} и $\sigma = \overline{z'^2}$ решаются два дополнительных дифференциальных уравнения переноса (1.25)–(1.26). Конечные величины в расчете определяются с учетом перемежаемости турбулентности по формулам (1.28).

При использовании “классической модели ФПВ–flamelet” рассмотрены ФПВ различного вида. В инженерных приложениях и коммерческих программных продуктах (FLUENT, ANSYS CFX) в качестве предписанной ФПВ используется плотность вероятности β –распределения. Такая ФПВ выбрана в качестве основной и в настоящей работе. Будем называть ее *pdf₁*.

Для воспроизведения методологии из [60, 201] также рассмотрена ФПВ, которая имеет гауссову форму в непеременяемой области течения $\gamma = 1$ (глубоко внутри слоя смещения):

$$pdf(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(z - \bar{z})^2}{2\sigma^2}\right) \quad (1.31)$$

и форму функции Айри в непережимаемой части течения $\gamma < 1$:

$$pdf(z) = \frac{1.404}{z_t} Ai\left(1.788 \frac{z}{z_t} - 2.338\right), \quad (1.32)$$

где $z_t = \bar{z}/\gamma$ – величина переменной смещения условно осредненная по моментам времени, когда в рассматриваемой точке смещения наблюдается турбулентный слой смещения. Далее будем называть ее pdf_2 .

Для γ пережимаемости решалось дифференциальное уравнение (1.28). Кроме того, было рассмотрено приближенное соотношение из [60, 201]:

$$\gamma = \begin{cases} \frac{1.31}{1 + (\sigma/\bar{z})^2}, & \sigma/\bar{z} > 0.555 \\ 1, & \sigma/\bar{z} \leq 0.555 \end{cases} \quad (1.33)$$

В расчетах на основе “классической модели ФПВ–flamelet”, следуя подходу из [60, 201], использовался простой способ вычисления скорости скалярной диссипации на стехиометрической поверхности N^{st} : локальное значение \bar{N}^{st} принималось равным значению $\bar{N}|_{\bar{z}=z_{st}}$, вычисляемому в точке из того же поперечного сечения ($x=const$), в которой $\bar{z} = z_{st}$. Однако, этот подход применим только в случае простой геометрии. Кроме того, не учитывается, что в сечении локальное значение N^{st} , начиная с некоторого момента, может стать ниже критического значения, когда реакция уже не может идти.

В [164] показано, что при некоторых упрощающих предположениях ламинарные флеймлеты в турбулентном диффузионном пламени могут быть представлены бесконечным одномерным слоем смещения. Структура пламени при этом может быть описана с помощью противоточных диффузионных пламен, а профиль скорости скалярной диссипации встречных пламен является функцией только переменной смещения z . Зависимость скорости скалярной диссипации от переменной смещения, используемой в решении уравнений флеймлетов, можно аппроксимировать, следуя [163]:

$$N(z) = N|_{\bar{z}=z_{st}} \cdot F(z), \quad F(z) = \exp\left[-2[erfc^{-1}(2z)]^2\right] \quad (1.34)$$

где $erfc^{-1}$ – обратная дополнительная функция ошибки. Библиотека flamelet рассчитывается при постоянном значении скорости скалярной диссипации на стехиометрической поверхности. Значение турбулентного среднего скорости скалярной диссипации на стехиометрической поверхности может быть определено по формуле:

$$\bar{N}|_{z=z_{st}} = N \int_0^1 F(z)P(z)dz, \quad (1.35)$$

где скорость скалярной диссипации \bar{N} вычисляется по формуле (1.27).

§1.11. Модели реактора частичного перемешивания (PaSR)

Кроме моделей микроламинарных пламен (flamelet), в настоящей работе рассмотрен другой класс моделей взаимодействия турбулентности с горением (TCI) – методы, основанные на модели реактора частичного перемешивания (PaSR). В этих методах предполагается, что при высоких числах Рейнольдса химические реакции протекают в основном в *тонких структурах*, связанных с мельчайшими турбулентными вихрями. Эти структуры расположены в пространстве неравномерно, и их объем составляет некоторую долю от всего объема, занимаемого газом. Таким образом, области, содержащие тонкие структуры, как бы погружены в окружающее течение (рис. 1.4,а из [138]). Именно в тонких структурах молекулярное смешение и теплообмен, а также и химические реакции происходят наиболее интенсивным образом. Существование тонких структур подтверждается экспериментом – см. рис. 1.4,б из [138].

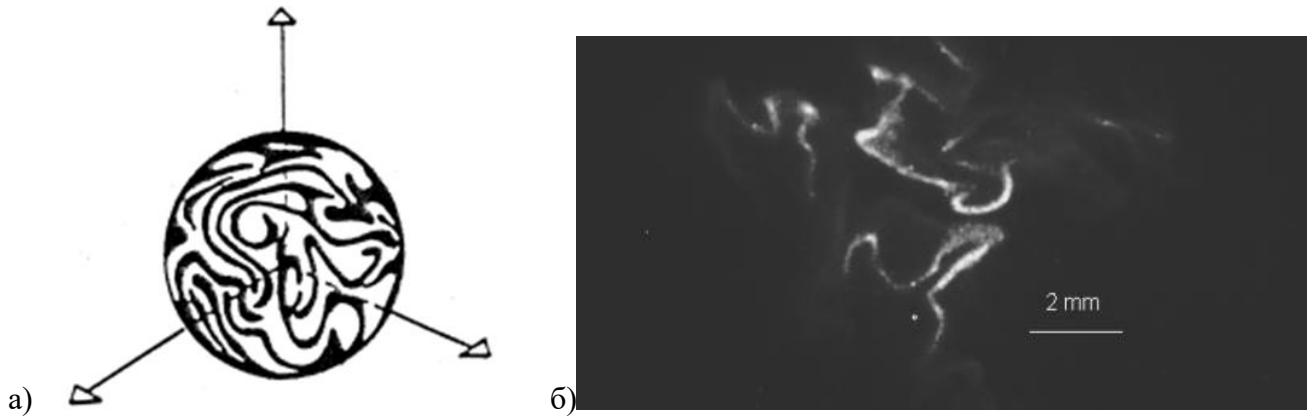


Рисунок 1.4 – а) “Тонкие структуры” и б) их визуализация в эксперименте [138]

В моделях PaSR тонкие структуры рассматриваются как *гомогенный реактор* [44], в котором непрерывно протекает реакция. Молекулярная диффузия подводит к тонким структурам свежую смесь из пространства, окружающего тонкие структуры, а также отводит из тонких структур продукты реакции. Также за счет молекулярной диффузии происходит теплообмен между тонкими структурами и окружающим пространством.

В практических реализациях метода PaSR дополнительно предполагается: 1) что во всех тонких структурах, находящихся в рассматриваемой ячейке расчетной сетки, состав газа однороден; 2) что в оставшейся части ячейки состав газа также однороден; 3) что скорости газа как сплошной среды в тонких структурах и в окружающем пространстве одинаковы и однородны по ячейке. Основными параметром модели являются объемная доля тонких структур γ^* и расход массы смеси через тонкие структуры G . Состояние газа в тонких структурах описывается системой дифференциальных уравнений для гомогенного реактора. Параметры газа внутри тонких структур будем обозначать верхним индексом “*” (T^*, Y_i^*, ρ^*, p^*), а в окружающем пространстве – верхним индексом “0” (T^0, Y_i^0, ρ^0, p^0). Средняя плотность и средний состав газа в ячейке связан с параметрами в тонких структурах и в окружающем пространстве соотношениями:

$$\bar{p} = \gamma^* \rho^* + (1 - \gamma^*) \rho^0, \quad \bar{Y}_i = (\gamma^* \rho^* Y_i^* + (1 - \gamma^*) \rho^0 Y_i^0) / \bar{p}. \quad (1.36)$$

Тогда средняя скорость реакции в данной ячейке сетки будет вычисляться по формуле:

$$\bar{W} \approx \gamma^* W^* + (1 - \gamma^*) W^0. \quad (1.37)$$

Наиболее известной моделью класса PaSR в настоящее время является модель EDC (“*Eddy Dissipation Concept*”) Магнуссена [118, 137, 138, 155]. В этой модели считается, что скорость реакции в тонких структурах намного больше, чем в окружающем пространстве. Поэтому полагается $\bar{W} \approx \gamma^* W^*$, а состояние в тонких структурах является квазистационарным и описывается алгебраической системой уравнений для стационарного состояния гомогенного реактора. Для нахождения этого стационарного состояния нужно на каждом шаге физического времени находить стационарный предел (установление по псевдовремени t') решения системы дифференциальных уравнений, описывающей состояние в реакторе. Эти уравнения в переменных модели EDC имеют вид:

$$\begin{cases} \frac{d(\gamma^* \rho^* e^*)}{dt'} = -\gamma^* \rho^* \cdot \eta \frac{h^* - h^0}{\tau^*} + e \frac{d(\gamma^* \rho^*)}{dt}, & \frac{\eta}{\tau^*} = \frac{G}{\gamma^* \rho^* V}, \\ \frac{d(\gamma^* \rho^* Y_i^*)}{dt'} = \gamma^* \rho^* \cdot \left(\frac{S_i^*}{\rho^*} - \eta \frac{Y_i^* - Y_i^0}{\tau^*} \right) + Y_i^* \frac{d(\gamma^* \rho^*)}{dt}, & \rho^* T^* \sum_{i=1}^{N_{sp}} \frac{Y_i^*}{m_i} = \bar{p} \end{cases}. \quad (1.38)$$

Основные параметры задачи выражаются в модели Магнуссена через параметры турбулентности в ячейке – кинетическую энергию турбулентности k и скорость ее диссипации ε :

$$\gamma^* = 9.7 \left(\frac{\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}}{k^2} \right)^{3/4}; \quad G = \eta \frac{\gamma^* \rho^* V}{\tau^*}; \quad \eta = (\gamma^*)^{-1/3}; \quad \tau^* = \tau_K. \quad (1.39)$$

Здесь $\nu = \mu / \rho$ – средняя кинематическая молекулярная вязкость в ячейке, V – объем ячейки. Заметим, что $(\nu \cdot \varepsilon / k^2)^{3/4} \sim (\nu / \nu_T)^{3/4} = 1 / \text{Re}_T^{3/4}$ – величина, которая сопоставима с отношением размера мельчайших турбулентных вихрей к размеру крупных турбулентных вихрей (оценка Колмогорова), τ^* – характерное время пребывания газа в реакторе, которое в модели *EDC* принимается равным характерному времени жизни мельчайших турбулентных вихрей $\tau_K = 0.41 \sqrt{\nu / \varepsilon}$. Параметр η вводится для того, чтобы в случае, когда $\text{Re}_T \rightarrow \infty$ при конечном характерном времени крупномасштабной турбулентности $\tau_T = k / \varepsilon$ (т.е. в случае, когда $\nu / \varepsilon \rightarrow 0$) расход газа через тонкие структуры G оставался конечным.

Недостатком модели Магнуссена является то, что в случае сильной и полностью развитой турбулентности, когда $\text{Re}_T \rightarrow \infty$, объемная доля тонких структур $\gamma^* \rightarrow 0$, и можно показать, что при этих условиях модель Магнуссена стремится к квазиламинарному приближению.

Другой вариант модели класса PaSR, который лишен указанного недостатка – модель PaSR из работ [73–75]. В этой модели тонкие структуры также предполагаются квазистационарными, но основные параметры задачи оцениваются по-другому:

$$\gamma^* = \frac{\tau_{хим}}{\tau_{хим} + \tau^*}; \quad G = \frac{\gamma^* \rho^* V}{\tau^*}; \quad \tau^* = \sqrt{\tau_K \cdot \tau_T}, \quad (1.40)$$

где $\tau_{хим}$ – характерный масштаб времени химических процессов, который обычно оценивается по формуле

$$\tau_{хим} \approx \delta_L / S_L, \quad (1.41)$$

где $\delta_L \approx \nu / S_L$ и S_L – соответственно толщина фронта и скорость ламинарного пламени.

Однако такая модель PaSR не учитывает предысторию состояния в тонких структурах. Тонкие структуры не обладают чувствительностью к тому, что происходит в них вверх по течению от рассматриваемой точки, а также не учитывают развития по времени. Это очень существенный недостаток, т.к. при одних и тех же условиях осредненного поля в тонких структурах могут реализовываться различные состояния – с горением или без – в зависимости от предыстории реактора, т.е. возможны гистерезисные эффекты. Кроме того, в реальности реакции в тонких структурах могут протекать с конечной скоростью.

Для учета этих эффектов В.А.Сабельниковым и К.Фюрби разработан расширенный вариант модели PaSR – “Extended PaSR (EPaSR)” [152–154], в котором предложено отказаться от квазистационарной трактовки тонких структур и решать для тонких структур систему дифференциальных уравнений в частных производных, учитывающую изменение по времени состава в тонких структурах, а также конвективный и диффузионный перенос тонких структур

по пространству. В модели решается дополнительный набор дифференциальных уравнений для описания состояния в тонких структурах, что практически удваивает размерность итоговой системы уравнений по сравнению со случаем без учета TCI. Эти уравнения аналогичны уравнениям для средних параметров течения с добавлением члена, учитывающего вклад от обмена между тонкими структурами и окружающим их пространством (второй член из правой части в уравнениях (1.38) выше). Эта модель была ранее успешно применена к моделированию как высокоскоростных, так и существенно дозвуковых течений с горением. Стоит отметить, что при включении EPaSR в систему уравнений RANS автором модели предложена модификация обменного члена между “0” и “*”, при которой вместо комбинации γ^*/τ^* используется $c_g \omega$, где c_g – коэффициент модели, а ω – характерная частота турбулентных пульсаций. Заметим, что и в модели Магнуссена $\eta \gamma^*/\tau^* \sim \omega$.

В работах В.А. Сабельникова и К. Фюрби [154] также рассмотрен упрощенный вариант модели EPaSR, в котором для сокращения затрат было решено отказаться от описания конвективного и диффузионного переноса тонких структур по пространству и описывать тонкие структуры обыкновенными дифференциальными уравнениями, учитывающими изменение по времени состава в тонких структурах. Эту модель будем называть *нестационарным вариантом* PaSR. При этом система (1.38) решается не до установления, а полагается $t' = t$. Но эта модель обладает недостатком стационарного варианта модели PaSR, связанным с изолированностью тонких структур в произвольной точке течения.

Еще одна новая оригинальная модель учета TCI того же класса – Generalized PaSR (GPaSR) – предложена В.А.Сабельниковым* и впервые реализована и применена на практике в настоящей работе. Мотивацией создания модели является необходимость минимальных модификаций модели PaSR для качественного описания обмена между соседними объемами внутри тонких структур. В этой модели учитывается конвективный перенос вдоль тонких структур, причем влияние на изменение состояния оказывают только те потоки, которые втекают в рассматриваемую ячейку. Для учета этих потоков в уравнения (2) добавлен член, приближающий локальное состояние в реакторе (“*”) к тому, что в него попадает из тонких структур, расположенных выше по потоку:

$$\frac{d(\gamma^* \rho^* Y_i^*)}{dt'} + \rho^* \gamma^* \frac{(Y_i^* - Y_i^{*,in})}{\tau_{res}} = \gamma^* \rho^* \cdot \left(\frac{S_i^*}{\rho^*} - \eta \frac{Y_i^* - Y_i^0}{\tau^*} \right) + \hat{Y}_i \frac{d(\gamma^* \rho^*)}{dt}, \quad (1.42)$$

где $t' = t$, а $Y_i^{*,in}$ – осредненная по расходу величина втекающей в данную ячейку концентрации компоненты i в тонких структурах. Таким образом, модель вносит чувствительность состояния в рассматриваемой ячейке к происходящему в окружающем

* Модель GPaSR пока не была опубликована.

пространстве и дает возможность уловить нестационарные эффекты, связанные с погасанием или загоранием. Важным моментом является то, что модель включает в себя характерное конвективное время пребывания втекающего газа в окрестности тонких структур – τ_{res} . Для его оценки предложено следующее соотношение:

$$\frac{1}{\tau_{res}} = \frac{\dot{m}_+}{\rho^* \Delta V}, \quad (1.43)$$

где $\dot{m}_+ = - \int_{S^-, \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} < 0} \rho^* \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dS > 0$ – втекающий поток массы, ΔV – объем рассматриваемой ячейки,

dS – площадь грани ячейки, \mathbf{n} – единичный вектор нормали к грани, направленный наружу из ячейки, интегрирование по S^- означает, что учитываются только те грани ячейки, на которых газ втекает в ячейку: $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} < 0$. $Y_i^{*,in}$ вычисляется подобным способом:

$$Y_i^{*,in} = - \int_{S^-, \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} < 0} \gamma^* \rho^* Y_i^* \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dS / (\gamma^* \cdot \dot{m}_+). \quad (1.44)$$

Аналогичные модификации производятся и с уравнением энергии. GPaSR является своего рода компромиссом между точностью модели EPaSR и вычислительной простотой PaSR.

Следует отметить, что в большом количестве работ по моделям PaSR можно обнаружить и другие различия между моделями. Так, в некоторых работах предполагается, что плотность газа постоянна по ячейке (т.е. одинакова в тонких структурах и в окружающем пространстве), а в других – что давление постоянно по ячейке. Для того, чтобы разобраться с численными проблемами, которые порождаются моделями класса PaSR, а также сравнить различные варианты модели PaSR между собой, была рассмотрена модельная задача, которая подробно описана в разделе 1.12.

§1.12. Модельная задача для анализа модели PaSR

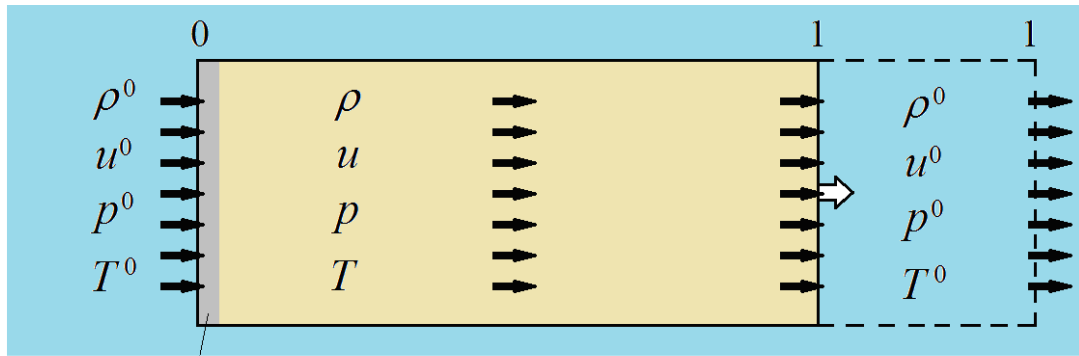
Для тестирования численных алгоритмов реализации модели PaSR была предложена локальная задача, которая позволяет дать простую физическую интерпретацию этих моделей и последовательно вывести уравнения модели PaSR. В основе этих построений лежит концепция идеального гомогенного реактора переменного объема, который может захватывать массу из окружающей среды или, наоборот, отдавать ее наружу.

Представим себе реактор в виде одномерного проточного канала постоянного сечения F (рис. 1.5). Через входное сечение 0 втекает поток газа из пространства, окружающего реактор, с параметрами p_0 , T_0 , \vec{Y}_0 . Через выходное сечение 1 вытекает поток реакторной смеси

с параметрами p , T , \bar{Y} . Расходы газа (потoki массы относительно поверхности реактора) через сечения 0 и 1 в каждый момент времени одинаковы и равны $G_1 = G_2 = G(t)$.

В реакторе установлен идеальный смеситель, благодаря которому в большей части объема параметры газа постоянны и равны параметрам в выходном сечении 1. Исключение составляет слой толщиной $\delta \rightarrow 0$, прилегающий к входному сечению 0. В этом слое происходит смешение втекающего в реактор потока с реакторной смесью, и параметры газа, включая давление, плотность, скорость и состав, меняются от начальных до значений в большей части объема реактора. Поскольку объем, в котором это происходит, бесконечно мал, отличие параметров в этом объеме от постоянных значений p , T , \bar{Y} в остальном объеме реактора не оказывает влияния на средние значения параметров по объему реактора, и эти средние значения равны p , T , \bar{Y} .

Объем реактора меняется по заданному закону $V(t)$. Для простоты считаем, что входное сечение 0 покоится, а выходное сечение 1 смещается со скоростью $\frac{1}{F} \frac{dV}{dt}$. При этом захватывается дополнительная масса. Давление в реакторе меняется по заданному закону $p(t)$.



область мгновенного
смешения (объем нулевой)

Рисунок 1.5 – Схема гомогенного реактора с изменением объема и массы

Закон сохранения энергии:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho E dV = -G(E - E^0) - \left\{ p \left(u - \frac{1}{F} \frac{dV}{dt} \right) - p^0 u^0 \right\} F + \hat{E} \frac{d\rho V}{dt}. \quad (1.45)$$

потоки через поверхность работа сил давления захваченная энергия

Здесь крышечкой обозначены параметры смеси, которая захватывается реактором. Если $\frac{d\rho V}{dt} > 0$, то реактор захватывает смесь из окружающего пространства, поэтому $\hat{a} = a^0$. Если же $\frac{d\rho V}{dt} < 0$, то реактор отдает часть своей смеси в окружающее пространство, поэтому $\hat{a} = a$.

Но в силу закона сохранения массы, $G = \rho \left(u - \frac{1}{F} \frac{dV}{dt} \right) F = \rho^0 u^0 F$.

Поэтому $GE + p \left(u - \frac{1}{F} \frac{dV}{dt} \right) F = G \left(E + \frac{p}{\rho} \right) = GH$.

Далее, поскольку $u^2/2 \ll C_p T$, то $H \equiv \frac{u^2}{2} + h \approx h = \sum_{i=1}^{N_{sp}} Y_i h_i(T) = h(T, \vec{Y})$.

Аналогично, $E \approx e(T, \vec{Y})$.

Получаем окончательный вид уравнения энергии:

$$\frac{d(\rho V e)}{dt} = -G(h - h^0) + \dot{e} \frac{d(\rho V)}{dt} \quad (1.46)$$

Закон сохранения массы i -й компоненты:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_V \rho Y_i dV &= S_i V - G(Y_i - Y_i^0) + \hat{Y}_i \frac{d\rho V}{dt} \\ \frac{d(\rho Y_i V)}{dt} &= S_i V - G(Y_i - Y_i^0) + \hat{Y}_i \frac{d\rho V}{dt} \end{aligned} \quad (1.47)$$

В случае, если турбулентное горение происходит в замкнутой емкости, состоящей из одной расчетной ячейки, то модель PaSR сводится к модели двух взаимодействующих гомогенных реакторов разных объемов V^* и V^0 , сумма объемов которых равна объему расчетной ячейки и постоянна. Реакторы обмениваются массой с постоянным расходом G . На вход каждого реактора подается то, что получается на выходе из другого реактора (см. рис. 1.6).

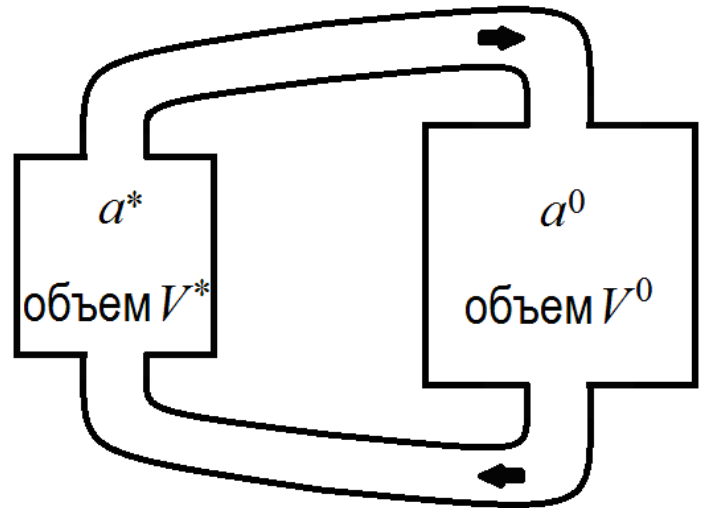


Рисунок 1.6 – Система двух взаимодействующих гомогенных реакторов

Состояние газа в одном реакторе обозначим индексом “*” (аналог “тонких структур”), в другом – индексом “0” (аналог газа, окружающего “тонкие структуры”). Считаем, что масса в каждом из реакторов может меняться, но суммарная масса постоянна. Будем считать, что суммарный объем реакторов постоянен $V^* + V^0 = V = const$, но V^* и V^0 могут меняться со временем. Обозначим $\frac{V^*}{V} = \gamma^*$. Получаем систему уравнений для описания такой системы:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d(\gamma^* \rho^* e^*)}{dt} = -\frac{G}{V}(h^* - h^0) + e \frac{d(\gamma^* \rho^*)}{dt}, \\ \frac{d(\gamma^* \rho^* Y_i^*)}{dt} = S_i^* \gamma^* - \frac{G}{V}(Y_i^* - Y_i^0) + \bar{Y}_i \frac{d(\gamma^* \rho^*)}{dt}, \\ \frac{d((1-\gamma^*) \rho^0 e^0)}{dt} = -\frac{G}{V}(h^0 - h^*) + \bar{e} \frac{d((1-\gamma^*) \rho^0)}{dt}, \\ \frac{d((1-\gamma^*) \rho^0 Y_i^0)}{dt} = S_i^0 (1-\gamma^*) - \frac{G}{V}(Y_i^0 - Y_i^*) + \bar{Y}_i \frac{d((1-\gamma^*) \rho^0)}{dt}, \\ \frac{d(\gamma^* \rho^*)}{dt} = -\frac{d((1-\gamma^*) \rho^0)}{dt}, \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (1.48) \\ (1.49) \\ (1.50) \\ (1.51) \\ (1.52) \end{array}$$

$$\hat{a} = \begin{cases} a^0, & d(\gamma^* \rho^*)/dt > 0, \\ a, & d(\gamma^* \rho^*)/dt < 0. \end{cases}$$

$$\bar{a} = \begin{cases} a, & d(\gamma^* \rho^*)/dt > 0, \\ a^0, & d(\gamma^* \rho^*)/dt < 0. \end{cases}$$

Складываем попарно уравнения (1.48) и (1.50), (1.49) и (1.51) и учитываем уравнение (1.52). Получаем уравнения для средних по всему объему системы параметров (которые аналогичны средним по времени параметрам течения при решении уравнений RANS):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d(\gamma^* \rho^* + (1-\gamma^*) \rho^0)}{dt} = 0, \\ \frac{d(\gamma^* \rho^* e^* + (1-\gamma^*) \rho^0 e^0)}{dt} = 0, \\ \frac{d(\gamma^* \rho^* Y_i^* + (1-\gamma^*) \rho^0 Y_i^0)}{dt} = \gamma^* S_i^* + (1-\gamma^*) S_i^0. \end{array} \right.$$

$$\text{Обозначив } \bar{\rho} = \gamma^* \rho^* + (1-\gamma^*) \rho^0, \quad \bar{e} = \frac{\gamma^* \rho^* e^* + (1-\gamma^*) \rho^0 e^0}{\bar{\rho}}, \quad \bar{Y}_i = \frac{\gamma^* \rho^* Y_i^* + (1-\gamma^*) \rho^0 Y_i^0}{\bar{\rho}},$$

$\bar{S}_i = \gamma^* S_i^* + (1-\gamma^*) S_i^0$, получим стандартную систему уравнений для описания горения в объеме постоянного сечения (в “бомбе”):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\bar{\rho}}{dt} = 0, \\ \frac{d\bar{\rho} \bar{e}}{dt} = 0, \\ \frac{d\bar{\rho} \bar{Y}_i}{dt} = \bar{S}_i. \end{array} \right. \quad \text{или} \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{d\bar{\rho}}{dt} = 0, \\ \bar{\rho} \frac{d\bar{e}}{dt} = 0, \\ \bar{\rho} \frac{d\bar{Y}_i}{dt} = \bar{S}_i. \end{array} \right.$$

Аналогом этой системы в случае течения газа являются полные уравнения RANS (1.1)–(1.2).

Таким образом, правило осреднения $\bar{a} = \gamma^* a^* + (1-\gamma^*) a^0$ работает только в том случае, когда величина a отнесена к единице объема ($a = \rho; \rho e; \rho Y_i; S_i$).

Среднюю температуру \bar{T} и среднее давление определим как решение уравнений

$$\bar{e} \equiv \sum_i \bar{Y}_i h_i(\bar{T}) - R_0 \bar{T} \sum_i \frac{\bar{Y}_i}{m_i}, \quad \bar{p} = \bar{\rho} R_0 \bar{T} \sum_i \frac{\bar{Y}_i}{m_i}.$$

В расчетах реальных течений мы следим за изменением во времени средних параметров и параметров с индексом “*”. Параметры с индексом “0” можно выразить через эти параметры:

$$\rho^0 = \frac{\bar{\rho} - \gamma^* \rho^*}{1 - \gamma^*}; \quad e^0 = \frac{\bar{\rho} \bar{e} - \gamma^* \rho^* e^*}{\bar{\rho} - \gamma^* \rho^*}; \quad Y_i^0 = \frac{\bar{\rho} \bar{Y}_i - \gamma^* \rho^* Y_i^*}{\bar{\rho} - \gamma^* \rho^*}; \quad h^0 = \frac{\bar{\rho} \bar{h} - \gamma^* \rho^* h^*}{\bar{\rho} - \gamma^* \rho^*}.$$

Обозначим $\frac{\eta}{\tau^*} = \frac{G}{\gamma^* \rho^* V}$, $t \rightarrow t'$. Тогда систему уравнений для реактора “*” (1.48)–(1.49)

совпадет с уравнениями моделей PaSR (1.38):

$$\begin{cases} \frac{d(\gamma^* \rho^* e^*)}{dt'} = -\gamma^* \rho^* \cdot \eta \frac{h^* - h^0}{\tau^*} + \hat{e} \frac{d(\gamma^* \rho^*)}{dt'}, \\ \frac{d(\gamma^* \rho^* Y_i^*)}{dt'} = \gamma^* \rho^* \cdot \left(\frac{S_i^*}{\rho^*} - \eta \frac{Y_i^* - Y_i^0}{\tau^*} \right) + \hat{Y}_i \frac{d(\gamma^* \rho^*)}{dt'}. \end{cases} \quad (1.53)$$

Давление и температура в реакторе “*” удовлетворяют уравнениям

$$e^* = \sum_i Y_i^* h_i(\bar{T}^*) - R_0 \bar{T}^* \sum_i \frac{\bar{Y}_i^*}{m_i}, \quad p^* = \rho^* R_0 T^* \sum_i \frac{Y_i^*}{m_i}. \quad (1.54)$$

Классические модели семейства PaSR (*EDC* Магнуссена [118, 137, 138, 155], PaSR Хомяка [73–75]) получаются, если предположить, что характерные временные масштабы процессов в реакторах и в окружающем газе сильно различаются: $\tau_{хар}^* \ll \tau_{хар}^0$, т.е.

$$\frac{1}{\tau_{хар}^*} \sim \|\bar{S}^* / \rho^*\| \gg \|\bar{S}^0 / \rho^0\| \sim \frac{1}{\tau_{хар}^0}. \quad (1.55)$$

Тогда за то время, пока меняются параметры со звездочкой, параметры с индексом “0” не должны успеть измениться. Наоборот, в каждый момент развития параметров с индексом “0” параметры с индексом “*” находятся в квазиравновесном состоянии ($\frac{da^*}{dt} = 0$). Следовательно, на временных масштабах порядка $\tau_{хар}^0$ состояние в реакторе “*” должно описываться

уравнениями $\gamma^* \rho^* \cdot \eta \frac{h^* - h^0}{\tau^*} = 0$, $\gamma^* \rho^* \cdot \left(\frac{S_i^*}{\rho^*} - \eta \frac{Y_i^* - Y_i^0}{\tau^*} \right) = 0$. Получить это состояние можно

методом установления как предельное стационарное решение системы уравнений (1.53). В этом случае время t' должно трактоваться как фиктивное время процесса установления, отличное от физического времени задачи t (которое входит в систему уравнений для средних величин). Отметим также, что в классических моделях семейства PaSR пренебрегают вовлечением массы

в реакторы, т.е. исключают из (1.53) члены $\hat{e} \frac{d(\gamma^* \rho^*)}{dt'}$ и $\hat{Y}_i \frac{d(\gamma^* \rho^*)}{dt'}$.

Если же принять $t' = t$, т.е. рассматривать явления в тонких структурах и в среднем течении как одновременно протекающие с конечной скоростью процессы, то получим аналог модели UPaSR, разработанной В.А.Сабельниковым и К.Фюрби [154]. Поскольку переноса по пространству нет, то UPaSR совпадает также с EPaSR и GPaSR.

Описанная локальная модельная задача была прежде всего использована для поиска устойчивых алгоритмов решения уравнений моделей класса PaSR. Это не было простым делом. Даже по сравнению с жесткой системой уравнений химической кинетики [32] система из двух взаимодействующих реакторов является менее устойчивой, т.к. описывает протекание процессов в двух жестких системах с разными характерными временами, обменивающимися друг с другом массой и энергией. Одной из причин неустойчивостей метода является одновременное протекание множества процессов с разными математическими свойствами, в т.ч. разными характерными временами. По этой причине было принято решение организовать расщепление по физическим процессам. Вот как оно реализовано в программе (на каждом этапе меняются только указанные параметры, фиксируя при этом остальные):

1. Из уравнений для средних величин по явной схеме находятся $\bar{\rho}^{n+1}, \bar{e}^{n+1}$. (В случае локальной модельной задачи $\bar{\rho}^{n+1} = \bar{\rho}^n, \bar{e}^{n+1} = \bar{e}^n$.)
2. Источниковые члены в уравнениях для тонких структур (1.53) аппроксимируются как полусумма значений на явном и неявном слоях. Система уравнений (1.53) вместе с уравнением состояния решается методом Ньютона. При этом параметры с индексом “0” и значения коэффициентов γ^*, η и τ^* не пересчитываются, а берутся с явного слоя. В результате находятся значения T^*, Y_i^*, ρ^* на новом слое $n+1$.
3. Уравнения для средних концентраций \bar{Y}_i с локально-неявной аппроксимацией источниковых членов решаются методом Ньютона. При этом параметры с индексом “0” выражаются через средние параметры и параметры с индексом “*”. Параметры T^*, Y_i^*, ρ^* на новом слое $n+1$ не пересчитываются.
4. Величины $\bar{T}^{n+1}, \bar{p}^{n+1}$ находятся из уравнений энергии и состояния.

В тестовых расчетах на основе описанного алгоритма использовалась кинетическая схема Моретти для горения водорода в воздухе [151]. Рассматривалась задача, в которой начальное состояние в обоих реакторах было одинаковым ($\bar{p} = p^* = 135742 \text{ Па}, \bar{T} = T^* = 1160 \text{ К}, \alpha = 1$). Рассматривались различные фиксированные значения параметра $\gamma^* \in (0; 1)$.

В ходе расчетов были обнаружены и другие проблемы, приводящие к неустойчивости алгоритма. В частности, было установлено, что взаимодействие реакторов становится неустойчивым, если разрешить протекание химических процессов в реакторе “0”. Рассмотрим для простоты случай классических моделей PaSR (с квазистационарным изменением процесса в

“тонких структурах”). В начальный момент времени $Y^*(H) = Y^0(H) = \bar{Y}(H) = 1.2 \cdot 10^{-8}$. На первом шаге по физическому времени t после достижения сходимости по псевдовремени t' концентрация радикала H в тонких структурах вырастает в 250000 раз, а средние значения остаются неизменными. В результате концентрация радикала H в пространстве, окружающем тонкие структуры, становится отрицательной: $Y^0(H) = \frac{\bar{\rho} \bar{Y}(H) - \rho^* \gamma^* Y^*(H)}{\bar{\rho} - \gamma^* \rho^*} < 0$. Для сохранения физичности приходится искусственно обнулять $Y^0(H)$, но это приводит к нефизичным значениям источников членов S_i^0 , и далее процесс развивается неустойчиво.

Таким образом, если процессы в тонких структурах развиваются быстро, а в окружающем пространстве – медленно, то модель двух взаимодействующих гомогенных реакторов дает нефизичные результаты. Скорее всего, причина – некорректность предположения о том, что состав в окружающем пространстве является однородным, т.е. о том, что окружающее пространство может быть описано моделью гомогенного реактора.

Если же положить $S_i^0 = 0$, то параметры в окружающем пространстве перестают влиять на процесс в среднем по ячейке и на процесс в тонких структурах, и тогда расчет оказывается устойчивым. При этом параметры в окружающем пространстве могут принимать нефизичные значения – могут возникать отрицательные значения концентраций и температуры. К этому результату следует относиться нормально, поскольку “модель двух взаимодействующих реакторов” является лишь условной интерпретацией того, что происходит в турбулентном потоке на самом деле. Для примера на рис. 1.7,а приведены зависимости различных параметров среднего течения от времени для расширенного варианта модели PaSR ($t' = t$) при всех рассмотренных начальных значениях параметра γ^* ; на рис. 1.7,б для этих же случаев приведены зависимости параметров тонких структур от времени, а на рис. 1.7,в – зависимости условных параметров в окружающем пространстве от времени. Естественно, при увеличении γ^* (т.е. при увеличении доли тонких структур) реакция развивается все быстрее. При этом видно, что поведение параметров с индексом “0” (рис. 1.7,в) может быть нефизичным. Тем не менее, развитие параметров в тонких структурах (рис. 1.7,б) и средних параметров по ячейке (рис. 1.7,а) оказывается физически непротиворечивым и устойчивым. Таким образом, при использовании моделей PaSR необходимо трактовать состояние смеси газов в окружающем пространстве (за пределами “тонких структур”) как замороженное.

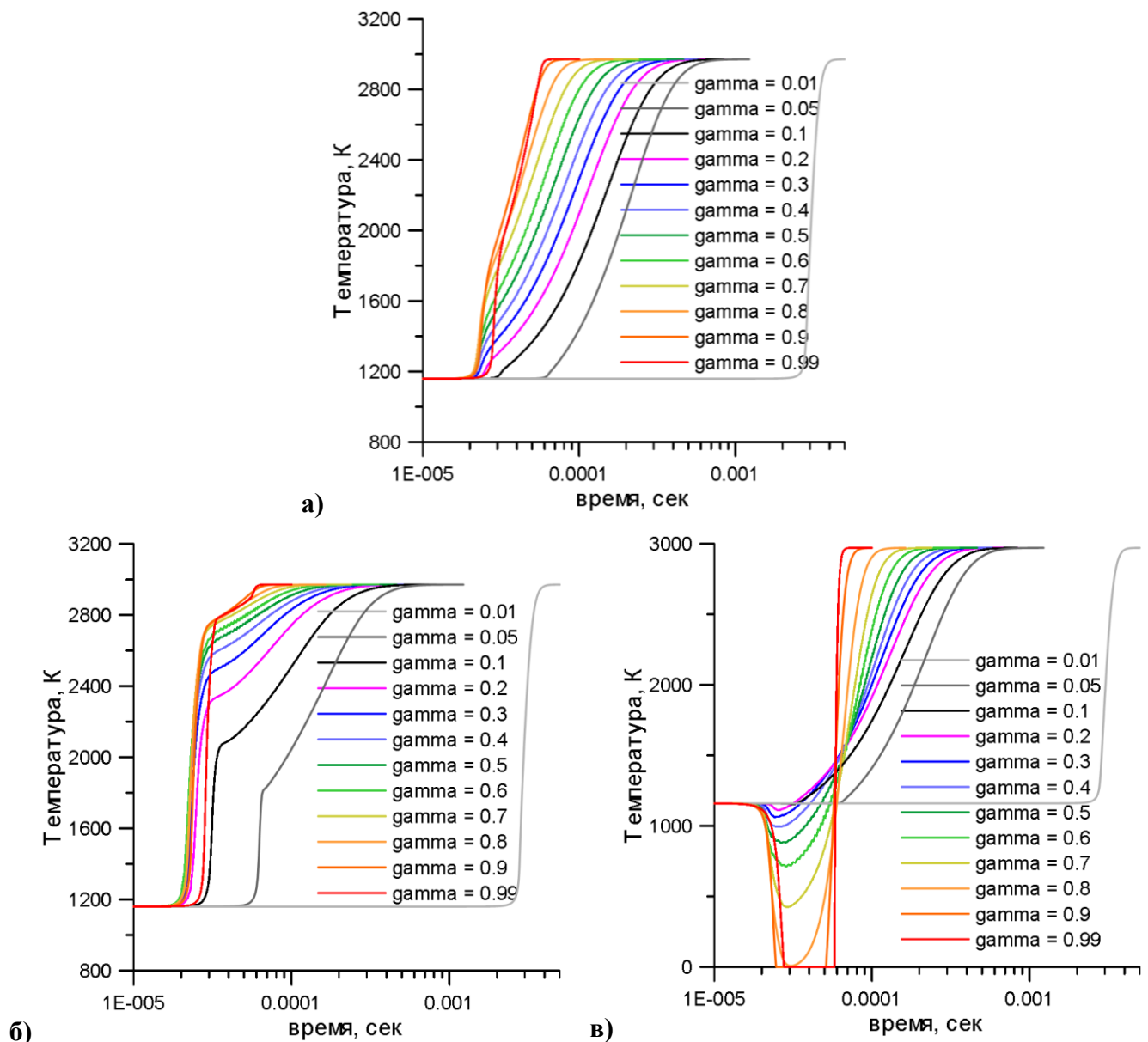


Рисунок 1.7 – Изменение температуры со временем при разных значениях параметра γ^* :

а) средняя температура \bar{T} ; б) тонкие структуры (T^*); в) окружающий газ (T^0)

Типичные зависимости температуры от времени, которые получаются в расчетах при $\gamma^* = 0.3$, показаны на рис. 1.8. Сплошными линиями показаны зависимости $\bar{T}(t)$, пунктиром – $T^*(t)$. На рис. 1.8,а сравниваются результаты, полученные с использованием модели с квазистационарными “тонкими структурами” (EDC, PaSR – красные кривые) и модели с нестационарными “тонкими структурами” (UPaSR, EPaSR, GPaSR – синие кривые) при $p^* = \bar{p}$. На рис. 1.8,б сопоставляются результаты применения двух моделей с нестационарными “тонкими структурами” – модели с $p^* = \bar{p}$ (синие кривые) и модели с $\rho^* = \bar{\rho}$ (красные кривые). Анализ этих рисунков показывает следующее:

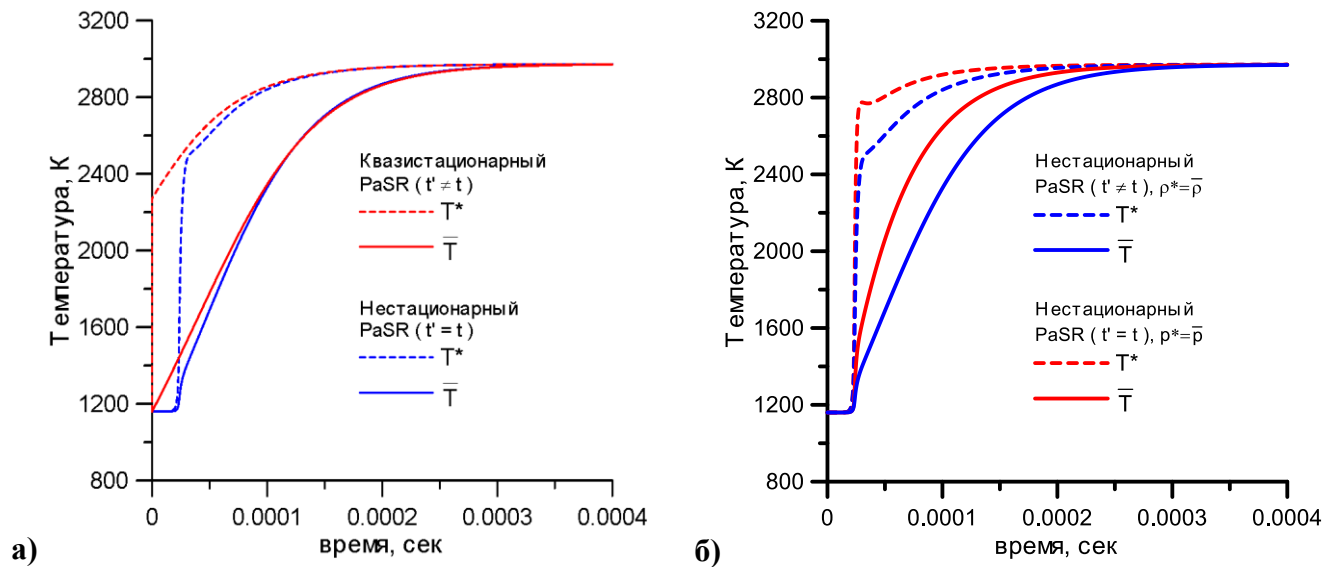


Рисунок 1.8 – Изменение температуры со временем при $\gamma^* = 0.3$:

а) сравнение моделей с квазистационарным поведением “тонких структур” и с общим временем; б) сравнение гипотез $\rho^* = \bar{\rho}$ и $T^* = \bar{T}$ на примере модели с общим временем

1. В конце развития нестационарного процесса параметры в тонких структурах и в среднем по ячейке сравниваются, и во всех вариантах достигается одно и то же конечное состояние.
2. “Нестационарные” варианты отличаются от вариантов с квазистационарным развитием тонких структур главным образом наличием задержки воспламенения в тонких структурах. В остальном в данной локальной задаче квазистационарное приближение дает весьма неплохое описание развития процесса (см. рис. 1.8,а).
3. Предположения о постоянстве давления по ячейке ($p^* = p^0 = \bar{p}$) и о постоянстве плотности по ячейке ($\rho^* = \rho^0 = \bar{\rho}$) приводят к разному развитию процессов в ячейке. При постоянном давлении часть выделяющегося тепла тратится на работу сил давления, поэтому на этапе нестационарного развития процесса температура все время ниже (см. рис. 1.8,б).

В остальных расчетах, которые будут далее описаны в диссертации, использовалось приближение $p^* = p^0 = \bar{p}$, которое лучше соответствует предположению о том, что газ в тонких структурах и газ в окружающем пространстве движутся с одинаковой скоростью, равной средней скорости потока. Если бы давления газа в тонких структурах и в окружающем пространстве не совпадали, то возникли бы дополнительные конвективные потоки между ними, и их нужно было бы учесть в уравнениях для тонких структур.

§1.13. Разработка комбинированного метода

Данная работа направлена на моделирование реальных течений в высокоскоростных камерах сгорания со смешанными режимами горения. Поэтому необходимо, чтобы метод мог быть применен в областях с разными режимами горения и механизмами стабилизации пламени, включая пределы горения предварительно не перемешанной и перемешанной смеси и механизм самовоспламенения, когда применим квазиламинарный подход без учета TCI. Для описания смешанных режимов горения был разработан комбинированный метод. В этом методе некоторый вариант учета TCI используется только для моделирования источниковых членов в уравнениях для активных компонент реагирующего газа в области влияния TCI (\overline{SY}_i^{TCI}). В остальных областях источникивые члены вычисляются по средним параметрам течения по обычным формулам Аррениуса (\overline{SY}_i^{lam}). Окончательные величины источниковых членов вычисляются как линейная комбинация этих двух предельных случаев с коэффициентами, вычисляемыми по соотношению между характерными временами течения:

$$\overline{SY}_i = c_{TCI} \cdot \overline{SY}_i^{TCI} + (1 - c_{TCI}) \cdot \overline{SY}_i^{lam}(\bar{T}, \bar{Y}, \bar{p}). \quad (1.56)$$

Рассмотрено два варианта комбинированного метода, которые различаются способом учета TCI. Первый основан на модели класса flamelet, второй – на модели класса PaSR.

В случае, когда для описания TCI используется модель класса flamelet, \overline{SY}_i^{TCI} и весовой коэффициент c_{TCI} вычисляются следующим образом:

$$\overline{SY}_i^{TCI} = \overline{SY}_i^{pdf}(\bar{z}, \bar{z}^2, \bar{N}^{st}, \bar{p}) = \int_0^1 \underbrace{SY_i(z, \bar{p}, \bar{N}^{st})}_{SY_i(T, \bar{Y} - flamelet)} P(z) dz. \quad (1.57)$$

$$c_{TCI} = \gamma \cdot c_{diff_comb} = \gamma \cdot f(\tau_{хим}, \tau_K, \tau_l) = \gamma \cdot \left(1 - \frac{\lg(\tau_{хим}) - \lg(\tau_K)}{\lg(\tau_l) - \lg(\tau_K)} \right), \quad (1.58)$$

где τ_K – характерный временной масштаб Колмогорова, $\tau_l = 1/\omega$ – макромасштаб турбулентности, $\tau_{хим}$ – характерное время протекания химической реакции, а c_{diff_comb} является индикатором диффузионного режима горения. Для $\tau_{хим}$ нет однозначного выражения. В случае диффузионного горения часто полагают, что $\tau_{хим}$ связано с обратной величиной критического значения скорости скалярной диссипации (при которой пламя потухает):

$$\tau_{хим}^{N^{cr}} = c_{хим}^{N^{cr}} \frac{z_{st}^2 (1 - z_{st}^2)}{N^{cr}}. \quad (1.59)$$

Вообще, по своей природе оно обратно пропорционально скорости некоторой из протекающих химических реакций. В работе предлагается оценить $\tau_{хим}$ как максимум из $\tau_{хим}^{N^{cr}} \sim 1/N_{cr}$ и обратной величины ламинарного источникового члена продукта реакции

$$\tau_{хим}^{source} = \frac{c_{хим}^{source}}{\overline{SY}_{product}^{lam} / (m_{product} \rho)} \quad (1.60)$$

$$\tau_{хим} = \max \left\{ \tau_{хим}^{N^{cr}}; \tau_{хим}^{source} \right\}. \quad (1.61)$$

Однако требуется тщательный анализ для нахождения более точной оценки $\tau_{хим}$.

Как и в "классическом" ФПВ–flamelet подходе, составляются flamelet библиотеки источниковых членов $SY_i^{flamelet}(z, \overline{N}^{st}, \overline{p})$. В итоговые библиотеки записываются значения интегралов \overline{SY}_i^{pdf} , полученные при осреднении $SY_i^{flamelet}(z, \overline{N}^{st}, \overline{p})$ с помощью ФПВ переменной смещения z по формуле:

$$\overline{SY}_i^{pdf}(\overline{z}, \overline{z'^2}, \overline{N}^{st}, \overline{p}) = \int_0^1 \underbrace{SY_i(z, \overline{p}, \overline{N}^{st})}_{SY_i(T, \overline{Y}-flamelet)} \cdot P(z, \overline{z}, \overline{z'^2}) dz. \quad (1.62)$$

Флуктуациями скалярной диссипации при осреднении с ФПВ пренебрегается: $\overline{N}^{st}(z) = const$. Таким образом, библиотека параметризована относительно величин $\overline{z}, \overline{z'^2}, \overline{N}^{st}, \overline{p}$. Расчеты показали, что в (1.58) можно положить параметр перемежаемости $\gamma = 1$, т.к. зоны диффузионного горения в рассмотренных задачах оказались преимущественно турбулентными ($\gamma = 1$). Таким образом, вычисление перемежаемости γ в комбинированном подходе можно опустить. Заметим, что это упрощение не работает при использовании подхода "классический ФПВ–flamelet", когда все поле течения описывается при помощи флеймлетов. Приведем алгоритм реализации в программе комбинированного метода, основанного на модели ФПВ–flamelet (рис. 1.9):

0. Предварительный этап: построение библиотеки flamelet–ФПВ

1. Из основных уравнений находим: $\overline{\rho}, \overline{u}, \overline{v}, \overline{w}, \overline{e}$
2. Локально–неявная схема для параметров турбулентности и дополнительных переменных для нахождения ФПВ: $\overline{q}, \overline{\omega}, \overline{z}, (\overline{z'})^2$
3. Определение \overline{SY}_i^{TCI} из библиотеки flamelet–ФПВ: $\overline{SY}_i^{TCI}(\overline{z}, \overline{z'^2}, \overline{N}^{st}, \overline{p})$, где $N^{st} = D(\nabla z)^2|_{st}$
4. Вычисление \overline{Y}_i из уравнений для компонент смеси с использованием средних источниковых членов $\overline{SY}_i = c_{TCI} \cdot \overline{SY}_i^{TCI} + (1 - c_{TCI}) \cdot \overline{SY}_i^{lam}$
5. Замыкание: из уравнений энергии и состояния вычисляем $\overline{T}, \overline{p}$

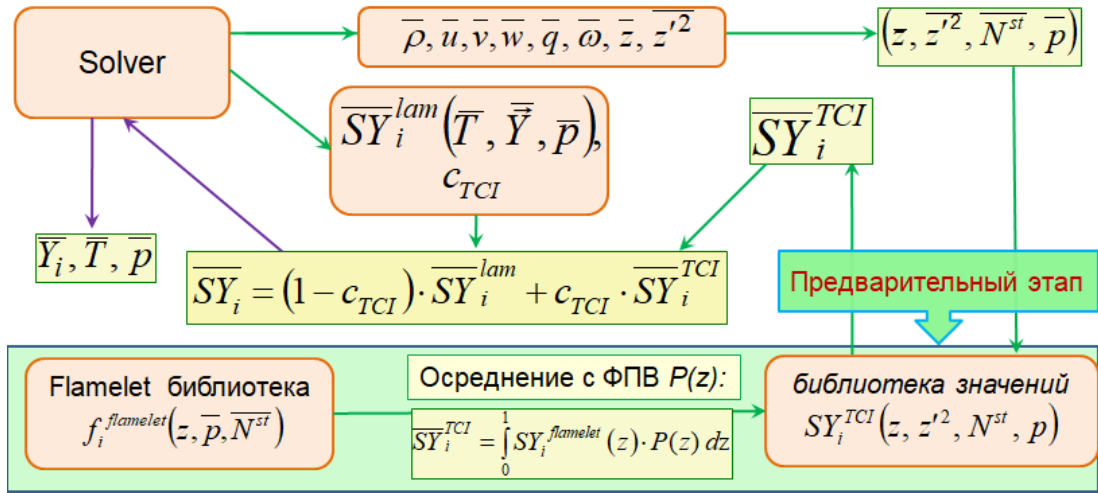


Рисунок 1.9 – Блок–схема алгоритма комбинированного метода с моделью ФПВ–flamelet

Однако комбинированный метод оказался неприменим в постановке, когда источниковые члены (\overline{SY}_i^{pdf}) вычисляются при использовании стационарной flamelet библиотеки. В этом случае в области диффузионного горения в месте воспламенения, получается слишком малая величина источникового члена $\overline{SY}_{H_2O}^{pdf}$ (H_2O является продуктом реакции). Как результат, пламя не устанавливается. Причиной этому является то, что в стационарной библиотеке flamelet источниковый член берется в пределе $t \rightarrow \infty$, когда изменений практически больше не происходит, и поэтому источник мал. При таком подходе огромные величины источниковых членов, возникающие в момент загорания, не принимаются во внимание. Таким образом, для того чтобы сделать метод применимым к течениям, в которых нестационарные эффекты играют существенную роль, необходимо добавить учет переходных процессов.

Для описания нестационарных процессов в рамках подхода flamelet существуют разные модели. Среди них модель переходных флеймлетов (Transient Laminar Flamelet Model, TLFM) разработанная Ferreira [104] и цитируемая в [163]. В этой модели параметры обычной библиотеки флеймлетов дополнены еще двумя временными параметрами. В [163] разработан иной нестационарный подход – Flame Age Model, (FAM) – который требует добавления еще только одного параметра к параметрам обычной библиотеки флеймлетов – время пламени (τ_F). Однако эти модели разработаны для LES, и расширение на случай RANS не так очевидно.

В настоящей работе используется другой подход, основанный на работе [168]. Для учета нестационарных эффектов используется библиотека, основанная на полном нестационарном решении уравнений flamelet – $f(z, p, N^s, t)$. В качестве начальных условий для получения этого решения используется линейное распределение f , основанное на гипотезе “черно–белого

смешения”: $f(z, p, N^s, 0) = z \cdot f^F + (1 - z) \cdot f^O$. Вместо формул (1.21) или (1.28) используется следующее выражение:

$$\bar{f}\left(\bar{z}, \bar{z}'^2, N^{st}, \bar{p}, \bar{c}\right) = \int_0^1 \int_0^1 \underbrace{f_i^{flamelet}\left(z, \bar{p}, N_i^s, t(c)\right)}_{f(T, \bar{Y}-flamelet)} \cdot \underbrace{P(z)P(c)}_{\bar{P}(z, c)} dcdz. \quad (1.63)$$

Здесь в качестве f может быть использована любая функция, вычисляемая из библиотеки флеймлетов: $f = SY_i^{pdf}$ или $f = Y_i$; $t(c)$ – момент времени, когда в нестационарном решении уравнений (1.16) достигается заданное значение параметра полноты протекания реакции c . В работе [168] величины z и c предполагаются статистически независимыми: $P(z, c) = P(z) \cdot P(c)$. В качестве $P(c)$ в [168] используется бета-функция, основанная на заданных значениях \bar{c} и \bar{c}'^2 . Для нахождения этих величин решаются дополнительные уравнения в частных производных. Однако, в [168] не решаются дифференциальные уравнения для средних по времени концентраций компонент смеси – \bar{Y}_i . Напротив, в настоящей работе такие уравнения решаются; при этом массовая доля воды Y_{H_2O} неплохо характеризует полноту протекания реакции (в частности, она монотонно увеличивается по мере протекания реакции). В настоящей работе для простоты берется $P(c) = \delta(c - \bar{Y}_{H_2O})$. Таким образом, момент времени $t(c)$ подбирается таким образом, чтобы эта формула дала значение \bar{Y}_{H_2O} , совпадающее с локальным решением дифференциального уравнения в частных производных для \bar{Y}_{H_2O} .

При создании библиотеки флеймлетов в компьютерную память записываются значения интегралов $\int_0^1 f_i^{flamelet}\left(z, \bar{p}, N^{st}, t(c)\right)_{c=\bar{Y}_{H_2O}} P(z) dz$ для каждого набора параметров \bar{p} , \bar{N}^{st} , \bar{Y}_{H_2O} , \bar{z} и \bar{z}'^2 . Нестационарная модель привела увеличению диффузионного источникового члена H_2O $SY_{H_2O}^{pdf}$ в области воспламенения, так что пламя стабилизировалось. Алгоритм построения нестационарной библиотеки приводится в Приложении А.3.

Второй вариант комбинированного метода основан на применении модели класса

PaSR для оценки \bar{SY}_i^{TCI} . В этом случае

$$\bar{SY}_i^{TCI} = \gamma^* \cdot \bar{SY}_i^*(T^*, \bar{Y}^*), \quad c_{TCI} = f(t_{xum}, \tau^*) = \sin\left(\frac{\pi}{2} \lg\left(\frac{\tau^*}{t_{xum}}\right)\right), \quad (1.64)$$

где для τ_{xum} и τ^* используются выражения из §1.12.

§1.14. Проблема “динамического равновесия”

Дополнительным результатом работы является исследование проблемы “динамического равновесия”, которая возникает при расчете равновесного состава методом установления. Равновесное состояние реагирующей смеси идеальных газов используется в некоторых вариантах моделей flamelet; к равновесному состоянию в процессе развития стремится решение уравнений модели PaSR; это состояние является предельным состоянием развития реагирующих течений в камерах сгорания. В Приложении Б описана попытка получить в расчете равновесное состояние реагирующей смеси идеальных газов, используя численные методы, аналогичные тем, что применяются при моделировании течений реагирующего газа.

Как и в §1.5, будем представлять j -ю химическую реакцию в виде:

$$\sum_k \nu_{kj}^f X_k \rightleftharpoons \sum_k \nu_{kj}^b X_k . \quad (1.65)$$

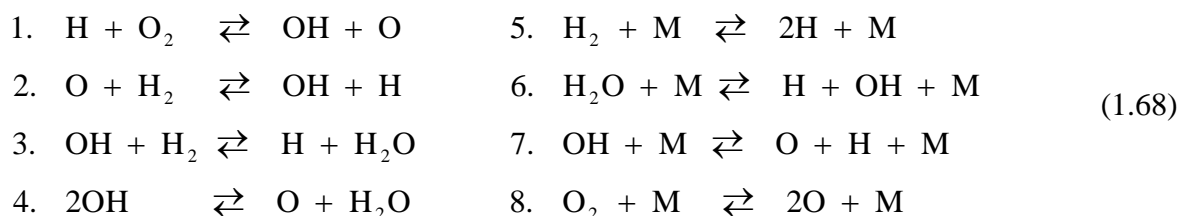
С физической точки зрения, развитие процесса горения завершается при достижении химического равновесия, когда полные скорости всех реакций обращаются в нуль:

$$W_j \equiv W_j^f - W_j^b = 0, \quad j = 1, \dots, N_r . \quad (1.66)$$

где скорости прямой и обратной реакции выражаются формулами (1.4) из §1.5. Однако в расчете процесс заканчивается, когда обращаются в нуль источники членов в уравнениях для компонент смеси, т.е. когда выполняется условие

$$S_k = -m_i \sum_{j=1}^{N_{react}} \Delta \nu_{kj} (W_j^f - W_j^b) = 0, \quad k = 1, \dots, N_{comp}, \quad (1.67)$$

где $\Delta \nu_{kj} = \nu_{kj}^f - \nu_{kj}^b$. В Приложении Б показано, что выполнение условия (1.67) не гарантирует выполнения условия истинного химического равновесия (1.66). При использовании моделей химической кинетики в расчете можно получить нефизичное стационарное состояние, которое было названо “**динамическим**” равновесием. Это связано с тем, что моделях кинетики есть зависимые реакции, уравнения которых являются линейной комбинацией уравнений других реакций. Рассмотрим, например, модель кинетики горения водорода, описанную в работе [151]:



В этой системе реакций четыре реакции являются *независимыми* (например, 1-я, 2-я, 4-я и 6-я), а остальные – *зависимыми* (например, 3-ю реакцию можно рассматривать как последовательную комбинацию актов 2-й и 4-й реакций). При “динамическом” равновесии

возникают кольцевые цепочки реакций, в которых полные скорости отдельных реакций $W_j \equiv W_j^f - W_j^b \neq 0$, но состав смеси не меняется. Например, это возможно, если W_2 , W_3 и W_4 не равны нулю, но $W_2 = W_4 = -W_3$.

“Динамическое” равновесие противоречит нередко применяемому в физике и химии *принципу детального равновесия* [35, 50], согласно которому в состоянии термодинамического равновесия каждый из протекающих в системе индивидуальных процессов также должен прийти в равновесие. К сожалению, этот принцип не является строго обоснованным. Он основан на том, что термодинамическое равновесие является состоянием максимального хаоса в системе. А в состоянии хаоса упорядоченные круговые цепочки процессов являются маловероятными [35].

Однако данное вероятностное рассуждение не является вполне удовлетворительным. Ведь скорости химических реакций связаны с вероятностями реализации актов реакций. Если при заданных параметрах найден состав смеси, в котором скорости реакций пришли в состояние баланса, то это значит, что сбалансированы и вероятности протекания соответствующих процессов и, следовательно, вероятность реализации такого “динамического” равновесия вполне конечна.

Но в физической химии существует более весомый аргумент против “динамического” равновесия. Это *принцип независимости протекания реакций* [25], согласно которому каждая индивидуальная реакция в системе протекает так, словно других реакций в системе нет. Поэтому константы скоростей $K_j^{f,b}(T)$ (см. §1.5) не должны измениться, если мы рассмотрим закрытую систему, в которой протекает только одна индивидуальная реакция вида (1.66). Но если реакция только одна, то “динамическое” равновесие не возникнет. А вот классическое равновесие рано или поздно обязательно осуществится*. Когда это произойдет, мы получим стационарное состояние с постоянными параметрами. Из условия (1.66) получим, что состав

* В самом деле, если, например, скорость прямой реакции $W^f = K^f \rho^{n^f} \cdot \prod_{k=1}^{N_{sp}} \left(\frac{Y_k}{m_k} \right)^{\nu_k^f}$ больше скорости обратной реакции $W^b = K^b \rho^{n^b} \cdot \prod_{k=1}^{N_{sp}} \left(\frac{Y_k}{m_k} \right)^{\nu_k^b}$, то из уравнения $\rho \frac{dY_k}{dt} = -m_k \Delta \nu_k (W^f - W^b)$ следует, что концентрации исходных веществ будут убывать (для них $\Delta \nu_k > 0$), а концентрации продуктов реакции – увеличиваться ($\Delta \nu_k < 0$). В результате W^f будет уменьшаться, а W^b – расти. Рано или поздно будет достигнуто состояние, когда $W^f = W^b$ и $\frac{dY_k}{dt} = 0$. Это стационарное состояние будет устойчивым, т.к. случайные отклонения от этого состояния вызовут соотношения между W^f и W^b , которые будут возвращать систему к этому состоянию.

газа в этом стационарном состоянии должен удовлетворять соотношению, которое называется “законом действующих масс”:

$$\left(\frac{\rho^{n^f} \cdot \prod_{k=1}^{N_{sp}} \left(\frac{Y_k}{m_k} \right)^{\nu_k^f}}{\rho^{n^b} \cdot \prod_{k=1}^{N_{sp}} \left(\frac{Y_k}{m_k} \right)^{\nu_k^b}} \right)_{равн} = \frac{K^f(T)}{K^b(T)}. \quad (1.69)$$

Естественно, при протекании одной реакции в замкнутой системе стационарное состояние будет и термодинамически равновесным. Условие термодинамического равновесия смеси идеальных газов можно записать в виде $\sum_{k=1}^{N_{sp}} \mu_k dY_k = 0$, где $\mu_k(T)$ – химический потенциал k -й компоненты [48, 167]. Если учесть, что при протекании реакции вида (1) $dY_k \sim -\Delta \nu_k m_k$, то путем некоторых преобразований можно привести условие термодинамического равновесия к следующему виду:

$$\left(\frac{\rho^{n^f} \cdot \prod_{k=1}^{N_{sp}} \left(\frac{Y_k}{m_k} \right)^{\nu_k^f}}{\rho^{n^b} \cdot \prod_{k=1}^{N_{sp}} \left(\frac{Y_k}{m_k} \right)^{\nu_k^b}} \right)_{равн} = K^{eq}(T) \equiv \exp \left\{ \frac{\sum_{k=1}^{N_{sp}} G_k^*(T) \Delta \nu_k}{R_0 T} \right\} \cdot \left(\frac{R_0 T}{p_*} \right)^{\Delta n}, \quad (1.70)$$

где T – температура, p – давление, R_0 – универсальная газовая постоянная, $\Delta n = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \Delta \nu_k$, а

$$G_k^*(T) = h_k(T) - T \cdot \left[s_k(T_*, p_*) + \int_{T_*}^T c_{p_k}(T) \frac{dT}{T} \right] - \text{потенциал Гиббса одного моля } k\text{-го компонента}$$

при стандартном давлении p_* (h_k – энтальпия, s_k – энтропия, c_{p_k} – удельная теплоемкость при постоянном давлении для одного моля k -го вещества). Поскольку для одной реакции в замкнутой системе стационарное состояние должно удовлетворять и условию (1.69), и условию (6), получим, что константы скоростей прямой и обратной реакций должны удовлетворять соотношению

$$\frac{K^f(T)}{K^b(T)} = K^{eq}(T), \quad (1.71)$$

где константа равновесия выражается через потенциалы Гиббса по формуле (1.70). Но в силу принципа независимости протекания реакций, константы скоростей реакций в случае протекания многих различных реакций будут такими же, как и при протекании единственной реакции. Поэтому их отношение всегда будет равно $K^{eq}(T)$ и, следовательно, даже при

протекании многих различных реакций классическое химическое равновесие является термодинамически равновесным состоянием газа.

В работе [167] на основе математического анализа термодинамических свойств системы строго доказано, что в закрытой системе (не обменивающейся массой с окружающей средой) при $p, T = \text{const}$ термодинамически равновесное состояние единственно. Но тогда оно совпадает с классическим химическим равновесием. Таким образом, мы доказали, что, по крайней мере, при $p, T = \text{const}$ “динамическое равновесие” физически невозможно.

Но не может ли “динамическое” равновесие достигаться в течениях газа, где условия $p, T = \text{const}$ не выполняются и где из-за молекулярной диффузии массы система не может считаться закрытой? Ведь для таких случаев доказательство единственности равновесия отсутствует. Докажем, что “динамическое” равновесие математически невозможно всегда.

Воспользуемся тем, что константы скоростей прямых и обратных реакций удовлетворяют соотношению (1.71). Предположим, что в рассматриваемой кинетической схеме есть зависимые реакции. А именно, пусть уравнения реакций с номерами 1, 2, ..., m при алгебраическом сложении дают уравнение реакции с номером $m+1$. Представим уравнение

реакции 1 в виде $\sum_{k=1}^{N_{sp}} X_k \Delta \nu_{k,1} = 0$, уравнение реакции 2 – в виде $\sum_{k=1}^{N_{sp}} X_k \Delta \nu_{k,2} = 0$, ..., уравнение

реакции $m+1$ – в виде $\sum_{k=1}^{N_{sp}} X_k \Delta \nu_{k,m+1} = 0$. Т.к. $\{m+1\} = \{1\} + \dots + \{m\}$, то для любого k

($k = 1, \dots, N_{sp}$) $\sum_{s=1}^m \Delta \nu_{k,s} = \Delta \nu_{k,m+1}$. Тогда из (1.70) и (1.71) следует, что

$$\begin{aligned} \prod_{s=1}^m K_s^{eq} &= \prod_{s=1}^m \left(\frac{R_0 T}{p^*} \right)^{\sum_{k=1}^{N_{sp}} \Delta \nu_{k,s}} \exp \left\{ (R_0 T)^{-1} \cdot \sum_{k=1}^{N_{sp}} G_k^*(T) \Delta \nu_{k,s} \right\} = \\ &= \left(\frac{R_0 T}{p^*} \right)^{\sum_{k=1}^{N_{sp}} \Delta \nu_{k,m+1}} \exp \left\{ (R_0 T)^{-1} \cdot \sum_{k=1}^{N_{sp}} G_k^*(T) \Delta \nu_{k,m+1} \right\} = K_{m+1}^{eq}. \end{aligned}$$

Таким образом, константа равновесия зависимой реакции равна произведению констант равновесия независимых реакций. Поэтому, например, для системы реакций (4) справедливы соотношения:

$$\begin{aligned} K_3^{eq} &= K_2^{eq} \cdot K_4^{eq}, & K_7^{eq} &= K_4^{eq} \cdot K_6^{eq} \\ K_5^{eq} &= K_2^{eq} \cdot K_4^{eq} \cdot K_6^{eq}, & K_8^{eq} &= K_1^{eq} \cdot K_4^{eq} \cdot K_6^{eq}. \end{aligned} \quad (1.72)$$

Покажем, что выполнение условий типа (1.72) гарантирует, что система уравнений (3) имеет единственное решение, для которого выполняются условия классического химического равновесия (1.66).

Рассмотрим для простоты модельную систему реакций, которая может образовать замкнутую кольцевую цепочку (рис. 1.10).

“Динамическое” равновесие реализуется, если скорости этих реакций удовлетворяют условию $W_1 = W_2 = -W_3 = \omega \neq 0$. Распишем это условие:

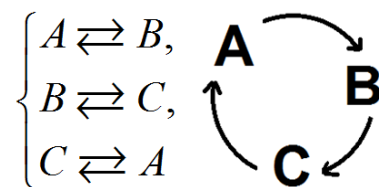


Рисунок 1.10 – Модельная кольцевая цепочка реакций

$$\begin{aligned} W_1 &= W_1^f \left(1 - \frac{\gamma_B}{K_1^{eq} \gamma_A} \right) = \omega, \\ W_2 &= W_2^f \left(1 - \frac{\gamma_C}{K_2^{eq} \gamma_B} \right) = \omega, \\ W_3 &= W_3^f \left(1 - \frac{\gamma_A}{K_3^{eq} \gamma_C} \right) = -\omega. \end{aligned} \quad (1.73)$$

Выразим из (1.73) константы равновесия и потребуем, чтобы для зависимой реакции 3 выполнялось соотношение $K_3^{eq} = K_1^{eq} K_2^{eq}$. Получим

$$1 + \frac{\omega}{W_3^f} = \left(1 - \frac{\omega}{W_1^f} \right) \left(1 - \frac{\omega}{W_2^f} \right). \quad (1.74)$$

Но из (1.73) следует, что и левая, и правая части равенства (1.74) положительны. Легко убедиться, что при любом знаке параметра ω одна из этих частей больше 1, а другая – меньше 1. Значит, (1.74) выполняется лишь при $\omega = 0$, т.е. когда мы имеем классическое, а не “динамическое” равновесие.

В Приложении Б дано доказательство неосуществимости “динамического” равновесия при выполнении условий (1.72) для системы реакций (1.68). Из этих доказательств следует, что при выполнении условий типа (1.72) “динамическое” равновесие не может возникнуть не только в случае $p, T = const$, но вообще никогда. В практических расчетах “динамическое” равновесие возникает из-за того, что для констант скоростей прямых и обратных реакций используются аппроксимации, которые не гарантируют выполнение условий типа (1.72).

Для получения истинного равновесия предложено модифицировать скорости зависимых реакций так, чтобы константы их равновесия выражались через константы равновесия независимых реакций. Например, константу скорости обратной 3-й реакции можно вычислять по формуле

$$K_3^b = K_3^f \frac{K_2^b \cdot K_4^b}{K_2^f \cdot K_4^f}.$$

В этом случае “динамическое” равновесие в расчете не возникает, и в пределе достигается классическое равновесное состояние.

Выводы к Главе 1

- 1.1. Предложено обобщение численного метода решения нестационарных уравнений Рейнольдса для многокомпонентного газа с неравновесными химическими реакциями на случай трехмерных течений. Предложены устойчивые алгоритмы численной реализации различных моделей для учета взаимодействия турбулентности с горением (TCI). Разработанный метод реализован в программных модулях *ZEUS-S3pp* и *zFlare* в рамках пакета прикладных программ *EWT-ЦАГИ*. Предложен комбинированный метод учета TCI, позволяющий рассчитывать смешанные режимы турбулентного горения без переключения численного алгоритма.
- 1.2. Предложена простая физическая интерпретация моделей TCI класса PaSR как системы из двух взаимодействующих гомогенных реакторов. При помощи этой интерпретации дано обоснование уравнений модели и предложены устойчивые численные алгоритмы ее реализации. Показано, что для обеспечения устойчивости решения необходимо считать, что в пространстве, окружающем “тонкие структуры”, химических реакций нет.
- 1.3. Обнаружена возможность появления в расчетах т.н. “динамического” равновесия, при котором в стационарном состоянии системы идут с конечными скоростями кольцевые цепочки химических реакций. Доказано, что это состояние является нефизичным. Найден способ предотвращения получения “динамического” равновесия. Доказано, что при использовании этого способа стационарное состояние системы единственно и соответствует истинному термодинамическому равновесному состоянию системы.

ГЛАВА 2. ТЕСТОВЫЕ РАСЧЕТЫ И МОДЕЛИРОВАНИЕ СВЕРХЗВУКОВЫХ ТУРБУЛЕНТНЫХ СТРУЙ С ГОРЕНИЕМ

Численный метод для расчета трехмерных течений на базе уравнений Рейнольдса для многокомпонентного неравновесно реагирующего газа, описанный в Главе I, был реализован в программах *ZEUS-S3pp* (далее для краткости называемой *S3pp*) и *zFlare*. Программа *S3pp* [42] была разработана автором на основе научного солвера *ZEUS* [29, 31], разработанного С.В. Михайловым и входящего в пакет прикладных программ *EWT-ЦАГИ* [7, 8]. Солвер *ZEUS* позволяет решать трехмерные уравнения Рейнольдса для однокомпонентного газа (воздуха). Программа *zFlare* разрабатывается С.С. Молевым с участием автора настоящей диссертации с учетом новых возможностей, введенных в солвер *ZEUS* за последние годы (новые модели турбулентности, новые методы реализации нестационарных вычислений, потенциал проведения расчетов на базе метода LES с использованием численных схем высокого разрешения). В программу *zFlare* перенесены все существенные возможности программы *ZEUS-S3pp*. Для демонстрации пригодности этих программ к описанию трехмерных турбулентных течений вязкого многокомпонентного газа был решен ряд тестовых задач с их использованием – как без горения, так и с горением. На этом этапе модели взаимодействия турбулентности с горением не использовались.

В работе автора [42] рассмотрены четыре тестовые задачи без горения из области внешней аэродинамики, которые входят в набор стандартных тестов для комплекса программ *EWT-ЦАГИ* [7, 8] – 1) пограничный слой на пластине; 2) круглая осесимметричная струя; 3) профиль NACA0012; 3) крыло ONERA M6. Производилось сопоставление с программой *ZEUS* и с доступными экспериментальными данными. В следующих двух тестах из [42] (задача об одномерном сверхзвуковом горении и задача о наклонной детонации) рассмотрены течения с горением водорода в воздухе, и результаты расчетов сравниваются с данными, полученными при помощи программы для расчетов двумерных течений с горением *SOLVER3* [12]. Наконец, было выполнено численное моделирование трехмерной тестовой задачи с горением поперечной струи топлива, выдуваемой в сверхзвуковой поток воздуха. Кроме *S3pp* и *zFlare*, ни одна из программ комплекса *EWT-ЦАГИ* не позволяет провести расчет такой задачи, поэтому сопоставление проводится с экспериментальными данными и с результатами расчетов других авторов.

Эти тесты дополнены результатами моделирования эксперимента A.D. Cutler et al. [76, 82, 85] с осесимметричными коаксиальными струями без горения. Из всех перечисленных тестов в этой главе описан только последний, потому что его геометрия близка к геометрии течений с турбулентным горением, которые будут рассмотрены далее.

§2.1. Моделирование эксперимента A.D. Cutler et al.

В эксперименте [82, 85] центральная круглая осесимметричная струя холодного гелия выдувалась в спутный поток воздуха (общий вид установки – рис. 2.1). Оба сопла были смоделированы на число Маха 1.8, но за счет разницы в молекулярном весе вытекающих газов скорости газов на срезе сопел отличались более чем в два раза. Конвективное число Маха составляло 0.7, что указывает на значительное влияние эффектов сжимаемости турбулентности на смешение газов.

Этот эксперимент имеет непосредственное отношение к задачам горения в сверхзвуковом потоке и был выбран из-за высокой точности измерений и большого количества экспериментальных данных. Кроме того, целью эксперимента было создание тестового случая для валидации программ вычислительной аэродинамики: было опубликовано детальное описание установки и предоставлен полный набор данных, включая геометрию сопел и результаты измерений в виде файлов данных.

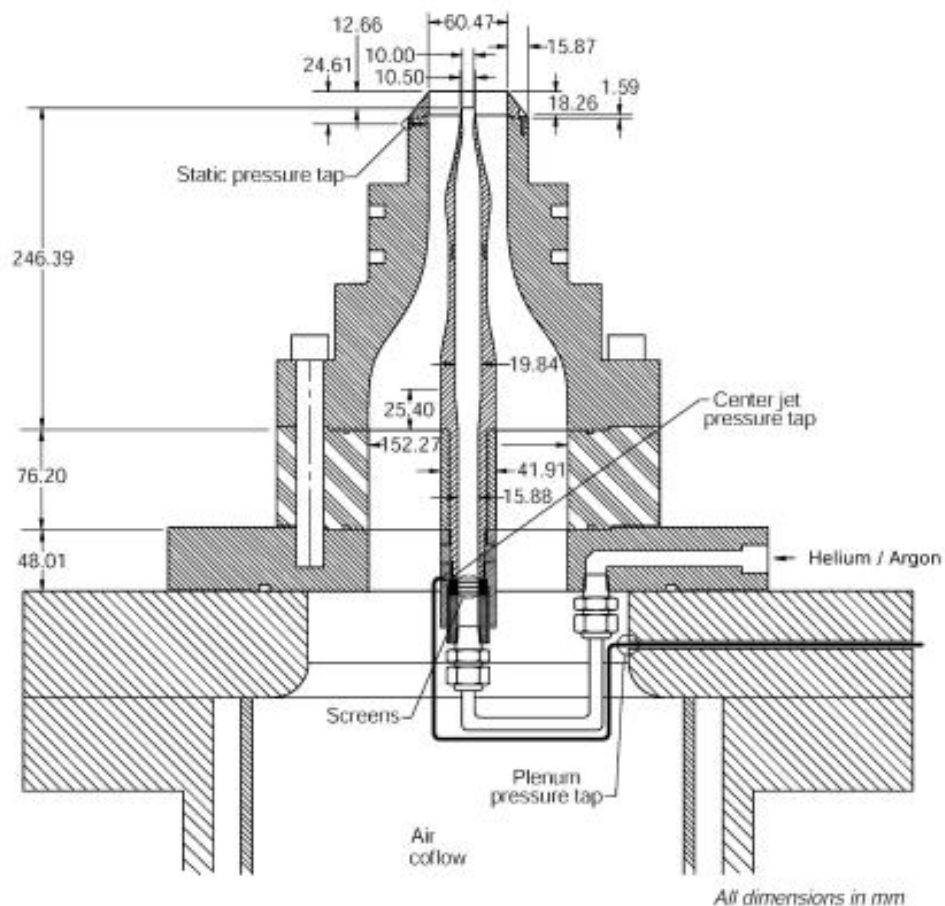


Рисунок 2.1 – Эксперименты A.D. Cutler et al. . [76, 82, 85].

Экспериментальная установка с осесимметричными соосными соплами

Также было проведено численное моделирование второй серии экспериментов A. D. Cutler et al. [76], проводимых на той же установке, с выдувом аргона из центрального

сопла. Режимы течения, моделировавшиеся в расчетах, представлены в Табл. 2.1–2.2. Частота турбулентных пульсаций относится к SST модели турбулентности.

Таблица 2.1 Параметры режима течения 1 из [82, 85]

Параметры	Центральная струя	Внешняя струя	Окружающее пространство
Состав	He–O ₂	Чистый воздух	Чистый воздух
Полная температура T , К	305.0	300.0	294.6
Полное давление p , Па	614.93	579.8	101.325
Кинетич. энергия турб. k , м ² /с ²	9	9	0.4
Частота турб. пульсаций ω , Гц	3000	3000	550

Таблица 2.2 – Параметры режима течения 2 из [76]

Параметры	Центральная струя	Внешняя струя	Окружающее пространство
Состав	Ar	Чистый воздух	Чистый воздух
Полная температура T , К	297.9	294.3	294.6
Полное давление p , кПа	615.86	580.68	101.325
Кинетич. энергия турб. k , м ² /с ²	9	9	0.4
Частота турб. пульсаций ω , Гц	3000	3000	550

В экспериментах производились замеры давления Пито¹ p_t с точностью 0.5%; измерения мольной доли He–O₂ (переводимой в массовую долю) с использованием пленочного термоанемометра, обеспечивающего точность не хуже 1.5% и замеры продольной компоненты скорости и ее среднеквадратичного отклонения с помощью метода RELIEF с допустимой ошибкой не более 3%.

Замеры делались в 14 поперечных сечениях струи в области не далее 7.5 диаметров внешнего сопла $D_{out} = 60.47$ мм от среза сопла. Эта область полностью включает в себя начальный участок внутренней струи, но не внешней струи (последний заканчивается значительно ниже по течению). Результаты расчетов сопоставляются с экспериментальными данными (p_t , Y_{He-O_2} , U) и расчетами других авторов [54].

¹ Давлением Пито для краткости будем называть давление, измеренное в потоке с помощью насадка Пито. В дозвуковом течении датчик в насадке Пито измерит давление торможения потока p_0 , а в сверхзвуковом – полное давление за прямым скачком уплотнения. В настоящей работе обозначается p_t . Для расчета применяются формулы:

$$p_t = p \cdot \left(1 + 0.5 \cdot (\kappa - 1) M^2\right)^{\frac{\kappa}{\kappa - 1}} \text{ при } M < 1 \text{ и } p_t = p \cdot \left(\frac{(0.5 \cdot (\kappa + 1))^{\kappa + 1} \cdot M^{2\kappa}}{\kappa M^2 - 0.5 \cdot (\kappa - 1)}\right)^{1/(\kappa - 1)} \text{ при } M > 1.$$

Стационарное течение в расчетах было получено методом установления. Для ускорения расчетов применялась технология локального шага по времени. Стационарные поля были получены на всех рассмотренных сетках. В расчетах сравнивались две модели турбулентности – SST и $q-\omega$. Первая из них является широко применяемой в задачах аэродинамики, в то время как вторая настроена прежде всего для описания пограничных слоев в высокоскоростном потоке.

Для получения корректных профилей на срезе сопел, течение моделировалось в подводящих каналах и соплах (см. рис. 2.2). В силу осевой симметрии течения, рассмотрен сектор в 6° , содержащий одну ячейку в направлении z , а расчетная область простирается в длину на $25 D$, включая область подробной сетки до $x/D \sim 8$, в радиальном направлении до $r/D \sim 6$ с подробной сеткой в области струи и внешнего слоя смешения. Была рассмотрена система вложенных сеток и получена сходимость по сетке.

Один из вопросов, исследовавшихся в расчетах – о влиянии граничных условий на стенках и пограничных слоев. Во внешнем сопле из эксперимента известно о турбулентном ПС, поэтому были рассмотрены варианты с заданием там на стенках граничного условия “прилипание” и “закон стенки” (см. Табл. 2.3). Первое требует сетки, разрешающей основные элементы пристенной части турбулентного пограничного слоя – вязкий подслой и буферную область, тогда как второе является приближенным и основано на заданном профиле скорости и других параметров в пограничном слое. Таким образом, рассматривалось два варианта сетки во внешнем сопле: 1) для “закона стенки” с минимальным расстоянием до стенки в первой ячейке, равным $y_w = 5 \cdot 10^{-6}$ м на самой подробной сетке; 2) для точного разрешения вязкого подслоя с $y_w = 5 \cdot 10^{-8}$ м на самой подробной сетке.

Во внутреннем сопле в эксперименте наблюдался ламинарный ПС, поэтому источники члены турбулентности были отключены во всем сопле. Расстояние до стенки на самой подробной сетке составляло $y_w = 10^{-6}$ м. В зависимости от граничного условия около стенки реализовывался ламинарный ПС или скольжение потока.

Размерности рассмотренной системы вложенных сеток для ГУ “закон стенки” во внешнем сопле – mesh00_{wl} , mesh0_{wl} , mesh1_{wl} и mesh2_{wl} – составляли $1.4 \cdot 10^6$, $3.5 \cdot 10^5$, $75 \cdot 10^3$ и $18.7 \cdot 10^3$ ячеек, соответственно, а для ГУ “прилипания” (mesh0 , mesh1 и mesh2) – $4.2 \cdot 10^5$, $1.4 \cdot 10^5$, $3.5 \cdot 10^4$. Сетка mesh0_{wl} содержала 44 ячейки поперек внутреннего сопла и 104 ячейки поперек внешнего, а mesh0 – 72 и 152 соответственно. Две более грубые сетки (mesh1 и mesh2) были получены сокращением числа ячеек вдвое по каждому направлению: mesh1 получена из mesh0 , а mesh2 получена из mesh1 . Таким образом, самая грубая сетка (mesh2) прорежена в 4 раза по каждому из направлений относительно самой подробной (mesh0). Сетка mesh00 получена из mesh0 обратной процедурой и содержит в 4 раза больше ячеек, чем mesh0 . Общий вид расчетной сетки приведен на рис. 2.2. На mesh00 проводился всего один контрольный расчет.

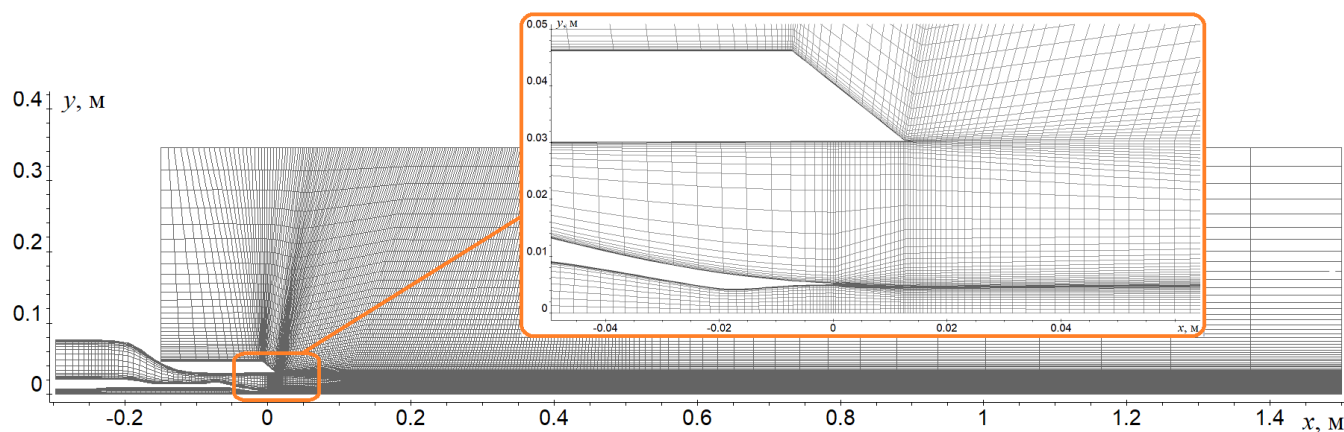


Рисунок 2.2 – Численное моделирование эксп. A.D. Cutler.

Общий вид используемой расчетной сетки (mesh2_{wl}) и детали в окрестности срезов сопел.

Для оценки влияния разрешения сетки, пограничных слоев (ГУ на стенке) и модели турбулентности были проведены серии расчетов. Первая серия расчетов проводилась с $q-\omega$ моделью турбулентности на всех описанных сетках при фиксированных прочих условиях с целью исследования сходимости по сетке. Общий вид поля числа Маха в расчете приведен на рис. 2.3.

Сходимость по сетке для каждого из типов граничного условия показана на рис. 2.4 (mesh00_{wl}, mesh0_{wl}, mesh1_{wl} и mesh2_{wl}) и на рис. 2.5 (mesh0, mesh1 и mesh2). Там приведены профили обезразмеренного давления Пито $p_t/p_{t,ref}$ ($p_{t,ref}$ – полное давление во внешнем сопле) в ряде поперечных сечений $x=const$. На каждом рисунке условия расчетов, кроме сетки, совпадают. Можно видеть, что результаты, полученные на разных сетках отличаются очень незначительно, что позволило бы использовать сетку mesh2 при необходимости параметрических расчетов.

Следующая серия расчетов проводилась на подробных сетках mesh0 и mesh0_{wl} с $q-\omega$ моделью турбулентности. Исследовалось влияние граничных условий и было рассмотрено три варианта их постановки: “закон стенки” во внешнем сопле в комбинации с А) “прилипанием” (ламинарный ПС) либо Б) “скольжением” во внутреннем сопле и В) “прилипание” в обоих соплах (ламинарным ПС во внутр. сопле).

Таблица 2.3 – Варианты постановки граничных условий на стенках сопел

	Вариант А	Вариант Б	Вариант В
Внутреннее сопло	“прилипание”	“скольжение”	“прилипание”
Внешнее сопло	“закон стенки”	“закон стенки”	“прилипание”
Расчетная сетка	mesh _{wl}	mesh _{wl}	mesh

Сопоставление по давлению Пито в этих расчетах приведено на рис. 2.6. Можно заметить, что наибольшее расхождение достигается в промежуточных сечениях. Учет ламинарного пограничного слоя во внутреннем сопле приводит к результатам, ближе к эксперименту, чем со скольжением. А расчеты с “законом стенки” и “прилипанием” во внешнем сопле почти неотличимы.

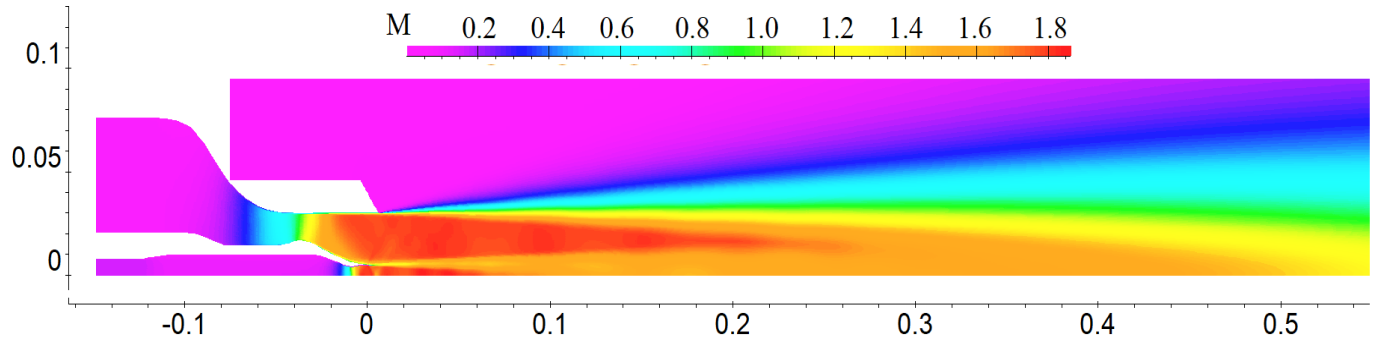


Рисунок 2.3 – Эксперименты A.D. Cutler. Общий вид поля числа Маха в расчете на грубой сетке

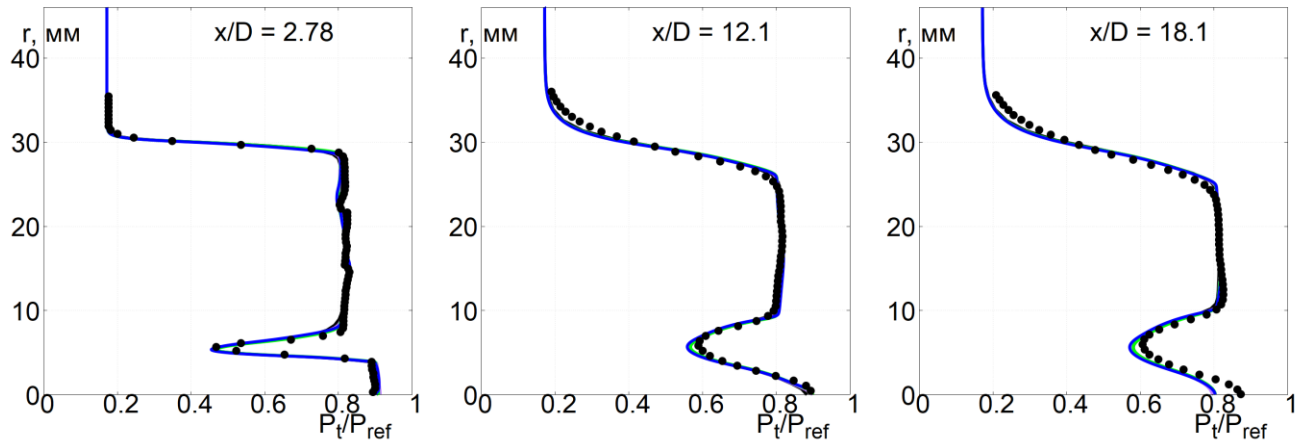


Рисунок 2.4 – Результаты численного моделирования эксп. A.D. Cutler (режим 1): сходимость по сетке. Черный цвет – mesh2, сиреневый – mesh1, зеленый – mesh0, синий – mesh00. Маркеры – эксперимент. Давление Пито в поперечных сечениях. Вариант А ГУ, $q-\omega$ модель турбулентности

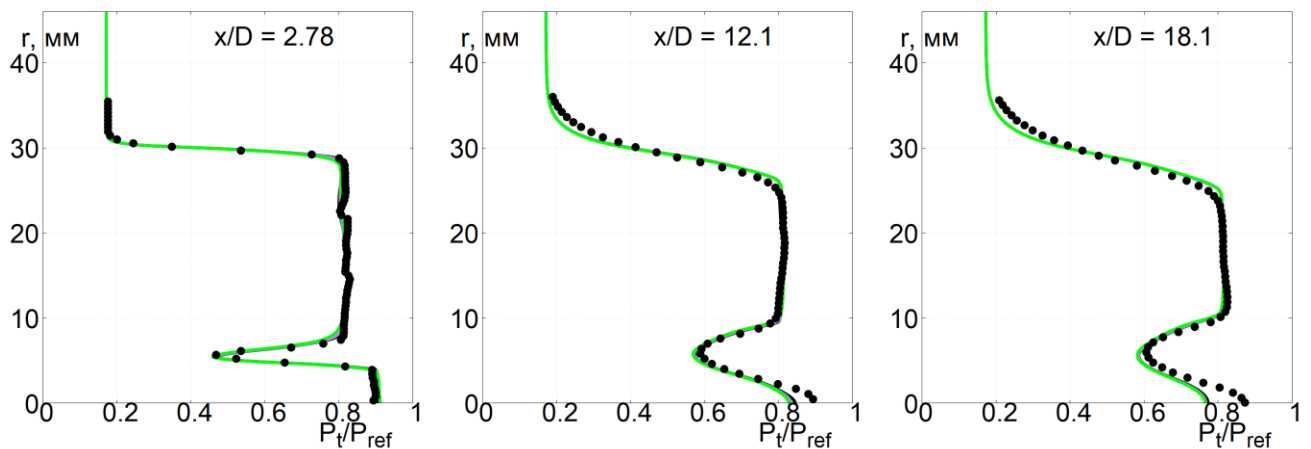


Рисунок 2.5 – Результаты численного моделирования эксп. A.D. Cutler (режим 1): сходимость по сетке. Черный цвет – mesh2_{wl}, сиреневый – mesh1_{wl}, зеленый – mesh0_{wl}. Маркеры – эксперимент. Распределение давления Пито в поперечных сечениях. Вариант В ГУ, $q-\omega$ модель турбулентности

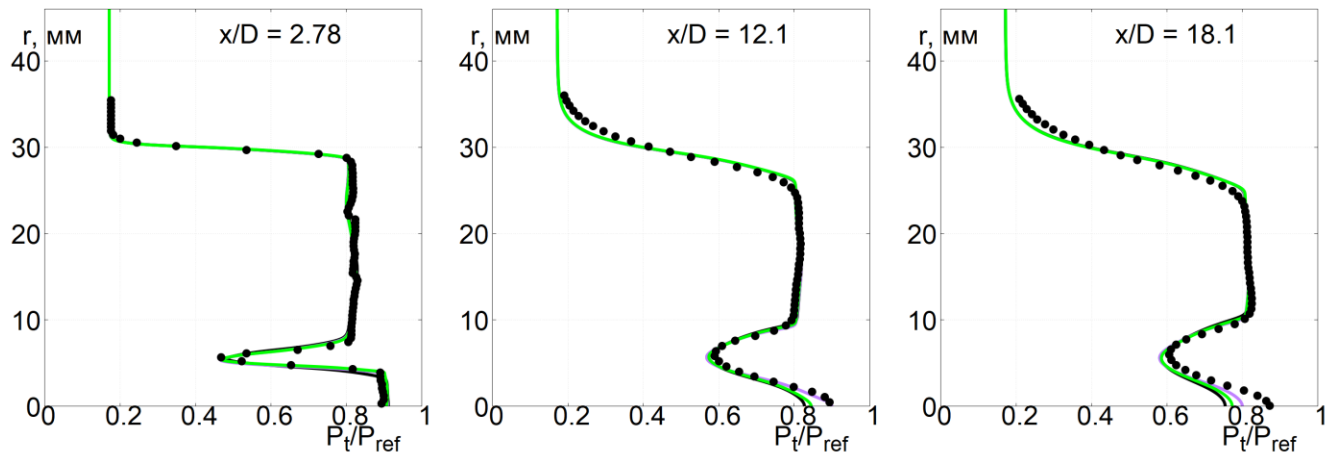


Рисунок 2.6 – Результаты численного моделирования эксп. A.D. Cutler (режим 1): сравнение вариантов граничных условий на стенках сопел: А – сиреневые кривые, Б – черные и В – зеленые. Распределение давления Пито в поперечных сечениях. Подробная сетка, $q-\omega$ модель турбулентности. Маркеры – эксперимент

Третья серия расчетов проводилась на сетке mesh0 с вариантом В граничных условий – “прилипание” в обоих соплах с $q-\omega$ и SST моделями турбулентности. Распределения Пито приводятся на рис. 2.7. В первых сечениях различие почти не заметно, но оно растет вниз по течению. Основное расхождение в результатах заключается в различном описании слоев смешения моделями $q-\omega$ и SST. Профили давления Пито, полученные по SST, имеют выпуклую форму, а по $q-\omega$ есть точка перегиба в каждом слое смешения. Тем не менее, нельзя сделать вывод о превосходстве той или иной модели – они дают результаты одного уровня точности.

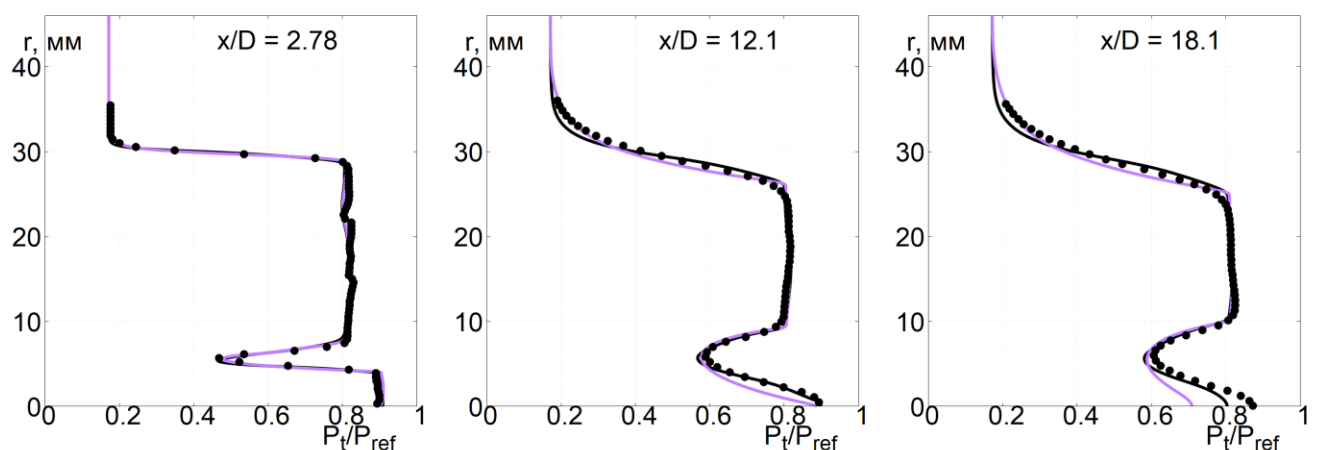


Рисунок 2.7 – Результаты численного моделирования эксп. A.D. Cutler (режим 1): сравнение моделей турбулентности $q-\omega$ (черные кривые) и SST (сиреневые кривые). Распределение давления Пито в поперечных сечениях. Подробная сетка mesh0, $q-\omega$ модель турбулентности, вар. В граничных условий. Маркеры – эксперимент

Наконец, на рис. 2.8–2.9 результаты, полученные в наиболее предпочтительном расчете (подробная сетка mesh0_w1, $q-\omega$ модель турбулентности, вариант А граничных условий), сопоставлены с экспериментом и данными их расчетной работы [54]. Приведены профили обезразмеренного давления Пито $p_t/p_{t,ref}$ (рис. 2.8,а), массовой доли газа из внутреннего сопла $Y(He-O_2)$ (рис. 2.8,б) и обезразмеренной средней величины продольной компоненты скорости u (скорость обезразмерена на характерную скорость в ядре потока внутреннего сопла $U_{nom} = 1127$ m/s) (рис. 2.9). Можно видеть, что давление Пито предсказывается лучше всего, массовая доля He–O₂ – удовлетворительно, а скорость заметно хуже остальных. Возможно, причиной этому является неудовлетворительный учет эффектов сжимаемости турбулентности в расчетах, либо специфика измерений скорости методом RELIEF. Кроме того, следует отметить точное определение зон смешения и позиций скачков. Систематическое отклонение наблюдается на границах турбулентных зон, где распределения параметров в расчетах имеет более резкую форму, чем в эксперименте.

На рис. 2.10–2.11 приводятся результаты численного моделирования эксперимента [76] с выдувом аргона из центрального сопла. Расчет проводился на подробной сетке mesh0_w1 с $q-\omega$ моделью турбулентности и вариантом А граничных условий. Результаты сопоставлены с экспериментом. Приведены профили давления Пито $p_t/p_{t,ref}$ ($P_{ref}=579.8$ кПа) (рис. 2.10) и массовой доли $Y(Ar)$ (рис. 2.11).

Качество сопоставления результатов с экспериментом подобно выше рассмотренному случаю с выдувом He–O₂ из центрального сопла. До сечения $x/D=15.1$ (включительно) совпадение с экспериментом хорошее, особенно по $Y(Ar)$. После этого сечения профили концентрации начинают сильно расходиться с экспериментальными. Это заметно и по профилям давления Пито, однако в последних сечениях там расхождение не такое сильное и оно заметно в основном в области внешнего слоя смешения.

В целом, качество описания массовой доли газа из центрального сопла в двух экспериментах находится на одном уровне и сопоставимо с данными других расчетных работ. По описанию давления Пито во втором случае немного ухудшилось описание внешнего слоя смешения, где распределения параметров в расчетах имеет более резкую форму, чем в эксперименте. Однако качество результатов остается вполне удовлетворительным. Вероятно, можно было бы добиться улучшения результатов за счет дополнительной настройки моделей – например, изменения турбулентного числа Шмидта Sc_t , как это было сделано в [54]. Но это пока оставалось за пределами настоящего исследования.

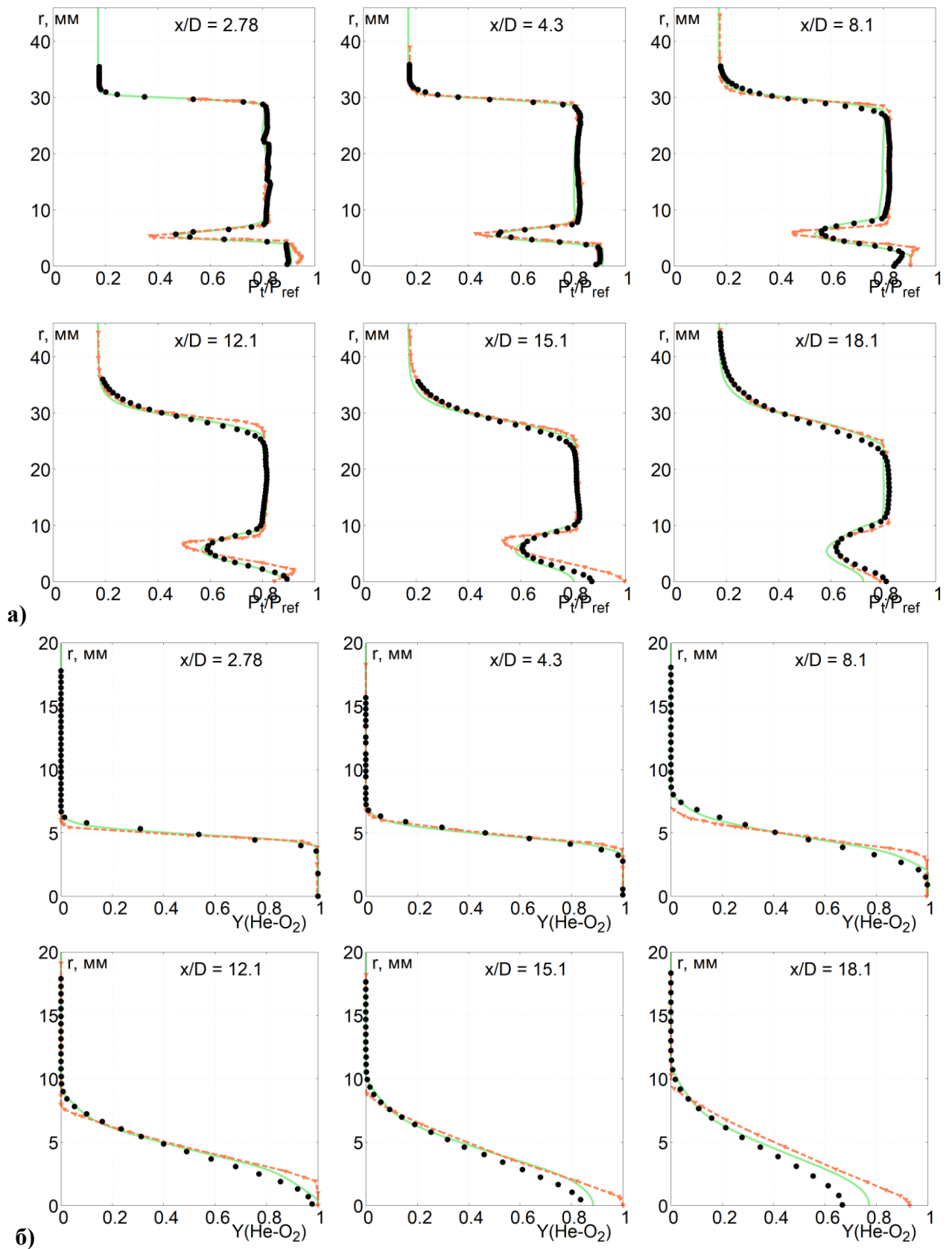


Рисунок 2.8 – Результаты расчетов эксп. [82, 85]. Подробная сетка $mesh0_w$, $q-\omega$ модель турбулентности, вар. А ГУ. Маркеры – эксперимент, пунктир – расчет [54].

Распределения а) давления Пито, б) массовой доли $He-O_2$ в поперечных сечениях

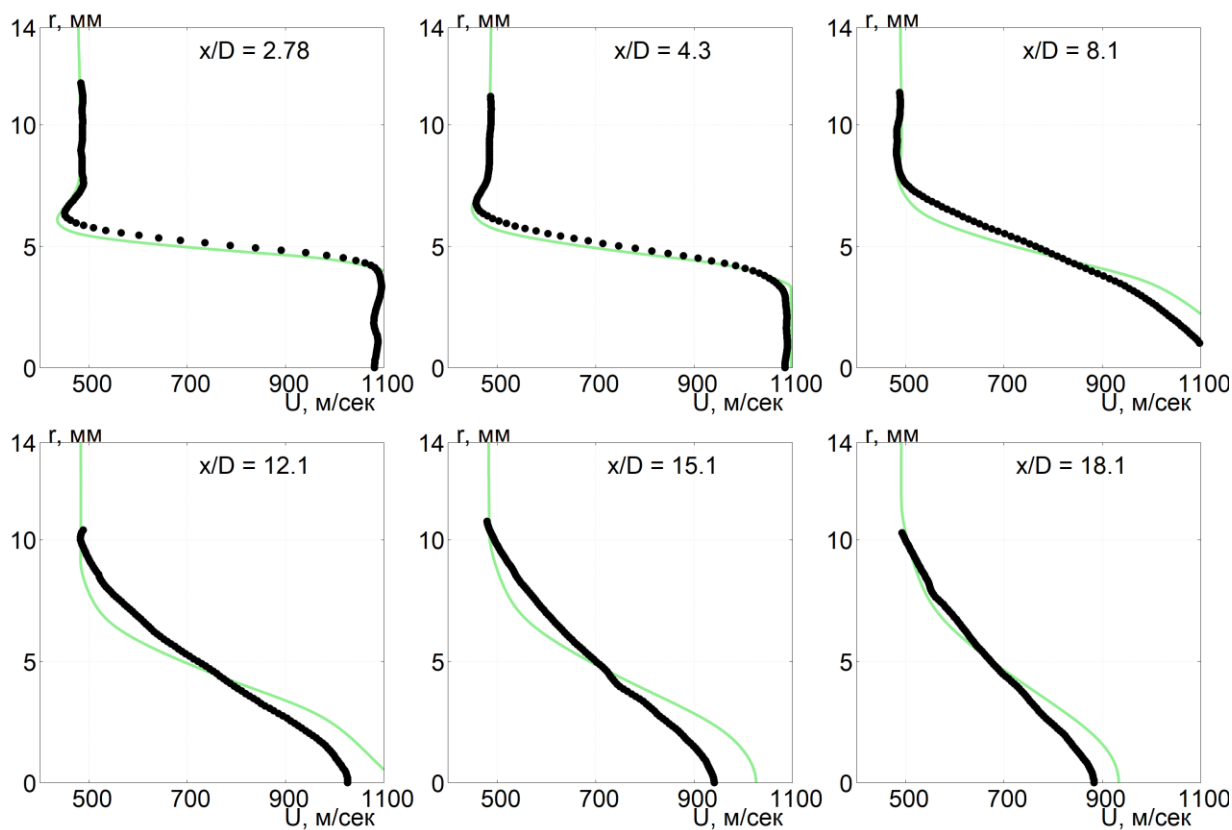


Рисунок 2.9 – Результаты численного моделирования эксп. A.D. Cutler (режим 1). Распределения продольной компоненты скорости в поперечных сечениях. Подробная сетка $mesh0_{wl}$, $q-\omega$ модель турбулентности, вар. А) граничных условий. Маркеры – эксперимент.

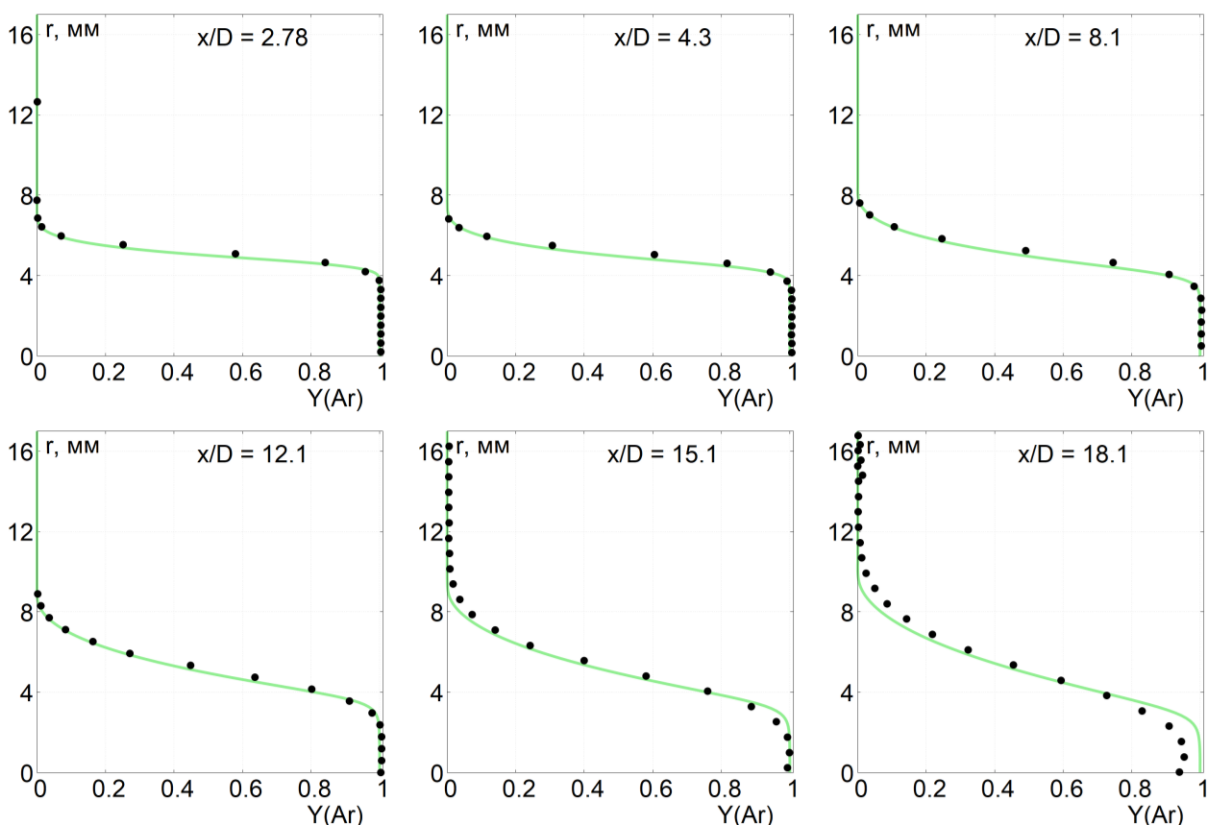


Рисунок 2.10 – Результаты численного моделирования эксп. A.D. Cutler (режим 2). Массовая доля аргона в поперечных сечениях. Подробная сетка $mesh0_{wl}$, $q-\omega$ модель турбулентности, вар. А) граничных условий. Маркеры – эксперимент.

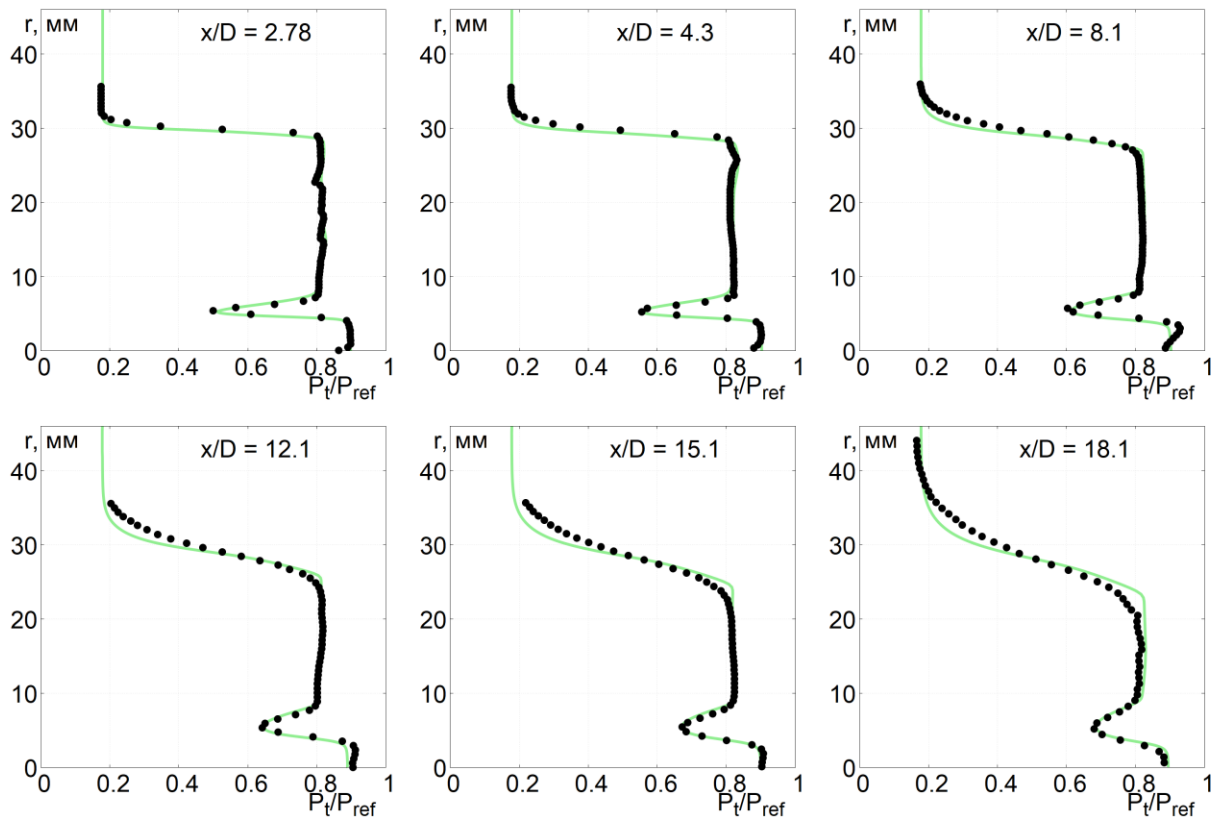


Рисунок 2.11 – Результаты численного моделирования эксп. A.D. Cutler (режим 2). Распределение давления Пито в поперечных сечениях. Подробная сетка mesh0_{wl}, $q-\omega$ модель турбулентности, вар. А граничных условий. Маркеры – эксперимент

§2.2. Анализ экспериментальных данных J.S. Evans et al. Расчеты без учета TCI

Первые исследования были проведены J.S. Evans et al. и изложены в [57] [100]. Эти данные широко используются для валидации CFD программ до сих пор (к примеру, [52, 56, 61, 68, 88, 91, 94, 97, 101, 106, 114, 126, 134, 147, 149, 157, 158, 188, 204]). Именно этот тест был выбран автором первым для верификации программы ввиду кажущейся простоты и большого количества экспериментальных данных.

В экспериментах J.S. Evans et al. исследовалось горение водорода в круглой сверхзвуковой струе ($M=1.9$, $T=251$ К, $p=1$ атм), истекающей в спутный сверхзвуковой поток воздуха ($M=2$, $T=1495$ К, $p=1$ атм), содержащего водяной пар. Состав вдуваемого воздуха: 24.1% O_2 , 47.8% N_2 и 28.1% H_2O . Схема эксперимента показана на рис. 2.12. Водород инжектировался из трубки с внешним диаметром $d=9.525$ мм и толщиной стенок 1.5 мм; на конце трубки было сопло, рассчитанное на $M=2$.

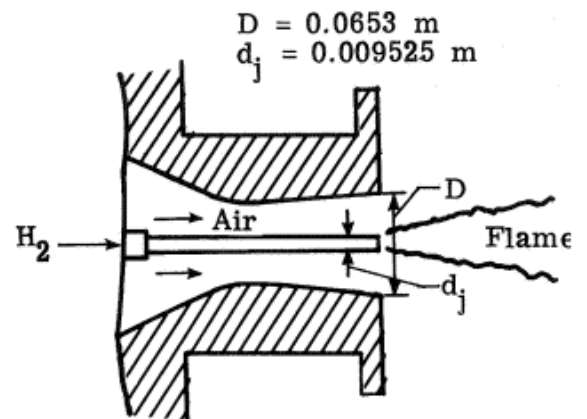


Рисунок 2.12 – Схема эксперимента J.S. Evans et al.

В [57] описаны результаты экспериментов с выдувом струи топлива в спутный поток окислителя (воздух) либо инертного газа (азот N_2). Рассмотрен выдув топлива как в открытое пространство, так и в канал (пристыкованная к соплу трубка). В [57] использовался подогреватель с галечным теплоносителем из циркония и оксида алюминия. Поэтому воздух не содержал никаких продуктов сгорания топлива. Приведены распределения давления Пито на оси и в поперечных сечениях $x/d=6.7$; $x/d=18.7$; $x/d=26.7$. Также приводится распределение давления Пито в сечении на срезе сопла $x/d=0$, но не указано, для какого из режимов эксперимента были проведены эти замеры. Осесимметричное, охлаждаемое водой, сопло окислителя рассчитано на $M=2$. Полное давление в подогревателе, создающее на выходе из сопла давление в одну атмосферу, составляло около семи атмосфер; соответственный расход – 1.15 кг/сек. Во время пусков стенки охлаждались инжeksiруемым водородом, который подавался при нормальной температуре. Полное давление водорода подбиралось так, чтобы на выходе получить статическое давление в одну атмосферу. Повышение температуры водорода при движении по трубке составило около 150 К, а расход газа – 7.7 г/сек.

В [57] приведены результаты расчетов в предположении равновесного горения, а также с учетом конечных скоростей химических реакций. Стоит обратить внимание на то, что результаты по этим двум моделям очень близки между собой. Это говорит о том, что реакция в условиях эксперимента протекает достаточно полно (из-за высокой температуры). Расчёты авторов работы [57] очень хорошо согласуются с экспериментальными данными по распределениям давления Пито. Однако в экспериментах [57], к сожалению, не проводилось замеров концентраций.

Эксперименты [57] и [100] были проведены на одной установке с небольшими отличиями. Однако в эксперименте [100] использовался огневой подогреватель, вследствие чего в воздухе присутствовали пары воды и радикалы. Помимо замеров давления трубкой Пито, в [100] проводились замеры концентраций всех молекул (H_2 , H_2O , O_2) в ряде поперечных сечений ($x/d=8.26$, 15.5, 21.7 и 27.9).

В [100] также приведены результаты расчетов, но с использованием другой модели турбулентности. При этом согласование с экспериментом по распределениям давления Пито в [100] сильно ухудшилось. В [100] приводится несколько попыток выбрать модель горения и турбулентности, но никакие расчеты в [100] не дают удовлетворительного соответствия с экспериментом. Если расчеты приближались к эксперименту по характеру распределений продукта реакции – H_2O , то потери полного давления становились очень большими и расчет оказывался далек от эксперимента. Таким образом, авторам [100] не удалось в расчетах получить удовлетворительного соответствия одновременно по распределениям давления Пито и концентраций.

Из множества расчетных работ – среди них [52, 56, 61, 68, 88, 91, 94, 97, 101, 106, 114, 126, 134, 147, 149, 157, 158, 188, 204] – только в нескольких – [134, 147, 158] приводится сопоставление с экспериментальными данными по давлению Пито. И только в работе [147] приводится полное сопоставление с экспериментом по всем сечениям. Следует отметить, что в этой работе в начальном сечении давление Пито в струе водорода завышено. Возможно, именно за счет этого в последующих сечениях авторами работы [147] получено хорошее согласование с экспериментом.

Одной из возможных причин, из-за которых никому не удалось воспроизвести результаты эксперимента, может быть неточность при определении концентрации методом взятия проб. В эксперименте измерения проводились контактным методом с помощью насадка типа трубки Пито. К сожалению, использование контактных методов оказывает локальное влияние на процессы горения за счет внесения в поток возмущений, охлаждения потока и каталитических эффектов на поверхности зонда. При этом, помимо возмущений в потоке, надо иметь в виду, что перед насадком возникает скачок уплотнения, который повышает температуру за ним. Таким образом, температура в пробном материале выше той, которая была бы в этом месте в потоке без насадка. Кроме того, для точного определения концентраций необходимо моментально проводить анализ химического состава газа. Иначе, в случае промедления, реакция успевает протечь дальше вплоть до равновесия. Тогда определенный состав уже будет отличаться от забранного в сторону увеличения продукта реакции. Это очень актуально в условиях эксперимента с высокой температурой в зоне горения.

Ещё одно замечание касается приведенных в [100] распределений концентраций и их соответствия заявленному составу газа из огневого подогревателя (по объему: 20% — O_2 , 38% — H_2O и 42% — N_2 , что соответствует примерно $Y_{O_2}=0.241$, $Y_{H_2O}=0.281$, $Y_{N_2}=0.478$). Этот состав должен соответствовать экспериментальным замерам в сечениях вне слоя смешения двух потоков при $r/d \sim 1.7$ (крайние точки приведенных данных). Там еще не должно сказываться влияние взаимодействия струи окислителя с окружающим пространством. Но в этих данных можно видеть $Y_{H_2O}=0.244$ против заявленной $Y_{H_2O}=0.281$, $Y_{O_2}=0.278$ вместо $Y_{O_2}=0.241$, $Y_{N_2}=0.468$ против $Y_{N_2}=0.478$, что соответствует ошибке по инертной компоненте примерно 0.01 или 2%, а по остальным ~ 0.04 или 13.5%.

Автором диссертации были предприняты значительные усилия, чтобы добиться удовлетворительного согласования с экспериментальными данными [100]. В этом разделе будут описаны основные результаты расчетов, выполненных без учета TCI.

Сначала рассматривалась только часть экспериментальной области. Расчет начинался с сечения $x/d=0.33$, в котором задавались профили параметров течения, приведенные в [100].

Параметры в ядре струи водорода: $Y_{H_2}=1$, $M=2$, $T=251\text{K}$, $p=105\text{ Па}$. Параметры в ядре потока воздуха: $Y_{H_2}=0$, $Y_{O_2}=0.241$, $Y_{H_2O}=0.281$, $Y_{N_2}=0.478$, $M=1.9$, $T=1495\text{K}$, $p=105\text{ Па}$. Кроме того, расчетная область была ограничена сверху границей $r/d=2$. Таким образом, взаимодействие горячей струи с окружающим пространством не принималось во внимание. Такой подход использовался и в расчетных работах других авторов, среди которых [147, 158, 188]. На рис. 2.13 показаны конфигурация расчетной области и поле массовой доли воды $Y(H_2O)$ в расчете без учета TCI. Так же, как и в [188] было задано 60 ячеек вдоль струи и 70 – в поперечном направлении, причем сетка сгущалась в окрестности струи: там было задано по 10 ячеек с размером, вдвое меньшим, чем при равномерном распределении, а дальше от струи шаг сетки изменялся по геометрической прогрессии. На нижней границе (на оси) ставилось условие симметрии, а на верхней – параметры невозмущенного потока воздуха. На выходе было поставлено условие экстраполяции нулевого порядка.

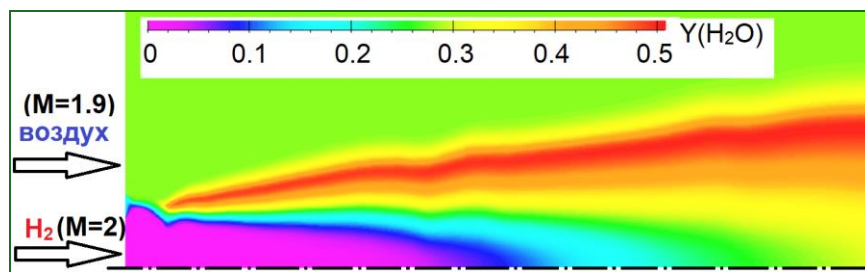


Рисунок 2.13 – Поле массовой доли H_2O в расчете эксперимента [100] без учета TCI

Была выполнена большая серия параметрических расчетов, в ходе которых были рассмотрены: различные начальные значения параметров турбулентности; разные значения турбулентных чисел Шмидта и Прандтля; две методики расчета турбулентного числа Маха в поправке Дэша для учета эффектов сжимаемости турбулентности [86]; несколько моделей химической кинетики: Moretti [151], ONERA [87], Fureby [189]; разные модели турбулентности – $(q-\omega)$ [30, 77, 78] и SST [187]. Однако все рассмотренные модификации не позволили приблизиться к экспериментальным данным, поэтому дальнейшие попытки были связаны с моделированием течения при $x/d < 0.33$ и при $r/d > 2$,

В этой второй серии расчетов использовалась более подробная сетка, позволяющая более корректно описать рециркуляционную зону за уступом между внутренним и внешним контурами, а также пограничные слои, нарастающие на стенках этих контуров. Типичный вид расчетной сетки представлен на рис. 2.14,а. Эта сетка содержит по 20 ячеек внутри каждого пограничного слоя и 40 ячеек на высоту уступа. В расчетах использовался “закон стенки”, так что в первой ячейке у стенки $y^+ \sim 10$. Было проведено специальное исследование, которое показало, что численное решение близко к сходимости по сетке. Сверху к расчетной области примыкает буферный блок, на верхней границе заданы параметры окружающего покоящегося

воздуха, левая граница буферного блока считалась твердой стенкой без прилипания, справа задан снос параметров.

К сожалению, в [100] не приводится геометрия сопел, создающих потоки водорода и воздуха. Сказано лишь, что сопло для подачи водорода расположено на конце трубки и имеет угол полураствора в 5 градусов. Столь скудные данные оставляют большой произвол в выборе геометрии сопел. Сначала было сделано предположение, что сопла имеют плавную геометрию типа сопла Лавалья, обеспечивающую хорошую равномерность потока на срезе сопел. Геометрия сопел, расчетная сетка и характерные поля числа Маха и температуры показаны на рис. 2.14 (внешнее сопло для воздуха) и рис. 2.15 (внутреннее сопло для водорода).

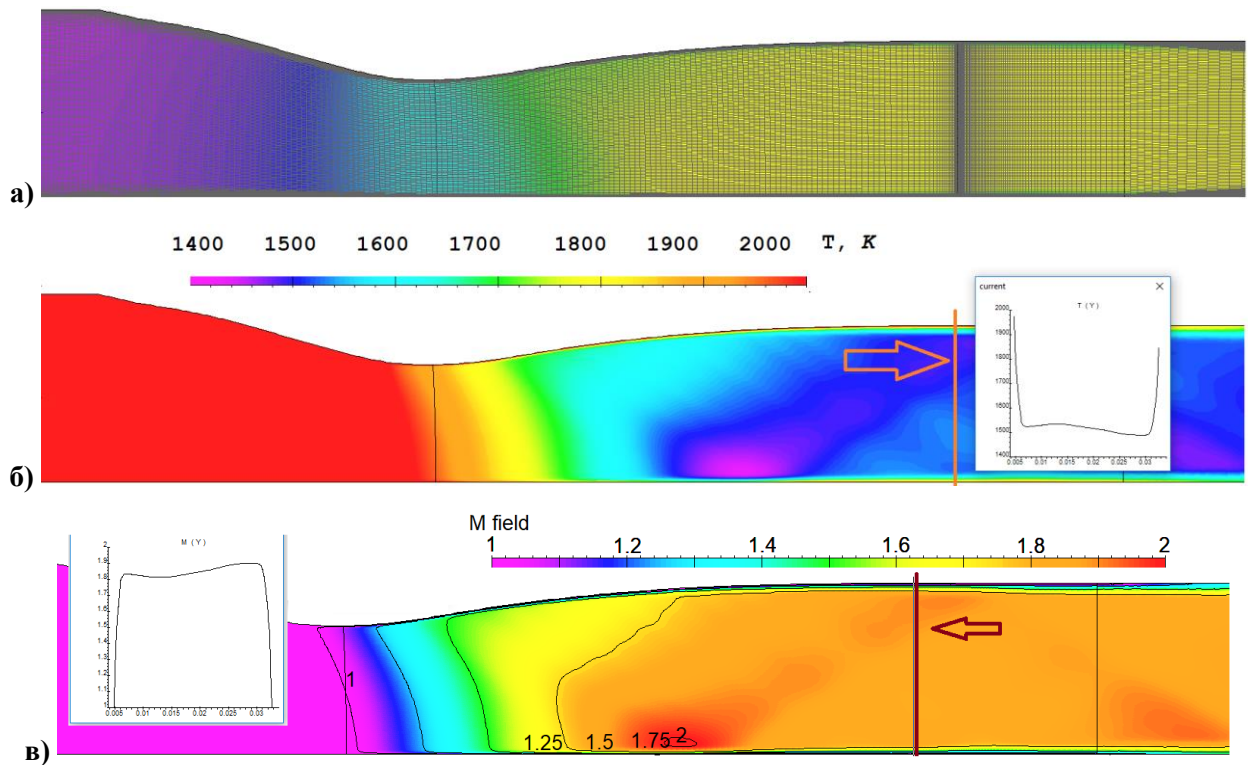


Рисунок 2.14 – Сопло для воздуха: геометрия, сетка, поля Маха и температуры в расчете

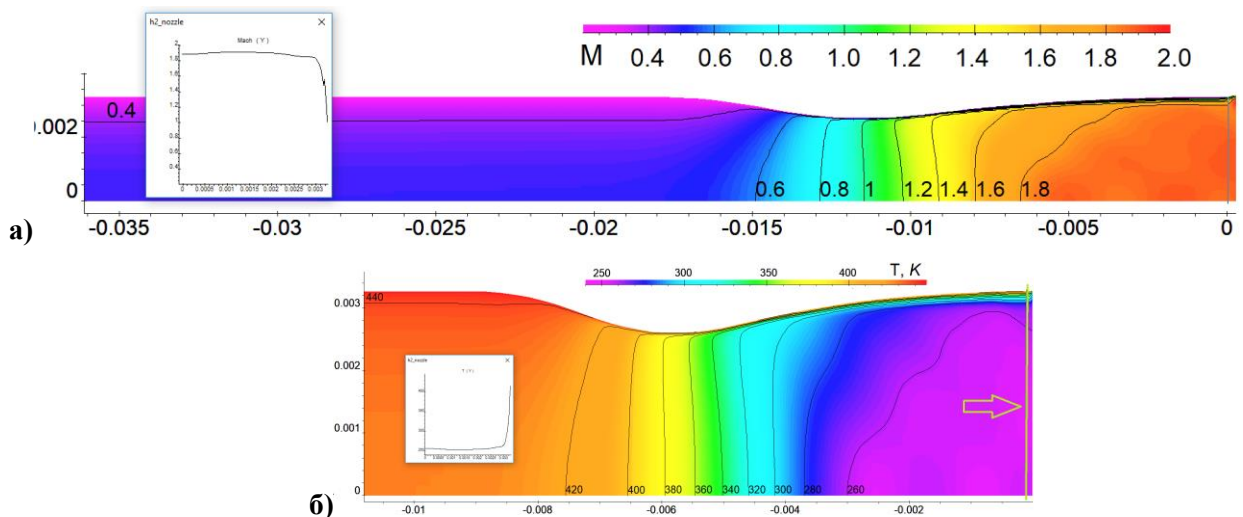


Рисунок 2.15 – Сопло для водорода: геометрия, поля Маха и температуры в расчете

Однако толщина пограничного слоя на срезе инжектора водорода оказалась слишком малой по сравнению с толщиной, известной из эксперимента [57]. Поэтому были предприняты попытки найти геометрию инжектора водорода, которая давала бы большую толщину пограничного слоя. Сначала были рассмотрены геометрии с трубкой разной длины перед соплом для водорода (т.к. в [100] сказано, что сопло расположено на конце трубки). При этом был получен интересный эффект, о котором упоминается в книге [1]: независимо от длины трубки перед соплом поток в звуковом сечении сопла выравнивается и толщина пограничного слоя становится практически нулевой, после чего пограничный слой начинает расти заново. На рис. 2.16 для примера показано число Маха для случая очень длинной трубки перед соплом Лавалья (геометрия сжата в 14 раз по горизонтали). Видно, что на стенке трубки имеется турбулентный пограничный слой, который дорастает до оси трубы и делает течение полностью вязким, с неравномерным профилем скорости. Однако в критическом сечении профиль действительно практически выравнивается, и на толщину пограничного слоя на срезе сопла влияет только длина расширяющейся части сопла.

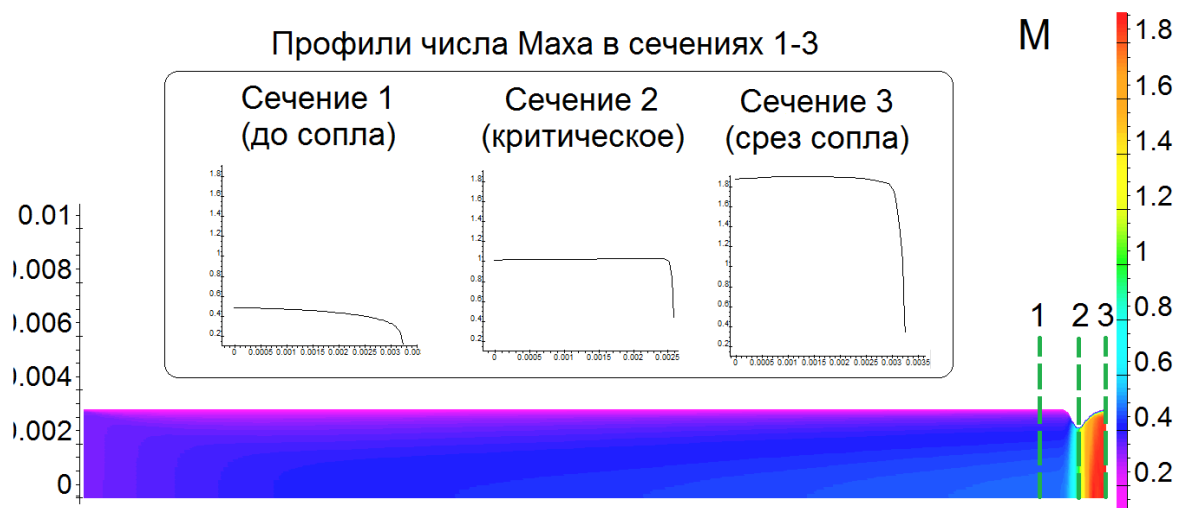


Рисунок 2.16 – Длинная трубка до сопла (для водорода, масштаб сжат в 14 раз вдоль продольной оси). Длина трубки не влияет на толщину ПС на срезе сопла

Поэтому далее была рассмотрена геометрия с цилиндрической трубкой, расположенной после сопла для H_2 (рис. 2.17,а). Для того, чтобы обеспечить угол полураствора в 5° , были еще рассмотрены несколько геометрий с трубкой, переходящей в коническое сопло с нужным углом. Эти геометрии отличались длиной конической части и, соответственно, толщиной пограничного слоя на выходе. Геометрия, а также поля числа Маха и давления Пито для одного из таких сопел показаны на рис. 2.17,б.

Также было рассмотрено несколько геометрий инжектора водорода в виде мерной шайбы – рис. 2.18.

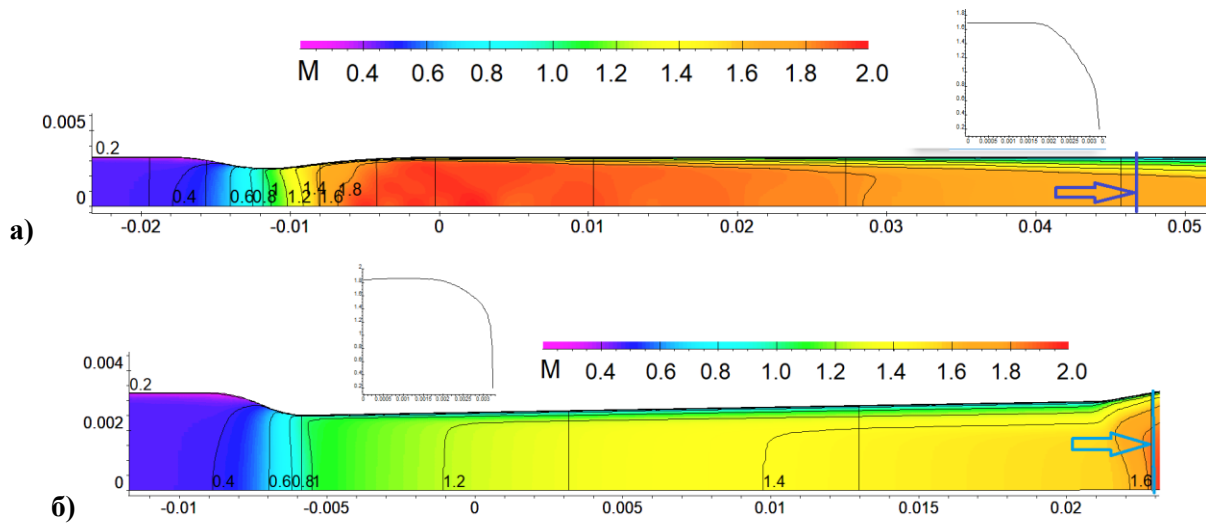


Рисунок 2.17 – Геометрия и поле числа Маха для возможной геометрии инжектора – сопло Лавала с длинной расширяющейся частью: а) сопло Лавала, переходящее в длинную цилиндрическую трубку; б) длинное коническое сопло

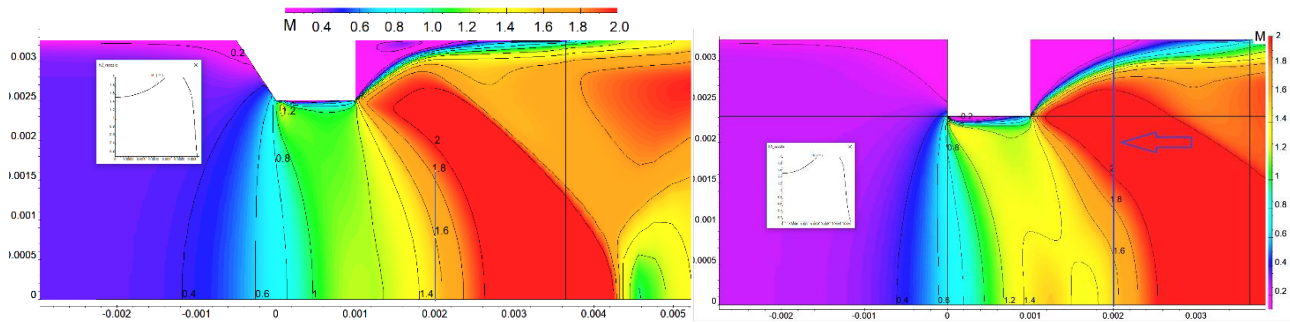


Рисунок 2.18 – Геометрия и поле числа Маха для рассмотренных мерных шайб

В ходе этих расчетов вновь было рассмотрено влияние начальных значений параметров турбулентности; значений турбулентных чисел Шмидта и Прандтля; сравнивались модели турбулентности ($q-\omega$) [30, 77, 78] и SST [187]) и химической кинетики Moretti [151], ONERA [87], Fureby [189]). В частности, было показано, что влияние модели турбулентности является несущественным.

На рис. 2.19 приводятся распределения массовой доли N_2 и давления Пито вдоль продольной оси и поперечные профили тех же параметров в сечении $x/d=15.5$. Из большого числа выполненных расчетов выбрано только два. Первый (фиолетовые кривые на рис. 2.19) начинается с сечения $x/d=0.33$, а второй (зеленые кривые на рис. 2.19) включает моделирование течения в соплах. В целом, никакие из рассмотренных модификаций не позволили заметно приблизиться к эксперименту по распределениям концентрации инертной примеси и давления Пито одновременно. Например, расчет, включая моделирование течения в соплах, лучше воспроизводит поперечные профили массовой доли азота, чем расчет от сечения $x/d=0.33$. Но при этом ухудшилось предсказание осевого распределения давления Пито.

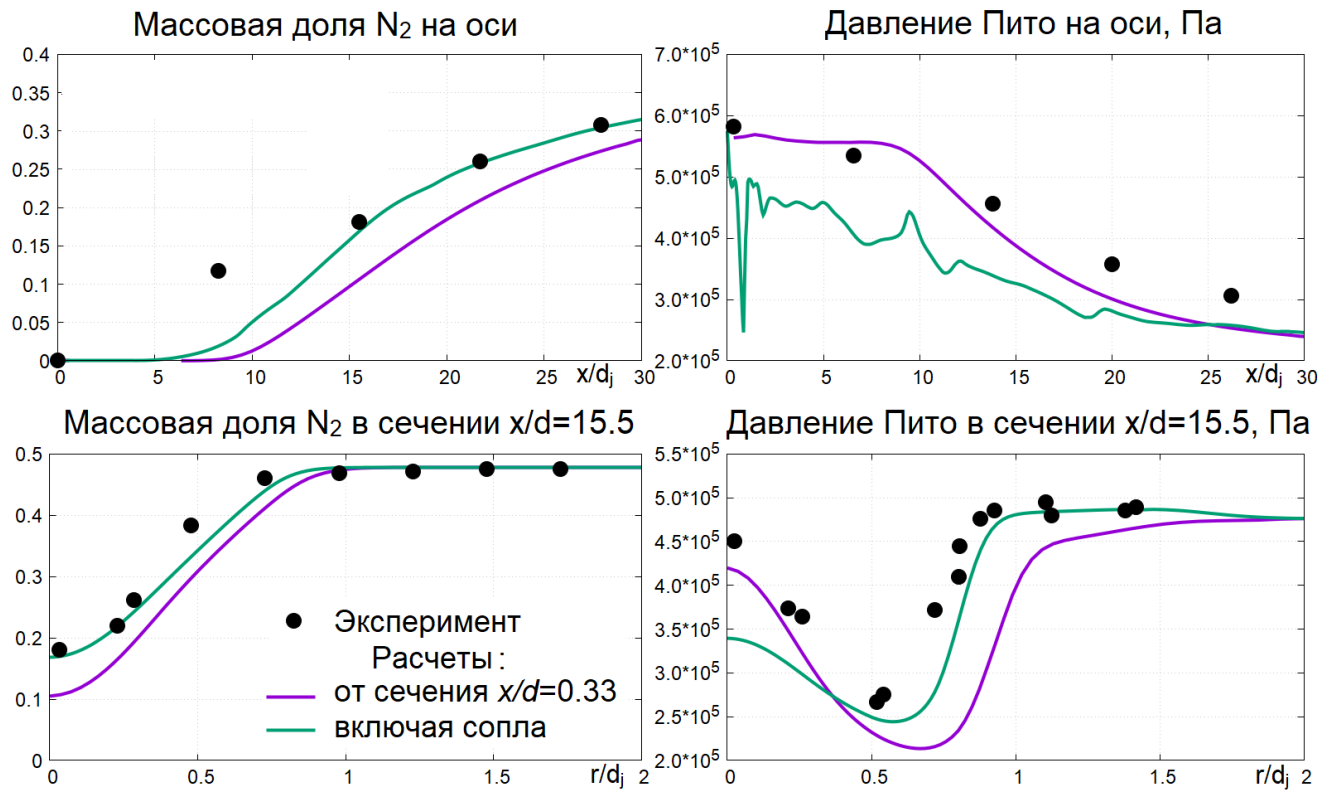


Рисунок 2.19 – Распределения массовой доли N_2 (слева) и давления Пито (справа): на оси (вверху) и в сечении $x/d=15.5$. Расчеты: от сечения $x/d=0.33$ – фиолетовые кривые, включая моделирование течения в соплах – зеленые кривые

§2.3. Анализ эксперимента М.С. Burrows & А.Р. Kurkov. Расчеты без учета TCI

В эксперименте М.С. Burrows & А.Р. Kurkov [67] водород инжектировался параллельно спутному потоку подогретого обедненного кислородом воздуха. Схема эксперимента, параметры потока топлива и воздуха, а также поле температуры в расчетах приведены на рис. 2.20. Камера сгорания представляла собой прямоугольный канал постоянной ширины 0.051 м. Воздух подводился через канал высоты 0.089 м. Вдув топлива осуществляется тангенциально через 7 форсунок шириной 0.078 см и высотой 0.4 см, расположенных в верхней части уступа. Входной поток состоял из 76.8% N_2 и 23.3% H_2O для случая без горения и 48.6% N_2 25.8% O_2 25.6% H_2O для случая с горением. Параметры потока воздуха: $M=2.44$, $T=1270$ К, $p=1$ атм; параметры топлива: $M=1$, $T=254$ К, $p=1$ атм. Толщина стенки, разделяющей потоки топлива и окислителя, составляла 0.76 мм. Исследуемая часть камеры линейно расширялась от 0.0938 м в начальном сечении до 0.105 м на выходе. В эксперименте замерялись концентрации и температура торможения в выходном сечении. В большинстве расчетных работ [60, 96, 98, 99, 130, 136, 193] авторы ограничиваются моделированием этого эксперимента в двумерном приближении.

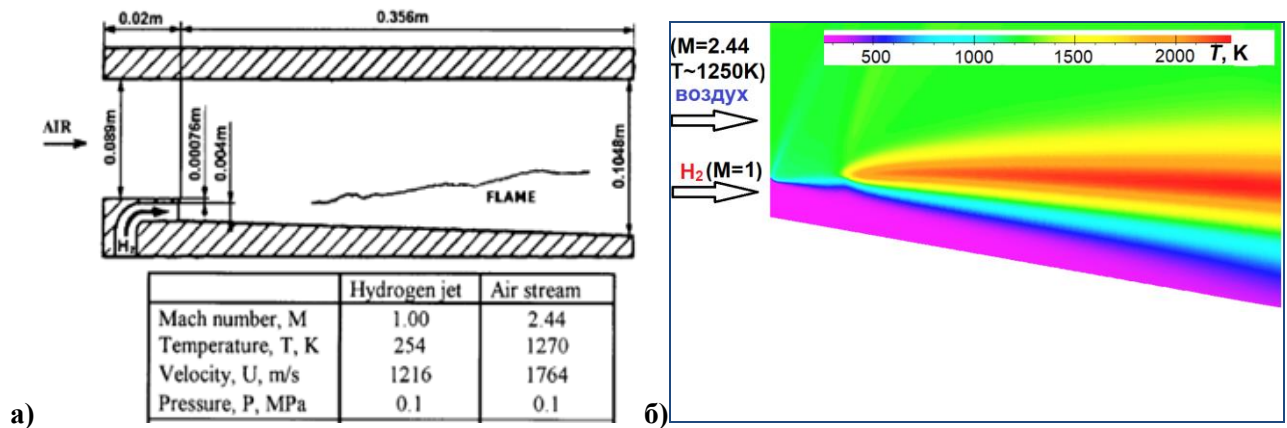


Рисунок 2.20 – Эксперимент M.C. Burrows & A.P. Kurkov : а) схема и условия;
б) поле температуры, полученное в расчетах автора без учета ТСІ

Расчеты автора проводились с граничным условием “прилипание” на стенках без учета теплообмена (теплоизолированные стенки). В первых расчетах использовались профили скорости, параметров турбулентности и энтальпии на входе в камеру, взятые из [60] (далее будут называться “старый профиль”). Результаты, полученные с этими распределениями параметров на входе в случае смешения без горения (т.е в расчете с замороженными химическими реакциями), находятся в хорошем соответствии с экспериментом и расчетами [60] (рис. 2.21,а, “старый профиль”). Были получены решения на системе вложенных сеток, самая грубая из которых содержала 164 ячейки на высоту камеры и 450 на длину камеры. Достигнута сходимость по сетке.

Было исследовано влияние модели химической кинетики на результаты. Рассмотренные кинетические схемы включают модель Moretti [151] с 6 активными компонентами и 8 реакциями; схему [61], предложенную в ЦИАМ с 8 активными компонентами и 20 реакциями; и используемую в ONERA [87] с 6 активными компонентами и 7 реакциями. Влияние кинетической схемы на профили на выходе из камеры оказалось незначительным. Напротив, влияние задания начальных значений параметров турбулентности на входе оказалось очень существенным – см. рис. 2.21,б, где также приведены результаты, полученные в [60] (“Другие авторы”) с использованием квази–ламинарного подхода (без учета ТСІ). Наилучшее приближение к эксперименту и к результатам работы [60] было получено при задании пониженного значения характерной частоты турбулентности ω по сравнению с [60] при сохранении того же значения кинематической турбулентной вязкости $\nu_t = 0.09q^2 / \omega$. Это позволило сдвинуть максимум в распределении мольной доли паров воды в сторону эксперимента. Но расхождение с экспериментом осталось значительным.

Дальнейшие усилия были направлены на попытку приблизиться к экспериментальным данным за счет уточнения профиля втекающего потока воздуха. Для этого предварительно

моделировалось течение над пластиной, и из расчетов пластины извлекались профили пограничного слоя. Рассматривались варианты с разными значениями заданной температуры стенки T_w и с разной толщиной пограничного слоя $\delta_{пс}$ (т.е. с различной длиной пластины). На рис. 2.22 варианты входного профиля пограничного слоя сравниваются с экспериментальными данными и с расчетами авторов экспериментов [67]. Наилучшее согласование обеспечивает профиль пограничного слоя при $T_w=298$ К (холодные стенки) и $\delta_{пс}=1$ см.

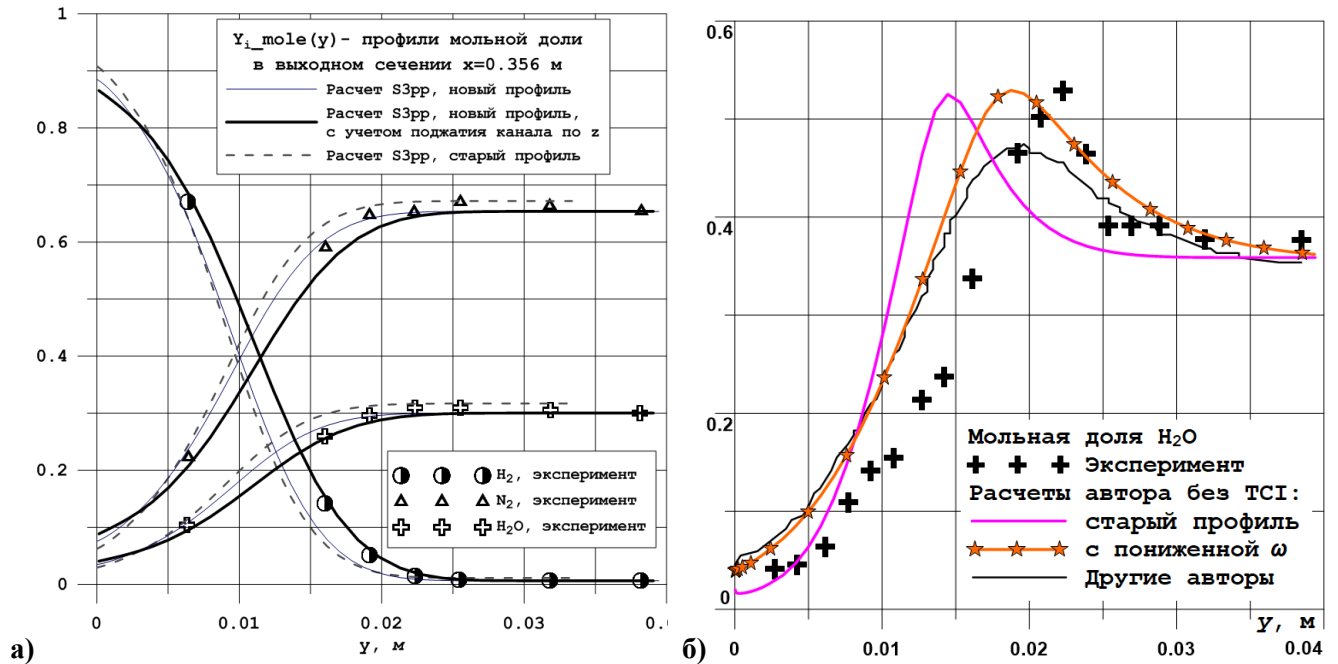


Рисунок 2.21 – Моделирование экспериментов М.С. Burrows & А.Р. Kurkov. Профили в выходном сечении $x=0.356$ м: а) смешение без горения, молярные доли молекул; б) горение, молярная доля H_2O

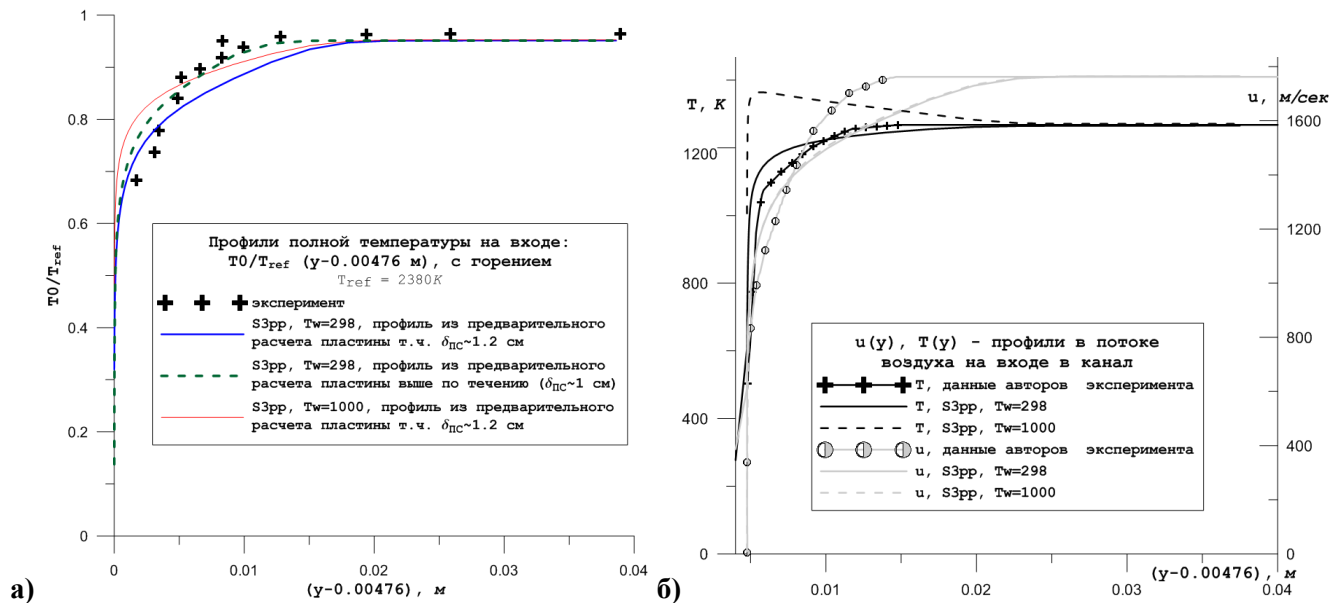


Рисунок 2.22 – Эксперимент М.С. Burrows & А.Р. Kurkov. Профили на входе в камеру: а) распределение температуры торможения; б) распределению статической температуры T и продольной компоненты скорости u в сечении на входе в камеру

В некоторых расчетных работах было получено улучшение в описании эксперимента за счет введения переменных чисел Шмидта (Sc_T) и Прандтля (Pr_T) [68, 200]. Для оценки влияния этих параметров автором были выполнены расчеты с различными (постоянными во всем поле) значениями этих коэффициентов. Полученные профили концентрации паров воды и температуры торможения в выходном сечении представлены на рис. 2.23. Влияние Pr_T оказалось незначительным (рис. 2.23,а,б). Влияние Sc_T более существенно; однако никаким изменением Sc_T невозможно изменить положение фронта пламени (максимумы Y_{H_2O} и T_0), не изменив его ширины. Вариация Sc_T приводит к расширению или сужению купола в профилях Y_{H_2O} и T_0 , но не позволяет сдвинуть фронт пламени вверх.

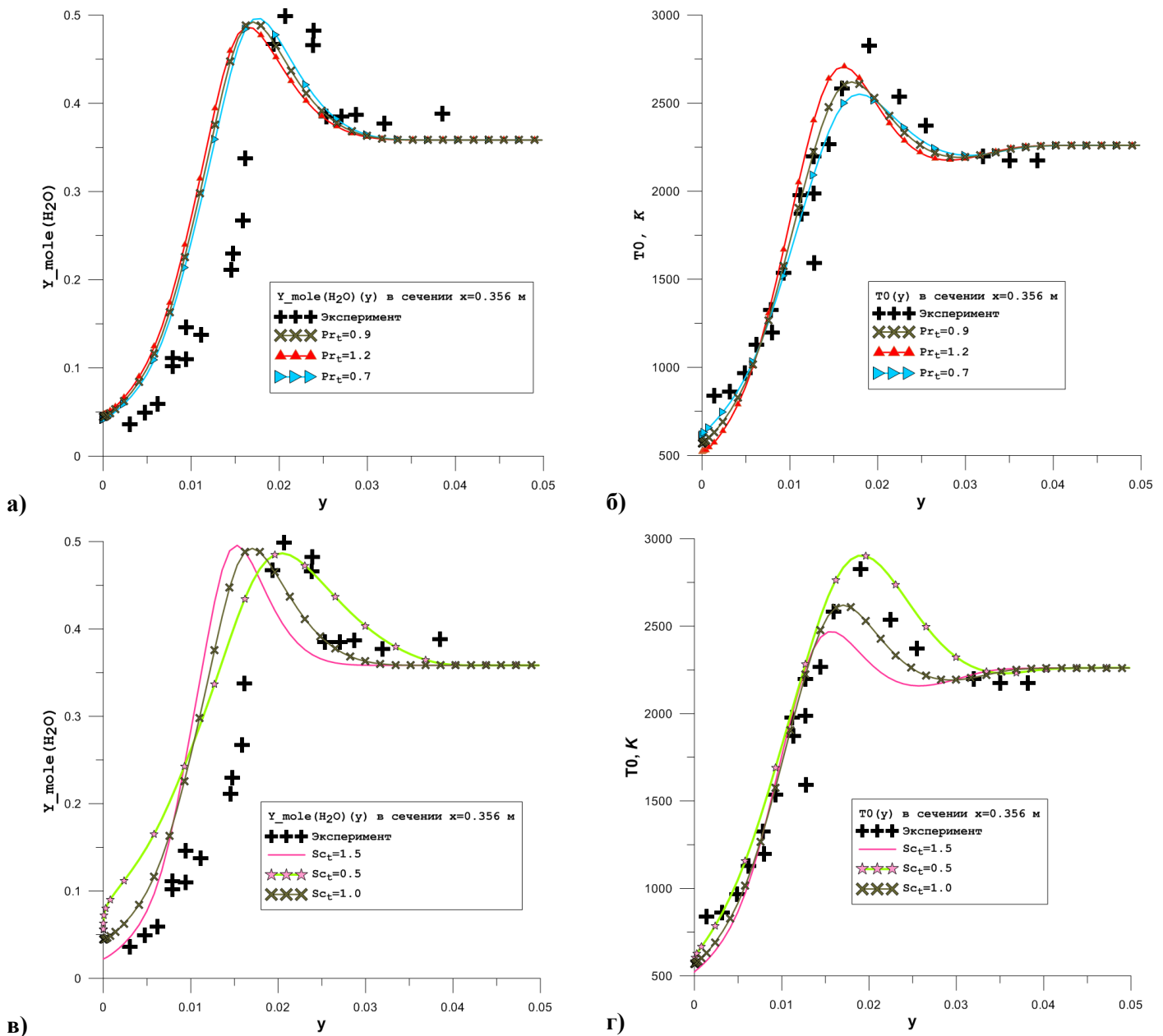


Рисунок 2.23 – Профили мольной доли H_2O (а, в) и температуры торможения T_0 (б, г) в выходном сечении $x=0.356$ м в расчетах эксп. М.С. Burrows & А.Р. Kurkov [67]: а–б) влияние турб. числа Прандтля Pr_t в–г) влияние турб. числа Шмидта Sc_t .

Расхождение с экспериментом может быть следствием некорректных начальных и граничных условий. В эксперименте водород вытекает из канала сложной формы, геометрия которого детально не приводится. Поток окислителя вытекает из сопла, за которым следует переходник, но детали канала из эксперимента неизвестны. Следует заметить, что экспериментальное распределение T_0 в сечении на входе в камеру (см. рис. 2.24,а из [67]) несимметрично относительно горизонтальной линии центра канала – пограничный слой сверху существенно толще. Это говорит о возможном увеличении толщины пограничного слоя за счет отрыва или скачка уплотнения. К сожалению, подробных данных о профиле параметров в начальном сечении не приводится, а полностью воспроизвести условия эксперимента не представляется возможным из-за отсутствия данных о геометрии.

Есть также сомнение в корректности жесткого задания профиля параметров на входе в камеру, где имеются толстые пограничные слои и, следовательно, возможно влияние вверх по потоку. Возможно [34], что от сильных скачков внутри канала возмущение пограничного слоя может быть настолько велико, что оно может распространиться вверх по потоку, перестроить течение и вызвать отрыв.

Особенно сильные расхождения между всеми расчетами и экспериментом наблюдаются в распределениях давления вдоль нижней стенки канала – см. рис. 2.24,б. При этом заметное расхождение наблюдается даже в случае без горения. Это означает, что ударно-волновые структуры течения в канале, полученные в расчетах и в эксперименте, были различны.

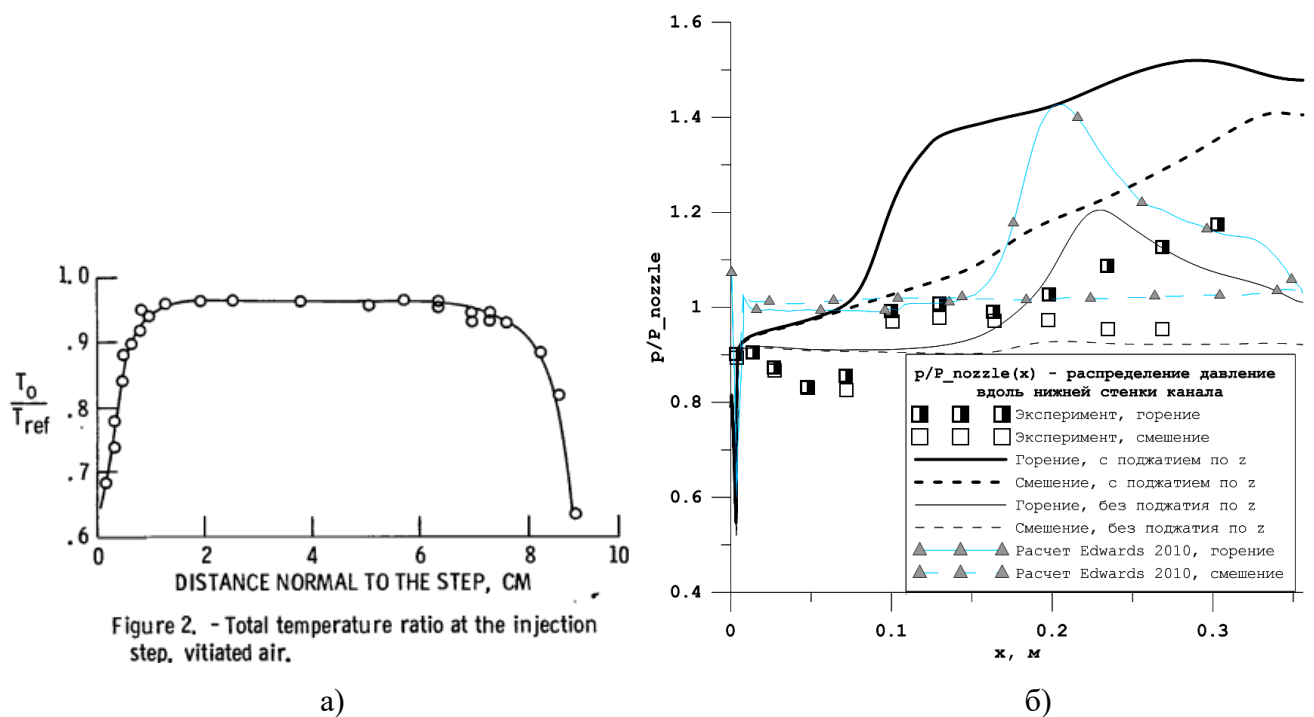


Рисунок 2.24 – Эксперимент М.С. Burrows & А.Р. Kurkov: а) экспериментальное распределение температуры торможения на входе в камеру [67]; б) распределение давления вдоль нижней стенки канала в расчетах и в экспериментах: с горением и без

При валидации расчетных моделей этот эксперимент, как правило, рассматривается в двумерной постановке, при этом авторы пытаются добиться лучшего согласования с экспериментом за счет сложных моделей (например, учета TCI). Но ширина канала в эксперименте в два раза меньше высоты. Если учесть толщину пограничных слоев в вертикальном направлении (см. рис. 2.24,а), то почти полканала по третьему измерению z – это пограничный слой, который нарастает по длине и может возмущаться скачками и волнами в канале. Это, в свою очередь, может привести к появлению градиента давления. Чтобы оценить возможный эффект от нарастания толщины пограничного слоя на боковых стенках канала, были проведены трехмерные расчеты, в которых были заданы различные скорости сужения канала по z -направлению. Было найдено некоторое сужение, при котором толщина пограничного слоя на верхней и нижней стенках канала резко выросла за счет градиента давления по x и имеющих скачков. При этом профили массовых долей компонент сдвинулись близко к экспериментальным точкам (рис. 2.25).

Достигнутое улучшение превосходит эффект от всех рассмотренных ранее действий. Правда, профили мольной доли кислорода и температуры торможения все еще заметно расходятся с экспериментом. Но не следует забывать, что улучшение достигнуто за счет искусственного линейного сужения канала, без моделирования реальной вязкой структуры течения на боковых стенках.

Если теперь посмотреть на экспериментальный график давления вдоль нижней стенки (рис. 2.24,б), то там можно увидеть скачок в давлении примерно при $x=10$ см – как в пуске с горением, так и без. В расчетах он не воспроизводится, как и поведение давления по x до этого скачка. В работе [92] (единственная работа, найденная автором, где приводятся эти данные) расчет также не воспроизводит поведение давления в эксперименте. Авторы [92] объясняют это скачками и волнами в струе водорода, которая вытекает из канала, форма которого приведена в [67] лишь схематически. Однако автор настоящей работы склоняется к тому, что это скорее влияние скачка, приходящего из сопла для воздуха и обусловленного, например, геометрией этого сопла до входного сечения в камеру. Тот же скачок может вызывать разную толщину пограничного слоя в профиле T_0 на входе в камеру.

По мнению автора, рассматривать моделирование эксперимента M.C. Burrows & A.P.Kurkov [67] в двумерной постановке некорректно из-за малой ширины канала в поперечном направлении, приводящей к существенному влиянию пограничного слоя на боковых стенках канала. Однако, трехмерное моделирование этого эксперимента не представляется возможным из-за отсутствия подробных данных о геометрии перед сечением на входе в камеру.

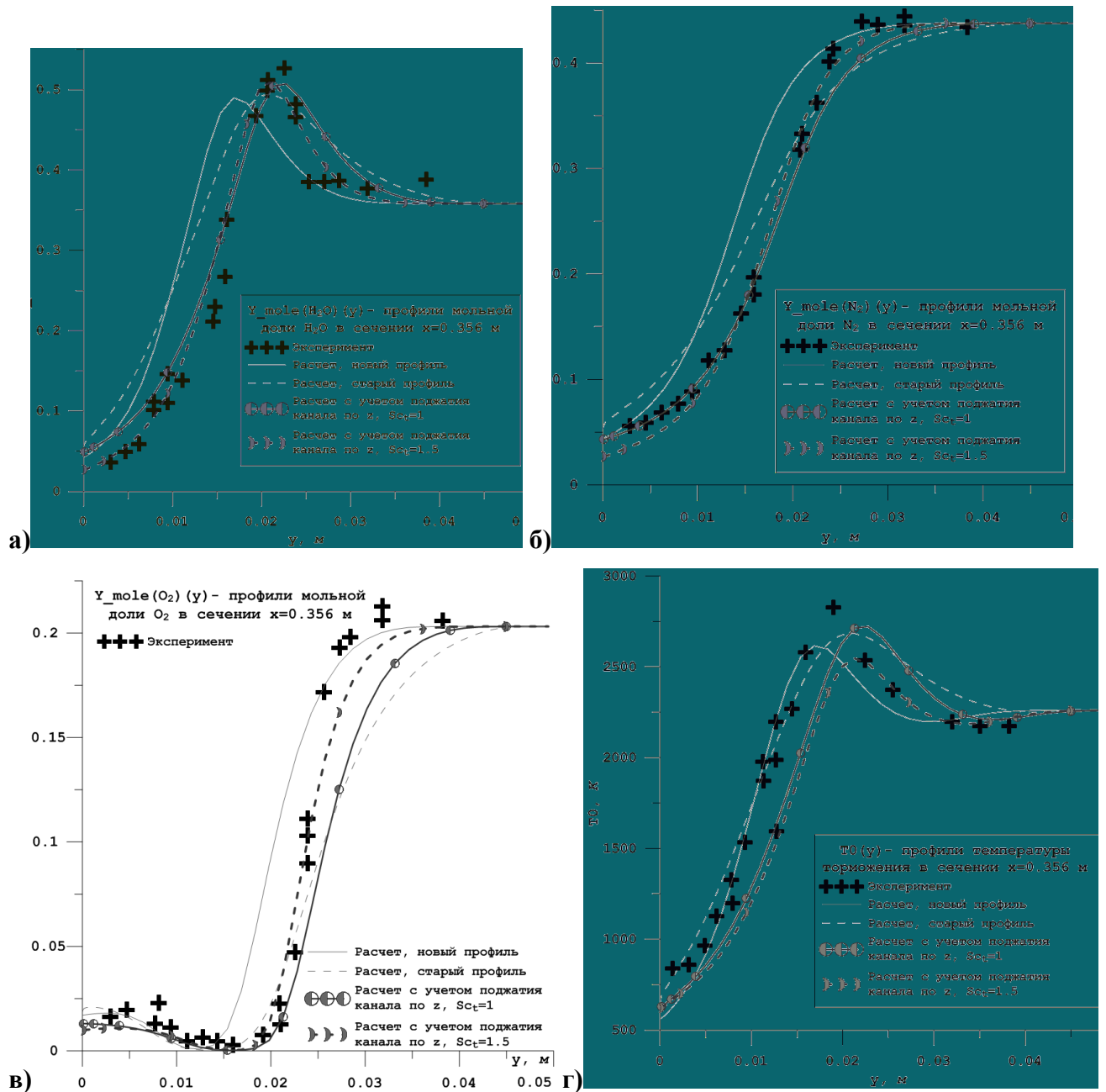


Рисунок 2.25 – Профили параметров в выходном сечении $x=0.356$ м

в расчетах эксп. M.C. Burrows & A.P. Kurkov [67]:

а) H_2O ; б) H_2 ; в) O_2 и г) температуры торможения T_0 (б, г)

§2.4. Применение “классической модели ФПВ flamelet” к моделированию экспериментов J.S.Evans et al. и M.C. Burrows & A.P. Kurkov

Поскольку новый разработанный метод включает использование flamelet библиотек, было принято решение сперва реализовать “классическую модель ФПВ–flamelet” (§1.10). В этом случае массовые доли реагирующих компонент смеси (а также, в принципе, возможно, и температура) во время расчета берутся напрямую из предварительно рассчитанной библиотеки, что позволяет не решать дифференциальные уравнения этих параметров. Тестирование этой части работы основано на сопоставлении с результатами отчета [60] (на картинках данные из этой работы обозначены “ЦИАМ (1996)”). Первой целью на этой стадии было повторить, насколько это возможно, методологию из [60], и приблизиться по результатам к этой работы возможно ближе. Кроме того, исследовалось влияние различных параметров, в том числе эмпирических коэффициентов Sc_T^z , Pr_T^σ , C_N и C_σ в дифференциальных уравнениях для средней величины переменной смещения \bar{z} и ее дисперсии $\sigma = \overline{z'^2}$.

На рис. 2.26 лучшие результаты моделирования эксперимента J.S.Evans et al., полученные автором и в работе [60], сопоставлены с экспериментом. На рис. 2.26,а представлены данные, полученные без учета TCI (приведены кривые, соответствующие расчетам рис. 2.19). Рис. 2.26,б получен с использованием “классической модели ФПВ–flamelet”. Лучшие результаты автора на рис. 2.26,б получены при $Pr_T^t=1$, $Sc_T^z=1$, $Pr_T^\sigma=1$, $C_\sigma=2$, $C_N=0.1$.

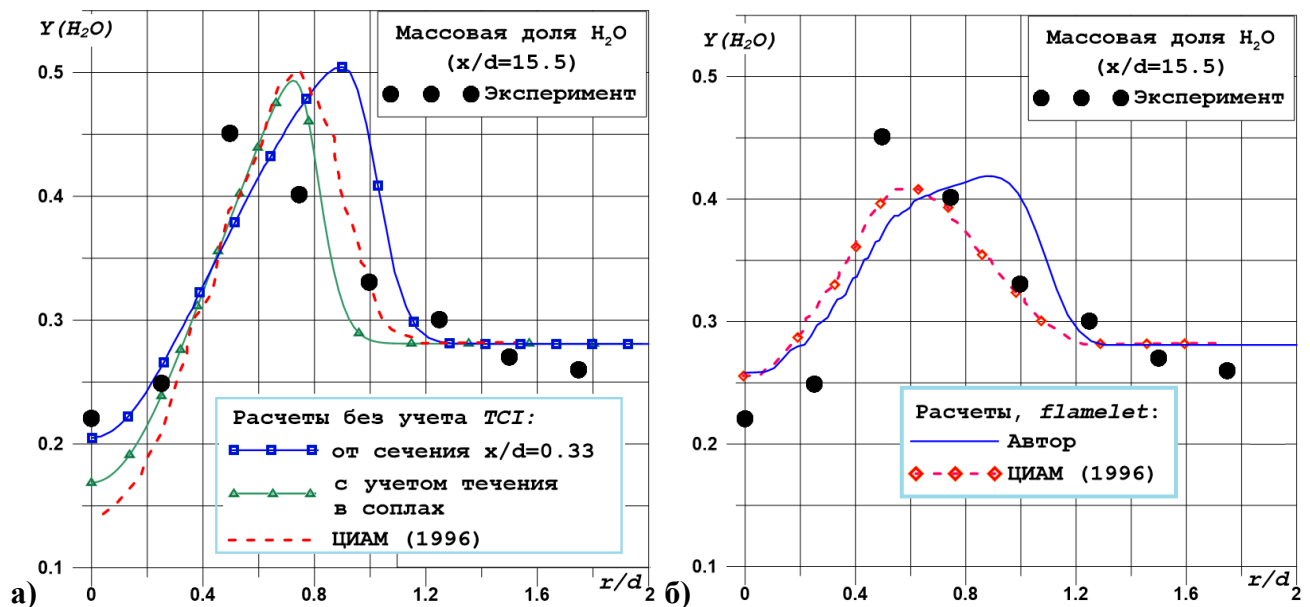


Рисунок 2.26 – Поперечное распределение массовой доли H_2O в сечении $x/d=15.5$ в эксп J.S. Evans et al. [100]: сопоставление результатов автора и расчетов [60] с экспериментальными данными: а) без учета TCI и б) по модели простых флеймлетов.

На рис. 2.27 представлены аналогичные результаты моделирования эксперимента M.C.Burrows & A.P.Kurkov.

В лучших расчетах автора достигнут тот же уровень согласования с экспериментами J.S.Evans et al. и M.C.Burrows & A.P.Kurkov, что и в работе [60]. Но все кривые далеки от эксперимента. Таким образом, использование простого подхода флеймлетов не позволило приблизиться к экспериментальным данным.

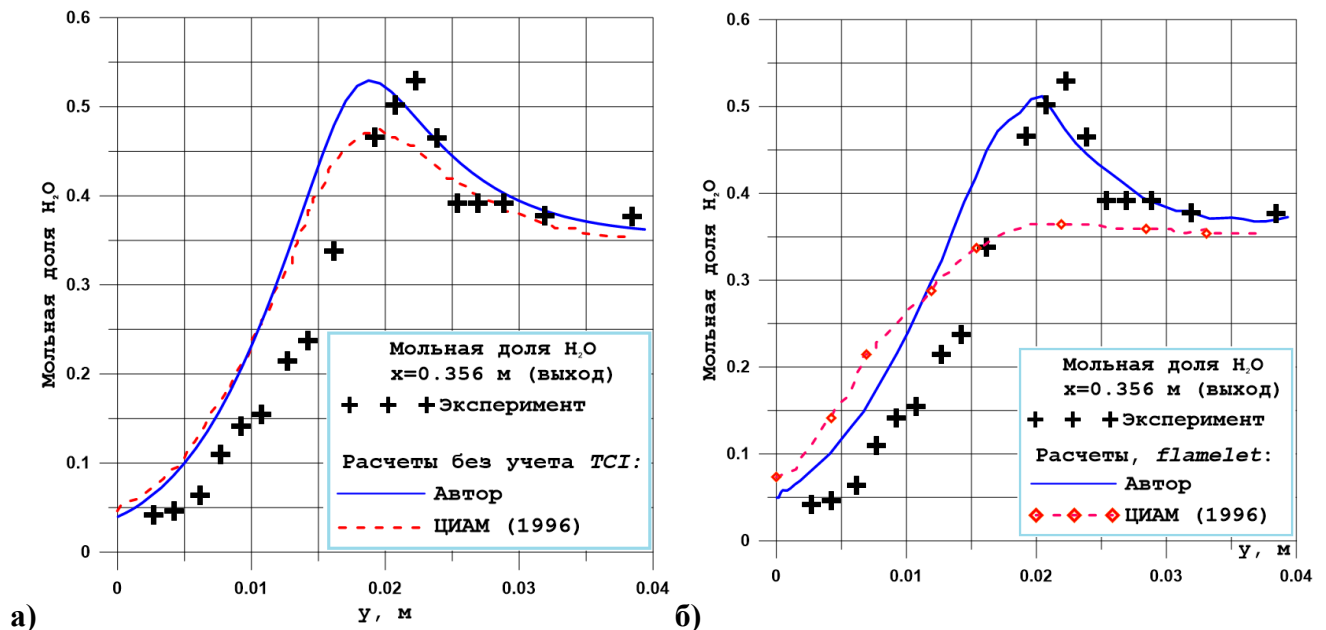


Рисунок 2.27 – Профили мольной доли H_2O в выходном сечении $x=0.356$ м в эксп. M.C. Burrows & A.P. Kurkov [67]: сопоставление результатов автора с расчетами из [60] и с экспериментальными данными: а) без учета TCI и б) по модели простых флеймлетов

Было исследовано влияние формы функции плотности вероятности (ФПВ). Сопоставлены расчеты с ФПВ бета-распределения и ФПВ с распределением Гаусса. Обе функции описаны в §1.10. Результаты, полученные с использованием этих двух различных ФПВ, различались, на первый взгляд, существенно (черная и серая сплошные кривые на рис. 2.28,а). Но, как показал более детальный анализ, основное различие связано не с видом ФПВ. Используя некоторую ФПВ, необходимо иметь в виду ее область допустимых значений (по переменным z и σ). Для β -функции распределения это ограничение естественным образом следует из условия положительности показателей степени в ФПВ: $\beta > 0$, $\gamma > 0$. Для функции Гаусса эти условия можно вывести следующим образом. Как известно из математической статистики, при гауссовом распределении случайной величины z в 99.73% случаев $\bar{z} - 3\sqrt{\sigma} \leq z \leq \bar{z} + 3\sqrt{\sigma}$. Требуя, чтобы $z \equiv \bar{z} + z' \in [0; 1]$, получим условие: $0 \leq \bar{z} \pm k\sqrt{\sigma} \leq 1$, где $1 \lesssim k \lesssim 3$. Вот результирующие ограничения на значения $\sqrt{\sigma} \equiv \sqrt{z'^2}$ для двух вариантов ФПВ:

$$\text{Гаусс : } \begin{cases} \sqrt{z'^2} \leq \frac{\bar{z}}{k}, \\ \sqrt{z'^2} \leq \frac{1-\bar{z}}{k}, \end{cases} \quad \text{beta : } \begin{cases} \sqrt{z'^2} \leq \frac{\bar{z}^2(1-\bar{z})}{1+\bar{z}}, \\ \sqrt{z'^2} \leq \frac{z(1-z)^2}{2-\bar{z}}. \end{cases} \quad (2.1)$$

Возьмем для функции Гаусса более мягкое органичение ($k=1$). На рис. 2.28,б сравниваются области допустимых значений для двух видов ФПВ. Видно, что область допустимых значений для ФПВ бета-распределения существенно уже. Тогда было выполнено моделирование эксперимента [100] с ФПВ Гаусса, но с ограничениями из области определения для бета-функции распределения. Результаты этого расчета (пунктирная кривая на рис. 2.28,а) оказались очень близки к результатам расчета на основе бета-функции распределения.

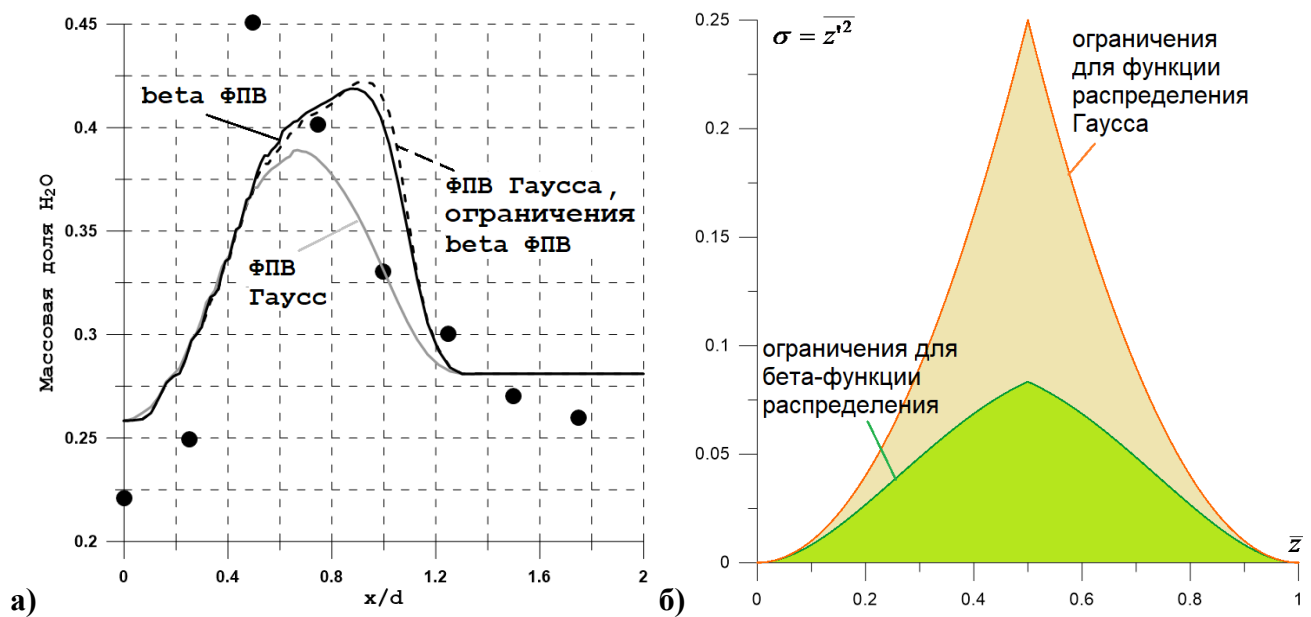


Рисунок 2.28 – а) Влияние области определения ФПВ и ее формы на результаты в эксп. J.S. Evans et al. [100]. б) Область определения распределения Гаусса и бета-функции

Следует отметить, что в расчетах мог быть получен неверный уровень величин σ из-за использования полуэмпирического уравнения для σ . Это уравнение было валидировано и настроено в основном для круглых струй при низких чисел Маха. В литературе оно широко используется без дополнительных настроек при произвольных условиях течения – автор не встречал иного способа нахождения σ . Очевидно, уравнение для σ требует доработки и валидации для течений иных конфигураций (высокоскоростные, сжимаемые течения, пристенные струи и др.). С точки зрения автора, этим нельзя пренебрегать, потому что зависимость получаемых результатов от величин σ – большая. Таким образом, для каждого рассматриваемого класса задач необходима тщательная настройка параметров модели и уравнения для σ . В то же время надо понимать, что, меняя параметры эмпирических коэффициентов в уравнениях для \bar{z} и σ , можно испортить описание круглых струй при низких

числе Маха. Возможно использование параметров, меняющихся в поле в зависимости от локально реализуемого типа течения, как это сделано в модели турбулентности SST Ф.Р.Ментера [187]. Но это остается вопросом для будущих исследований.

§2.5. Применение комбинированного метода, основанного на flamelet, к моделированию экспериментов J.S.Evans et al. и M.C. Burrows & A.P. Kurkov

При попытке применения комбинированного метода, предложенного автором (см.§1.13), к моделированию эксперимента M.C Burrows & A.P. Kurkov [67] оказалось, что пламя затухает (хотя и в расчете без учета TCI, и в расчете на базе “классической модели ФПВ–flamelet” достигалась стабилизация горения). Анализ показал, что это происходит из-за слишком малой величины источникового члена H_2O (пары воды являются здесь продуктом реакции) в области, где возникает горение (рис. 2.29,а, сечение А-А). Это можно видеть напрямую из сопоставления источника H_2O (рис. 2.29,б), вычисляемого по средним параметрам течения, без учета TCI ($\overline{SY}_{H_2O}^{lam}$) с источниковым членом, вычисленным при помощи ФПВ – $\overline{SY}_{H_2O}^{pdf}$ (рис. 2.29,в). Можно видеть, что в сечении А-А на рис. 2.29,а, где возникает горение, $\overline{SY}_{H_2O}^{lam}$ очень велик, а $\overline{SY}_{H_2O}^{pdf}$ существенно меньше. Это и приводит к затуханию пламени.

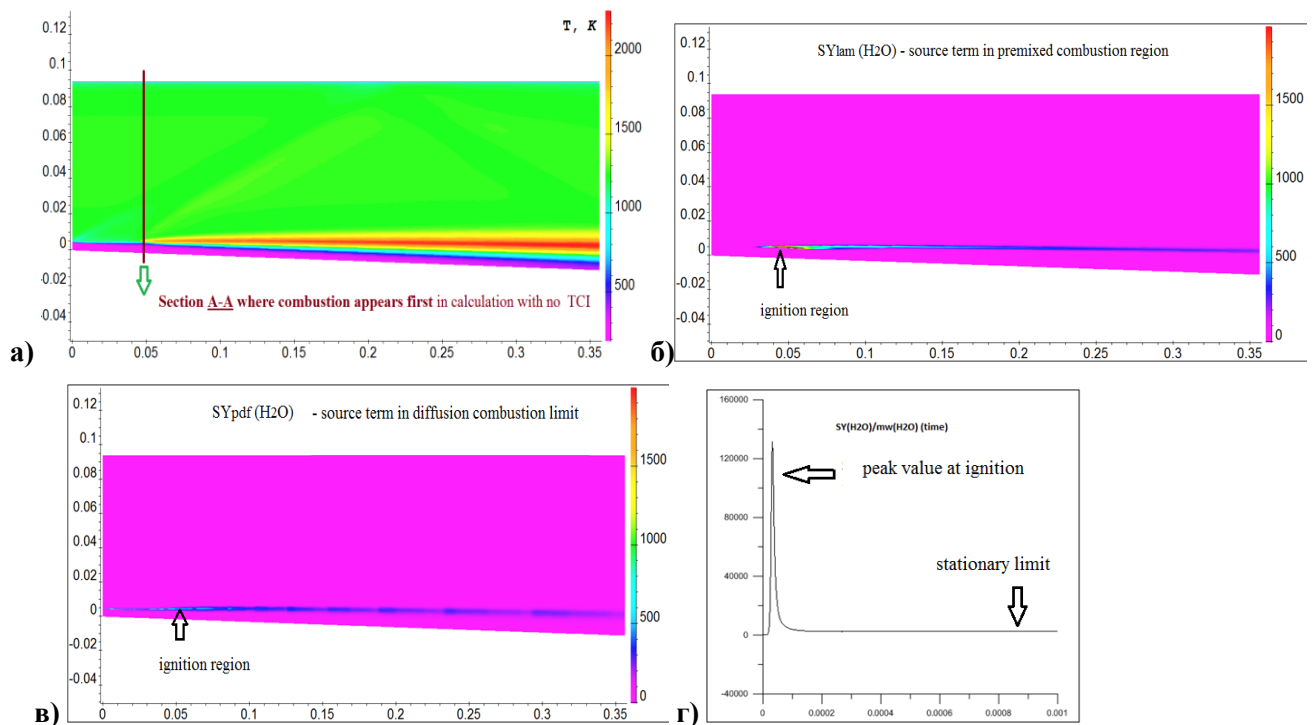


Рисунок 2.29 – Применение комбинированного метода к моделированию эксперимента M.C. Burrows & A.P. Kurkov [67]: а) Поле температуры T (K) в расчете без TCI (А-А – сечение загорания); б) $\overline{SY}_{H_2O}^{lam}$; в) $\overline{SY}_{H_2O}^{pdf}$. г) Зависимость скорости производства H_2O от времени

$SY_{H_2O}^{flamelet}(t)$ при некотором $z=const$ в процессе установления при создании библиотеки флеймлетов.

Для понимания причины напомним, что при построении библиотеки использовалась стационарная модель flamelet. Однако стационарное состояние микроламинарных пламен находилось методом установления – путем решения нестационарной системы, описывающей развитие микроламинарного пламени по времени. Рассмотрим развитие источникового члена массовой доли паров воды $SY_{H_2O}^{flamelet}(z, \bar{p}, \bar{N}^{st}, t)$ для некоторого набора параметров $(z, \bar{p}, \bar{N}^{st})$ в ходе процесса установления стационарного состояния – см. рис. 2.29,г. В стационарной библиотеке используется конечная величина $SY_{H_2O}^{flamelet}(\bar{z})$, взятая при $t \rightarrow \infty$, когда изменений больше не происходит, и источник оказывается мал. Но в этом случае огромные величины, возникающие в момент начала горения, не принимаются во внимание. Чтобы сделать метод применимым к течениям, в которых существенны процессы возникновения и развития пламени, необходимо добавить в модель учет этих переходных процессов.

Был применен подход, основанный на работе [168]. При построении обычной библиотеки стационарных флеймлетов используется стационарное решение уравнений (1.16) – $f(z, p, N^{st}, t \rightarrow \infty)$. Для учета переходных эффектов используется библиотека, основанная на полном нестационарном решении этого уравнения – $f(z, p, N^s, t)$. В качестве начальных условий для получения этого решения используется линейное распределение f , основанное на гипотезе “черно-белого смешения” топлива (F) и окислителя (O): $f(z)|_{t=0} = z \cdot f^F + (1-z) \cdot f^O$. Вместо формулы (1.28) используется следующее выражение:

$$\bar{f}_i = \gamma \int_0^1 \int_0^1 f_i^{flamelet}(z, \bar{p}, \bar{N}_i^s, t(c)) \text{pdf}(z, c) dz dc + (1-\gamma) \left((1-\bar{z}) \cdot (f_i)_O + \bar{z} \cdot (f_i)_F \right). \quad (2.2)$$

Здесь $t(c)$ – момент времени, когда в нестационарном решении уравнения (1.16) достигается заданное значение параметра полноты протекания реакции c . В работе [168] величины z и c предполагаются статистически независимыми: $\text{pdf}(z, c) = \text{pdf}(z) \cdot \text{pdf}(c)$. В качестве $\text{pdf}(c)$ в [168] используется бета-функция, основанная на заданных значениях \bar{c} и \bar{c}^2 . Для нахождения этих величин решаются дополнительные уравнения в частных производных. Однако в [168] не решаются дифференциальные уравнения для средних по времени массовых долей реагирующих компонент смеси – \bar{Y}_i . При использовании комбинированного метода, основанного на flamelet, эти уравнения решаются; а концентрация воды Y_{H_2O} неплохо характеризует полноту протекания реакции (в частности, она монотонно увеличивается от 0 до 1 по мере протекания реакции). В итоге, в библиотеку flamelet был добавлен еще один параметр – переменная развития процесса c , в качестве которого берется массовая доля H_2O – \bar{Y}_{H_2O} . Для простоты полагается $\text{pdf}(c) = \delta(c - \bar{Y}_{H_2O})$. Таким образом, в формуле (2.2) момент времени $t(c)$

подбирается таким образом, чтобы эта формула дала значение \bar{Y}_{H_2O} , совпадающее с локальным решением дифференциального уравнения в частных производных для \bar{Y}_{H_2O} .

Использование формулы (2.2) привело к увеличению $\bar{SY}_{H_2O}^{pdf}$ в области воспламенения, и была достигнута стабилизация пламени.

Далее комбинированный метод, основанного на flamelet, был применен к расчетам эксперимента J.S. Evans et al. [100]. При этом расчеты оказались неустойчивыми. В областях с $\bar{Y}_{O_2} \approx 0$ возникали огромные по абсолютной величине отрицательные источниковые члены $\bar{SY}_{O_2}^{pdf}$. Анализ показал, что причиной являлись большие значения $\sigma \equiv \bar{z}^2$, т.е. значительная ширина “купола” функции плотности вероятности (ФПВ). Поэтому при вычислении источникового члена по формуле $\bar{SY}_{O_2}^{pdf} = \int_0^1 SY_{O_2}^{flamelet}(z) \cdot pdf(z) dz$ в интегрировании участвовали значения $SY_{O_2}^{flamelet}(z)$, расположенные на отрезке $z \in [0; 1]$ далеко от локального значения \bar{z} .

Для пояснения на рис. 2.30,а для некоторого сечения ($x/d=13.6$) сопоставлены профили источникового члена в уравнении для массовой доли кислорода, полученные разными способами. $\bar{SY}^{lam}(O_2)$ (оранжевая кривая) – источниковый член, рассчитанный по средним параметрам течения (без учета TCI). $\bar{SY}^{pdf}(O_2)$ (зеленая кривая) – источниковый член, рассчитанный по формуле

$$\bar{SY}_{O_2}^{pdf} = \int_0^1 SY_{O_2}^{flamelet}(z) \cdot pdf(z) dz \quad (2.3)$$

с использованием бета–ФПВ, рассчитанной по полученным в расчете значениям \bar{z} и $\sigma \equiv \bar{z}^2$. Также на график нанесены профили средней массовой доли кислорода \tilde{Y}_{O_2} и коэффициента c_{diff_comb} , который используется в комбинированном методе – см. формулу (1.58). Напомним, что $c_{diff_comb} = 1$ указывает на область диффузионного горения, где $\bar{SY} \equiv \bar{SY}^{pdf}$. Эта область отмечена на рисунке.

Как видно из рис. 2.30,а, профиль $\bar{SY}^{pdf}(O_2)$ смещен относительно $\bar{SY}^{lam}(O_2)$ и содержит гораздо бóльшие по модулю отрицательные значения. При этом в области диффузионного горения, где используется $\bar{SY}^{pdf}(O_2)$, большие по модулю отрицательные значения этого члена возникают именно в тех местах, где концентрация кислорода близка к нулю ($r/d \sim 0.008$). Это похоже на нефизичное поведение модели. Наоборот, профиль источникового члена $\bar{SY}^{lam}(O_2)$ выглядит вполне физично: он отличен от нуля только в области смешения, где массовая доля кислорода отлична от нуля. Для того, чтобы убедиться, что нефизичная форма профиля

$\overline{SY}^{pdf}(O_2)$ обусловлена слишком большими значениями $\sigma \equiv \overline{z'^2}$, на рис. 2.30,а пунктирной линией показан профиль $\overline{SY}^{pdf}(O_2)\big|_{\sigma=0}$, рассчитанный по формуле (2.3) при использовании бета-ФПВ, соответствующей $\sigma=0$. При $\sigma=0$: $\overline{SY}(O_2)_{pdf}\big|_{\sigma=0} = SY_{O_2}^{flamelet}(\bar{z})$ и видно, что получается физически непротиворечивое распределение источников члена, близкое к $\overline{SY}^{lam}(O_2)$.

Это показывает недостаточность используемых в расчете ограничений на область допустимых значений для бета-ФПВ

$$\sigma \leq \sigma_{\max 1} = \min \left\{ \frac{\bar{z}^2(1-\bar{z})}{1+\bar{z}}; \frac{\bar{z}(1-\bar{z})^2}{2-\bar{z}} \right\}, \quad (2.4)$$

которые следуют из условия положительности показателей степени в ФПВ (см. §2.5).

Предложен способ устранения описанной проблемы. Идея заключается в том, чтобы построить дополнительные ограничения на значения $\sigma \equiv \overline{z'^2}$. Наиболее естественно для этого воспользоваться условием, которое уже было использовано в предыдущем разделе для гауссовой ФПВ: $0 \leq z \pm k\sqrt{\sigma} \leq 1$ (где $1 \lesssim k \lesssim 3$). Это приводит к ограничению:

$$\sigma \leq \sigma_{\max 2} = \min \left\{ \frac{\bar{z}^2}{k^2}, \frac{(1-\bar{z})^2}{k^2} \right\}. \text{ При } k=1 \text{ это ограничение является более слабым, чем условие}$$

$\sigma \leq \sigma_{\max 1}$ (см. рис. 2.28,б). Но при бóльших значениях k условие $\sigma \leq \sigma_{\max 2}$ оказывается более сильным в окрестности $z=0$ и $z=1$. Окончательно берем $\sigma \leq \min(\sigma_{\max 1}; \sigma_{\max 2})$.

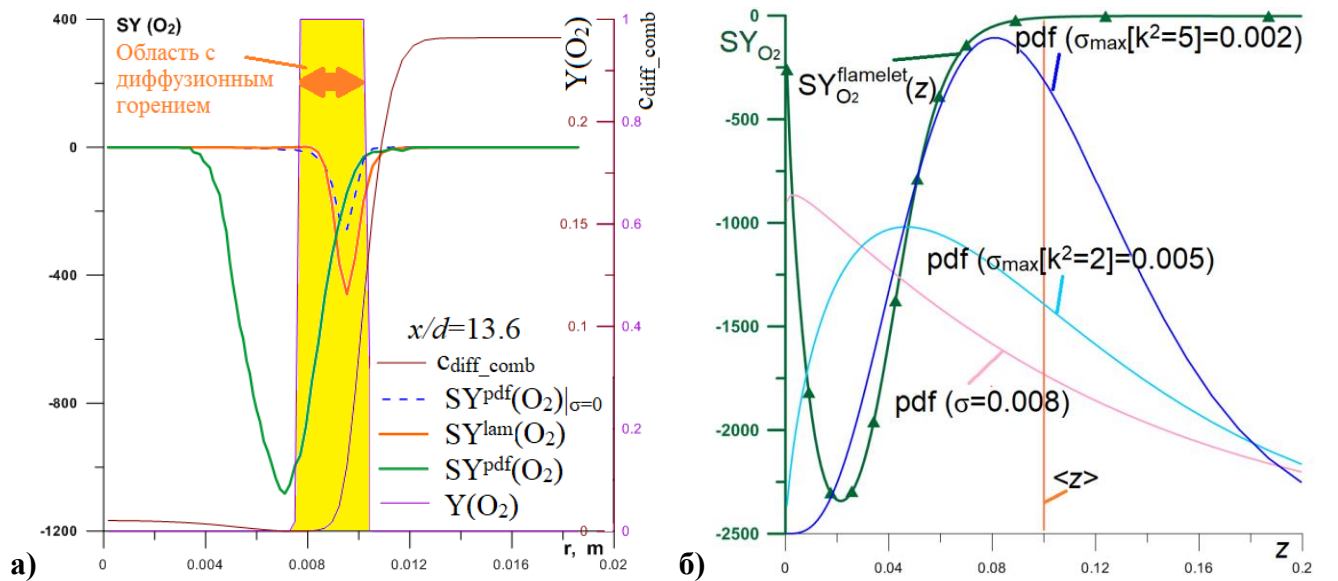


Рисунок 2.30 – Применение комбинированного метода в нестационарной постановке flamelet к моделированию эксп. J.S. Evans et al. [100]: а) Распределения параметров течения в поперечном сечении $x/d=13.6$; б) $\overline{SY}_{O_2}^{pdf}(\bar{z})$ из библиотеки флеймлетов и форма ФПВ для разных значений σ

На рис. 2.30,б для некоторой точки из сечения $x/d=13.6$, $r/d=0.008$ показано распределение $SY_{O_2}^{flamelet}(z)$, которое подставляется в интеграл (2.3). Вертикальной оранжевой линией указано среднее значение \bar{z} в рассматриваемой точке. Там же представлены графики бета-ФПВ, которые получены с использованием нового ограничения $\sigma \leq \min(\sigma_{\max 1}; \sigma_{\max 2})$ при трех разных значениях k : 1) $k=0$ (это приводит к стандартному ограничению $\sigma \leq \sigma_{\max 1}$); 2) $k=\sqrt{2}$; 3) $k=\sqrt{5}$. Видно, что стандартное распределение имеет очень широкий купол, а максимум этого распределения очень далек от \bar{z} . При усилении ограничения (т.е. при увеличении k) максимум ФПВ смещается в сторону \bar{z} , а ширина купола уменьшается.

Легко понять, что такие изменения формы ФПВ очень сильно влияют на значение интеграла (2.3). При $k=0$ было получено $\overline{SY}_{O_2}^{pdf} \approx -700$, при $k=\sqrt{2}$ – $\overline{SY}_{O_2}^{pdf} \approx -570$, а при $k=\sqrt{5}$ – $\overline{SY}_{O_2}^{pdf} \approx -260$. При $k=\sqrt{5}$ расчет стал устойчивым.

Таким образом, наблюдается очень сильная зависимость результатов от величин σ , которые находятся из решения полуэмпирического дифференциального уравнения в частных производных. Предложенное ограничение – не лучшее решение проблемы, потому что подправленное поле σ уже не удовлетворяет этому дифференциальному уравнению. Поэтому расчет, основанный на решении этого дифференциального уравнения, будет снова и снова воспроизводить описанную проблему. Лучшим решением могло бы быть усовершенствование уравнения для σ , но это выходит за пределы данного исследования.

Напомним, что в комбинированном методе переключение с одного режима на другой производится на основе сопоставления характерных времен. Поэтому требует настройки еще один параметр, управляющий разделением режимов горения – $c_{diff_comb} = f(t_{chem}, t_{\eta}, t_l)$ (см. §1.13). Согласно описанию, приведенному в §1.13, есть три управляющих коэффициента: c_{chem} , c_{turb_micro} , c_{turb_macro} . Независимых параметров два, рассматриваются все три, т.к. их можно интерпретировать как коэффициенты при соответствующих временах. На рис. 2.31,а приведены распределения t_{chem} , t_{η} , t_l в некотором сечении $x = const$. Относительное положение этих кривых (все сплошные линии) наглядно показывает разделение режимов. На том же рис. 2.31,а можно проследить изменение в положении кривых при изменении значений параметров c_{chem} , c_{turb_micro} , c_{turb_macro} – одному положению соответствуют сплошные кривые, другому – прерывистые, каждому параметру – свой цвет. На рис. 2.31,б сравниваются распределения, полученные с разными значениями коэффициентов. Выбран оптимальный набор коэффициентов: $c_{chem} = 0.01$, $c_{turb_micro} = 10$, $c_{turb_macro} = 1$.

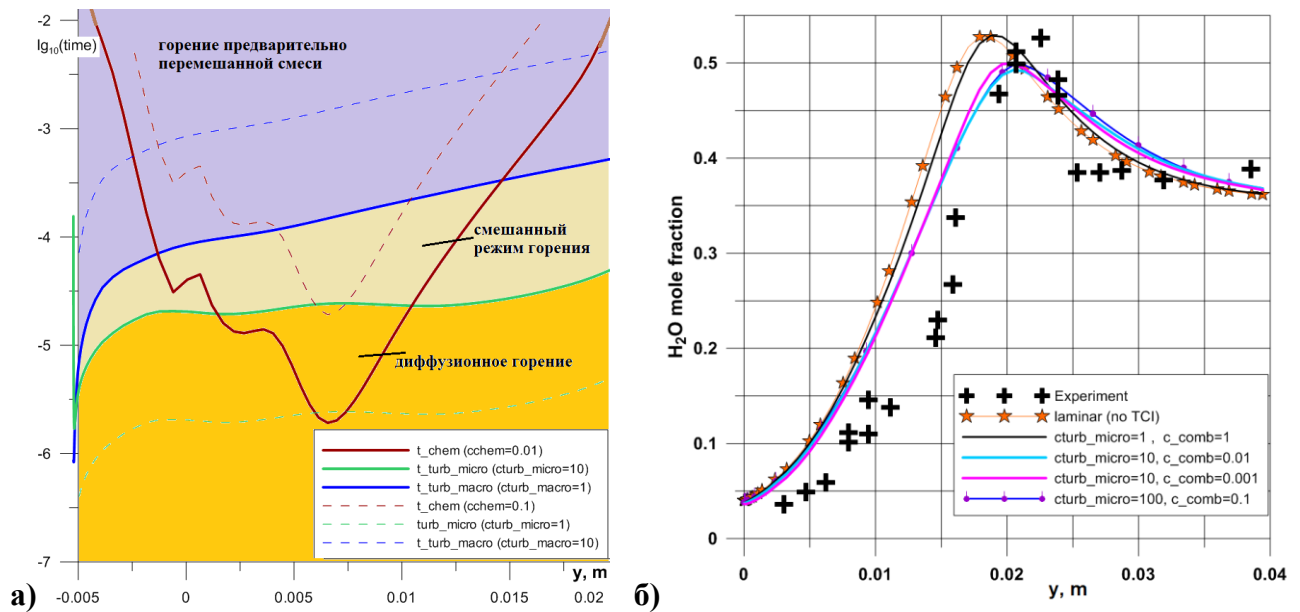


Рисунок 2.31 – Моделирование эксперимента M.C. Burrows & A.P. Kurkov [67]:
а) распределения t_{chem} , t_{η} , t_l в сечении $x=const$; б) профили мольной доли H_2O в выходном сечении $x=0.356 m$ для разных значений коэффициентов c_{chem} , c_{turb_micro} , c_{turb_macro}

После того, как была завершена настройка комбинированного метода, этот метод был применен к параметрическим расчетам экспериментов J.S.Evans et al. и M.C. Burrows & A.P. Kurkov. В этих расчетах было исследовано влияние коэффициентов в уравнениях для \bar{z} и $\sigma \equiv \bar{z}'^2$ (Sc_T^z , Pr_T^σ , C_N и C_σ). Оказалось, что эти коэффициенты сильно влияют на решение. Лучшие результаты при моделировании экспериментов J.S.Evans et al. и M.C. Burrows & A.P. Kurkov были получены с $Sc_T^z=1.5$, $Pr_T^\sigma=1.5$, $C_\sigma=5$, $C_N=1.0$.

Наилучшие результаты сравниваются с экспериментом и с расчетами без учета TCI на рис. 2.32. При моделировании эксперимента J.S.Evans et al. комбинированный метод привел к сильному изменению решения, но не обеспечил совпадения с экспериментом. Это естественно с учетом замечаний, сделанных в §2.3 (без TCI). Напротив, в эксперименте M.C. Burrows & A.P. Kurkov применение нового метода привело лишь к небольшим изменениям. Гораздо более сильное улучшение результатов было достигнуто без учета TCI путем сужения канала, моделирующего нарастание пограничного слоя на боковых стенках (см. §2.3).

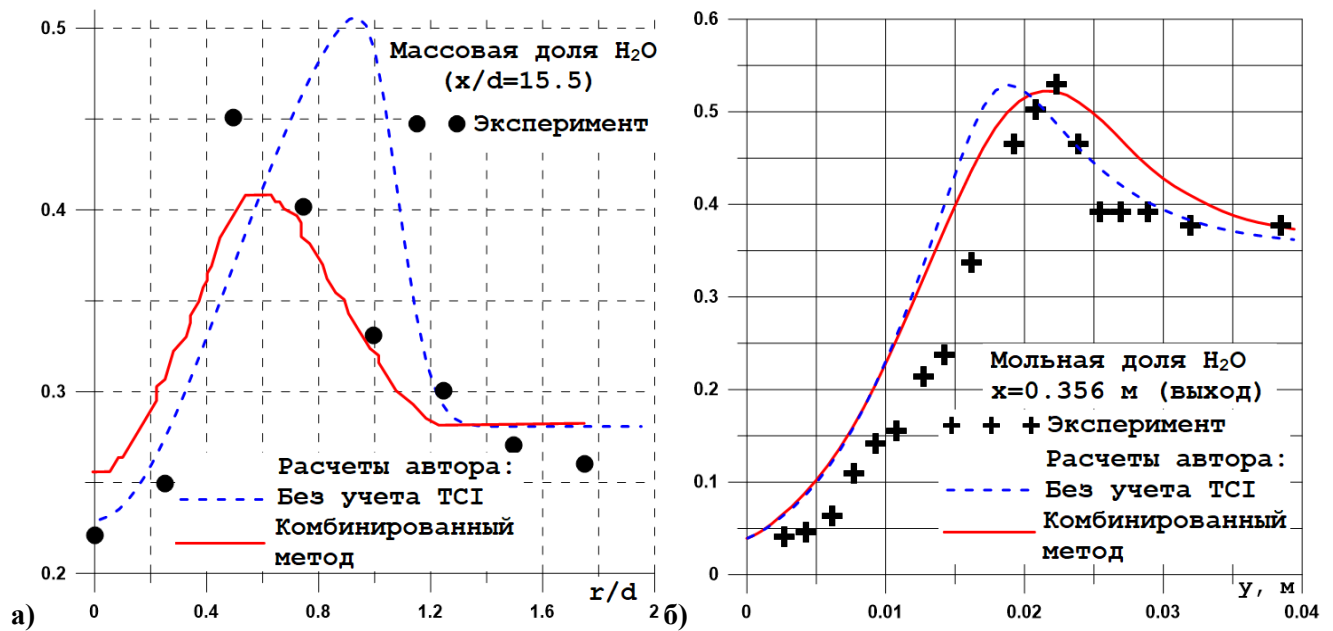


Рисунок 2.32 – Результаты расчетов без учета TCI и по комбинированному методу.

- а) Поперечное распределение массовой доли H_2O в сечении $x/d=15.5$ в эксп. J.S. Evans et al. [100].
 б) Профили мольной доли H_2O в выходном сечении в эксп. M.C. Burrows & A.P. Kurkov [67]

§2.6. Применение подхода PaSR к моделированию экспериментов

J.S.Evans et al. и M.C. Burrows & A.P. Kurkov

Рассмотрим теперь моделирование экспериментов J.S.Evans et al. [100] и M.C. Burrows & A.P. Kurkov [67] с использованием другого класса моделей TCI – моделей реактора частичного перемешивания.

Сначала в комплексе программ *zFlare* был реализован метод EDC [118, 137, 138, 155] (§1.11). Однако, в постановке (1.38–1.39) при моделировании эксперимента J.S. Evans et al. [100] горение в расчетах не стабилизировалось. Как показал анализ, параметр γ^* (объемная доля “тонких структур”, в которых происходит горение) в расчете оказался слишком малым. Из-за этого были малы средние значения источниковых членов $\bar{S}_i = \gamma^* S_i^*$, и пламя не стабилизировалось в канале. Заметим, что модель EDC Магнуссена была разработана и применяется, главным образом, для дозвуковых течений. Поскольку величина γ^* обратно пропорциональна характерной величине турбулентных пульсации скорости (q), а большим скоростям потока могут соответствовать большие значения q , то вычисляемая объемная доля тонких структур γ^* становится очень мала (в расчетах были получены значения $\gamma^* \sim 0.01 \dots 0.04$ в зоне, где должно быть горение – см. рис. 2.33,а). Таким образом, модель EDC требует доработки для возможности ее применения в высокоскоростных течениях.

Возможной альтернативой является другая модель для учета TCI того же класса – т.н. Partially Stirred Reactor model (PaSR, [73–75]), которая, главным образом, отличается от модели EDC определением основных величин модели – γ^* и τ^* . В этой модели они вычисляются по формулам (1.40) из §1.11.

Применение метода PaSR к моделированию эксперимента J.S.Evans et al. [100] привело к противоположным результатам по сравнению с моделью EDC. В зоне горения были получены слишком большие значения объемной доли “тонких структур” – $\gamma^* > 0.8$ (см. рис. 2.33,б). Поэтому поле течения почти не отличалось от поля, полученного без учета TCI. По мнению автора, слишком большие значения параметра γ^* могут быть обусловлены некорректным определением характерного времени химических процессов $\tau_{хим}$. Определение $\tau_{хим} \approx \delta_L / S_L$ является естественным, если основную роль в стабилизации горения играет волновой механизм распространения пламени. Если же в задаче могут присутствовать области со стабилизацией горения за счет самовоспламенения, то там в качестве характерного времени естественно взять время задержки воспламенения: $\tau_{хим} = \tau_{инд}$. В общем же случае может быть необходим локальный выбор $\tau_{хим}$, в зависимости от характера протекающих химических процессов.

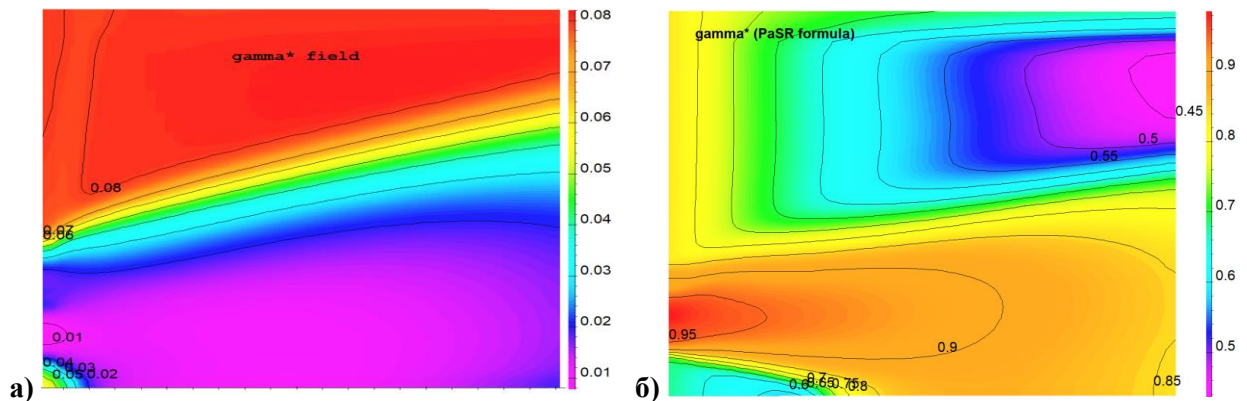


Рисунок 2.33 – Результаты применения моделей класса PaSR к описанию эксп. J.S.Evans et al. [100]. Поле объемной доли тонких структур γ^* в расчетах по моделям а) EDC, б) PaSR.

Для понимания действия модели PaSR были проведены расчеты с параметром γ^* , фиксированным во всем поле на протяжении всего расчета. Эти расчеты показали (рис. 2.34), что при $\gamma^* \rightarrow 1$ результаты действительно приближаются к расчетам без учета взаимодействия турбулентности и горения, а при $\gamma^* \rightarrow 0$ – к расчету с выключенными химическими реакциями. Ни одна из кривых на рис. 2.34, включая кривую, полученную с переменным параметром γ^* , не дает приближения к эксперименту по всей совокупности параметров по сравнению с расчетом без TCI.

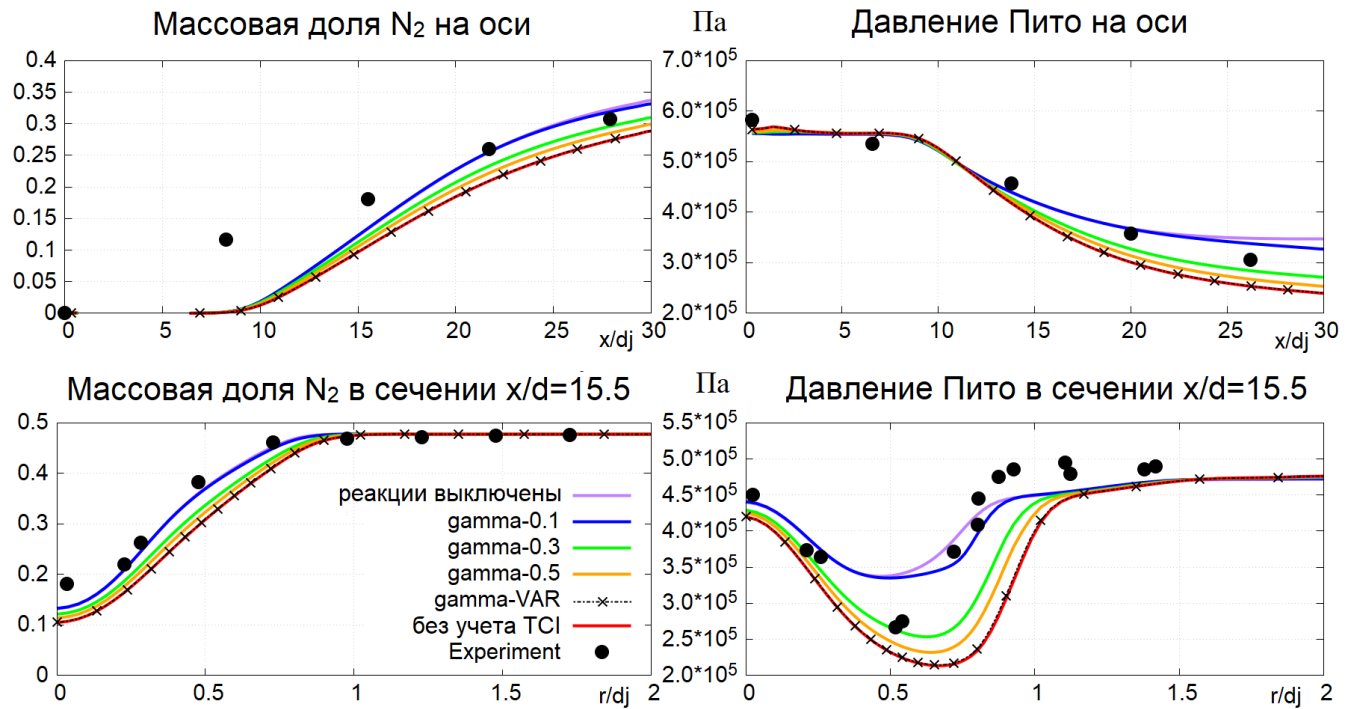


Рисунок 2.34 – Результаты расчетов эксп. J.S.Evans et al. [100]: без учета TCI – красный цвет; по модели PaSR с переменными значениями γ^* – черный пунктир с макрерами; с фиксированным γ^* : 0.5 – оранжевый, $\gamma^*=0.3$ – зеленый, 0.1 – синий; и с выключенными реакциями – фиолетовый

Расчеты на основе модели PaSR были проведены и для эксперимента M.C. Burrows & A.P. Kurkov. При этом были получены сходные результаты. Объемная доля “тонких структур” оказалась близкой к 1 в области тепловыделения (см. рис. 2.35,а). Поэтому полученное распределение параметров мало изменилось по сравнению с расчетом без TCI (рис. 2.35,б).

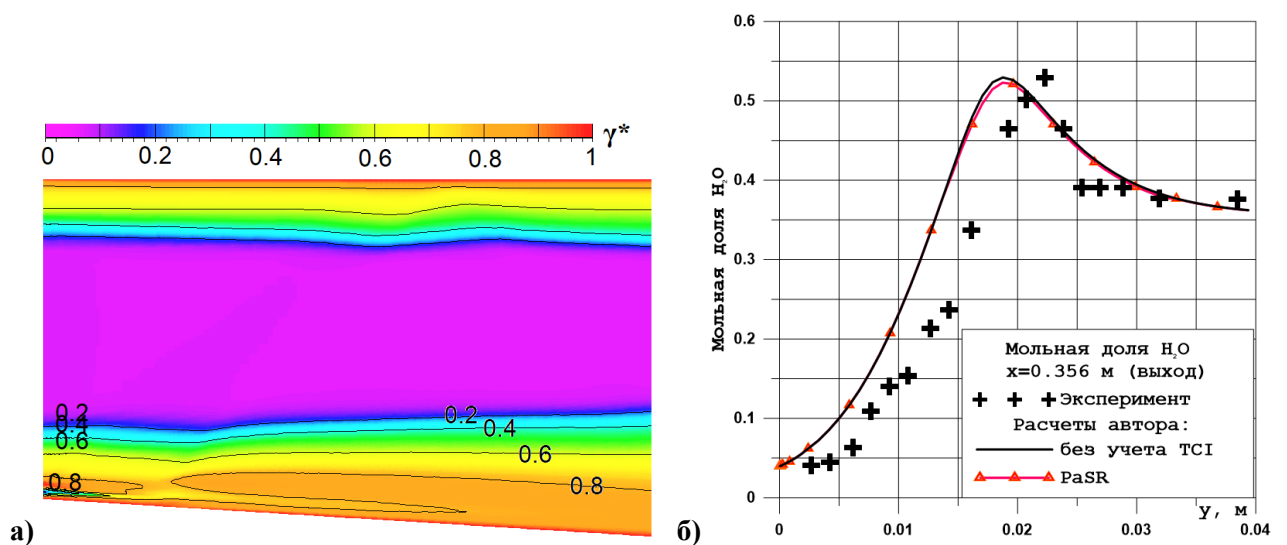


Рисунок 2.35 – Результаты применения моделей класса PaSR к описанию эксп. M.C. Burrows & A.P. Kurkov: а) Поле объемной доли тонких структур γ^* ; б) профили массовой доли паров воды на выходе из расчетной области

Таким образом, при одинаковых граничных условиях для “тонких структур” и для окружающего пространства и в сверхзвуковых течениях, где нет влияния вверх по потоку, применение модели PaSR приводит к уменьшению интенсивности протекающих химических реакций по сравнению с расчетом без TCI.

§2.7. Моделирование эксперимента T.S. Cheng. Расчеты без учета TCI

Существенным недостатком экспериментов J.S.Evans et al. и M.C. Burrows & A.P. Kurkov является применение контактных методов измерений. Вводимые в поток инструменты изменяют картину течения. Особенно ненадежными являются измерения состава путем отбора проб из потока. Этим недостатком лишены эксперименты T.S.Cheng et al. [72], в которых для измерения температуры и концентраций применялись неконтактные методы. Благодаря большому объему измеренных данных, этот эксперимент широко применяется для валидации расчетных программ для сверхзвукового горения, и данные анализировались в ряде расчетно–теоретических работ [52, 55, 57, 110, 115, 117, 141, 192]. Подробное описание численного моделирования этого эксперимента в квазиламинарном приближении и на основе модели PaSR дано в диссертации J. Moule [152]. Учитывая негативный опыт использования моделей класса flamelet, все расчеты данного эксперимента проводились автором с применением модели PaSR.

В экспериментах Т.С. Ченга и др. [72] звуковая струя топлива (водород H_2) из инжектора диаметром $D=2.36$ мм, окруженная спутным кольцевым сверхзвуковым потоком горячего загрязненного воздуха из сопла с внешним диаметром 17.78 мм, истекала во внешнее открытое пространство с покоящимся воздухом. Спутный поток загрязненного воздуха создавался огненным подогревателем, в котором водород сжигался в воздухе, обогащенном кислородом, и полученные в результате продукты горения разгонялись до $M=2$ в сопле Лавалья. Схема установки и параметры потоков из [72] приводятся на рис. 2.36. Чтобы получить близкую к экспериментальным измерениям статическую температуру на выходе из сопла, в расчетах пришлось задать полную температуру на выходе из подогревателя $T_0 \sim 2070$ К, хотя авторы эксперимента декларируют $T_0 \sim 1750$ К. Подобная процедура при моделировании этого эксперимента использовалась и в диссертации J. Moule [152]. Результаты измерений, проведенных в 1994 году Ченгом и др. с использованием оптических методов (ультрафиолетовое рассеяние Рамана и методы лазерной флуоресценции), изложены в [72]. В эксперименте проводились замеры средних величин и пульсаций температуры, а также концентраций молекул H_2 , O_2 , N_2 , O_2 и радикала OH . Измерения проводились в ряде поперечных сечений, на расстояниях от среза сопла: $x/D=0.85, 10.8, 21.5, 32.3, 43.1, 64.7$ и 86.9 .

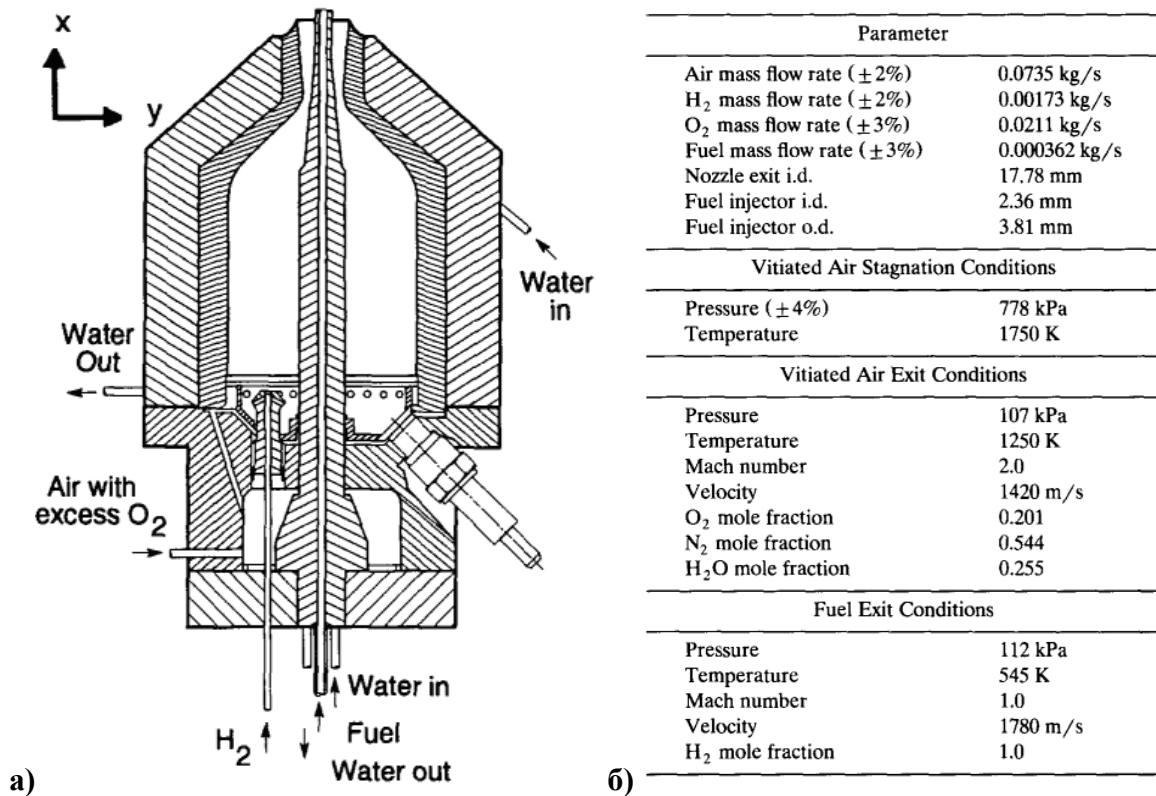
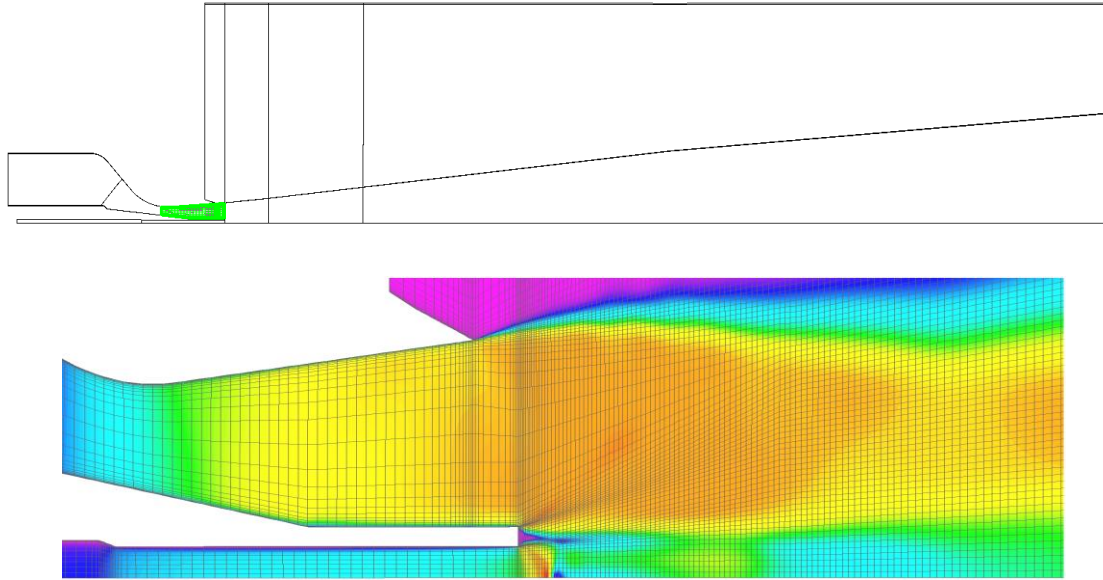


Рисунок 2.36 – Эксперимент [72]: а) схема установки, б) условия эксперимента

Для получения корректных профилей на срезе сопел, течение моделировалось в подводящих каналах и соплах. В силу осевой симметрии течения, рассмотрен сектор в 6° , содержащий одну ячейку в направлении z , а расчетная область простирается в длину на $\sim 170D$ (включая область подробной сетки до $x/D \sim 50$), в радиальном направлении до $R/D \sim 50$ с подробной сеткой в области струи и внешнего слоя смешения (см. рис. 2.37). Была рассмотрена система вложенных сеток и получена сходимость по сетке. Самая подробная сетка (mesh0) включает порядка 350000 ячеек с использованием граничного условия “закон стенки”. Размер минимальной ячейки по нормали к стенке на срезе сопла составлял $y_w = 2.5 \cdot 10^{-6}$ м и $3.7 \cdot 10^{-6}$ м ($y^+ \sim 10$) для внутреннего и внешнего сопел, соответственно. Сетка содержала около 50 ячеек поперек внутреннего сопла, около 100 ячеек поперек внешнего сопла. Две более грубые сетки (mesh1 и mesh2) были получены сокращением числа ячеек вдвое по каждому направлению: mesh1 получена из mesh0, а mesh2 получена из mesh1.

Сначала были заданы на левой границе обоих сопел такие параметры турбулентности: $q=32$ м/сек, $\omega=15500$ Гц. В этом расчете было получено неудовлетворительное согласование с экспериментальными данными (о влиянии задания турбулентности далее и на рис. 2.43). Поэтому был задан уровень турбулентности на выходе из сопла, следуя работе [152]: в потоке воздуха – $Tu=10\%$, $L_T=0.5D$ (соответствующие значения $q=170$ м/сек, $\omega=12750$ Гц), а в потоке водорода – $Tu=1.5\%$, $L_T=0.077D$ ($q=32$ м/сек, $\omega=15500$ Гц). Если в расчете величины q или ω на срезе сопла оказывались меньше указанных значений, то они корректировались. Возможно, это

связано с тем, что в расчете не воспроизводятся специфические особенности течения в подогревателе (в частности, сильная закрутка струек топлива, попадающих в подогреватель). Однако, в [72] не приводится никаких данных по этому поводу, а моделирование течения с закруткой является отдельной сложной задачей, лежащей за пределами настоящего исследования. Поэтому для задания нужного уровня турбулентности в сечении на выходе из сопел выполнялась коррекция, повышавшая параметры q и ω в случае, если они оказывались ниже заданных значений.



**Рисунок 2.37 – Численное моделирование эксперимента [72]:
расчетная область и детали сетки в окрестности среза сопла**

На рис. 2.38 приводится поле числа Маха в расчетах, а на рис. 2.39 – поле температуры. На рис. 2.40 сопоставляются экспериментальные данные и профили из расчетов в четырех сечениях, полученные на разных сетках при одинаковых остальных условиях. Следует отметить несимметричность экспериментальных данных. Можно видеть, что результаты, полученные на разных сетках, отличаются незначительно (отличие не более 1%), что позволяет использовать сетку mesh2 для параметрических расчетов.

Для оценки влияния различных факторов и параметров расчета на течение и развитие горения, а также с целью оценки недостающих из экспериментальных данных условий, была проведена серия параметрических расчетов без учета TCI на самой грубой сетке. Исследовалась чувствительность течения и получаемых профилей к различным факторам: к условиям теплообмена на стенках каналов и сопел, к параметрам течения на входе каждого сопла (величины полных температуры и давления, состав газовой смеси из подогревателя, распределение параметров турбулентности), к значениям турбулентных чисел Шмидта и Прандтля, к составу газа во внешнем покое пространстве и др.

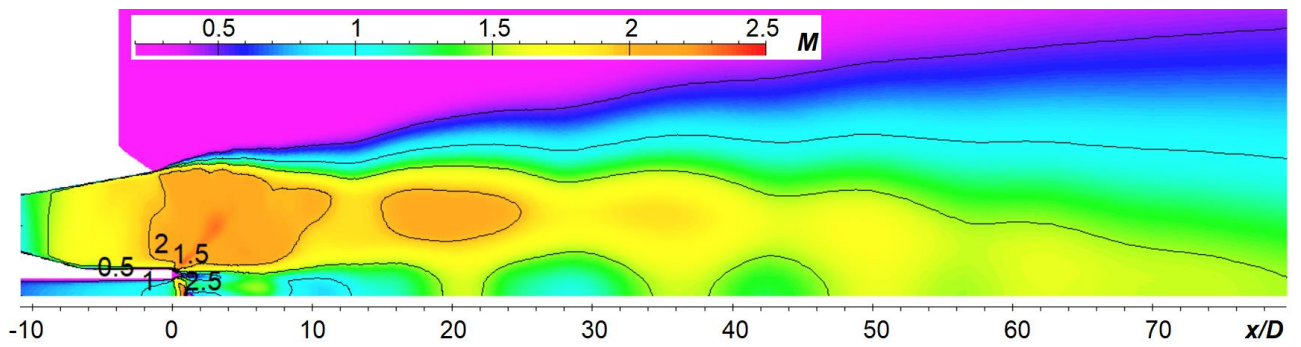


Рисунок 2.38 – Поле числа Маха при моделировании эксперимента [72]

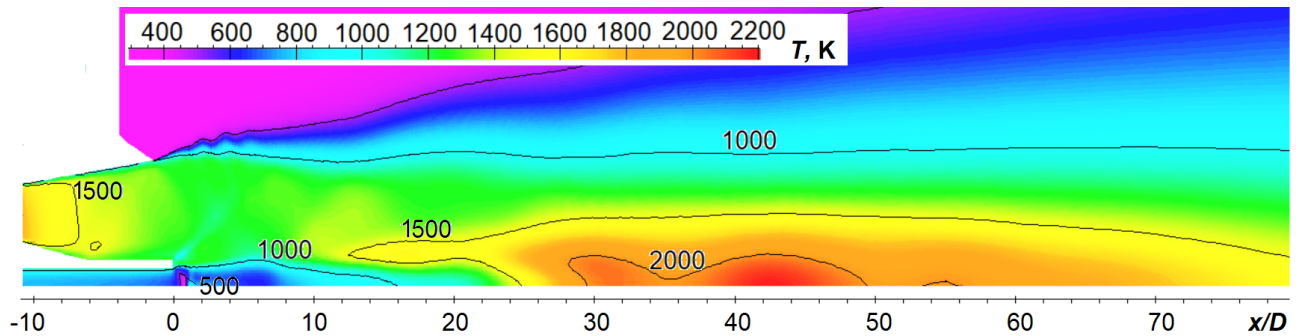


Рисунок 2.39 – Поле температуры T , К при моделировании эксперимента [72]

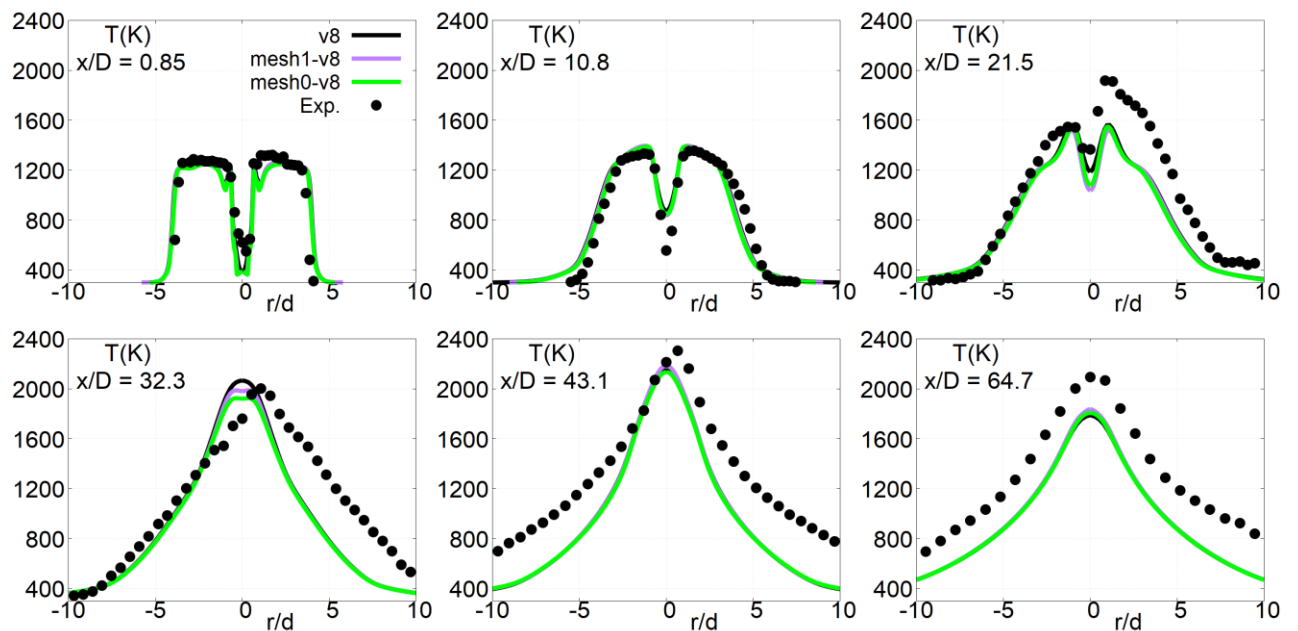


Рисунок 2.40 – Моделирование эксп. [72]: сходимость по сетке. Профили температуры, К

Влияние наиболее значимых параметров представлено рис. 2.41–2.43, где показаны профили температуры в последовательных сечениях $x/D = \text{const}$. Наиболее близкие к эксперименту результаты были получены в расчете со следующими параметрами: температуры стенок инжектора водорода – 500 К и 1200 К, температура внутренней стенки сопла для воздуха – 1100 К, параметры торможения в потоке воздуха – $P0_{Out} = 830000$ Па, $T0_{Out} = 2170$ К,

параметры торможения в потоке водорода – $P0_{Inn} = 320000$ Па, $T0_{Inn} = 800$ К, $Sc_t=Pr_t=0.7$. На входе производилась описанная выше коррекция параметров турбулентности. На рис. 2.41–2.43 другие расчеты сопоставляются именно с этим расчетом (который обозначен как “лучший расчет”).

При пониженной температуре стенок ($T_w=500$ К) температура в первых сечениях оказывается ниже, чем в “лучшем расчете”, и не приближается к эксперименту (рис. 2.41).

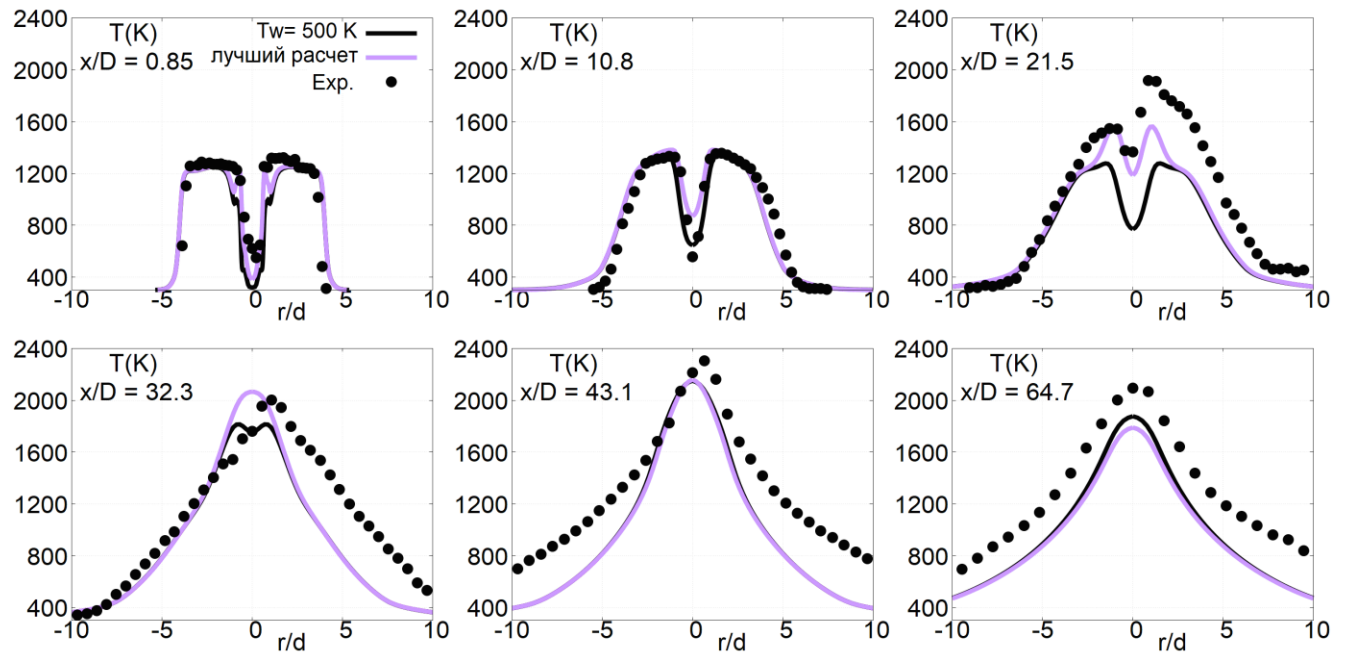


Рисунок 2.41 – Численное моделирование эксп. [72]: влияние температуры стенок сопел

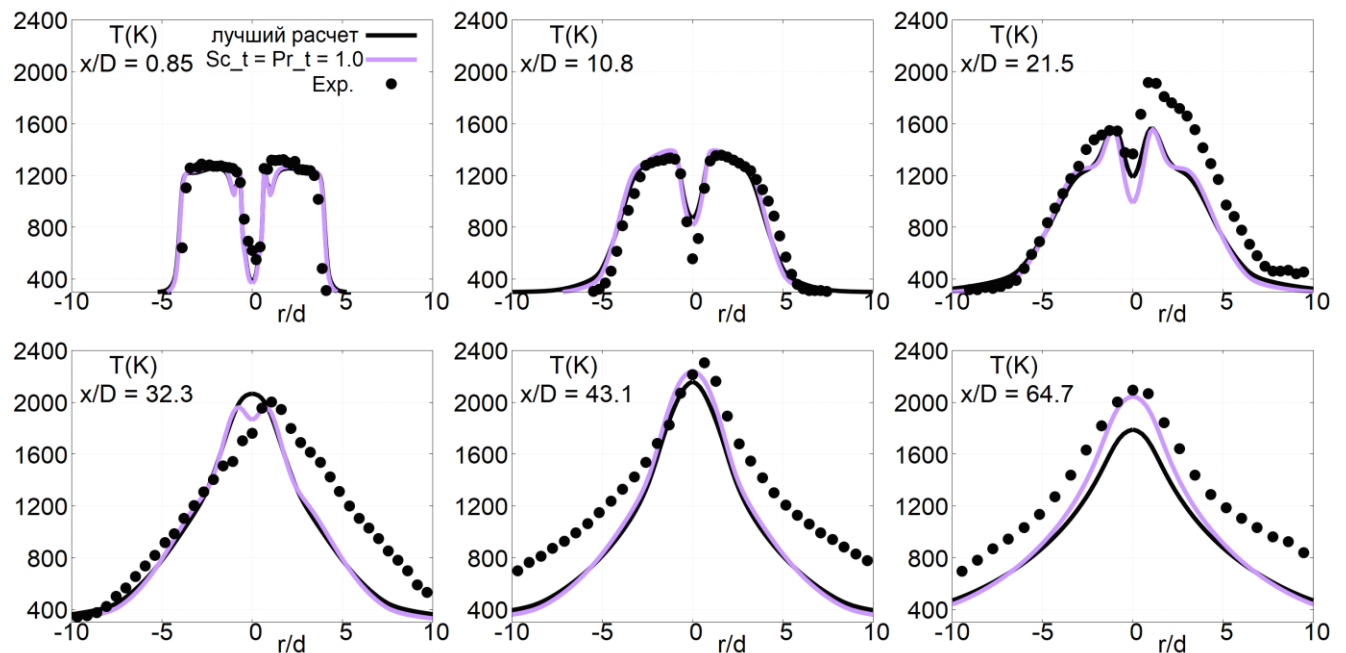


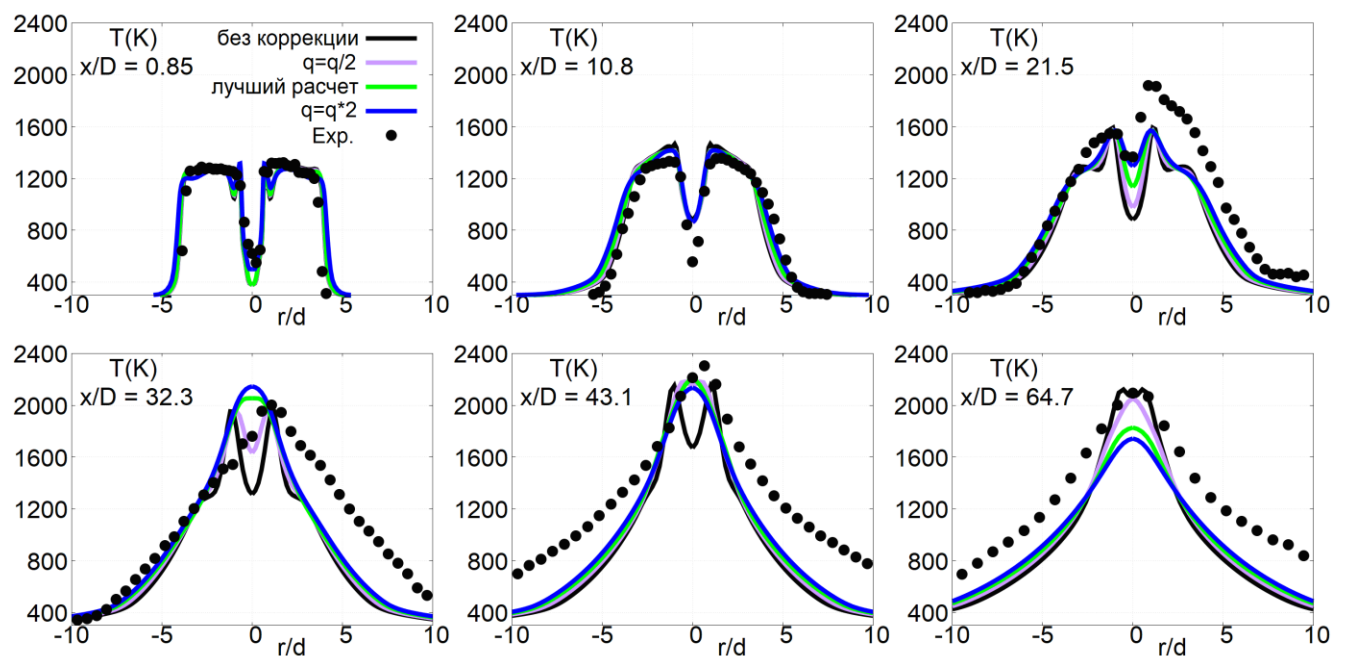
Рисунок 2.42 – Численное моделирование эксперимента [72]: влияние Sc_t и Pr_t

Использование значения турбулентных чисел Шмидта и Прандтля равных $Sc_t=Pr_t=1.0$ вместо рекомендованного в [152] $Sc_t=Pr_t=0.7$ (см. рис. 2.42) приводит к появлению в сечении

$x/d=32.3$ двух пиков в распределении T , которых нет в эксперименте. В последнем сечении на оси температура выше и ближе к эксперименту при $Sc_t=Pr_t=1.0$. Далеко от оси в этом случае температура ниже, чем при $Sc_t=Pr_t=0.7$, т.к. диффузия тепла при росте Pr_t ослабевает. В целом влияние Sc_t и Pr_t невелико и автор остановился на $Sc_t=Pr_t=0.7$.

Влияние изменения полной температуры на 10% во внешнем контуре оказалось несущественным.

Использование коррекции, основанной на параметрах, заданных из эксперимента (как в “лучшем расчете”) обеспечивает качественно правильный характер профилей температуры. Повышение параметра q на срезе сопла в 2 раза по сравнению с “лучшим расчетом”, уменьшение q в 2 раза и попытка отказаться от коррекции параметров турбулентности на срезе сопла (что приводит к еще более слабой турбулентности на срезе сопла) не позволяют приблизиться к экспериментальным профилям температуры – см. рис. 2.43.



**Рисунок 2.43 – Численное моделирование эксперимента [72]:
влияние уровня турбулентности в сечении среза сопла**

Следует отметить, что концентрация водяных паров в экспериментальных профилях на внешней границе не равна нулю, что говорит о вероятном накоплении в окружающем пространстве продуктов сгорания на протяжении эксперимента. Расчеты с составом, соответствующим внешней границе экспериментальных профилей, показали, что этот эффект мало влияет на структуру горячей струи.

Далее будет рассматриваться только описанный выше “лучший расчет”, дающий наиболее близкие к эксперименту результаты. Результаты этого расчета были сопоставлены данными расчетов на основе уравнений Рейнольдса без учета TCI, которые приведены в диссертации [152] (рис. 2.44). В большинстве расчетных исследований других авторов (к

примеру, [53, 62, 64, 110, 117, 147]) течение обычно моделируется, начиная с первого сечения, доступного в эксперименте, в котором задаются измеренные профили ($x/D \sim 0.85$). Как правило, такого подхода недостаточно для учета особенностей эксперимента. Поэтому для сопоставления были выбраны данные J. Moule из работы [152], в которой рассмотрено моделирование полной задачи, включая течение в соплах и каналах для подогретого воздуха и топлива. В этой работе было получено правильное описание основных характеристик пламени и получены результаты мирового уровня.

В первом экспериментальном сечении $x/D=0.85$ в профиле температуры, взятом из расчета, температура в струе водорода несколько ниже, чем в эксперименте. Это связано с тем, что струя водорода, вытекая из сопла, попадает в сильно расширяющееся пространство, разгоняется там до $M \sim 2$, вследствие чего температура сильно падает. В том же сечении при $r/D \sim 1$ в расчете наблюдается немонотонное поведение профиля температуры с локальным минимумом, которого нет в эксперименте. Это также связано с локальным разгоном расширяющегося сверхзвукового потока подогретого воздуха. Детали течения вблизи уступа представлены на рис. 2.45, где приводятся поля температуры, числа Маха, давления и вертикальной компоненты скорости.

Описанные отклонения от эксперимента в начальном сечении $x/D=0.85$ можно объяснить несоответствием имеющихся чертежей сопел, предоставленных авторами эксперимента, и реальной геометрии, используемой в эксперименте. Например, уступ между потоками топлива и окислителя мог быть скруглен либо мог деформироваться в ходе экспериментов, что привело бы к не такому резкому и сильному расширению потоков. Еще одной причиной могут быть особенности теплообмена на стенках, не известные из эксперимента. Заметим, что при таком несоответствии с экспериментом в начальном сечении вряд ли возможно ожидать лучшего уровня совпадения в последующих сечениях. В сечении $x/D=10.8$ (рис. 2.44) концентрация молекулярного водорода $Y(H_2)$ несколько завышена относительно эксперимента. Это может быть следствием некорректной работы модели турбулентности при описании начального участка струи. В области до установления пламени (до $x/D \sim 25$) получено неплохое согласование с экспериментом по профилям температуры и концентраций. Вплоть до сечения $x/D \sim 21.5$, как и в эксперименте, наблюдаются два локальных экстремума в расчетных профилях температуры и концентрации H_2O . Эти экстремумы расположены в слое смешения, начинающемся от уступа, и разделяющем потоки топлива и окислителя. В сечении $x/D \sim 21.5$ в эксперименте начинает проявляться сильная асимметрия, не воспроизводимая в расчетах [152].

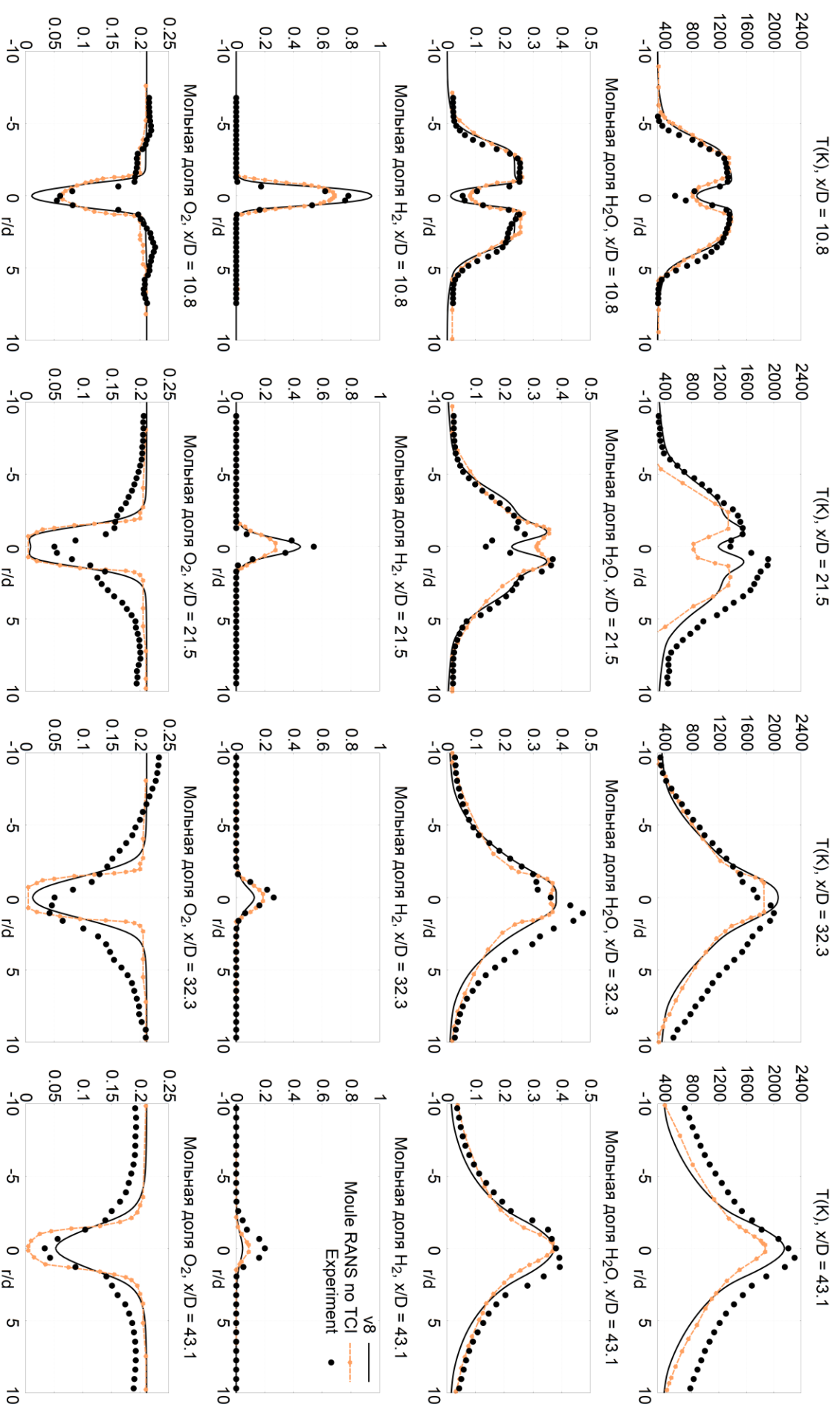


Рисунок 2.44 – Численное моделирование (без учета TCI) эксперимента [72]: сопоставление с экспериментальными данными и расчетами [152]

Расхождение в экспериментальных данных в симметричных относительно оси точках из областей $x < 0$ и $x > 0$ достигает 20%. Однако в расчетах не удастся воспроизвести ни одну из половин экспериментальных профилей. Горение начиналось в эксперименте в сечении $x/D=21.5$, о чем свидетельствует повышение температуры и пики в профилях $Y(H_2O)$ и $Y(OH)$. Расчетные профили имеют те же тенденции. При $x/D=32.3$ слои смешения практически сомкнулись и уже почти нет двух пиков в профилях температуры и $Y(H_2O)$, они слились в один осевой – это зона пламени.

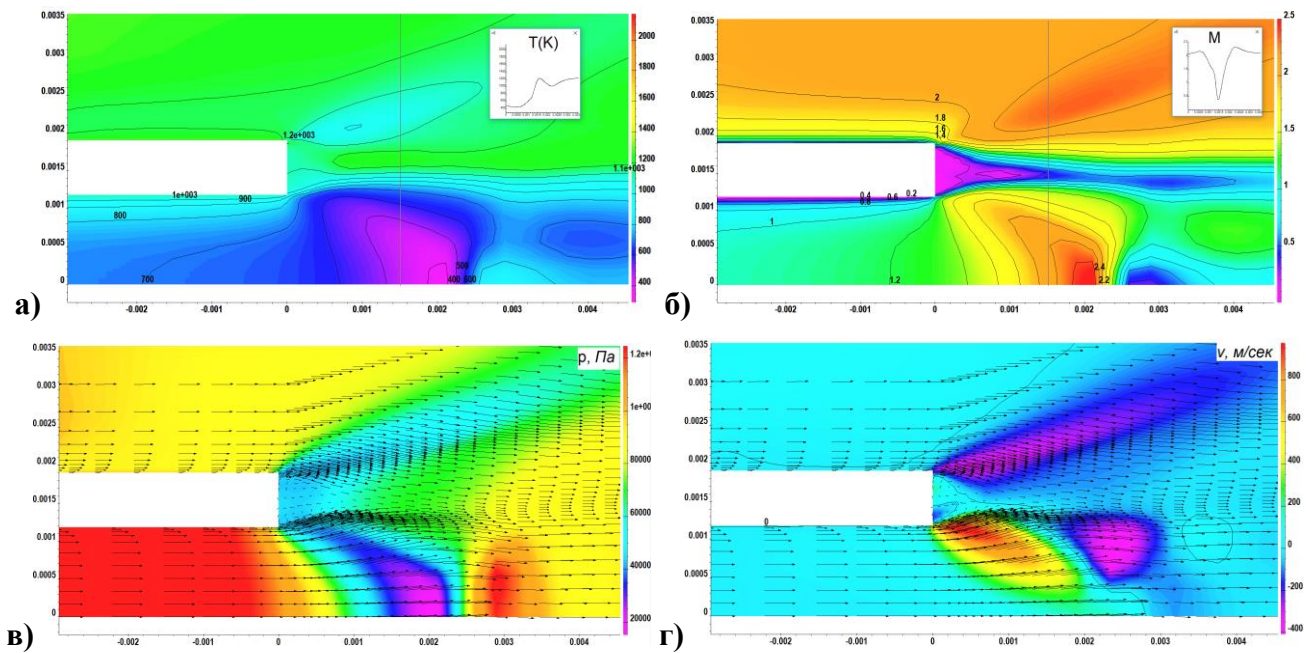


Рисунок 2.45 – Численное моделирование эксперимента [72]: поля течения вблизи уступа: а) температуры, б) числа Маха, в) давления и г) вертикальной компоненты скорости.

Кроме того, в сечениях, начиная с $x/D=43.1$, температура в расчете становится ниже экспериментальной во всем профиле, доходя до нескольких сот градусов около границы с внешним покоящимся газом. Эта тенденция обнаружена во всех расчетных работах, просмотренных автором (напр., [52, 55, 57, 110, 115, 117, 141, 192]). Если в эксперименте внутреннее сопло было установлено под углом к внешнему потоку, то падение температуры после сечения $x/D=43.1$ может быть связано с областью разрежения, которой нет в осесимметричном случае.

§2.8. Моделирование эксперимента T.S. Cheng. Расчеты с учетом TCI

Попытка учесть TCI при помощи модели PaSR при моделировании эксперимента T.S. Cheng [72] привела к тем же выводам, что и ранее при моделировании эксп. J.S.Evans et al. [100] и M.C. Burrows & A.P. Kurkov [67]: полученные результаты очень мало отличались от результатов без учета TCI. На рис. 2.46 показаны профили температуры в тех же сечениях без учета TCI и с моделью PaSR. Видно, что включение модели TCI приводит к весьма незначительному изменению поля течения и не приближает профили параметров к экспериментальным. Это связано с большими (близкими к 1) значениями объемной доли тонких структур γ^* , полученными в расчетах – см. поле γ^* на рис. 2.47.

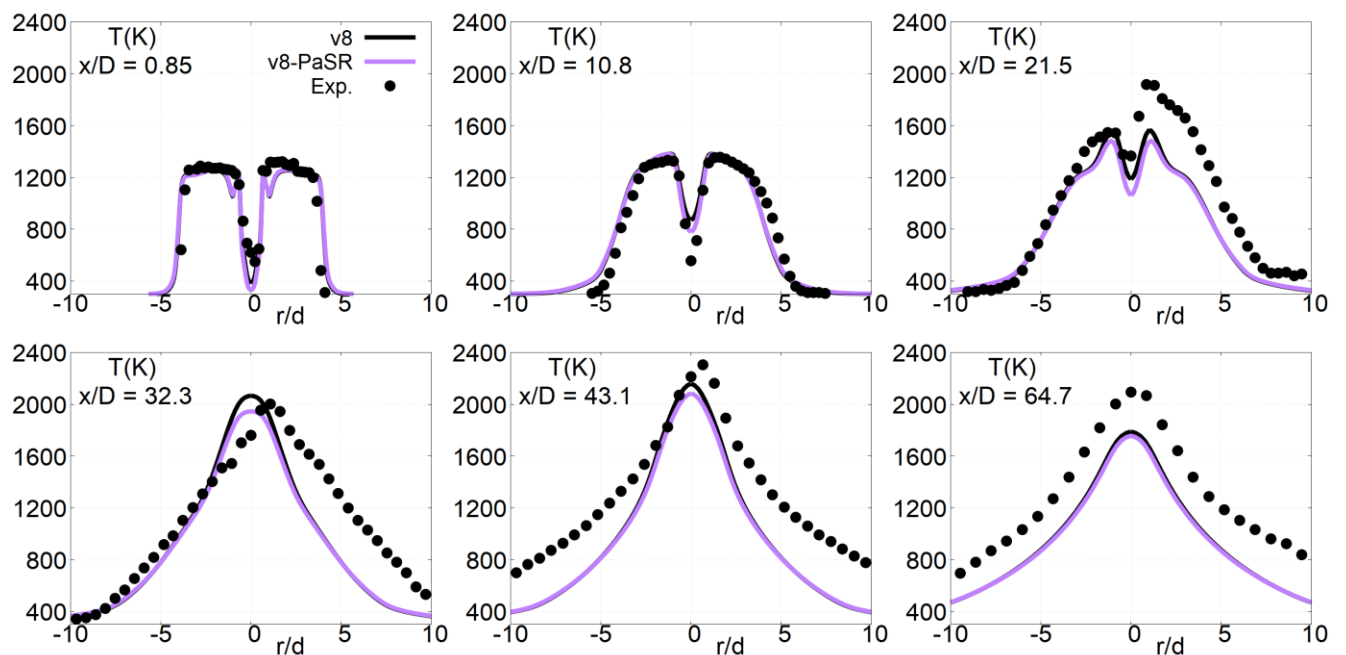


Рисунок 2.46 – Численное моделирование эксп. [72]: без учета TCI и с подходом PaSR

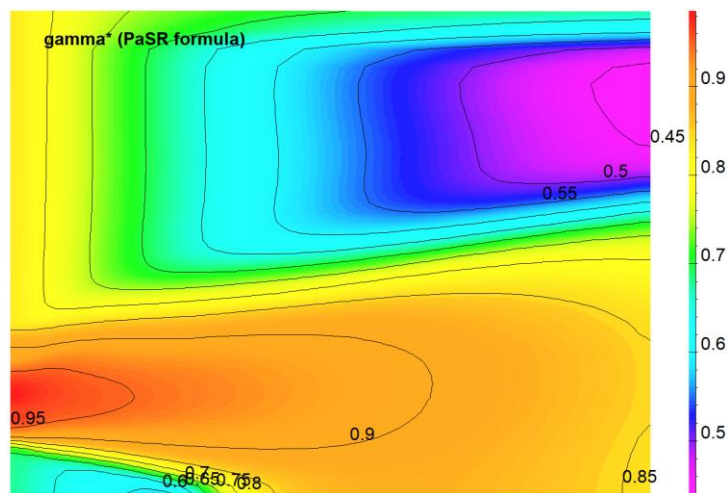


Рисунок 2.47 – Численное моделирование [72]: поле объемной доли “тонких структур” γ^*

Для понимания действия модели PaSR были проведены расчеты с параметром γ^* , фиксированным во всем поле на протяжении всего расчета. Результаты этих расчетов (рис. 2.48) показали, что при $\gamma^* \rightarrow 1$ результаты приближаются к расчетам без учета взаимодействия турбулентности и горения, а при $\gamma^* \rightarrow 0$ – к расчету с выключенными химическими реакциями. Таким образом, применение модели PaSR приводит к уменьшению интенсивности протекающих химических реакций относительно расчета без TCI.

При моделировании описанных выше экспериментов получаются значения γ^* , близкие к единице. Поскольку в модели PaSR $\gamma^* = \frac{\tau_{chem}}{\tau_{chem} + \tau^*}$, то данный результат означает, что в этом течении смешение происходит быстрее, чем химическая реакция, и развитие горения ближе к квазиламинарному приближению (без существенного влияния турбулентности на средние скорости химических реакций). Наиболее вероятно, что в этих задачах горение развивается в основном по механизму самовоспламенения, а приблизиться к эксперименту возможно путем детального воспроизведения газодинамической структуры течения.

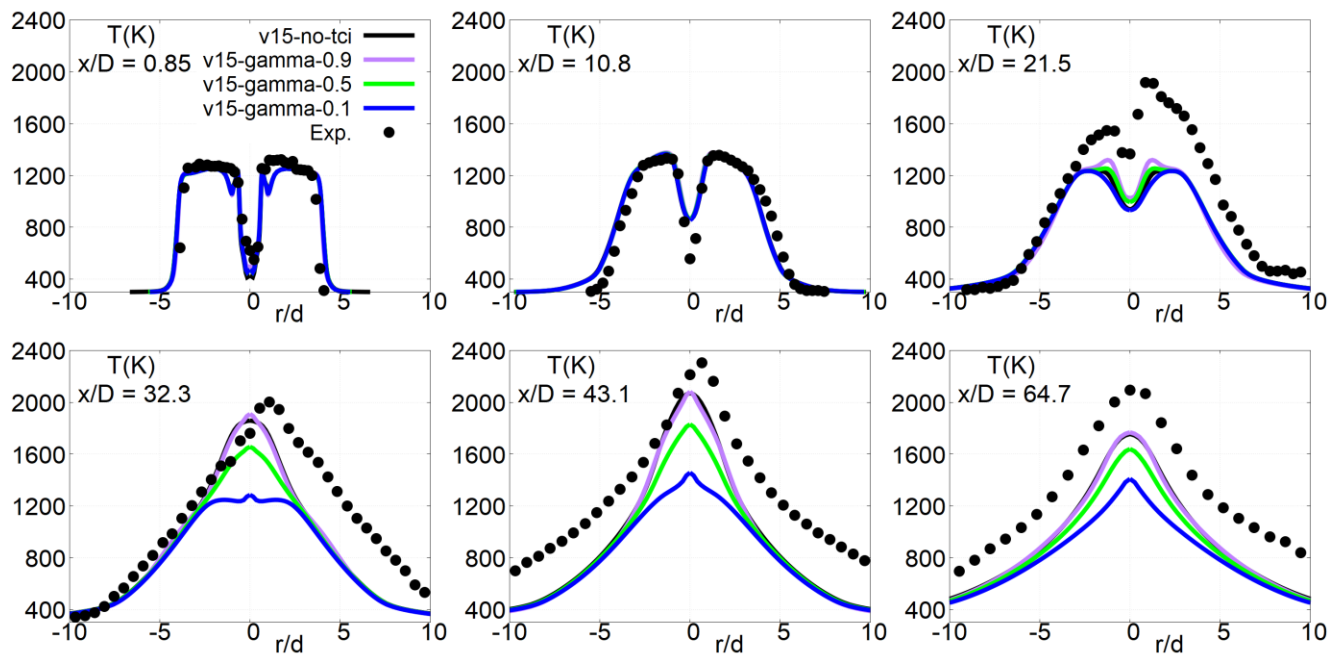


Рисунок 2.48 – Численное моделирование эксперимента [72]: без учета TCI (черный цвет) и с фиксированным значением γ^* : сиреневый – $\gamma^*=0.9$, салатовый – $\gamma^*=0.5$, синий – $\gamma^*=0.1$

§2.9. Механизм стабилизации пламени в эксперименте T.S. Cheng

На практике для анализа протекающих в камере сгорания процессов полезно знать, насколько быстро выделяется теплота вдоль линии тока в окрестности данной точки. Для визуализации областей наиболее интенсивного тепловыделения рекомендуется [13] использовать поля скорости тепловыделения ϕ , Дж/(кг·м). Это поле можно определять по имеющимся полям основных параметров течения после окончания расчета:

$$\phi(x, y, z) = \sum_{k=1}^{N_{sp}} h_k m_k \sum_{l=1}^{N_{reac}} \Delta n_{kl} W_l / (\rho |\vec{V}|) = \sum_{k=1}^{N_{sp}} h_k S_k / (\rho |\vec{V}|).$$

На рис. 2.49 приведены поля температуры, числа Маха и десятичного логарифма скорости тепловыделения ϕ вдоль линий тока, полученные при моделировании эксперимента T.S.Cheng et al. До $x/D \sim 7$ тепловыделение незначительно – это зона задержки воспламенения (где накапливаются радикалы). Существенное тепловыделение возникает за диском Маха (область голубого цвета на рис. 2.49,б), который образуется при нерегулярном отражении скачка уплотнения от оси. Повышение давления и температуры стимулируют выход реакции на стадию интенсивного тепловыделения. Но, несмотря на высокую скорость тепловыделения, температура доходит до 1600 К и далее не растет: выделяющееся тепло идет на разогрев соседних линий тока за счет турбулентной диффузии. Наконец, когда тепловыделение охватывает всю способную к горению область смешения струи, температура начинает расти и увеличивается до 1800 К. В эксперименте наблюдалась стабилизация пламени на расстоянии около $25D$ от среза сопла (рис. 2.50). В расчетах получились похожие результаты и подобная картина течения.

В данной задаче большую роль играет турбулентный перенос тепла по пространству. Но вклад турбулентных пульсаций в среднюю скорость химических реакций оказывается незначительным, так как сверхзвуковой поток быстро выносит реагирующую смесь из области турбулентного перемешивания. Развитие горения определяется локальными параметрами течения, т.е. протекает по механизму самовоспламенения. Поэтому модели TCI не дают существенного вклада в структуру течения. Более сильную роль играет диск Маха в сечении $x/D \sim 6$, вызывающий повышение температуры и давления, а также падение скорости (т.е. увеличение времени пребывания смеси в области с данными параметрами).

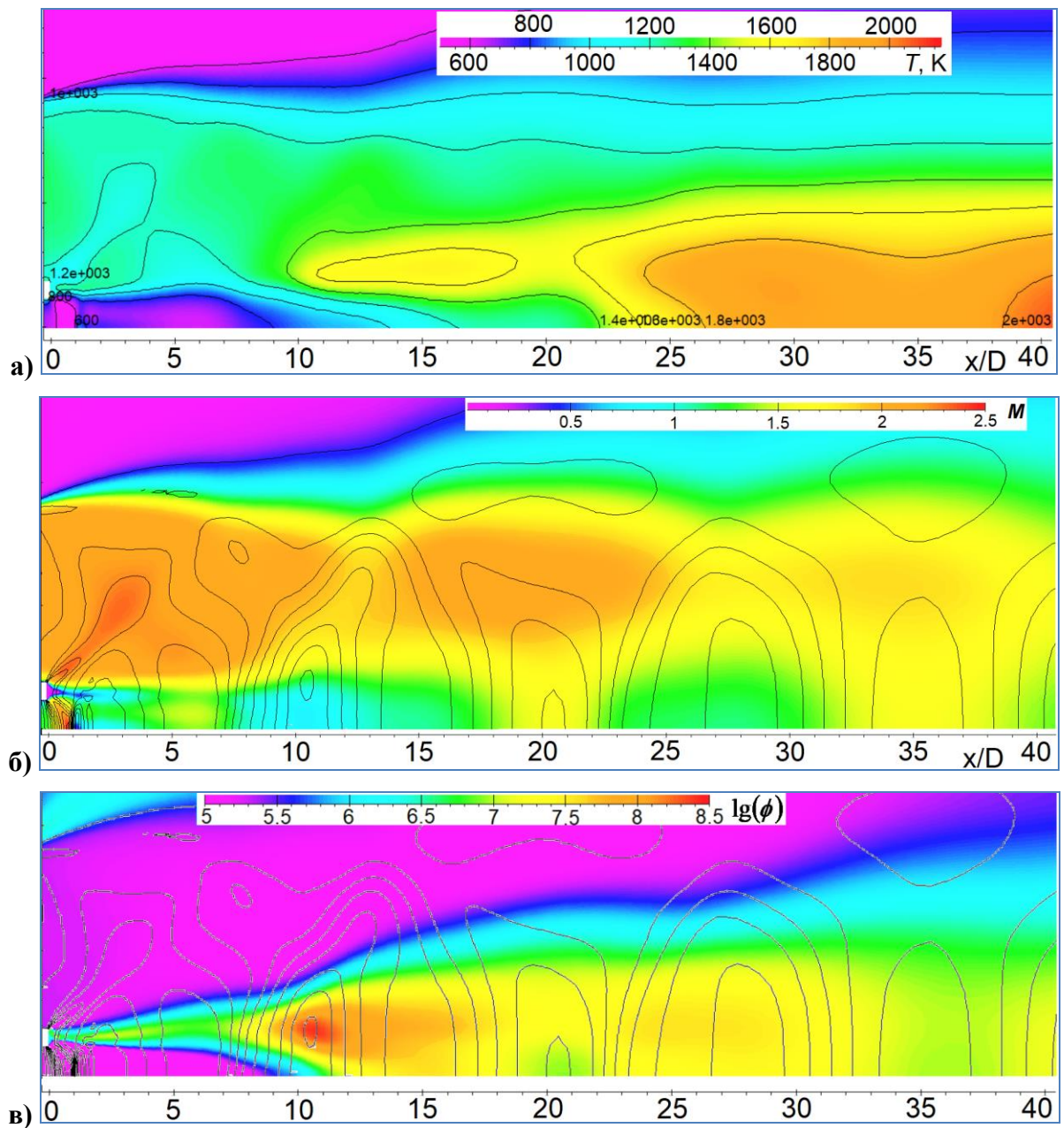


Рисунок 2.49 – Численное моделирование эксперимента T.S.Cheng et al.: поля
 а) температуры, К, б) числа Маха и в) десятичного логарифма скорости
 тепловыделения ϕ , Дж/(кг·м) вдоль линий тока. На а) и б) нанесены изолинии давления

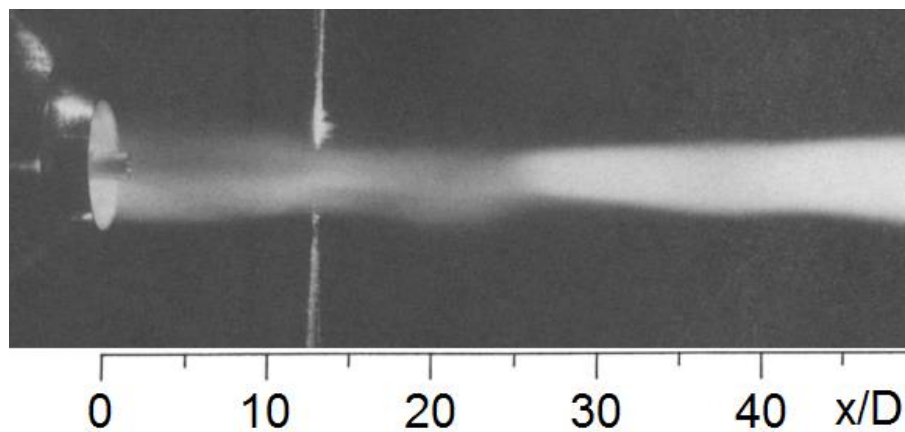


Рисунок 2.50 – Визуализация тепловыделения в эксперименте T.S.Cheng et al. [72]

Отметим, что в работе [64] делается противоположное предположение – о том, что диск Маха в сечении $x/D \sim 6$ порожден горением в струе. Для доказательства того факта, что воспламенение вызвано скачком уплотнения, а не наоборот, на рис. 2.51 сопоставлены поля давления, полученные в расчетах а) с отключенными химическими реакциями (без горения) и б) при протекании реакций (с горением). Можно видеть, что положение скачков и поля в целом, полученные в этих двух случаях, отличаются не сильно. Присутствие диска Маха в расчете без горения говорит о том, что его появление обусловлено не горением.

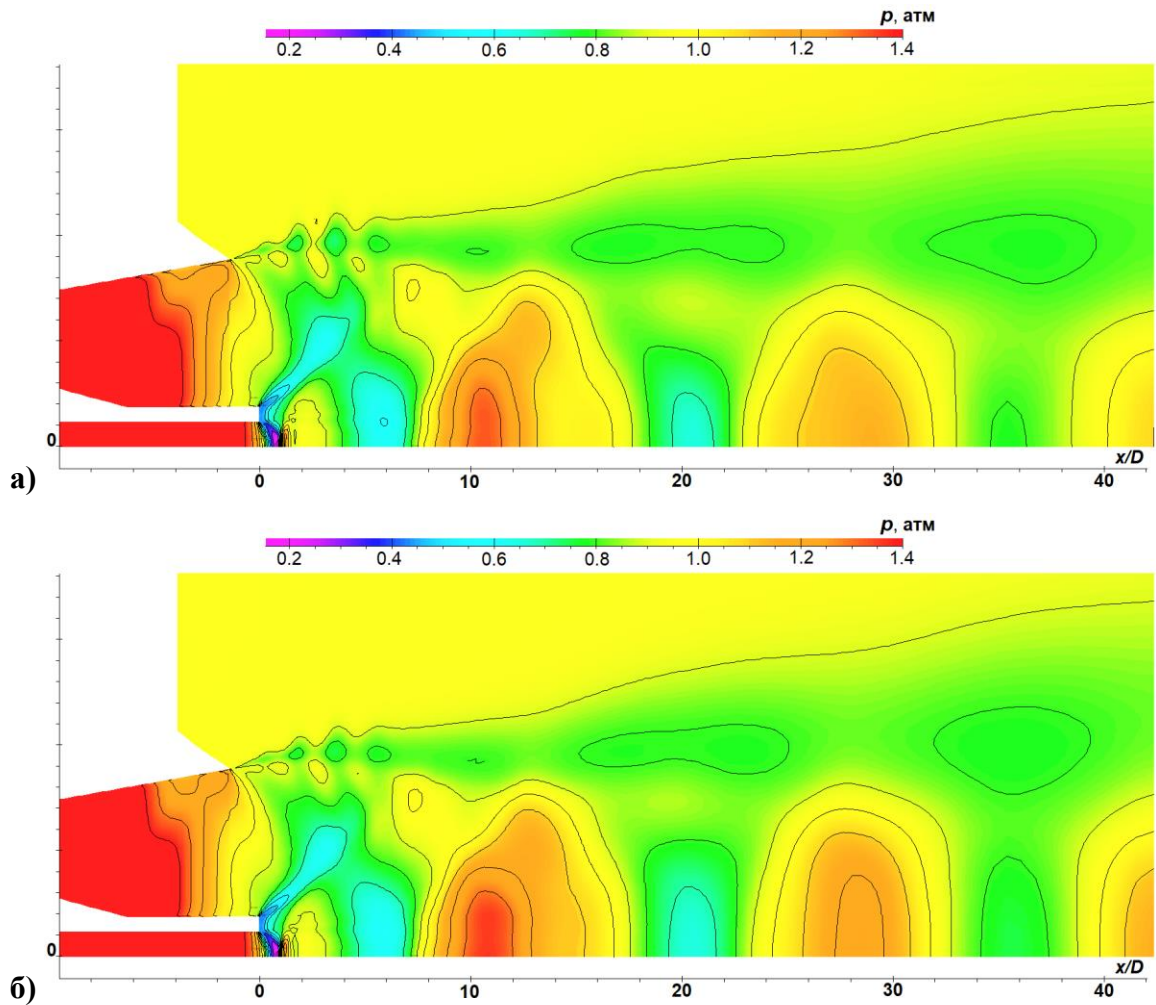


Рисунок 2.51 – Поля давления с изолиниями через каждые 0.1 атм в расчетах эксперимента [72]: а) с отключенными химическими реакциями и б) с горением

Подводя итоги всем описанным в данной Главе расчетным исследованиям, следует сказать, что во всех экспериментах со сверхзвуковым горением при простой геометрии течения не было обнаружено существенного вклада от моделей учета TCI.

Выводы к Главе 2

- 2.1. Выполнено численное моделирование эксперимента A.D. Cutler и др. с осесимметричными коаксиальными струями, т.к. его геометрия близка к геометрии рассматриваемых экспериментов с горением. Полученные результаты хорошо соотносятся с экспериментом и находятся на одном уровне с доступными опубликованными данными расчетных работ других авторов. Таким образом, используемые программы дают приемлемое качество описания турбулентного переноса в холодных сверхзвуковых течениях.
- 2.2. Выполнено численное моделирование ряда классических тестов по горению в сверхзвуковых турбулентных струях. Полученные результаты расчетов высокоскоростных течений с горением простой конфигурации (как без учета, так и с учетом взаимодействия турбулентности и горения – TCI) имеют такой же уровень согласования с экспериментальными данными, что и расчеты в аналогичной постановке, выполненные другими авторами [60, 152]. Учет TCI на основе моделей двух различных классов (микроламинарных пламен и реактора частичного перемешивания) не позволил приблизиться к экспериментальным данным.
- 2.3. Выявлены существенные недостатки известной модели микроламинарных пламен с предписанной функцией плотности вероятности (сильная зависимость от определяемого неточно параметра функции плотности вероятности). Эти недостатки ограничивают применимость такого подхода для описания смешанных режимов горения, реализуемых на практике в высокоскоростных камерах сгорания.
- 2.4. Автором выявлен механизм стабилизации горения в эксперименте T.S. Cheng с коаксиальными сверхзвуковыми струями (самовоспламенение в присутствии интенсивной турбулентной диффузии и ударно–волновых структур), объясняющий незначительное влияние моделей TCI на структуру пламени в сверхзвуковом потоке. Из-за высокой скорости потока время пребывания газа в области турбулентного смешения недостаточно для существенного проявления эффектов TCI. Поэтому основную роль в стабилизации горения играют эффекты самовоспламенения, которые усиливаются в ударно–волновых структурах струи.
- 2.5. Во всех рассмотренных сверхзвуковых течениях с горением простой конфигурации вклад различных газодинамических эффектов (неоднородность течения в подводящих каналах, нарастание пограничных слоев на боковых стенках канала, ударно–волновая структура сверхзвукового потока, особенности теплообмена на стенках) является сопоставимым или более существенным по сравнению с вкладом взаимодействия турбулентности с горением.

ГЛАВА 3. МОДЕЛИРОВАНИЕ ДОЗВУКОВОГО ТЕЧЕНИЯ В КАМЕРЕ СГОРАНИЯ СО СТУПЕНЬКОЙ

Во всех экспериментах со сверхзвуковым горением, рассмотренных в Главе 3, не было обнаружено существенного вклада от моделей учета TCI. Чтобы убедиться, что этот результат не связан с некорректной реализацией моделей TCI, необходимо было провести валидацию программы на тестовых задачах, в которых TCI проявляется существенным образом. В качестве такого был выбран эксперимент с горением метана в дозвуковом потоке – камера сгорания с обратной ступенькой, экспериментальные исследования которой проводились в ONERA [139]. Геометрия камеры представлена на рис. 3.1. Обратная ступенка является широко распространенным средством для стабилизации горения как при малых, так и при высоких скоростях потока [81, 122] и обычно используется для оценки характеристик моделей турбулентности при прогнозировании отрывных течений [161]. Выбор эксперимента основан на нескольких причинах. Во-первых, простая 2D геометрия позволяет выполнить множество расчетов за разумное время. Это особенно актуально при настройке и валидации новой модели, когда необходимо проводить много параметрических расчетов. Во-вторых, в экспериментах проводились измерения как для течения без горения, так и для случая с реакциями, что является существенным и важным преимуществом. Кроме того, эксперимент использовался другими авторами для валидации методов и программ, и есть ряд опубликованных работ по результатам численного моделирования этого течения. Некоторые из них могут быть использованы для сопоставления полученных результатов, включая самые современные – с использованием метода EPaSR для учета TCI [161].

Канал содержит обратную ступеньку шириной 0.1 м. Вверх по течению от ступеньки канал имеет длину 1.5 м и высоту 6.5 см, а вниз по течению от ступеньки – длину 1.4 м и высоту 0.1 м. Для лучшего контроля расхода и акустики на входе и выходе из основной камеры располагаются звуковые сопла. Уровень турбулентности контролируется хонейкомбом (турбулизирующей сеткой), расположенным в трубке вверх по течению.

Воздух, предварительно нагретый до $T = 520$ К электрическим подогревателем, проходит через длинный канал перед ступенькой. В качестве топлива используется метан, который инжектируется примерно на 1 м выше по потоку от ступеньки. Затем он смешивается с нагретым воздухом. В камеру сгорания попадает уже почти однородная смесь топлива и окислителя, скорость газа на входе в камеру составляет порядка 50 м/с, а температура – около 525 К ($M \sim 0.1$). Коэффициент избытка топлива составлял около 0.8. Уровень турбулентных пульсаций, измеренный на расстоянии 0.15 м вверх по потоку от ступеньки, составлял в эксперименте 11 % от средней скорости течения.

В экспериментах были сделаны шлирен-фотографии течения, измерялось давление на стенке, брались образцы газа для последующей хроматографии с целью получения профилей средних концентраций в области пламени. Также в ходе эксперимента были детально измерены профили скорости и уровень турбулентности с помощью лазерной Доплеровой анемометрии (ЛДИС), температура и ее пульсации измерялись с помощью когерентной антистоксовой Рамановской спектроскопии (CARS). Современные данные численного моделирования этого эксперимента в рамках двумерных уравнений RANS с использованием модели турбулентности $k-l$ и метода EPaSR [161] показывают существенную роль TCI в структуре течения.

§3.1. Расчетная область, сетка и граничные условия

Расчетная область содержит только непосредственно камеру сгорания. Численное моделирование всей установки было бы вычислительно слишком затратным, и в то же время в этом нет необходимости при изучении наиболее существенных процессов, происходящих в камере. Расчетная область имеет длину 1.1 м и высоту 0.1 м. Высота ступеньки, расположенной на нижней стенке, равна $h=0.0035$ м, и она располагается на расстоянии 0.1 м от начала расчетной области. Все координаты далее отсчитываются от места положения ступеньки.

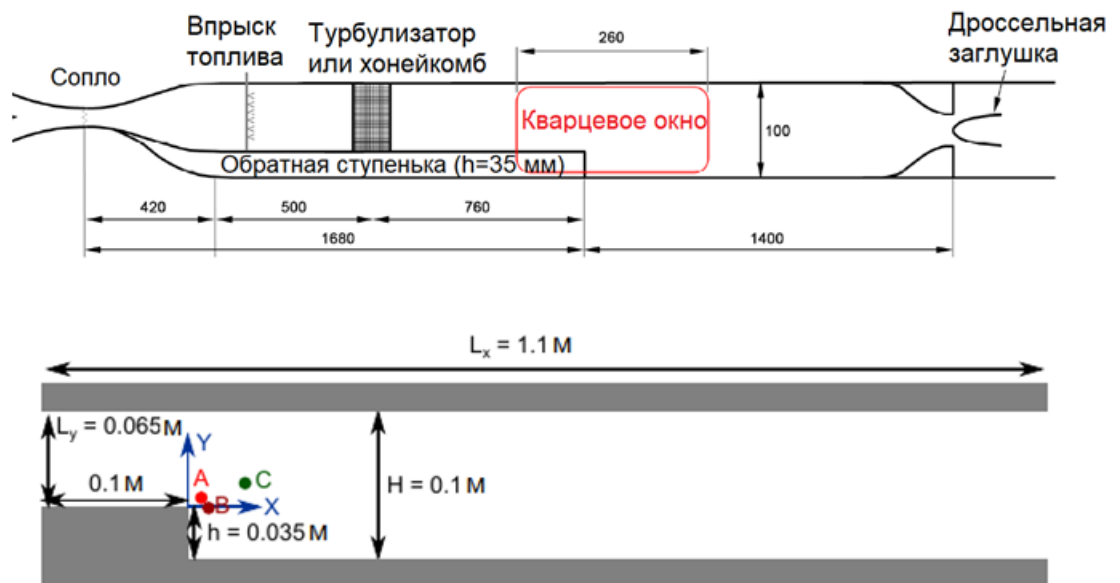


Рисунок 3.1 – Эксперимент Magre & Moreau et al.: схема тестовой установки A3C оптической диагностикой (сверху), размеры канала с обратным уступом (внизу)

Сетка сгущается в обоих направлениях в окрестности ступеньки, а также и в рециркуляционной зоне. Самая подробная сетка (mesh0) состоит из 250000 прямоугольных ячеек, содержит порядка 150 ячеек поперек высоты ступеньки и 140 ячеек поперек канала, на стенках здесь также используется граничное условие “закон стенки”. Mesh1 получена из mesh0 удалением каждой второй линии. Так же получена mesh2 из mesh1.

В расчетах использовалась модель турбулентности $q-\omega$. Смесь метана и воздуха ($Y_{CH_4}=0.0446557$, $Y_{N_2}=0.7326543$, $Y_{O_2}=0.22269$) впрыскивается при $T=525$ К при коэффициенте избытка топлива, равном 0.8. Профили на входе были получены в ходе численного моделирования 2D канала с высотой $L_y=0.065$ м и длиной $L_{chx}=30L_y=1.95$ м, расположенного перед камерой. При расчете течения в этом канале на левой границе была задана скорость $u=53$ м/с, которая в сечении входе в основной канал давала максимальную скорость $u=58$ м/с, и значения параметров турбулентности $k=60$ м²/сек² и $l=0.01$ м (что соответствует $q\sim 7.5$, $\omega\sim 67.5$). На правой границе основного канала было задано постоянное давление $P=1$ бар. В выходном и входном сечениях применялись мягкие граничные условия, основанные на анализе инвариантов Римана.

§3.2. Течение в камере без горения

Прежде всего, проводилось моделирование течения без горения. Здесь особое внимание уделялось правильному описанию рециркуляционной зоны за ступенькой. Точное определение средней координаты точки присоединения потока x_r затруднено из-за нечеткого характера границы вихря. Средняя длина присоединения потока в эксперименте составляла примерно $x_r/h=4.3\pm 0.2h$ [139]. В расчетах автора было получено $x_r/h < 4.85$, что составляет примерно столько же, сколько и в расчетах Н.Петровой (ONERA) [161], которые проводились в рамках подхода RANS на сетке из 37000 ячеек с использованием метода 2-го порядка аппроксимации пространству и 1 по времени и модели турбулентности $k-l$ при аналогичных граничных условиях. Сопоставление по профилям осредненной по Фавру продольной скорости с экспериментальными данными и расчетами [161] для ряда вертикальных сечений приводится на рис. 3.2,а, а по профилям вертикальной компоненты скорости – на рис. 3.2,б.

Получено удовлетворительное согласование экспериментальных и численных данных по средней скорости. Получена сходимость по сетке. Наибольшие различия с экспериментальными данными наблюдаются в нижней части камеры ($y<0$ м). Однако следует учитывать, что эта область плохо доступна для экспериментальных измерений. Кроме того, в рециркуляционной области нарушается предположение о малости турбулентных пульсаций, лежащее в основе гипотезы Буссинеска, а течение не является тонкослойным, и модель турбулентности не настраивалась на описание таких областей. Относительные ошибки в определении вертикальной компоненты скорости гораздо больше, чем в определении продольной компоненты. Но это связано с тем, что вектор скорости является единым физическим объектом, поэтому абсолютные величины ошибок определения продольной и вертикальной компонент скорости сопоставимы друг с другом.

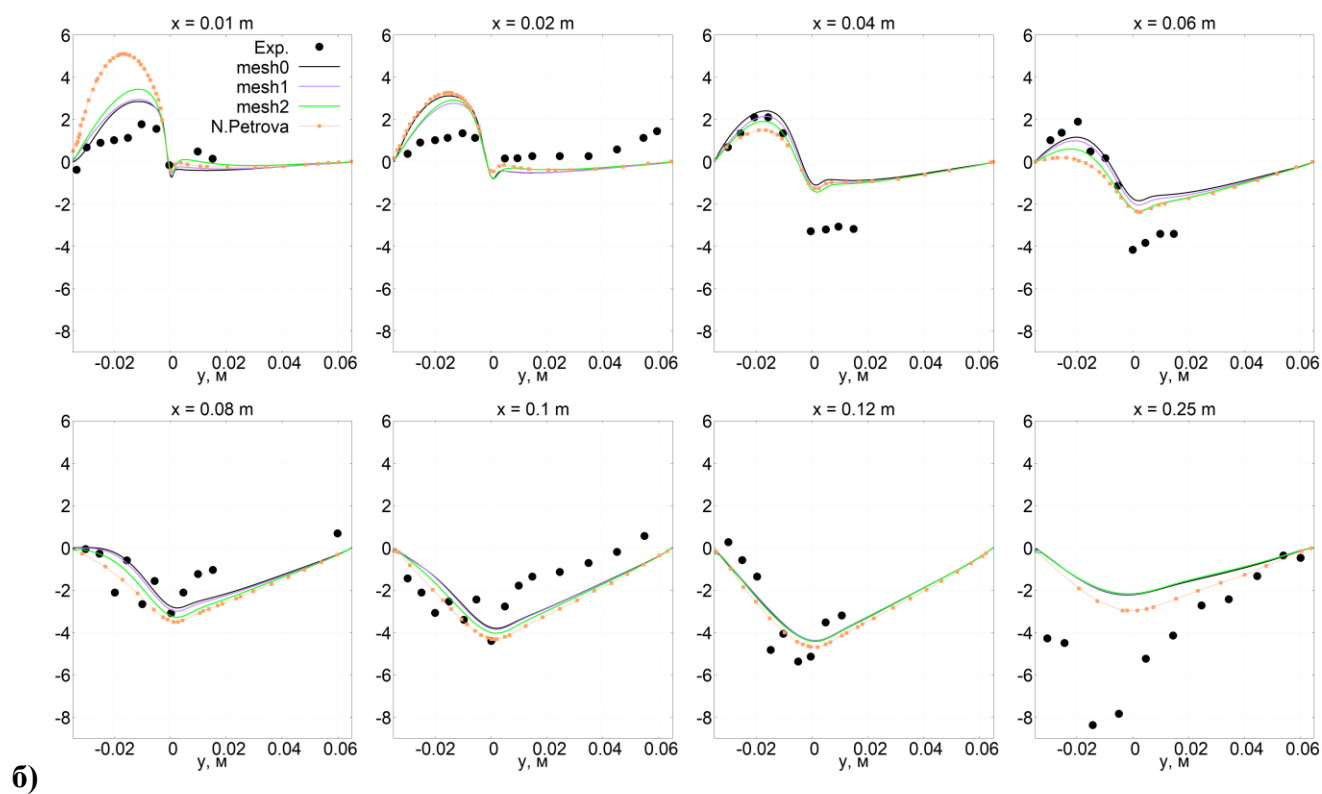
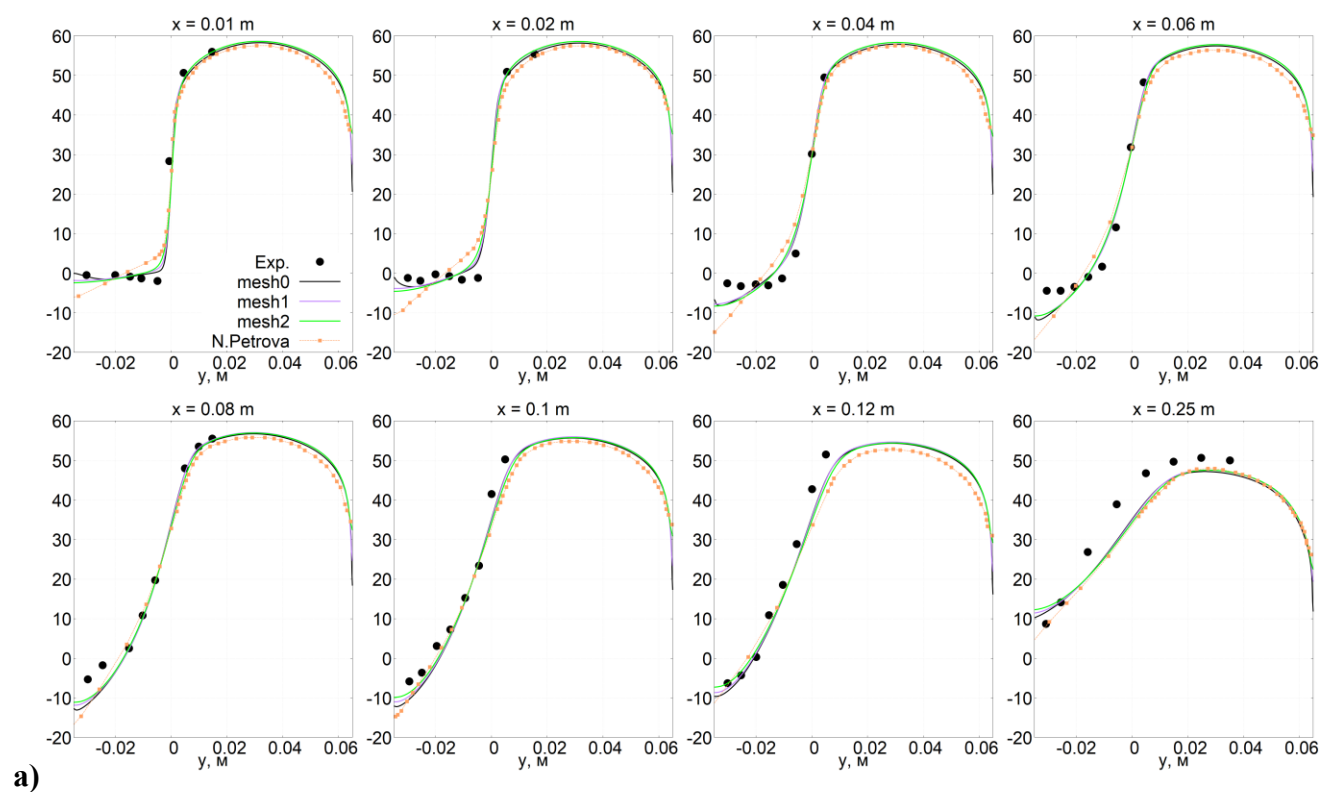


Рисунок 1.2 – Численное моделирование эксп. [139]: сходимость по сетке и сопоставление с экспериментальными данными и расчетами [161] (оранжевые кривые с маркерами). Вертикальные профили осредненных по Фавру величин

а) x -компоненты скорости u ; б) y -компоненты скорости v

Профили среднеквадратичного отклонения компонент скорости ($\sqrt{u'^2}$ и $\sqrt{v'^2}$) сопоставлены с экспериментом на рис. 3.3–3.3. Необходимо заметить, что в рамках гипотезы Буссинеска предполагается изотропность турбулентности. Поэтому в расчетах полагается $\sqrt{u'^2} = \sqrt{v'^2} = \sqrt{2/3}q$. Эти значения в расчете завышены для обеих компонент скорости, особенно сильно в последних сечениях и для $\sqrt{v'^2}$. Та же тенденция прослеживается и в работе [161]. Таким образом, при численном моделировании течения без горения получено удовлетворительное качество сопоставления с экспериментом по профилям осредненной величины x -компоненты скорости u_x и по средней длине присоединения потока. Сильное расхождение с экспериментом по полям пульсаций скорости (сопоставимое с результатами других авторов) свидетельствует о неточности гипотезы Буссинеска применительно к данному классу течений. Тем не менее, результаты находятся на одном уровне с [161], и далее будет рассматриваться течение той же конфигурации с горением.

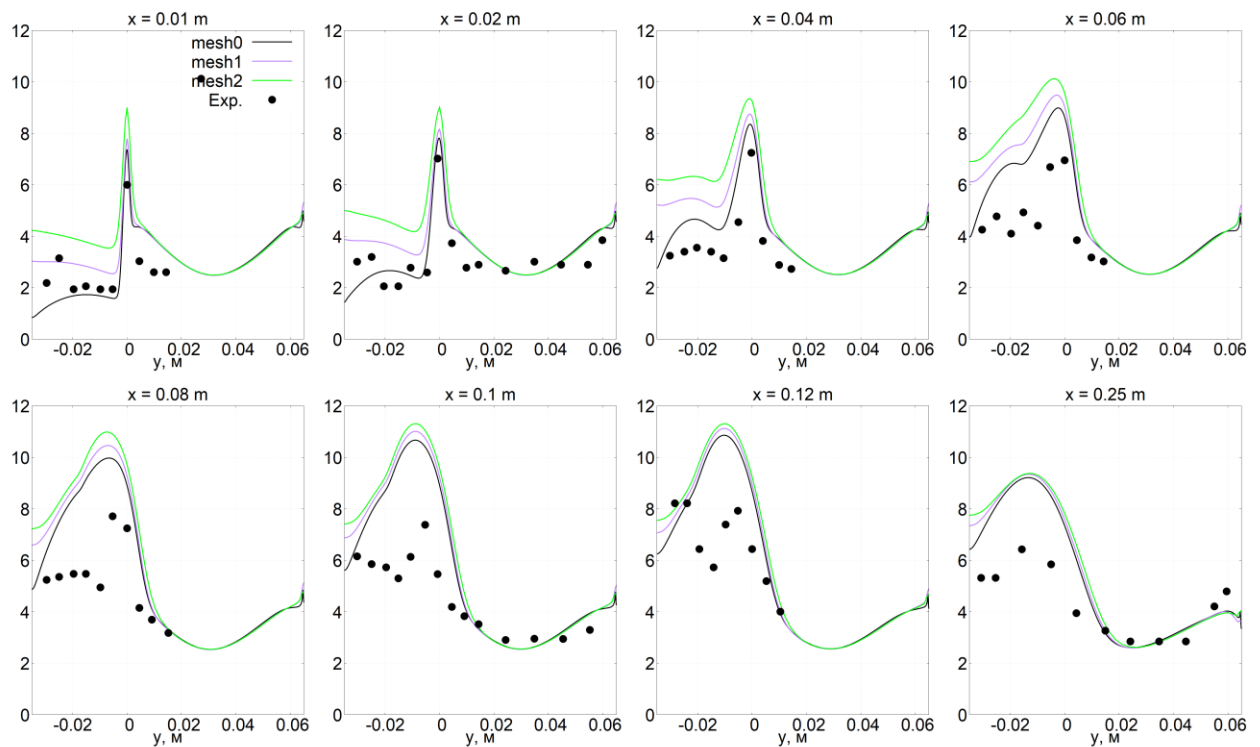


Рисунок 3.3 – Численное моделирование эксп. [139]: сходимость по сетке. Вертикальные профили среднеквадратичного отклонения x -компонент скорости $\sqrt{u'^2}$ [161].

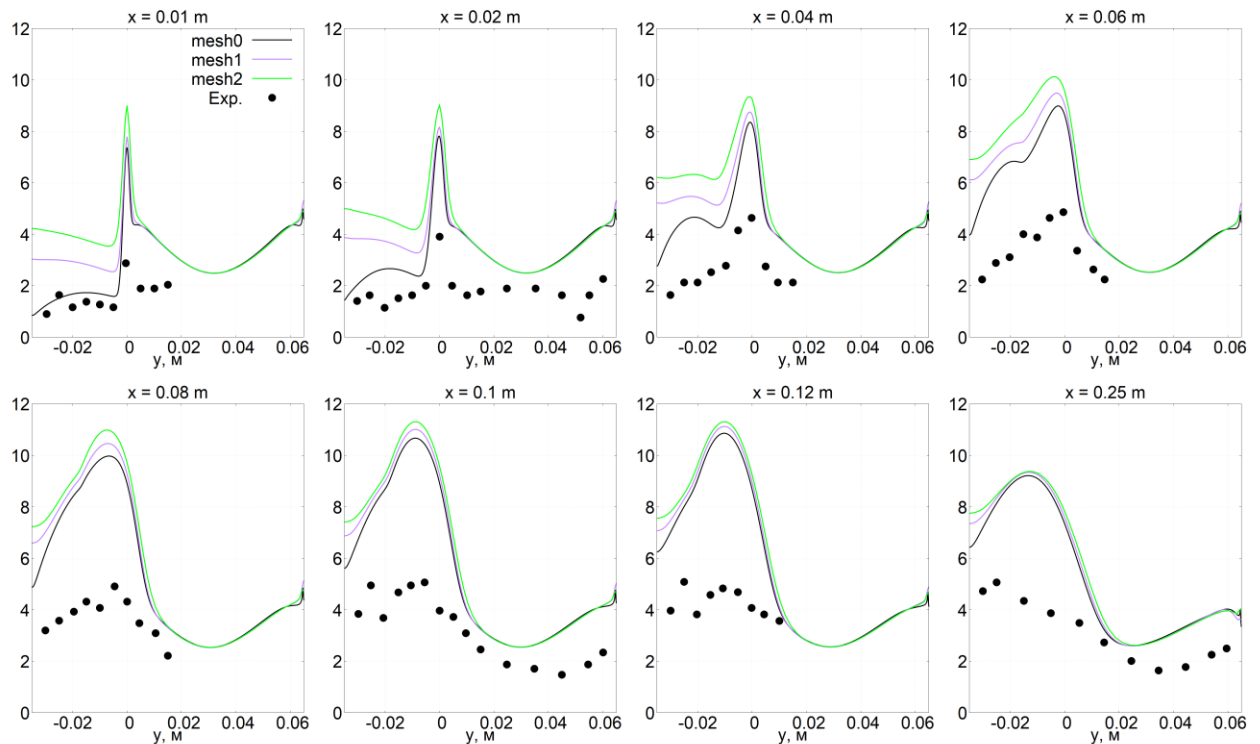


Рисунок 3.4 – Численное моделирование эксп. [139]: сходимость по сетке. Вертикальные профили среднеквадратичного отклонения y -компоненты скорости $\sqrt{v'^2}$ [161].

§3.3. Течение в камере с протеканием химических реакций без учета TCI

При $T \sim 525$ К кинематическая вязкость газа составляет порядка $\nu \sim 4 \times 10^{-5}$ м²/с. Оценка для турбулентного числа Рейнольдса при этом: $Re_T \sim 5 \times 10^4$, а для масштаба длины Колмогорова: $\eta_K \sim 0.1$ мм. При таких условиях скорость распространения ламинарного фронта пламени можно оценить как $S_L \sim 0.9$ м/с, а характерный масштаб толщины фронта пламени – $\delta_L \sim 5.5 \times 10^{-4}$ м. Тогда характерное время химических процессов $\tau_{ch} \sim 6 \times 10^{-4}$ с, а турбулентное число Дамкелера и Карловица равны $Da \sim 10$, $Ka \sim 30$. Следовательно, в камере реализуется режим утолщенного пламени (“*thickened flame*”), при котором мелкомасштабные турбулентные вихри деформируют внутреннюю структуру пламени, вызывая его утолщение [161].

В случае реагирующего течения используются те же расчетная область, сетка, граничные условия и физические модели, что и в описанном выше расчете нереагирующего течения. Для инициализации процесса горения в начале расчета искусственно задается очаг горения. В расчетах автора во всей области в качестве начального поля задавались высокая температура и состав смеси, соответствующий продуктам горения. В этом эксперименте реализуется волновой механизм горения предварительно перемешанной смеси метана и воздуха (стабилизация пламени за счет распространения волны горения против потока горючей смеси со скоростью,

равной скорости потока). Таким образом, модель кинетики должна прежде всего давать корректные значения скорости распространения ламинарного пламени, а не правильную величину периода задержки воспламенения, как это было в рассмотренных выше задачах. Это создало определенные трудности в выборе модели кинетики. После рассмотрения ряда моделей, была выбрана модель [5], удовлетворяющая поставленным условиям. Однако оказалось, что выбранная модель вызывала незатухающие колебания в окрестности фронта пламени, что приводило к нестационарности течения и отсутствию предельного стационарного решения. Эти колебания дополнительно поддерживались мягкими граничными условиями, допускающими акустические колебания внутри расчетной области. К сожалению, из-за развития очень сильных неустойчивостей на подробных сетках, сходимости по сетке не было достигнуто.

Был предпринят ряд попыток, нацеленных на устранение этих колебаний. Для этого правая выходная граница была удалена за счет добавления длинного буфера справа. В другом варианте за каналом был создан буфер в виде бочки. Однако к успеху это не привело. Поэтому после достижения режима квазипериодических колебаний производилось осреднение по времени получаемого численного решения нестационарных уравнений RANS с глобальным шагом по времени. Сходимость по времени достигалась по осредненному решению, когда оно переставало меняться с течением времени. Кроме того, для оценки влияния этих колебаний на все поле течения, были выведены и сопоставлены профили разных параметров в разные моменты времени в рамках одного цикла колебаний (для основного параметра – температуры – эти графики приведены на рис. 3.5). Даже кривые, соответствующие максимальному расхождению по этим профилям (1%), качественно не меняли структуры течения.

В эксперименте стенки охлаждались водой, поэтому присутствовали потоки тепла в направлении стенки, а также перераспределение тепла через металлические стенки и охлаждающую жидкость за счет теплопроводности. Однако в эксперименте не измерялись ни температура стенок, ни тепловые потоки. Поэтому при численном моделировании эксперимента стенки полагались теплоизолированными – как и в расчетной работе [161]. Это приводит к завышению температуры около нижней стенки и к ее занижению на верхней стенке в начале канала (там, где горения нет).

На рис. 3.6 положение изолинии $T=1500$ К в расчете без учета TCI сопоставлено с экспериментальными данными. По этой кривой можно судить о характерном угле наклона пламени в предварительно перемешанной смеси. В области обратного течения ($0.1 \text{ м} < x < 0.3 \text{ м}$) угол пламени в расчете близок к эксперименту. В основной части камеры сгорания ($0.3 \text{ м} < x < 0.7 \text{ м}$) значение угла наклона пламени в расчете завышено, в то же время оно занижено вблизи верхней стенки.

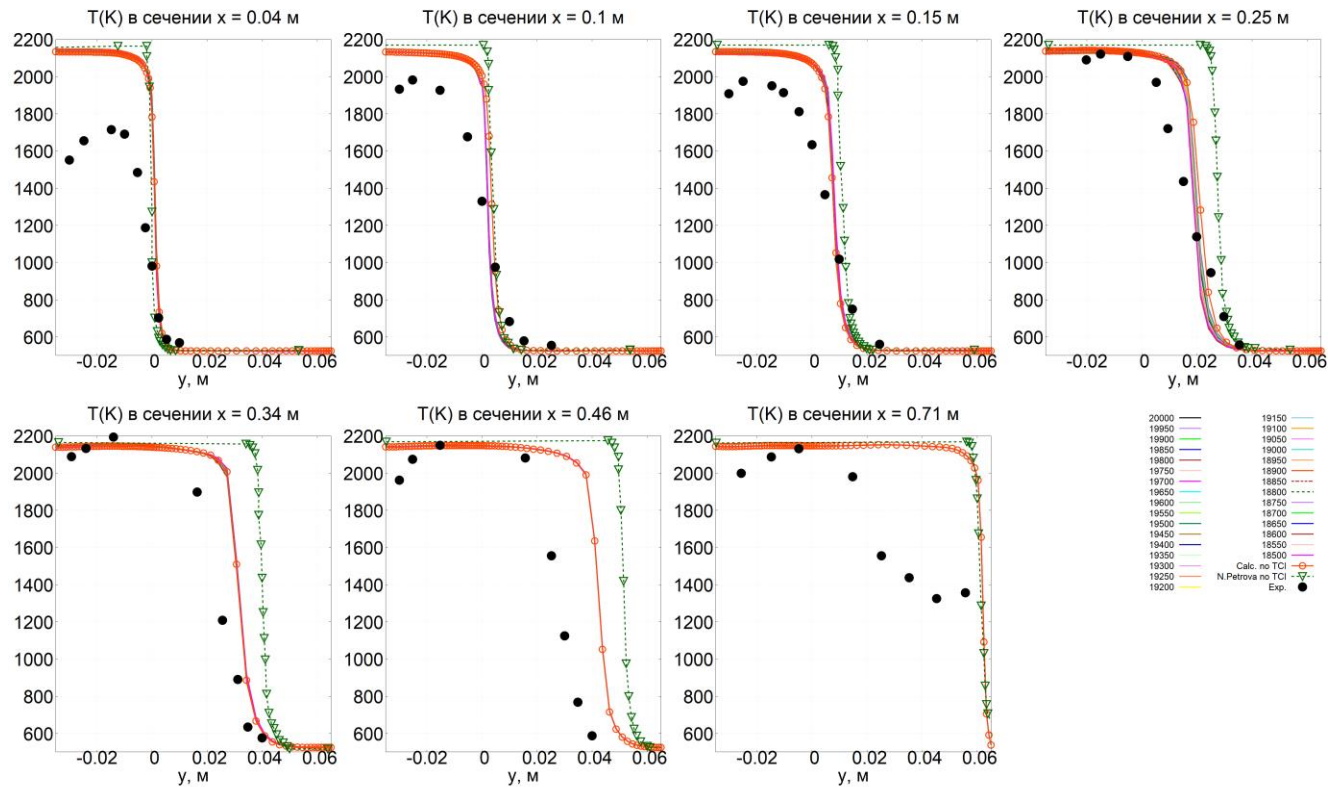


Рисунок 3.5 – Численное моделирование эксп. [139] с горением без учета TCI: вертикальные профили средней температуры T . Расчеты: автор – оранжевые кривые, [161] – зеленые; черные маркеры – эксперимент

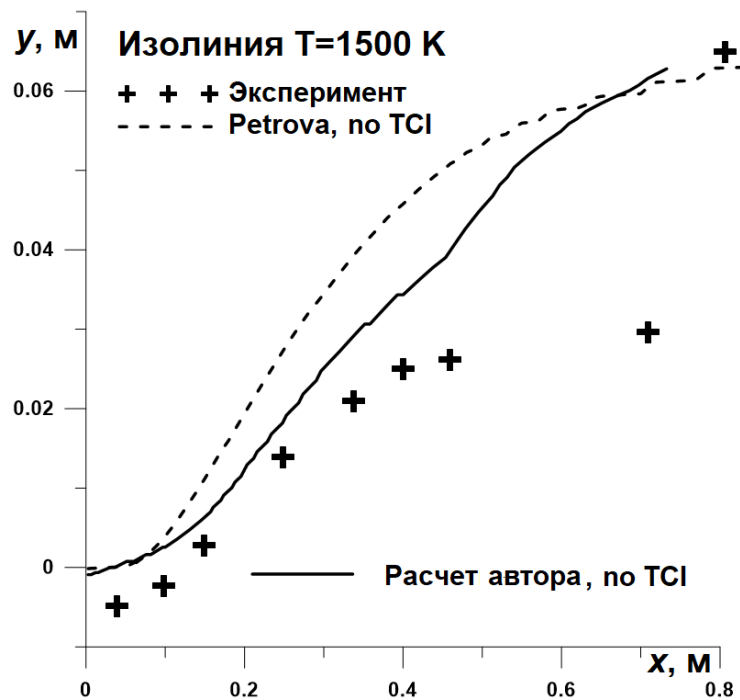
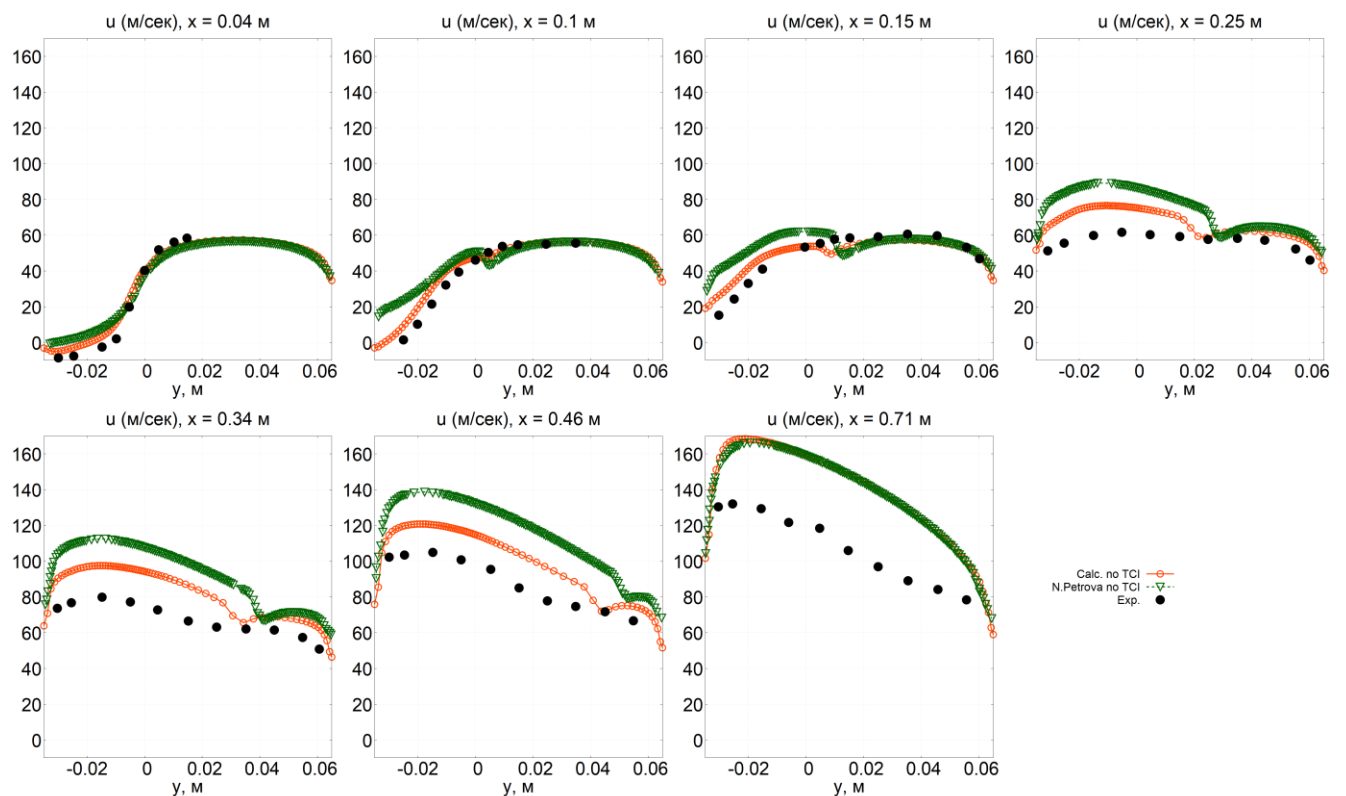


Рисунок 3.6 – Расчеты (без учета TCI) эксперимента [139] с горением: изотерма $T=1500$. Автор – сплошная кривая, [161] – пунктир; маркеры – эксперимент

На рис. 3.5 приводятся распределения температуры в поперечных вертикальных сечениях, полученные в расчете без учета TCI, там же нанесены экспериментальные точки из [139] и результаты расчета [161] без учета TCI. В нижней части камеры ($y < 0$ м) при $x \leq 0.15$ м температура в расчете завышена, а при $x \geq 0.25$ м температура вблизи нижней стенки оказывается завышенной из-за упрощенного граничного условия адиабатической стенки без учета динамического теплообмена через стенки канала и охлаждающую воду снаружи. Фронт пламени, в котором происходит рост температуры, в эксперименте гораздо шире, чем в расчете. Особенно велико расхождение в последних двух сечениях. По графикам распределения продольной компоненты скорости в сечениях $x = \text{const}$ (рис. 3.7) можно видеть, что скорость за ступенькой ($y < 0$ м) в расчете заметно завышена, а длина области обратного течения близка к эксперименту. В целом, результаты, полученные в расчете без учета TCI, заметно отклоняются от эксперимента, но расхождение с экспериментом не хуже, чем в расчетах из [161].



**Рисунок 3.7 – Численное моделирование эксп. [139] (с горением без учета TCI):
вертикальные профили осредненной x -компоненты скорости u . Расчеты:
автор – оранжевые кривые, [161] – зеленые; черные маркеры – эксперимент**

§3.4. Расчеты с учетом TCI (PaSR, UPaSR)

Сначала была рассмотрена модель PaSR и ее нестационарный вариант UPaSR. В обеих моделях процессы в тонких структурах протекают локально, но в PaSR на каждом шаге физического времени расчет в тонких структурах ведется до получения стационарного решения, а в UPaSR делается всего один шаг по времени, равный физическому шагу в ячейке.

На рис. 3.8 сопоставлены поля температуры, в трех расчетах: без учета TCI, по модели PaSR и по модели UPaSR. Там же нанесены изолинии $T=1500$ К. Видно, что учет TCI приводит к существенному изменению картины течения. Фронт пламени при учете TCI стал более размытым. В целом, PaSR и UPaSR дали близкие результаты. Если бы были достигнуты стационарные решения, PaSR и UPaSR должны дать совпадающие решения. Но в камере происходят квазипериодические колебания, структура колебаний в PaSR и UPaSR различна, и, соответственно, различны осредненные по времени поля течения. Далее будем рассматривать только UPaSR, который хотя бы частично учитывает предысторию развития тонких структур.

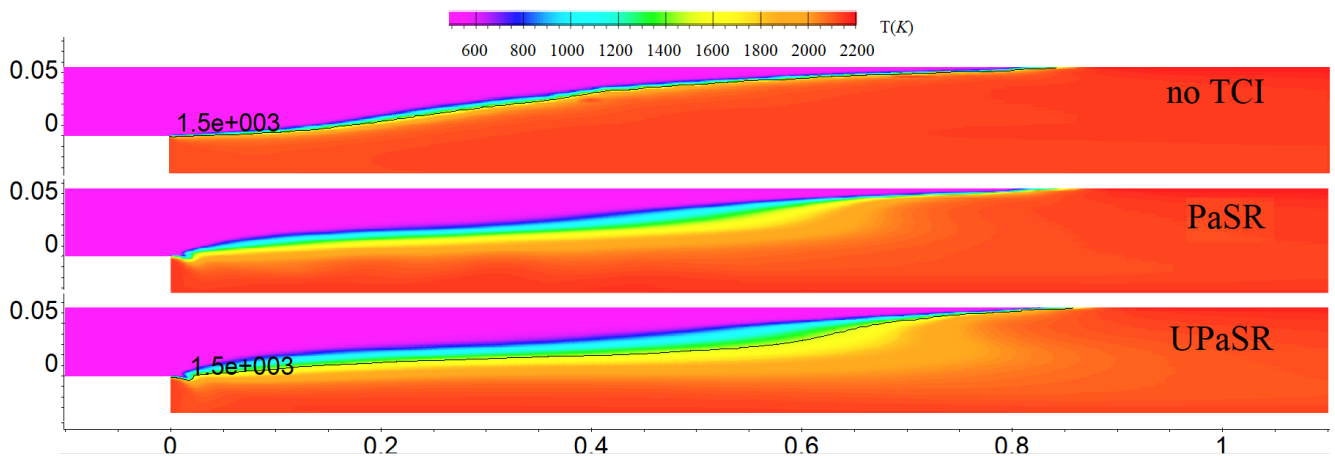


Рисунок 3.8 – Поле средней температуры T в расчетах без TCI и по UPaSR

В начале камеры ($x < 0.05$ и $y > 0$) волна горения имеет в окрестности ступеньки изогнутую S-образную форму и оказывается в некоторой области почти перпендикулярна направлению потока. В стационарном течении невозможна реализация такой конфигурации пламени, т.к. оно бы сносилось потоком, что вызывало бы колебания фронта. Такая нефизичная ситуация связана с недостатком моделей PaSR и UPaSR, которые не учитывают происходящее в тонких структурах вверх по течению относительно данной точки. Наличие горения в тонких структурах в этой модели определяется начальными условиями и обменным членом между “0” и “*”, который зависит от параметров турбулентности и некоторых других средних локальных параметров. Отсутствие горения выше по течению влияет на тонкие структуры в данной точке потока лишь опосредованно — через их локальное взаимодействие со средним течением, которое, в свою очередь, зависит от пространственного переноса.

Специфическая форма изолинии $T=1500$ К в окрестности ступеньки связана с тем, что волна горения зарождается не на углу ступеньки, а на небольшом расстоянии вниз по потоку. На рис. 3.9 показаны поле T^* , поле десятичного логарифма скорости тепловыделения и поле $\lg(\tau^*)$. Можно видеть, что при $y > 0$ в области, где $\lg(\tau^*) < -4$ (изолиния, выделяющая голубую область), тепловыделения нет, т.к. расход массы через тонкие структуры $G \sim 1/\tau^*$ слишком велик. Тем не менее, при $y < 0$ – в слое смешения, ограничивающем зону возвратного течения за ступенькой, – начинается интенсивное тепловыделение. Поскольку в тонких структурах условия неблагоприятны для стабилизации горения, начало тепловыделения в этой области можно объяснить быстрым разогревом среднего течения за счет турбулентных и молекулярных потоков тепла от горячих продуктов сгорания, находящихся в зоне возвратного течения.

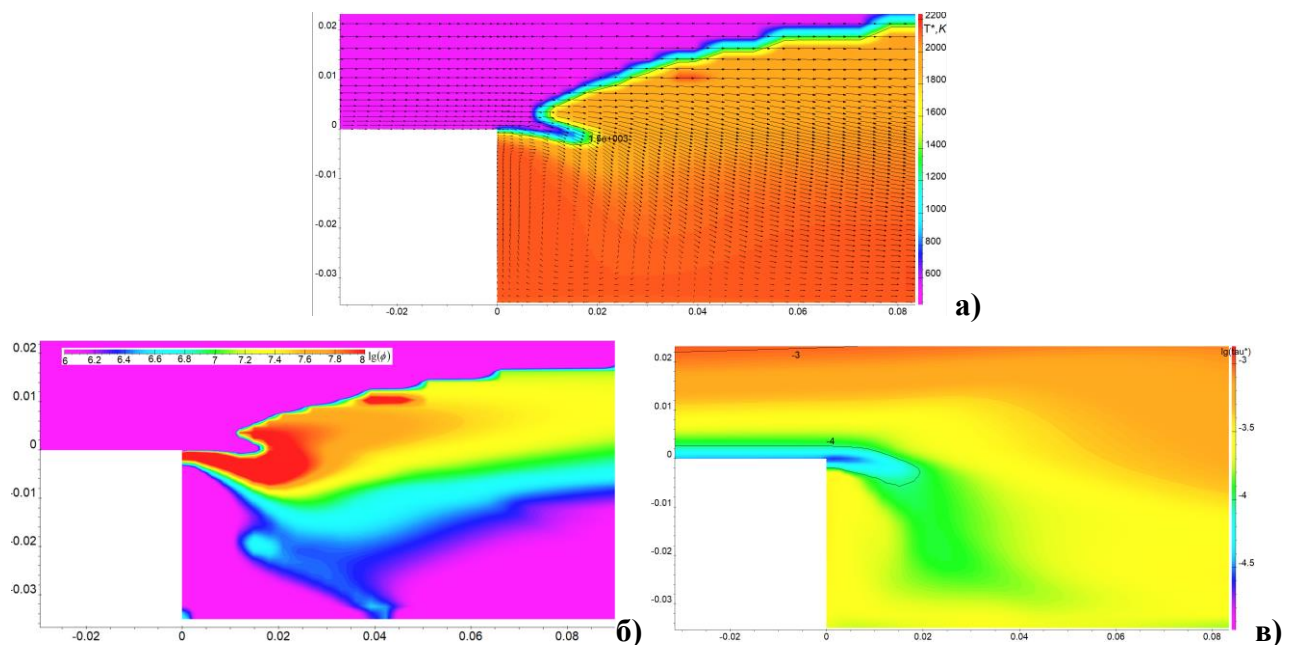


Рисунок 3.9 – Расчет (UPaSR): поля в области ступеньки: а) T^* , б) $\lg(\phi)$ и в) $\lg(\tau^*)$

На рис. 3.10 положения изолинии $T=1500$ в камере, полученные в расчетах без TCI и по моделям PaSR и UPaSR, сопоставлены с экспериментальными данными. При $0.05 < x < 0.25$ м фронт пламени расположен выше, чем в эксперименте. При $x < 0.2$ расчет без TCI располагается ближе к эксперименту, чем расчет с PaSR. UPaSR демонстрирует более выраженный перегиб фронта пламени при $x \sim 0.6$ м. Но расхождение с экспериментом остается значительным.

На рис. 3.11 приведено поле объемной доли тонких структур γ^* , которое в данном случае определяется по локальным значениям параметров турбулентности. Следует отметить низкие значения γ^* ($\sim 0.3 \dots 0.4$) вдали от стенки и сильный рост γ^* до значений $\gamma^* \sim 0.9 \dots 1$ в пограничных слоях и в зоне возвратного течения за ступенькой. Такое определение γ^* несовершенно, потому принимается во внимание только локальное характерное время (τ^*).

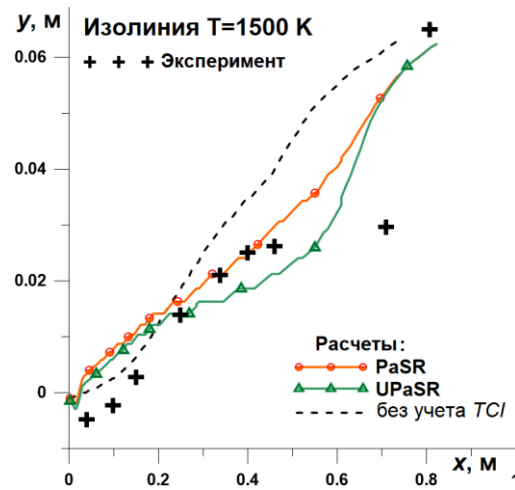


Рисунок 3.10 – Изотермы $T=1500$ К. Сравнение расчетов без учета TCI (пунктир) и по моделям UPaSR (зеленая кривая) и PaSR (рыжая кривая) с экспериментом (маркеры)

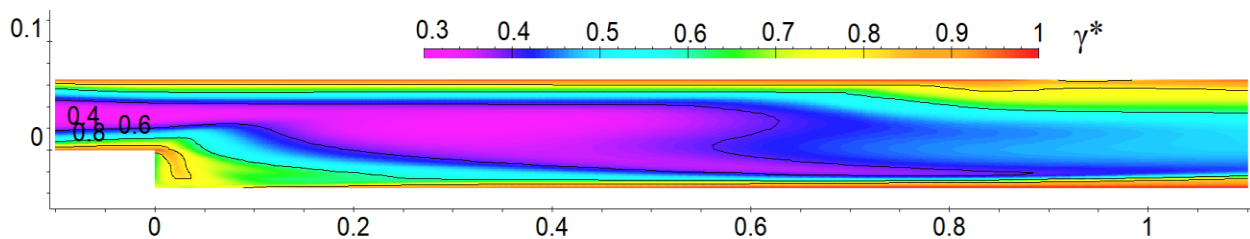


Рисунок 3.11 – Поле параметра γ^* в расчете по модели UPaSR

Была также выполнена серия расчетов, в которых исследовалось влияние различных параметров модели PaSR. На рис. 3.12 сопоставляются распределения температуры в поперечных вертикальных сечениях, полученные в расчете по модели PaSR в постановке $p=\text{const}$ и $\rho=\text{const}$. Там же нанесены экспериментальные точки из [139]. Видно, что профили “размазались” ($|dT/dy|_{x=\text{const}}$ стало меньше и ближе к эксперименту) по сравнению с расчетом без TCI (ср. рис. 3.5). В большинстве сечений профили, полученные в постановке $\rho=\text{const}$, сильнее отличаются от эксперимента, чем профили $p=\text{const}$. Поэтому далее всюду используется постановка $p=\text{const}$.

Одним из основных коэффициентов модели является c_{τ^*} , участвующий в определении характерного времени пребывания газа в реакторе: $\tau^* = c_{\tau^*} \sqrt{\tau_K \cdot \tau_T}$. На рис. 3.13 сопоставляются распределения температуры в поперечных вертикальных сечениях, полученные в расчетах по UPaSR с разными значениями коэффициента c_{τ^*} (0.05...1.0). За исключением сечения $x=0.25$ м, во всех расчетах передний фронт пламени расположен выше, чем в эксперименте – там, где происходит тепловыделение в тонких структурах. Уменьшение c_{τ^*} приводит к снижению τ^* и, следовательно, к росту объемной доли тонких структур $\gamma^* = \tau_{chem} / (\tau_{chem} + \tau^*)$.

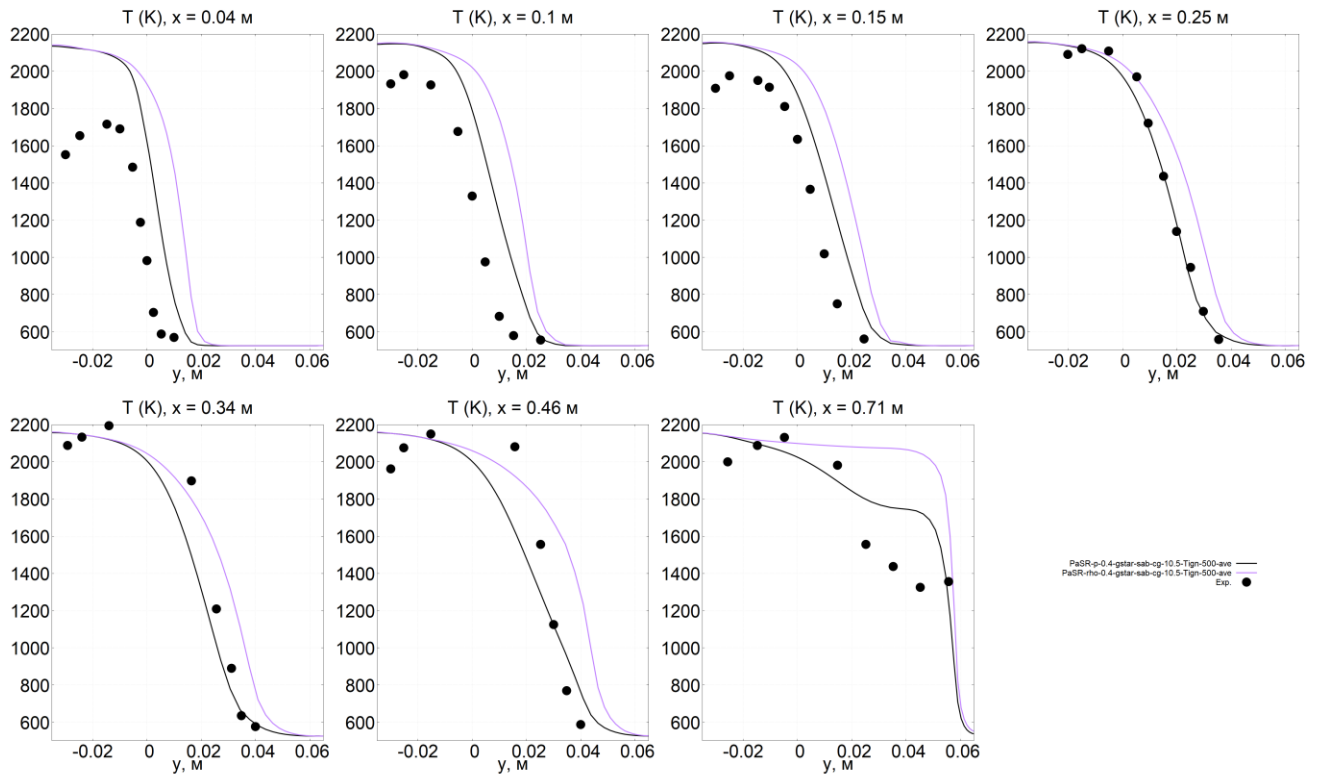


Рисунок 3.12 – Влияние постановки $p=const$ (черная кривая) или $\rho=const$ (сиреневая кривая) при расчете параметров в реакторе (UPaSR)

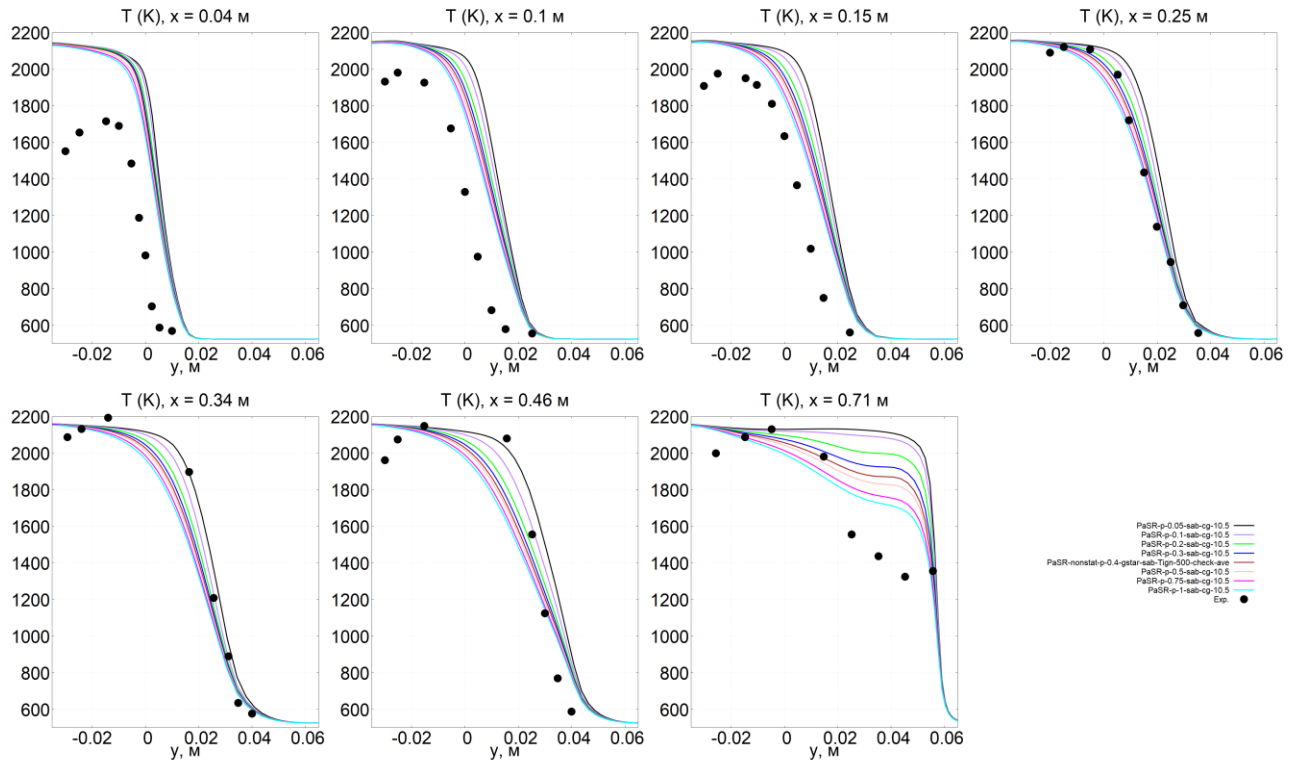


Рисунок 3.13 – Влияние коэффициента c_{τ^*} (UPaSR). Черная кривая – $c_{\tau^*}=0.05$, сиреневая – 0.1, салатовая – 0.2, синяя – 0.3; красная – 0.4, розовая – 0.5, фиолетовая – 0.75, голубая – 1.0

Но уравнение энергии в пренебрежении диффузией тепла и в приближении постоянной теплоемкостью смеси можно записать в виде

$$\bar{\rho} C_p \frac{D\bar{T}}{Dt} = \gamma^* \cdot \sum_{j=1}^{N_{\text{react}}} Q_j W_j(\rho^*, T^*, \bar{Y}^*). \quad (3.1)$$

где $D/Dt = \partial/\partial t + \bar{u}_i \partial/\partial x_i$ – производная вдоль траекторий объемов газа. Поэтому увеличение γ^* ускоряет рост средней температуры вдоль этих траекторий, снижая продольную ширину пламени. Поэтому в каждом сечении $x=\text{const}$ средняя температура выше в том расчете, где ниже c_{τ^*} . За исключением двух начальных сечений, ширина фронта пламени в поперечном направлении больше, чем в эксперименте.

На рис. 3.14 можно видеть влияние вида члена, описывающего в PaSR обмен между тонкими структурами и окружающим пространством: по модели Магнуссена ($G = \eta \gamma^* \rho^* V / \tau^*$) или как предложено В. А. Сабельниковым ($G = c_g \omega \cdot \rho^* V$, где $c_g=10.5$). В последней постановке температура несколько выше и ближе к эксперименту, что особенно заметно в последних сечениях. Поэтому более предпочтительным следует считать вариант В.А.Сабельникова. Отметим, что этот вариант был рекомендован в [161, 162] для RANS реализации EPaSR.

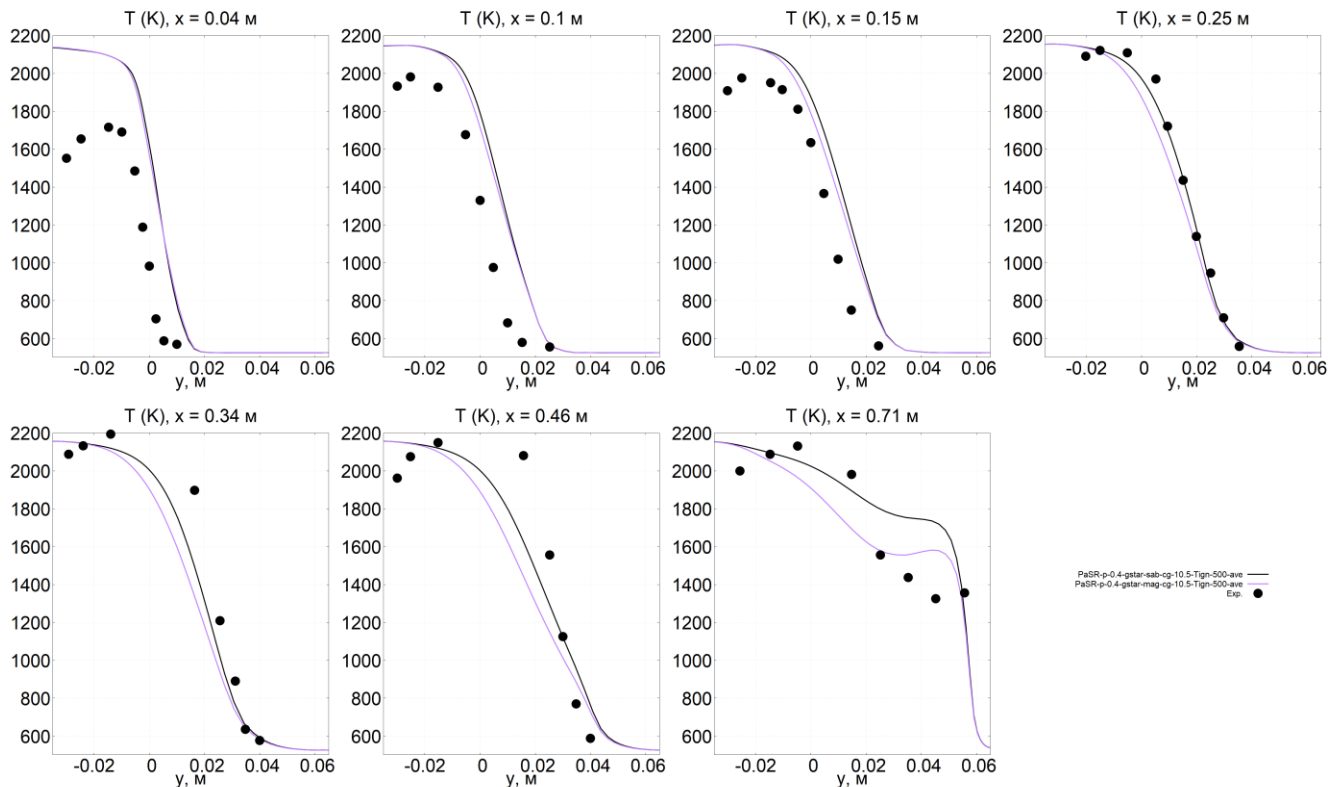


Рисунок 3.14 – Влияние вида обменного члена между “0” и “*” в расчетах по UPaSR: следуя Магнуссену – сиреневая кривая, Сабельникову ($c_g=10.5$) – черная

Наконец, было исследовано влияние коэффициента c_g в формуле $G = c_g \omega \cdot \rho^* V$. Результаты параметрических расчетов приведены на рис. 3.15. При уменьшении c_g происходит сдвиг кривых $T(y)$ влево и вниз (температура падает). Этот эффект можно объяснить следующим образом. Уменьшение c_g приводит к падению расхода смеси через тонкие структуры, что увеличивает время пребывания там смеси, позволяет реакции пройти дальше и, следовательно, вызывает увеличение температуры в тонких структурах. Но при температуре, близкой к максимальной для данной смеси, скорость реакции падает при увеличении температуры. Значит, увеличение температуры снижает скорость тепловыделения. Следовательно, уменьшается источниковый член в уравнении энергии – см. (3.1). Скорость роста средней температуры вдоль траекторий объемов газа уменьшается, и ширина пламени увеличивается. Поэтому в каждом сечении $x = \text{const}$ средняя температура выше в том расчете, где ниже c_g . Если сравнивать поперечную ширину пламени с экспериментальной, то наилучшие результаты дает $c_g = 17.5$ (в работе В.А.Сабельникова [161, 162] предложено значение $c_g = 10.5$). При этом расчетные кривые сдвинуты вправо от данных эксперимента, т.к. передний фронт пламени расположен выше, чем в эксперименте (что вообще характерно для всех расчетов на базе моделей PaSR и UPaSR). Дальнейшие исследования будут направлены на более совершенные модификации модели PaSR: EPaSR и GPaSR.

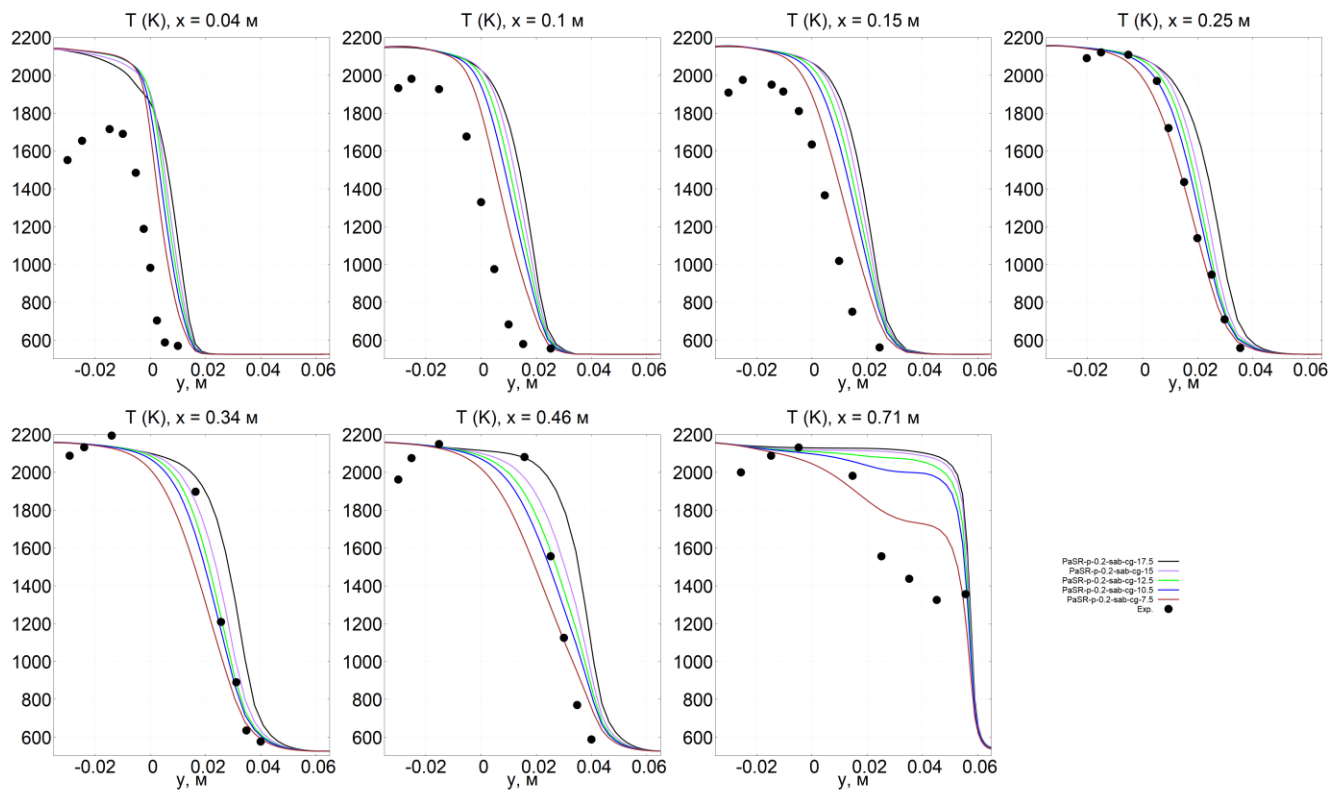


Рисунок 3.15 – Влияние коэффициента c_g в расчетах по UPaSR. Черная кривая – $c_g = 17.5$, сиреневая – $c_g = 15$, салатная – $c_g = 12.5$, синяя – $c_g = 10.5$; красная – $c_g = 7.5$

§3.5. Расчеты по EPaSR и GPaSR

Ниже речь пойдет о результатах применении методов EPaSR и GPaSR к численному моделированию рассматриваемого эксперимента. Напомним, что в модели EPaSR предложено отказаться от квазистационарной трактовки тонких структур и решать для “*” систему дифференциальных уравнений в частных производных, учитывающую изменение по времени состава в тонких структурах, а также конвективный и диффузионный перенос тонких структур по пространству. Таким образом, модель EPaSR требует решения дополнительного набора дифференциальных уравнений для описания состояния в тонких структурах, что практически удваивает размерность итоговой системы уравнений по сравнению со случаем без учета TCI. Но это позволяет устранить недостатки модели PaSR.

Новая оригинальная модель учета TCI того же класса – Generalized PaSR (GPaSR) – является своего рода компромиссом между точностью модели EPaSR и относительной вычислительной простотой PaSR. В этой модели конвективный перенос тонких структур учитывается при помощи дополнительного источникового члена.

На рис. 3.16 представлены поля температуры, полученные в расчетах без учета TCI и в расчетах на основе моделей UPaSR, EPaSR и GPaSR. Можно видеть, что модели EPaSR и GPaSR, как и UPaSR, дают более “размазанные” (гладкие) поля температуры, чем расчет без учета TCI. При этом в поле нет уже нефизичного повышения температуры в начале камеры около $x \sim 0$, как это имело место в моделях PaSR и UPaSR. Это было достигнуто благодаря учету обмена между тонкими структурами соседних ячеек (конвективный и диффузионный перенос параметров с “*”).

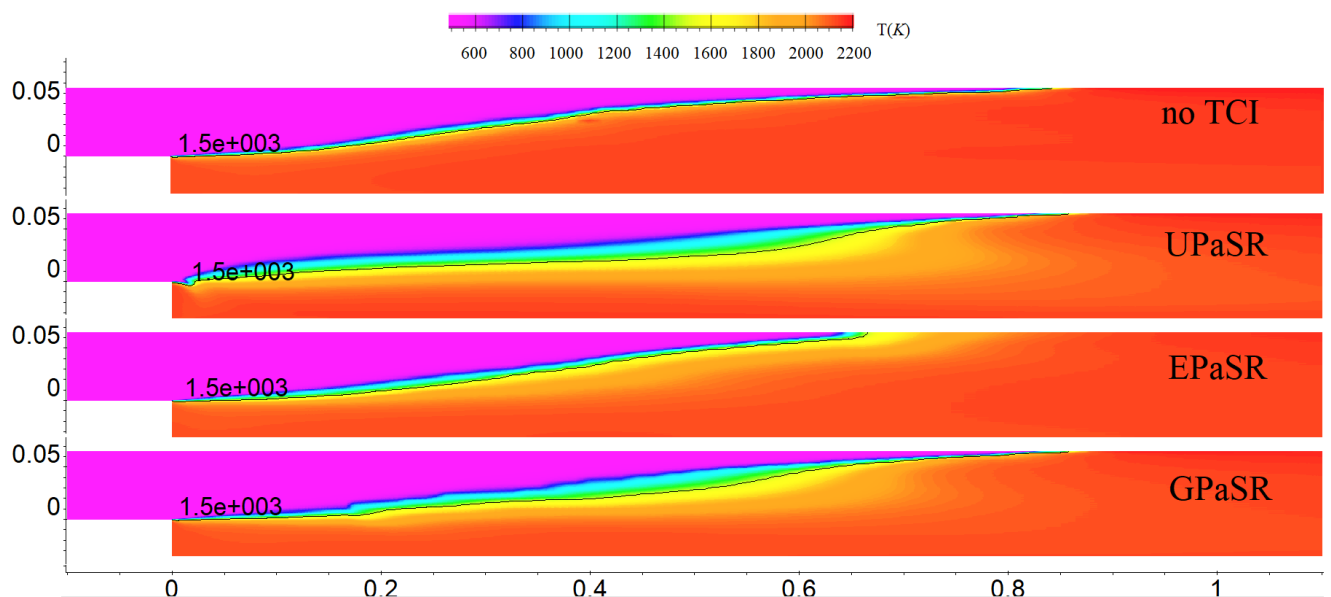


Рисунок 3.16 – Сопоставление полей средней температуры T в расчетах без TCI и с модификациями PaSR. Нанесены изолинии $T=1500\text{ K}$

Параметрические расчеты на основе модели EPaSR с различными значениями коэффициентов c_{τ^*} и c_g в целом показали те же тенденции, что и аналогичные расчеты на основе модели UPaSR. По совокупности сечений лучшие (наиболее близкие к эксперименту) результаты дает значение $c_{\tau^*}=0.2$ и рекомендованное в [161, 162] значение $c_g=10.5$.

На рис. 3.17 приводится поле параметра γ^* , которое получается в модели EPaSR из решения дополнительного дифференциального уравнения. Это поле можно сравнить с рис. 3.11, полученного по модели UPaSR. Можно видеть, что за счет турбулентной диффузии от стенок внутрь невязкого ядра потока величина γ^* близка к 0.6 в основной части расчетной области, с областью роста γ^* до 0.8...0.9 в окрестности рециркуляционной зоны за ступенькой.

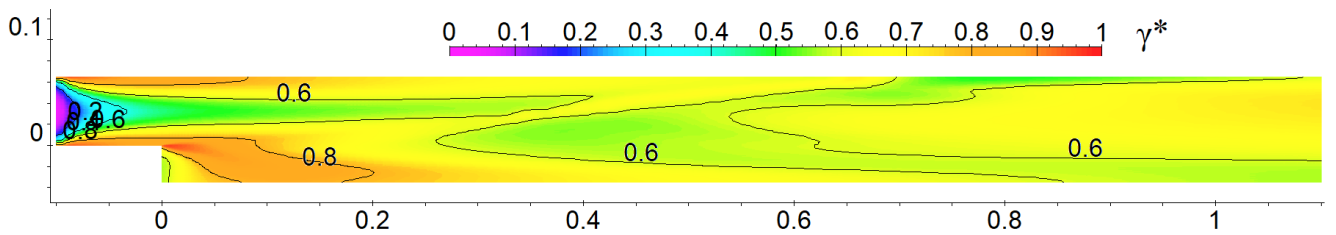


Рисунок 3.17 – Поле параметра γ^* в расчете по EPaSR.

Важным новым параметром модели GPaSR является характерное конвективное время пребывания втекающего газа в окрестности тонких структур – τ_{res} . Для его оценки предложено следующее соотношение:

$$\frac{1}{\tau_{res}} = c_{GPaSR} \cdot \frac{\dot{m}_+}{\rho^* \Delta V}. \quad (3.2)$$

где $\dot{m}_+ = - \int_{S^-, \vec{u} \cdot \vec{n} < 0} \rho^* \vec{u} \cdot \vec{n} dS > 0$ – втекающий поток массы, ΔV – объем рассматриваемой

ячейки, dS – площадь грани ячейки, \vec{n} – единичный вектор нормали к грани, направленный наружу из ячейки, интегрирование по S^- означает, что учитываются только те грани ячейки, на которых газ втекает в ячейку: $\vec{u} \cdot \vec{n} < 0$.

На рис. 3.18 представлено влияние коэффициента c_{GPaSR} . В первом и последних трех сечениях (до $x=0.2$) различия между кривыми незначительны, а по совокупности остальных сечений автору представляется наиболее близким к эксперименту $c_{GPaSR}=0.75$.

Теперь сопоставим результаты расчетов по моделям EPaSR и GPaSR с экспериментом, а также с расчетами Н.Петровой (ONERA), выполненными по модели EPaSR [161].

По форме изолинии $T=1500K$ (рис. 3.19) можно сказать, что при $x < 0.4$ м расчеты по EPaSR и GPaSR друг к другу и к эксперименту, и результаты значительно лучше, чем при использовании UPaSR. При $x > 0.4$ м EPaSR также идет ближе к эксперименту, а GPaSR несколько завышает положение передней границы фронта пламени. В целом расчеты автора и

[161] по модели EPaSR близки друг к другу, хотя в [161] использовалась другая модель турбулентности ($k-l$). Имеется расхождение при $x > 0.4$ м, и трудно сказать, какая кривая лучше, поскольку экспериментальное значение при $x \approx 0.7$ м может быть и “выбитой точкой”.

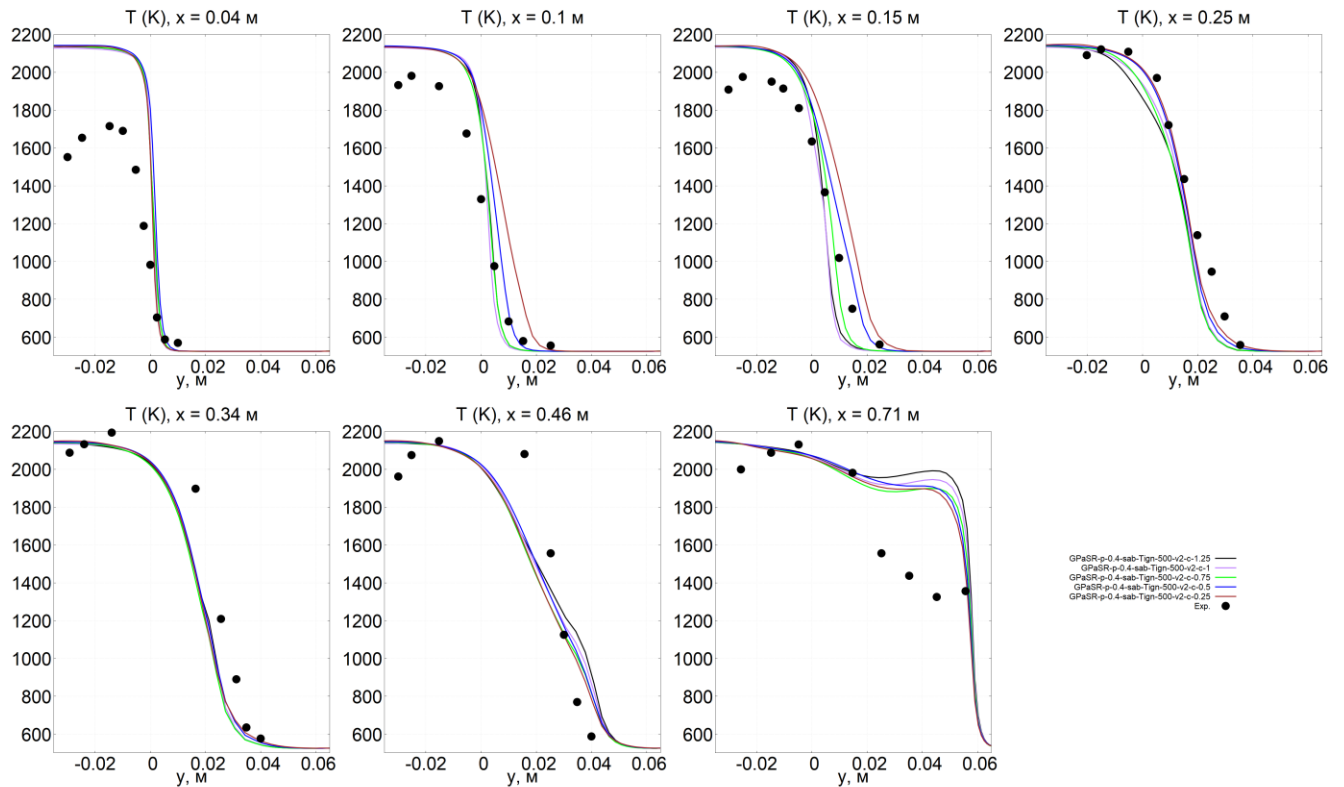


Рисунок 3.18 – Влияние коэффициента c_{GPaSR} ($c_g=10.5$ и $c_{\tau^*}=0.4$ везде) в расчетах по GPaSR. Кривые соответствуют: черная – $c_{\text{GPaSR}}=1.25$, сиреневая – $c_{\text{GPaSR}}=1.0$, салатовая – $c_{\text{GPaSR}}=0.75$, синяя – $c_{\text{GPaSR}}=0.5$, красная – $c_{\tau^*}=0.25$.

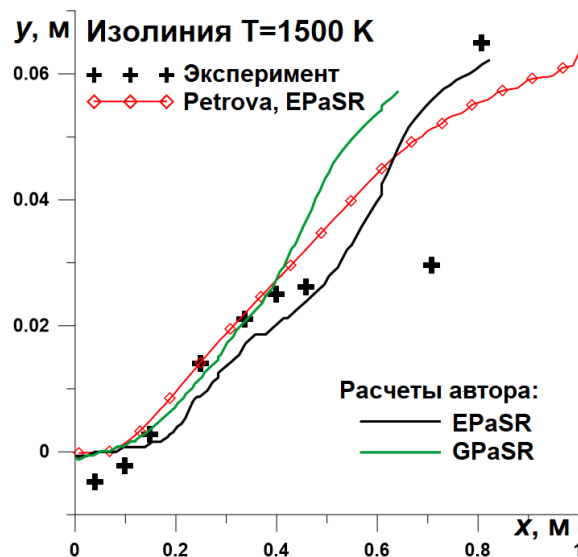


Рисунок 3.19 – Изотермы $T=1500$ в расчетах и в эксперименте (маркеры). Черная кривая – EPaSR, зеленая – GPaSR, красная с маркерами – EPaSR из [161]

На рис. 3.20 дано сопоставление профилей температуры и продольной скорости, полученных с использованием методов EPaSR и GPaSR, с экспериментальными данными и с расчетами на основе метода EPaSR из [161]. По сравнению с рис. 3.5 и 3.7 (которые получены

без учета TCI) и с рис. 3.12 (по UPaSR) очевидно заметное приближение расчета к эксперименту в сечениях $x=0.25$ м и $x=0.34$ м, где пламя уже достаточно удалено от ступеньки и где еще не сказывается некорректное описание условий теплообмена на верхней стенке канала.

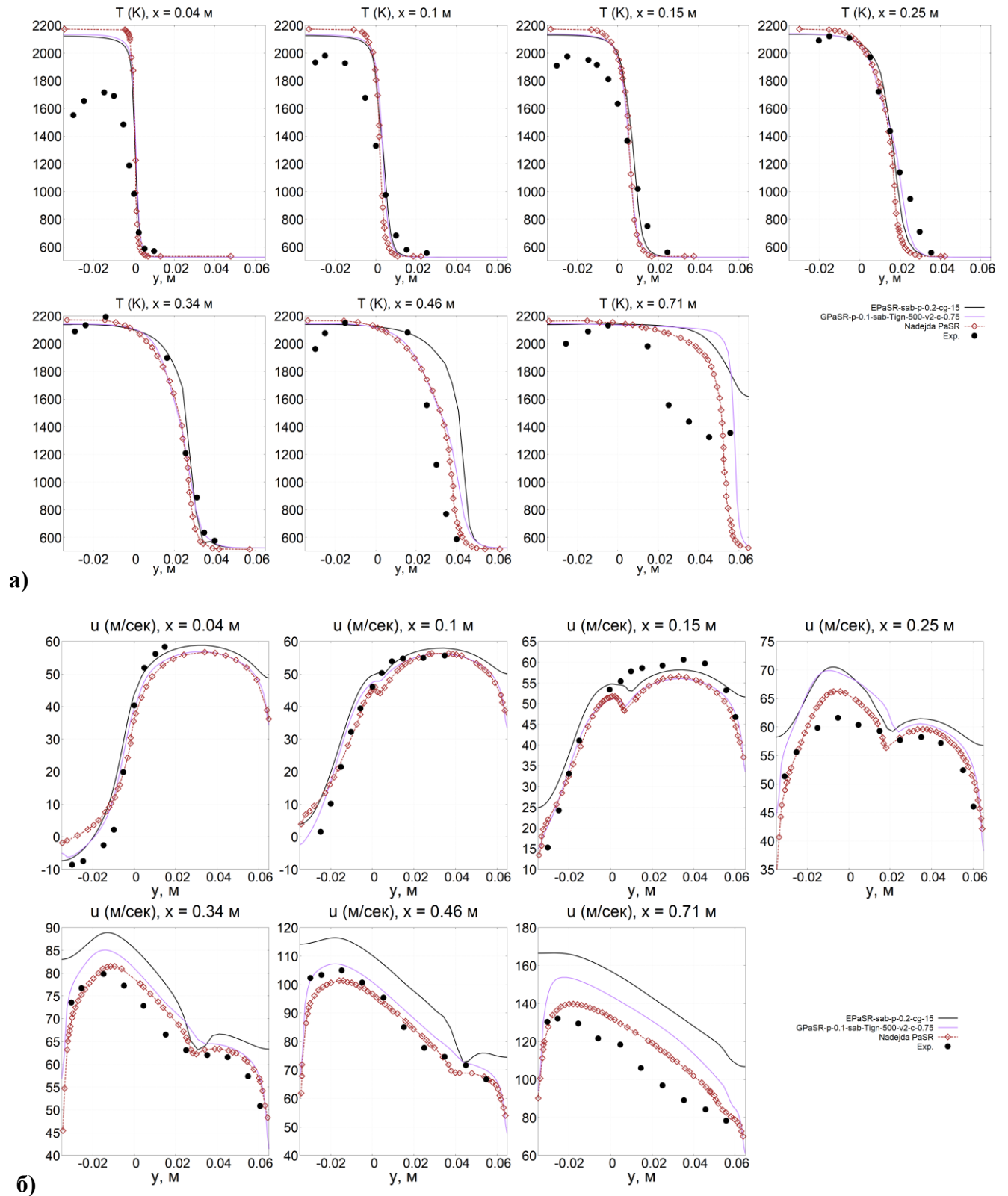


Рисунок 3.20 – Распределения средних значений а) температуры и б) x -компоненты скорости u в поперечных сечениях. Черные маркеры – эксперимент, кривые соответствуют расчетам: черная – EPaSR, сиреневая – GPaSR; красная с маркерами – EPaSR из [161]

§3.6. Механизм стабилизации горения в эксперименте Magre&Moreau

Рассмотрим механизм стабилизации пламени в эксперименте [139]. Т.к. мы имеем стационарное течение однородно перемешанной смеси, то можно было бы ожидать стабилизацию пламени в стоячей волне горения, распространяющейся по газу за счет турбулентного и молекулярного переноса тепла и наклоненную к потоку так, чтобы скорость газа по нормали к потоку была равна скорости волны относительно потока. Если бы это было так, то фронт пламени был бы наклонен более полого там, где скорость потока больше и более круто – там, где скорость потока меньше (рис. 3.21).

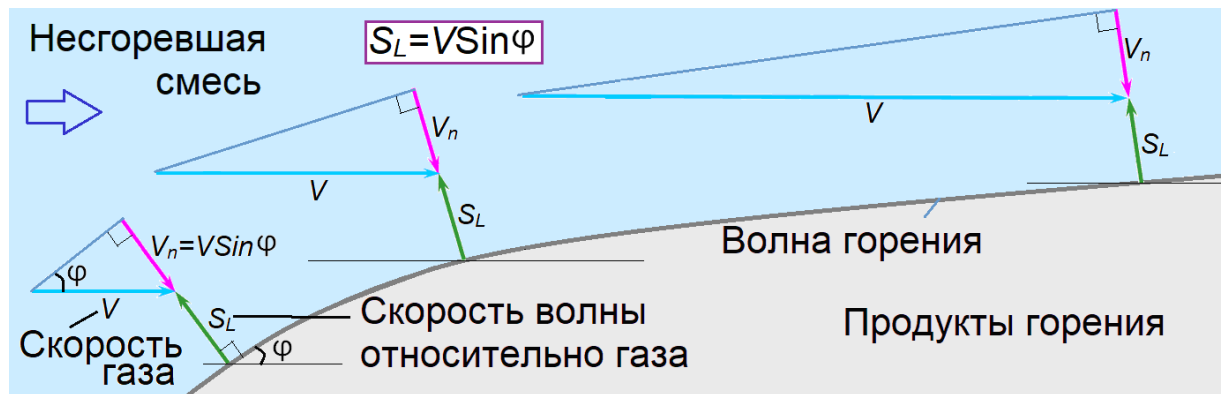


Рисунок 3.21 – Наклон волны горения в зависимости от скорости потока

Посмотрим на поля продольной скорости и температуры (первые два поля на рис. 3.22). Тонкие пограничные слои на верхней стенке не разрешены сеткой. Скорость потока в невязком ядре потока перед фронтом пламени увеличивается слева направо. Это связано с тем, что под фронтом пламени из-за тепловыделения поток отклоняется вниз, и для сохранения интеграла $\int_{y=0}^{y=H} \rho u v dF$ необходимо над фронтом отклонить поток вверх. В дозвуковом потоке пламя наводит перед собой положительную вертикальную скорость. Соответственно, и пламя наклоняется все более и более полого. Значит, в верхней части течения реализуется волновой механизм стабилизации горения. Но вот в нижней части картинки, при подходе к ступеньке, скорость падает, а пламя опять-таки наклоняется все более полого. Значит, там другой механизм. (Для сравнения на поле скорости черной линией показан контур фронта пламени, который реализовался бы при волновом механизме распространения пламени.)

Это видно и из полей скорости производства H_2O и CO_2 (нижние два поля на рис. 3.22), которые показывают, что в верхней части более интенсивно производится CO_2 , а в нижней части – H_2O . Смена кинетического механизма свидетельствует и о разных способах стабилизации горения. Судя по всему, в нижней части пламени реализуется существенно

двумерный механизм стабилизации, при котором поток тепла от горячей рециркуляционной зоны постепенно прогревает поток над ступенькой, повышая скорость реакции. У самой ступеньки скорость потока меньше, и загорается раньше. Значит, там мы имеем самовоспламенение вдоль линий тока за счет вертикального потока тепла.

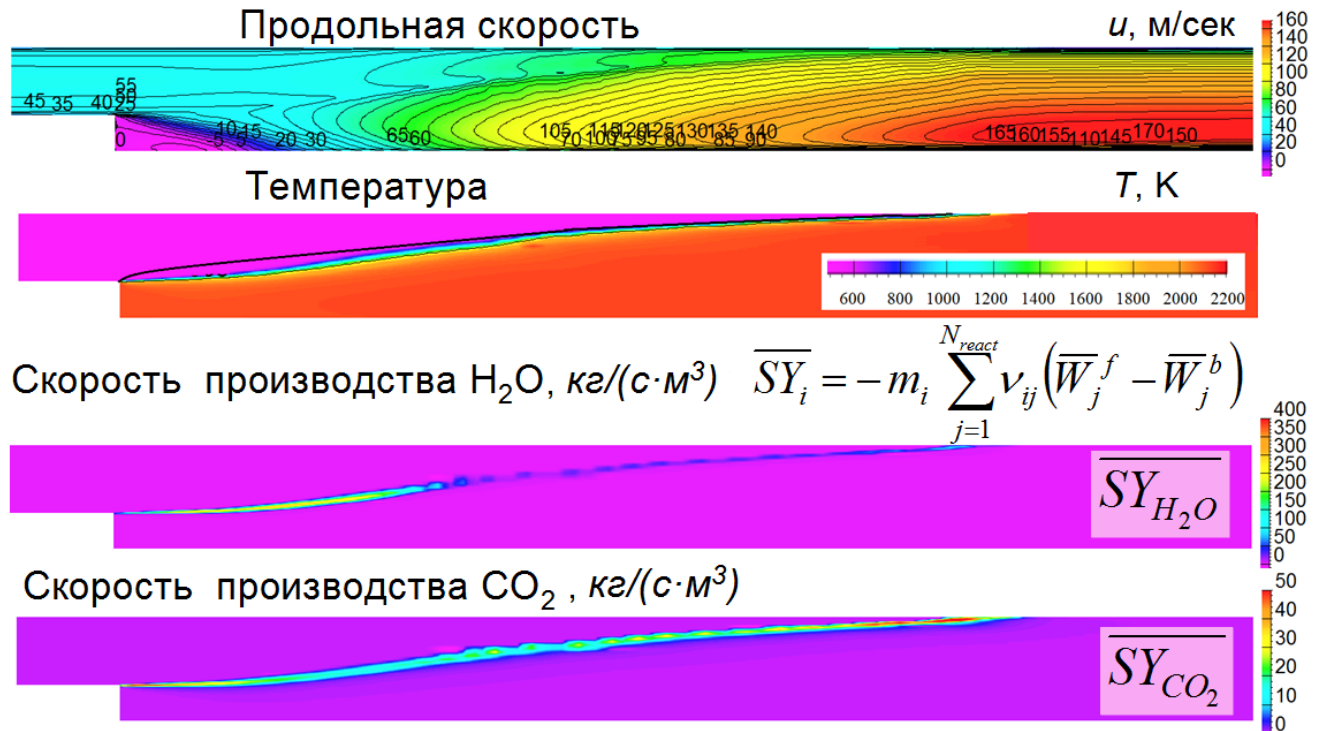


Рисунок 3.22 – Поля продольной скорости, температуры и скоростей производства H_2O и CO_2 в расчете методом UPaSR

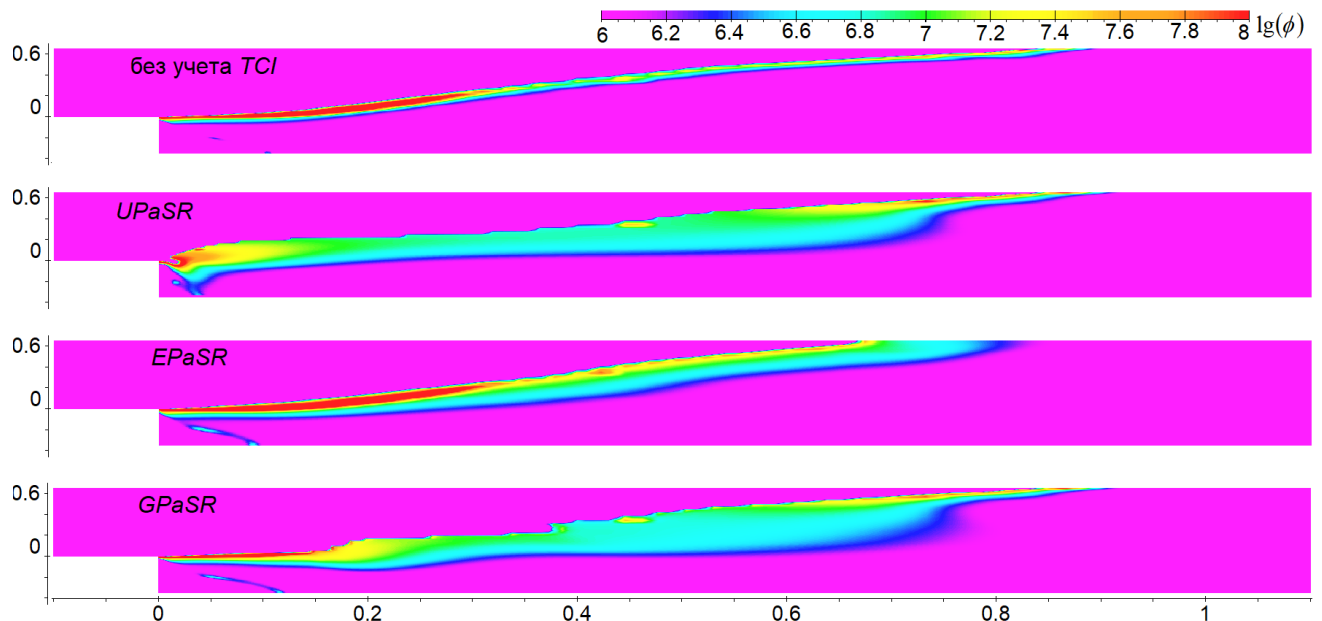


Рис. 3.23 – Поля десятичного логарифма скорости тепловыделения ϕ вдоль линий тока в расчетах без учета TCI и по моделям UPaSR, EPaSR и GPaSR

На рис. 3.22 были рассмотрены поля, полученные без учета TCI. Рис. 3.23–3.24 показывают, что меняется при использовании различных моделей турбулентного горения. На рис. 3.23 сравниваются поля десятичного логарифма скорости тепловыделения. Можно видеть, что при переходе к UPaSR картина течения меняется. Вместо постепенного выделения вдоль линий тока имеем взрывное тепловыделение в области, расположенной за ступенькой. При этом, как показывает поле источника H_2O (рис. 3.24), при использовании модели UPaSR во всем поле кинетический механизм такой же, как и в верхней части поля течения. Следовательно, в случае UPaSR механизм стабилизации почти всюду – волновой. Это связано с тем, что UPaSR не учитывает температуру тонких структур вверх по потоку от данной точки и хранит память о температуре, заданной в начальном поле. Возникает как бы локальный источник зажигания, и к нему привязывается стоячая волна горения. При переходе к EPaSR поток сносит горячие тонкие структуры, и поле возвращается к тому же механизму, что и без TCI. TCI только замедляет тепловыделение внутри волны горения (источник уменьшается пропорционально доле тонких структур). Как и следовало ожидать, в случае GPaSR мы имеем нечто среднее между UPaSR и EPaSR: в нижней части поле тепловыделения больше похоже на EPaSR, а в верхней – на UPaSR.

Полученные результаты позволяют понять, почему модели EPaSR и GPaSR не приближают расчет к эксперименту при $x \leq 0.1$ м и существенно улучшают согласование с экспериментом в сечениях $x = 0.25$ м и $x = 0.34$ м. этих двух сечениях существенным образом проявляется волновой механизм распространения пламени, на который сильно влияют эффекты TCI. А вблизи ступеньки развитие горения определяется эффектами локального самовоспламенения. Потому там модели TCI и не дают эффекта.

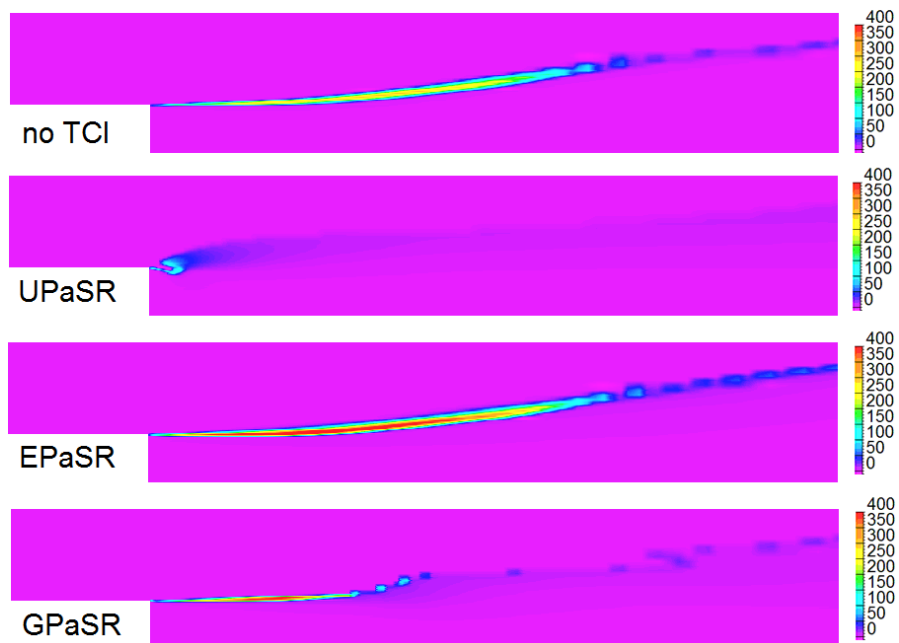


Рис. 3.24 – Поля скорости производства паров воды в расчетах без учета TCI и по моделям UPaSR, EPaSR и GPaSR

Выводы к Главе 3

- 3.1. Для настройки методов семейства PaSR выполнено численное моделирование глубоко дозвукового течения ($M < 0.2$) в камере сгорания со ступенькой P. Magre et al. без горения и с горением. Сопоставлены различные методы учета TCI семейства PaSR. Произведена настройка моделей. Выявлены недостатки модели PaSR, связанные с неучетом предыстории тонких структур вверх по течению относительно данной точки. Исследовано влияние различных параметров моделей класса PaSR. Из вариантов $\rho^* = \rho^0 = \bar{\rho}$ и $\rho^* = \rho^0 = \bar{\rho}$ ближе к эксперименту результаты расчетов по первому варианту. Уменьшение коэффициентов c_{τ^*} и c_g ускоряет рост температуры вдоль линий тока. Наиболее близкие к эксперименту результаты получены при $c_{\tau^*} = 0.2$ и $c_g = 10.5$.
- 3.2. Примененные в диссертации расширенная (EPaSR) и обобщенная (GPaSR) модели реактора частичного перемешивания Сабельникова В.А. улучшили согласование с экспериментом в области существенного проявления взаимодействия турбулентности с горением по сравнению с квазиламинарным расчетом. Средняя ошибка² определения скорости уменьшилась в 1.7 раз с моделью EPaSR и в 2.7 раз с моделью GPaSR, а ошибка определения температуры – в 2.3 раза с моделью EPaSR и в 3.2 раза с моделью GPaSR. Новая модель GPaSR эффективнее модели EPaSR на 10% по времени счета.
- 3.3. Установлен механизм стабилизации горения в данном эксперименте: самовоспламенение в присутствии интенсивной турбулентной диффузии, переходящее в волну дефлаграции, распространяющуюся за счет молекулярной и турбулентной диффузии тепла. Существенное проявление эффектов TCI наблюдается только в области волнового распространения пламени, но не в области самовоспламенения возле обратного уступа, где основную роль играет нагрев потока за счет турбулентной диффузии тепла из зоны возвратного течения.

² Ошибка (отклонение расчета от эксперимента) вычисляется по норме L_2 , затем делится на максимальное экспериментальное значение параметра в данном сечении канала и находится среднее арифметическое по всем сечениям.

ГЛАВА 4. РАСЧЕТЫ ТЕЧЕНИЯ В МОДЕЛЬНОЙ КАМЕРЕ СГОРАНИЯ (HEXAFLY-INT)

§4.1. Предыстория и обзор проекта HEXAFLY-INT.

Экспериментальная модель и ее испытания в ЦАГИ

Быстрое развитие реактивной авиации, в том числе и пассажирской, а также и освоение авиационной техники, способной преодолевать звуковой барьер, приходится на 1950-е годы. Уже в 1947 году американским Bell X-1 впервые в мировой истории был преодолен этот барьер [46]. А с 1954 года началось производство сверхзвуковых истребителей: F-100 и МиГ-19. Поднялся вопрос о перевозке пассажиров на самолётах, способных развивать сверхзвуковую скорость. Из преимуществ, это сокращало время перелёта на дальние расстояния, а самолёт не нуждался в промежуточных посадках для дозаправки. В конце 50-х первыми в эту работу включились англичане (проект Bristol 223), а также французы (проект Super-Caravelle). Усилия обеих стран были объединены – так был создан проект сверхзвукового пассажирского самолёта «Конкорд». Работы по созданию сверхзвукового пассажирского авиалайнера с крейсерской скоростью полета 2300—2700 км/ч в СССР начались в ОКБ Туполева в начале 60-х.

Первый полёт Ту-144 состоялся 31 декабря 1968 года, на два месяца раньше «Конкорда». Ту-144 также является вторым в истории пассажирским авиалайнером, преодолевшим звуковой барьер в 1969 г. (первым был американский турбореактивный лайнер Douglas DC-8 в 1961 г.). Следующий символический рубеж в 2 Маха самолёт преодолел в 1970 г., совершив полёт на высоте 16300 м со скоростью 2150 км/ч. Специально для самолёта был разработан двухконтурный турбореактивный двигатель с форсажной камерой. Пассажирские перевозки начались в ноябре 1977 г. Коммерческая карьера Ту-144 была недолгой: всего семь месяцев. Поводом для прекращения пассажирских полётов послужила катастрофа опытного экземпляра Ту-144Д. Более основательной причиной отказа от пассажирской эксплуатации является нерентабельность. Из-за высокого удельного расхода топлива в крейсерском режиме и сложного технического обслуживания парка сверхзвуковых лайнеров билеты на сверхзвуковой рейс не покрывали даже незначительной части эксплуатационных расходов. Кроме того, малая дальность полёта (3–5 тыс. км) также ограничивала, усложняла и удорожала возможности пассажирской эксплуатации. Коммерческая эксплуатация «Конкордов» началась в 1976 г. и продолжалась до катастрофы с одним из лайнеров в 2000 г. Регулярные пассажирские перевозки возобновились через год, однако последовала череда инцидентов, приведшая к прекращению коммерческой эксплуатации парка «Конкордов» в 2003 г.

Таким образом, препятствием гражданскому высокоскоростному транспорту были недостаточная дальность и высокий расход топлива из-за слишком низкой эффективности крейсерского полета, которые к тому же снижаются с числом Маха полета. Однако за последние десятилетия были предложены радикально новые концепции современного высокоскоростного ЛА на основе на хорошо продуманной интеграции высокоэффективной силовой установки с конструкцией ЛА, создающей большую подъемную силу. Исследования в этом направлении ведутся в том числе в ряде международных проектов Европейского Сообщества (6-я и 7-я Рамочные Программы) [47, 121, 180, 182, 207]. Здесь следует выделить одновременно запущенные проекты ATLLAS и LAPCAT, а также их продолжения ATLLAS II и LAPCAT II.

Ключевыми элементами, вынуждающими ограничить число Маха полета, являются трудности с материалами и охлаждением, как силовой установки, так и планера в целом. Преимущества перспективных экономичных, высокоэффективных и высокоскоростных конструкций гражданских самолетов могут быть достигнуты и реализованы только при условии разработки легких, высокотемпературных композиционных материалов для конструкций и двигателей, с целью снижения веса, расхода топлива и прямых эксплуатационных расходов. Это наряду с разработкой инновационных технологий охлаждения являлось основным предметом исследования проекта ATLLAS [37].

Проект получил продолжение – ATLLAS II, в котором прорабатывались вопросы, связанные с размещением этих материалов на ЛА, с разработкой таких важных узлов, как инжекторы топлива, охлаждаемые керамические панели для двухрежимных ПВРД, с покрытием контрольных поверхностей композитными материалами и т.п.

Одновременно с ATLLAS был запущен проект LAPCAT (Long-Term Advanced Propulsion Concepts and Technologies) [182], конечной целью которого являлось сокращение времени дальних полетов. Для этого требуется новый режим полета с числами Маха в диапазоне от 4 до 8. При таких высоких скоростях классические турбореактивные двигатели необходимо заменить прямоточными воздушно-реактивными со сжатием за счёт скоростного напора. Но прямоточным двигателям требуется дополнительная силовая установка для достижения минимальной рабочей скорости, в роли которой может выступить ТРД. Основными задачами проекта являлись определение и оценка различных концепций СУ (ПВРД и ТРД), повышение эффективности интеграции двигателя и несущей конструкции ЛА, повышение КПД турбин и теплообменников и, наконец, экспериментальные и численные исследования горения при высоком давлении и в сверхзвуковом потоке.

Продолжение проекта – LAPCAT II, в котором акцент был сделан на разработку новых концепций высокоскоростных ЛА, нацеленных на достижение максимальной эффективности

крейсерского полета с оптимальной интеграцией корпуса и силовой установки. Результатом работы стал проект малоразмерного демонстратора высокоскоростного ЛА на водородном топливе [121], рассчитанный для летных и трубных испытаний с числа Маха крейсерского полета $M = 5-7$ на высоте 27–33 км (рисунок 4.1). Для взлета и ускорения до $M \sim 4.5$, при котором происходит переключение на двухрежимный ПВРД, предполагается использовать ракетно–турбинный двигатель. Предварительное численное моделирование показало неплохие характеристики этого аппарата [207].



**Рисунок 4.1 – Малоразмерный демонстратор высокоскоростного ЛА MR2
который исследовался в рамках проекта HEXAFLY–INT [181]**

Продолжением LAPCAT II стал следующий международный скоординированный проект, HEXAFLY–INT (High–Speed Experimental Fly Vehicles – INTernational) 7–й Рамочной Программы, начатый в 2014 г. и продолжающийся в настоящее время [47]. Проект нацелен на подготовку и осуществление летных экспериментов этого демонстратора. Можно выделить 6 основных направлений исследований в рамках HEXAFLY–INT:

- 1) оценка общих характеристик транспортных средств с точки зрения эффективности крейсерского полета, дальности, аэро–двигательного баланса, интеграции разработанных материалов и и т. д.;
- 2) высокоскоростная аэродинамика для оценки, например, влияния эффектов сжимаемости, аэродинамического облика ЛА, АД качества, устойчивости и т. д.;
- 3) исследования СУ для оценки характеристик воздухозаборника, камеры сгорания, сопла, включая высокоскоростное горение, процессы впрыскивания и смешения топлива и т. д.;
- 4) исследования материалов и конструкций, устойчивых к высоким температурам, для летных испытаний в реальных условиях, направленные в т.ч. на снижение веса,

концепции активного и пассивного охлаждения, оценку возможности повторного использования отработавших материалов;

- 5) высокоскоростное управление полетом, требующее тестирования в реальном времени;
- 6) оценки воздействия высокоскоростного полета на окружающую среду, направленные на снижение шума от звукового удара и высотных выбросов в стратосфере.

Хотя проект нацелен на проведение летных экспериментов, т.к. только они могут служить доказательством технической осуществимости новых перспективных высокоскоростных концепций. Но этому предшествует обширная программа численных исследований и наземных экспериментов.

Проект координируется Европейским Космическим Агентством ESA–ESTEC (European Space Agency – European Space Research and Technology Center, Нидерланды). Участниками проекта HEXAFLY–INT являются исследовательские организации Франции (ONERA), Италии (CIRA, TET, TSD, MAT), Великобритании (GDL), Бельгии (VKI), Германии (DLR, Университет Штутгарта), России (ЦАГИ, ЦИАМ, ЛИИ, МФТИ), Австралии (университеты Сиднея, Нового Южного Уэльса, Южного Квинсленда).

Российские исследователи принимают участие в нескольких группах работ проекта, включая экспериментальные и численные исследования силовой установки. В рамках 4–й группы работ в ЦИАМ на основании разработанной в ЕС базовой конфигурации высокоскоростного ЛА–демонстратора (EFTV – Experimental Flight Test Vehicle) были спроектированы и изготовлены две экспериментальные модели для “горячих” испытаний на высокоэнтальпийных стендах: модель полного ЛА (без крыльев) для экспериментальных измерений аэро–двигательного баланса и модель внутреннего проточного тракта EFTV для экспериментальной отработки различных режимов работы двигателя.

Модель полного ЛА представляет собой демонстратор технологического модуля высокоскоростного ПВРД на водородном топливе (рисунок 4.2). Модель испытывалась на стенде Ц16ВК ЦИАМ с огневым подогревателем на метане. Эксперименты выполнил коллектив исследователей во главе с А.Н.Прохоровым. Был рассмотрен ограниченный диапазон режимов полета (в основном – $M_{\infty} = 7.4$). В ходе испытаний был зарегистрирован положительный аэродвигательный баланс – тяга, создаваемая двигателем, превышала общее аэродинамическое сопротивление экспериментального объекта [47]. Эксперименты сопровождалось трехмерными численными расчетами как в “холодной”, так и в “горячей” постановке, проведенными Н.В.Кукшиновым, О.В.Гуськовым и др. [51].

Модель внутреннего проточного тракта была предназначена для испытаний на стенде Т–131Б ЦАГИ в режиме присоединенного воздуховода и проектировалась с учетом рекомендаций специалистов ЦАГИ. Модель включала полный тракт силовой установки EFTV от горла

воздухозаборника до выхода сопла с воспроизведением структуры конструкции ЛА, его подсистем и компонентов – см. рисунок 4.3.

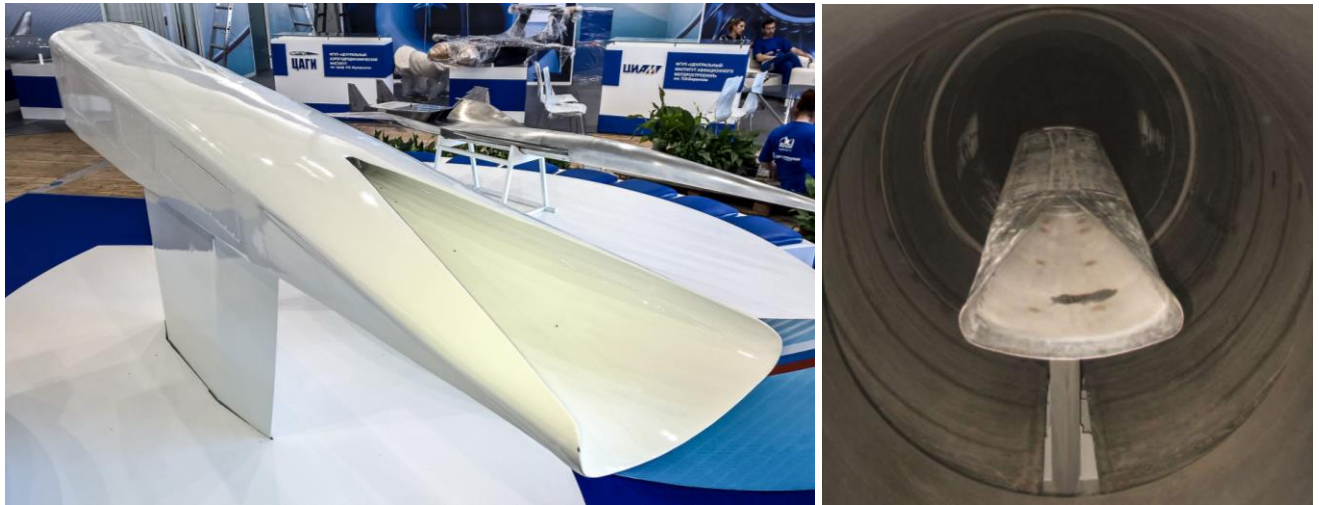


Рисунок 4.2 – Демонстратор технологического модуля силовой установки HEXAFLY-INT на выставке МАКС–2015 [146](слева) и на стенде Ц16ВК ЦИАМ [47] (справа)

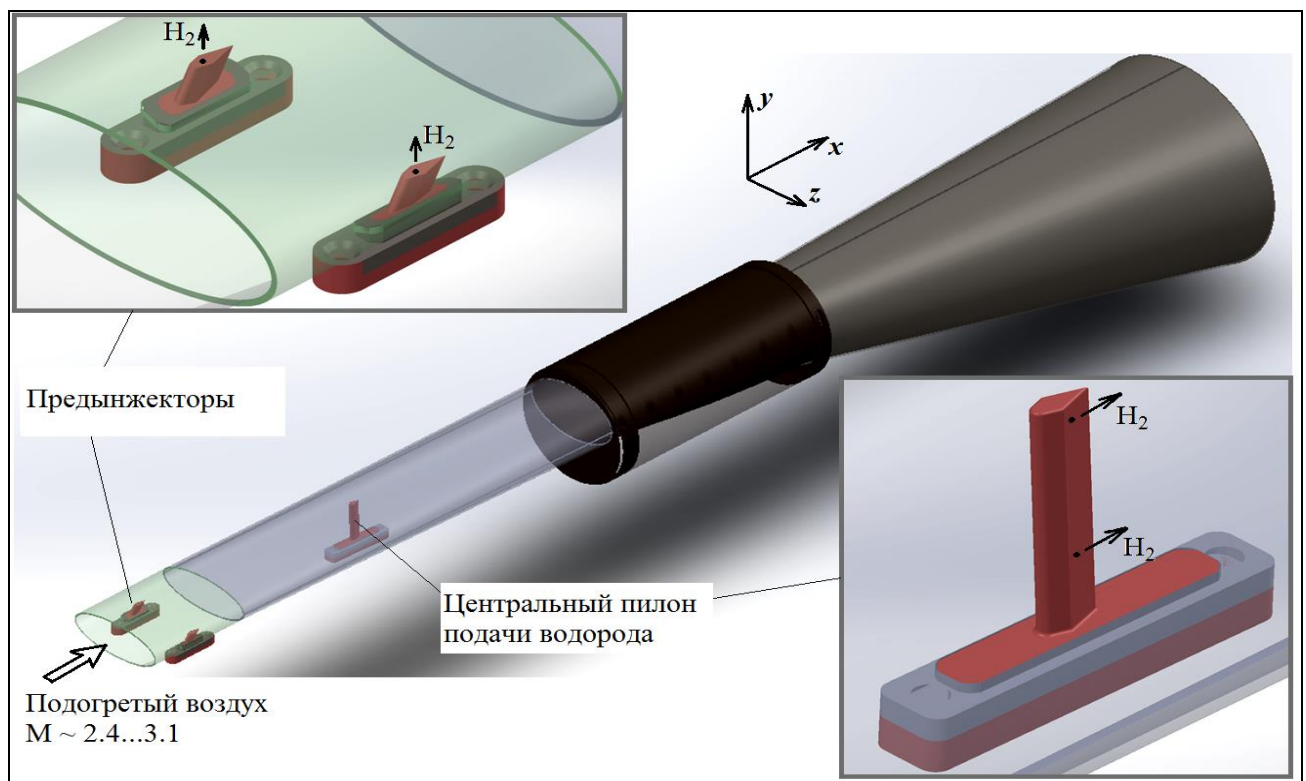


Рисунок 4.3 – Экспериментальная модель внутреннего проточного тракта силовой установки HEXAFLY-INT для испытаний на стенде Т-131Б ЦАГИ

“Горячие” эксперименты на АДТ Т-131Б были проведены для режимов полета $M_\infty = 6, 7, 7.4$ с разными вариантами подачи топлива. Эксперименты выполнил коллектив исследователей, в который входили О.В.Волощенко, В.А.Талызин, А.А.Николаев,

М.А.Иванькин и др. [190]. Численное сопровождение экспериментальных исследований проводилось автором (трехмерные расчеты) и В.В.Власенко (двумерные расчеты) [13].

На рис.4.4 приводится геометрия сборки для экспериментов на АДТ Т–131Б: переходное сопло, расположенное в эксперименте между огневым подогревателем и моделью проточного тракта HEXAFLY–INT, камера сгорания и расширяющееся сопло. Переходное сопло включает расширяющийся участок сверхзвуковой части сопла с переходом сечения от круга к эллипсу.

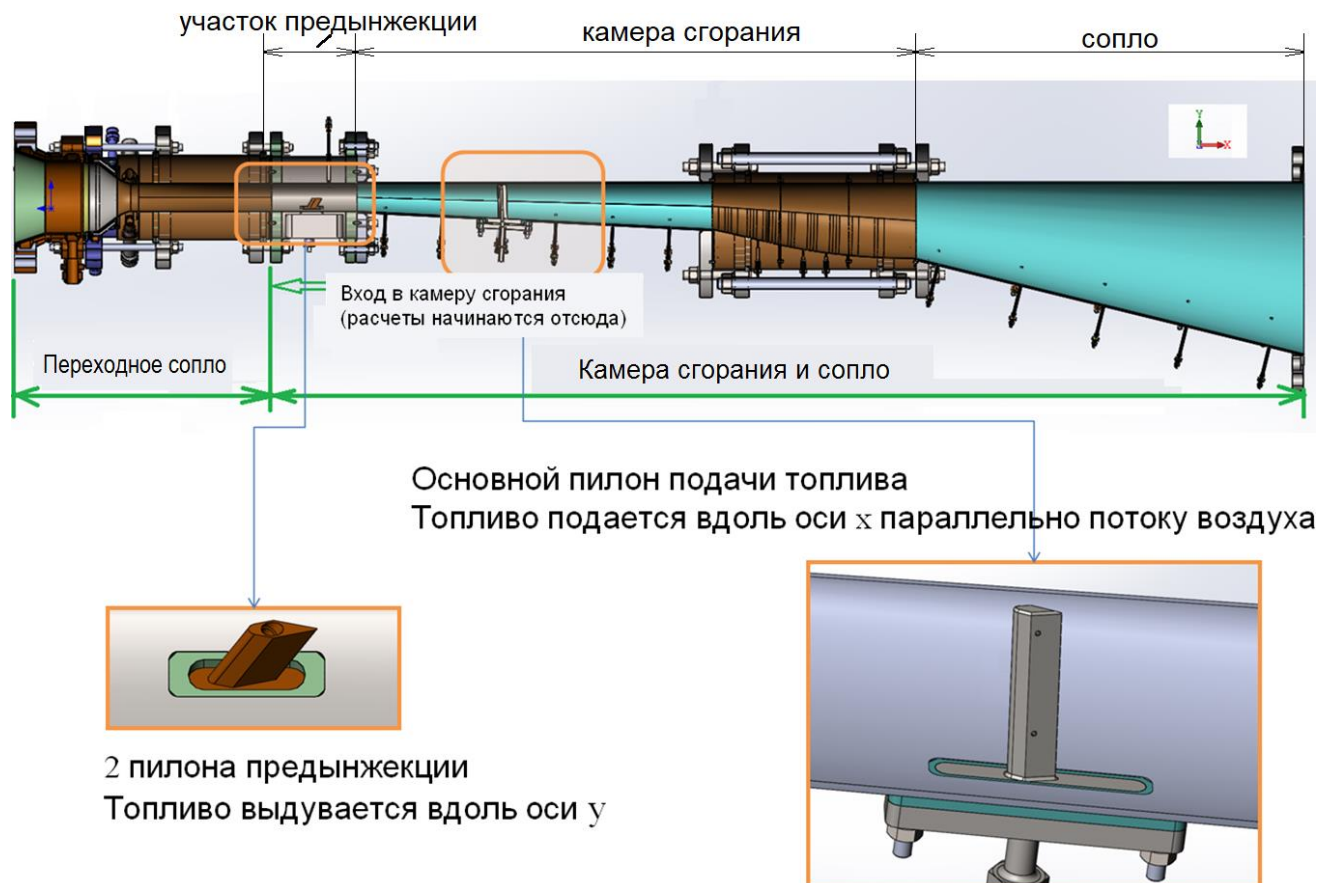
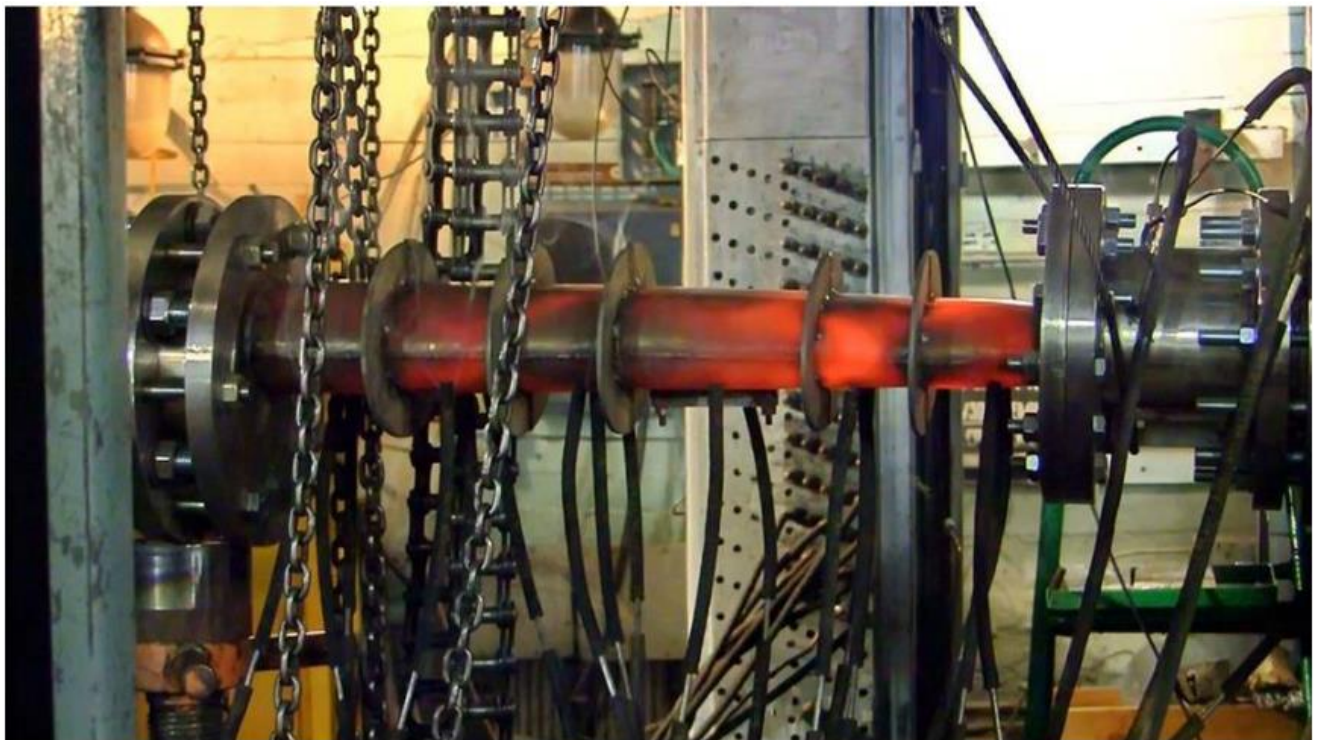


Рисунок 4.4 – Модель проточного тракта силовой установки HEXAFLY–INT при виде сбоку и геометрия пилонов для инжекции топлива

Остальные секции (рис. 4.4) воспроизводили элементы проточного тракта EFTV. Сразу за входом в камеру расположен т.н. участок предынжекции (на рис. 4.4 он выделен серым цветом), в одном сечении которого на нижней стенке, симметрично относительно продольной плоскости симметрии были установлены два коротких стреловидных пилон, наклоненных к продольной оси под углом 60° , с радиусами скругления передней кромки – 2 мм и задней кромки – 0.3 мм и отверстием инжекции диаметром 5 мм на торце, через которое водород выдувался вертикально вверх. Форсунки были спрофилированы так, чтобы число Маха истекающих вверх струек было равно $M = 2$. Следующая секция – основной участок камеры сгорания (на рис. 4.4 – первый голубой участок), в одном сечении которой на продольной

плоскости симметрии был расположен основной пилон подачи топлива, установленный почти вертикально и имеющий по бокам две пары отверстий инъекции диаметром 1.4 мм. Он также имел стреловидную форму с радиусами скругления передней кромки – 2 мм и задней кромки – 0.2 мм. Далее располагался расширяющийся отсек с переходом поперечного сечения от эллипса к кругу (коричневый цвет на рис. 4.4) и т.н. “двумерное” сопло (голубой цвет справа на рис. 4.4) – расширяющееся сверхзвуковое сопло с круглыми сечениями.

Модель проточного тракта содержит некоторые отличия от реального высокоскоростного ЛА–демонстратора EFTV [13, 207]. На рис. 4.5 приведена фотография модели проточного тракта EFTV, установленного на стенде Т–131Б ЦАГИ. Снимок сделан во время “горячего” пуска. Видно, как раскаляются стенки модели. Несмотря на то, что пилоны–инжекторы были изготовлены из жаропрочной стали, основной пилон сторел через несколько “горячих” пусков, и подачу топлива пришлось производить только из пилонов–предынжекторов. В некоторых пусках центральный пилон заменялся на пилон–имитатор, не содержащий отверстий для инъекции топлива.



**Рисунок 4.5 – Фотография модели проточного тракта HEXAFLY–INT
в АДТ Т–131Б ЦАГИ: нагрев модели во время испытаний**

§4.2. Выбор режима и определение параметров на входе в камеру

На основе проведенных экспериментов в АДТ Т–131Б ЦАГИ была выполнена валидация используемой численной технологии. Для этого было проведено численное моделирование одного из режимов экспериментальных пусков. Все описанные в этом разделе расчеты проводились на базе метода из Главы 1, с применением граничного условия “закон стенки” [13]. Хотя в качестве топлива в камере сгорания используется водород, однако, для достижения требуемой температуры торможения, поток воздуха проходит через огневой подогреватель и содержит продукты горения углеводородного топлива. Поэтому в расчетах используется кинетическая схема горения углеводородного топлива в воздухе (1.46) из [13] (12 реакций между 9 активными компонентами и инертным азотом N_2). Массовая доля кислорода близка к воздуху при нормальных условиях. Расчеты проводились методом установления. Для ускорения сходимости использовалась технология локального шага по времени. Ниже будет рассматриваться лишь полученное стационарное поле течения. Полученные в расчетах распределения давления по стенкам камеры были сопоставлены с экспериментом.

$M_\infty = 7$ (этому режиму соответствуют число Маха на входе проточный тракт $M_{entry} \approx 2.6$), $M_\infty = 7.4$ ($M_{entry} \approx 3$) и $M_\infty = 6$ ($M_{entry} \approx 2.3$). Число Маха на входе в проточный тракт обеспечивалось в эксперименте геометрией переходного сопла (точнее, площадью критического сечения сменной секции 2). Сопла для $M_\infty = 6$, $M_\infty = 7$ и $M_\infty = 7.4$ отличались только радиусом критического сечения в секции 2 ($R_{cr} = 23$ мм, $R_{cr} = 20$ мм и $R_{cr} = 14.8$ мм, соответственно).

Экспериментальные пуски отличались значениями давления торможения, расхода на входе в проточный тракт EFTV, расхода водорода (т.е. коэффициентом избытка окислителя $\alpha = G_{O_2} / (8G_{H_2})$), где G_{O_2} – поток массы кислорода во втекающем в камеру загрязненном воздухе из огневого подогревателя, а G_{H_2} – суммарный поток массы водорода), а также режимом работы центрального пилон-инжектора (подаваемая через него доля топлива). Давление торможения измерялось в подогревателе (на входе в секцию 1), а в качестве входного расхода воздуха использовался суммарный расход воздуха, керосина и обогащающего кислорода на входе в подогреватель.

Уже в ходе второго экспериментального пуска центральный пилон сгорел. В остальных режимах весь расход водорода был равно распределен между пилон-предынжекторами. Хотя в части экспериментов на место центрального пилон был установлен его имитатор, но подача топлива через него была невозможна. Поэтому выбор режима пал на единственный

режим с полноценной работой центрального пилона, в котором по 43.4% от общего расхода водорода инжектировалось из каждого предынжектора и 13.2% – из центрального пилона.

Для определения профиля параметров потока на входе в камеру, перед расчетом течения в проточном тракте силовой установки HEXAFLY-INT (рис. 4.4) моделировалось течение в переходном сопле в 3-мерной постановке. Геометрия переходного сопла, которое имитировало условия полета при $M_\infty = 7$, а также расчетная сетка, показаны на рисунке 4.6.

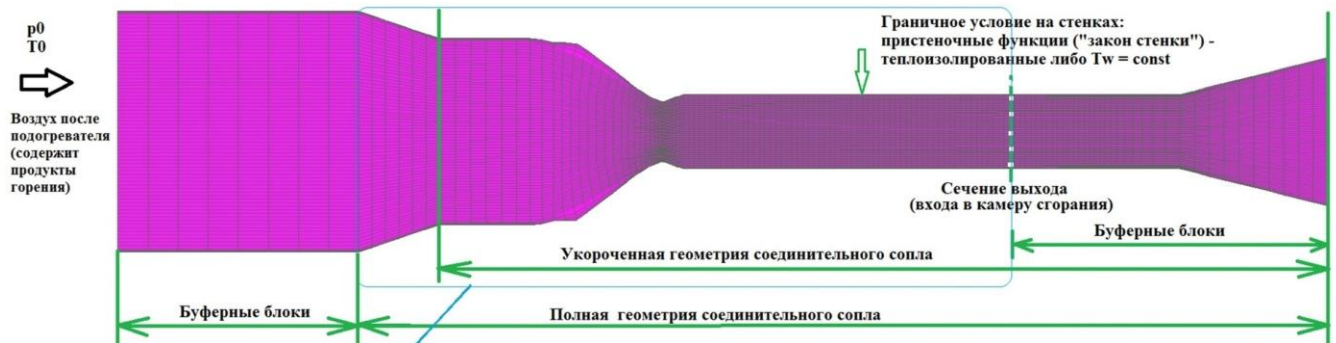


Рисунок 4.6 – Сопло для режима $M_\infty = 7$: расчетная сетка и граничные условия

Стенки сопел считались теплоизолированными, и на них ставилось условие “закон стенки”. На входе (левая граница расчетной области) ставилось мягкое характеристическое граничное условие дозвукового втекания потока, в котором задавались значения давления торможения p_0 и температуры торможения T_0 , состав газа и параметры турбулентности, а значение инварианта Римана, приходящего по характеристикам изнутри расчетной области, бралось из приграничной внутренней ячейки расчетной области. Если в ходе расчета возникала ситуация, когда поток не втекал в расчетную область через данную границу, а вытекал, то из центров приграничных ячеек сносились два инварианта Римана, а давление торможения принималось равным заданному значению p_0 .

Использовался равновесный состав газа, соответствующий заданному соотношению расходов воздуха, обогащающего кислорода и керосина и заданным параметрам торможения в подогревателе – p_0 и T_0 . Параметры турбулентности принимались равными $q = 9$ м/сек, $\omega = 2000$ Гц. Сечение, соответствующее входу в камеру сгорания, обозначено зеленой линией на рис. 4.4. Справа к этому сечению были пристроены два буферных блока. 1-й буферный блок – канал постоянного сечения. На его стенках в части, примыкающей к соплу, ставилось условие “закон стенки”, чтобы обеспечить такое же развитие течения, как и в секции 4 проточного тракта EFTV. В оставшейся части этого блока на стенках было задано условие скольжения (непротекания). Во 2-м буферном блоке площадь сечения канала линейно увеличивалась вдоль продольной оси x , и на стенках также было задано условие скольжения. Расчеты начинались от

поля с покоящимся газом. Во всех блоках, кроме 2-го буферного блока, задавались такой же состав, давление и температура газа, как и на левой границе. Во 2-м буферном блоке было задано малое давление 500 Па. На правой границе использовались параметры из приграничных ячеек расчетной области. Это обеспечивало сверхзвуковой режим истечения из сопла Лавалья.

Давление торможения в подогревателе p_0 бралось из эксперимента, а температура торможения в подогревателе T_0 подбиралась так, чтобы обеспечить известное из эксперимента значение суммарного расхода G_Σ . В качестве начального приближения на 1-й итерации использовалась температура торможения, найденная в ходе 2.5-мерных расчетов, выполненных В.В. Власенко [13]. После окончания расчета температура торможения в подогревателе подправлялась, исходя из предположения, что $G_\Sigma \sim 1/\sqrt{T_0}$. За несколько итераций достигалось значение расхода, отличающееся от заданного лишь в третьей значащей цифре.

На рис. 4.7 приводятся поля числа Маха и давления торможения (в предположении, что поток тормозится при замороженных химических реакциях), которые были получены в 3^х-мерных расчетах подогревателя. Поле числа Маха показывает, что сопло обеспечивает значение числа Маха на входе в камеру, близкое к заданному: $\langle M_{entry} \rangle \approx 2.7$. На полях полного давления виден уровень потерь p_0 , обусловленных пограничными слоями, скачками уплотнения и неравновесными реакциями в сопле. На рисунке 4.8 приводятся профили параметров в сечении входа в проточный тракт EFTV, полученные в расчетах.

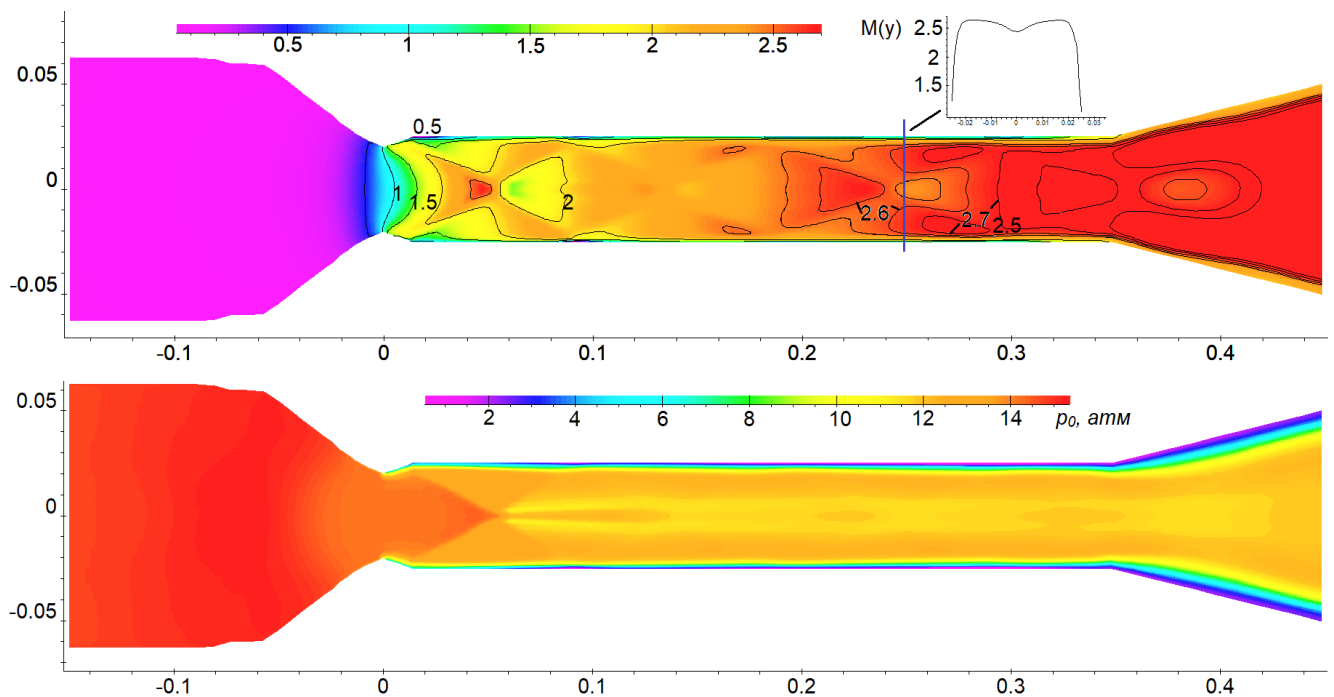


Рисунок 4.7 – Поля а) числа Маха и б) полного давления в переходном сопле

Также было исследовано влияние формы переходного сопла до критического сечения на поле течения после критического сечения. Для этого был проведен расчет с сокращенной передней частью переходника. Результаты расчетов показали, что поля после критического сечения в двух расчетах практически совпадают и потому здесь опускаются. Этот результат позволяет менять форму сопла до критического сечения (в том числе можно проводить расчеты на укороченной геометрии).

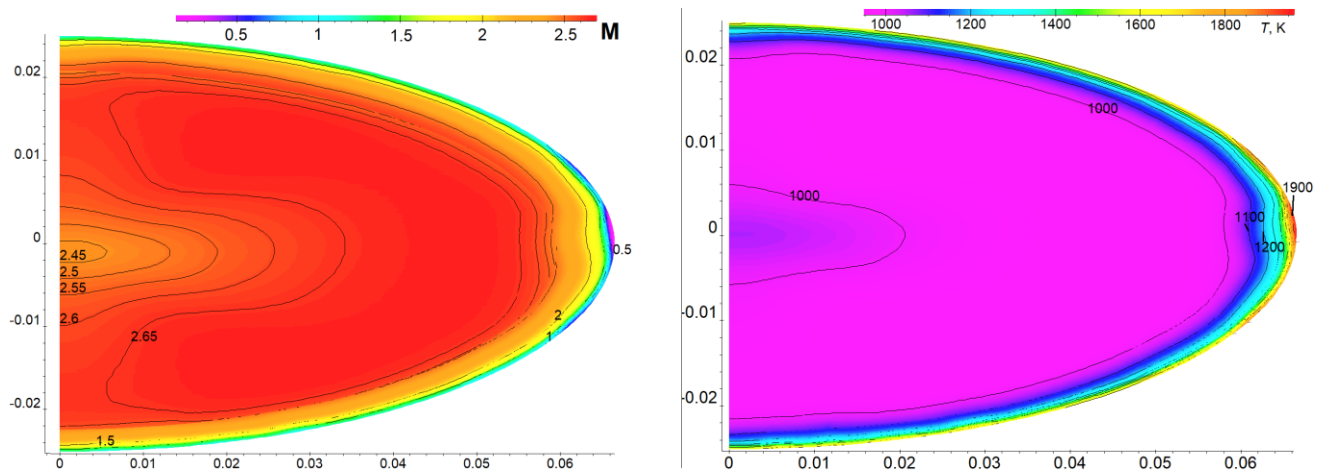


Рисунок 4.8 – Профили параметров в сечении входа в проточный тракт EFTV, полученные в трехмерных расчетах

§4.3. Граничные условия и расчетная сетка

Расчеты камеры сгорания проводились, начиная с сечения входа в камеру, используя при этом заданный профиль на входе, полученный из моделирования течения в подогревателе. В силу осевой симметрии была рассмотрена лишь половина камеры.

На рис.4.3 изображена геометрия камеры сгорания с пилонами. Основание пилонов расположено вне камеры, а сам пилон расположен внутри. Более детально общий вид пилонов, а так же геометрия камеры сгорания в плоскости симметрии, показаны на рис.4.4. Пилоны предварительной инжекции топлива расположены по бокам камеры сгорания. Топливо (водород H_2) инжектируется вертикально вверх перпендикулярно основному потоку газа в камере. Основной пилон расположен ниже по течению по центру камеры. Этот пилон по высоте загромаждает почти всю камеру. Топливо инжектируется через четыре отверстия (по два с каждой стороны пилона) параллельно основному потоку газа в спутном направлении. В рассмотренном режиме течения 13.2% топлива подавалось через основной пилон и по 43.4% через каждый пилон предынжекции.

На рис.4.9 можно видеть расчетную область, используемую в трехмерных расчетах камеры сгорания, и сетку в буферных блоках за выходным сечением камеры. Эти блоки предназначены для удаления границы вытекания газа из камеры возможно дальше от

выходного сечения камеры, чтобы предотвратить ее влияние на течение внутри камеры. Там же приводится структура блоков используемой в расчетах сетки. Вычисления проводились на многоблочной структурированной шестигранной сетке. Общее количество ячеек: 3077504, блоков: 226, ячеек вдоль канала: 416, ячеек поперек канала: 72, ячеек в пограничном слое: 4, ячеек вдоль оси z : 108. Сетка в окрестности инжекторов внутри камеры сгорания (рис.4.10) содержала: 16 ячеек по высоте маленького пилона; 96 ячеек по профилю маленького пилона; 48 ячеек по высоте основного пилона; 64 ячейки по профилю основного пилона.

На рис.4.11 изображена сетка (сверху слева – 3D вид, сверху справа – вид со стороны оси x) и структура блоков (снизу) в окрестности предынжектора внутри камеры сгорания, там заметны блоки внутри пограничного слоя вблизи поверхностей канала и пилона.

Сетка сгущается по направлению к стенке не очень сильно, потому что используется граничное условие “закон стенки” с использованием пристенных функций. Стенки канала предполагались теплоизолированными. На вертикальных стенках канала (в плоскости сечения выхода из камеры) в буферных блоках было поставлено условие непротекания без прилипания потока. То же граничное условие ставилось и на поверхностях пилонов, т.к. течение в их окрестности является очень сложным, с переходом от ламинарного к турбулентному, что требует непозволительно сильного сгущения сетки даже для “закона стенки”. В то же время пограничный слой там тонкий, и им допускается пренебречь. На выходной (правой) границе расчетной области параметры принимались равными значениям в центрах приграничных внутренних ячеек (снос параметров). На остальных границах буферных блоков ставилось мягкое граничное условие на основе анализа характеристик в окрестности границ: если характеристики идут от границы внутрь расчетной области, то соответствующие инварианты Римана задаются по соответствующим параметрам невозмущенного потока на бесконечности. В противном случае параметры берутся из центров приграничных внутренних ячеек.

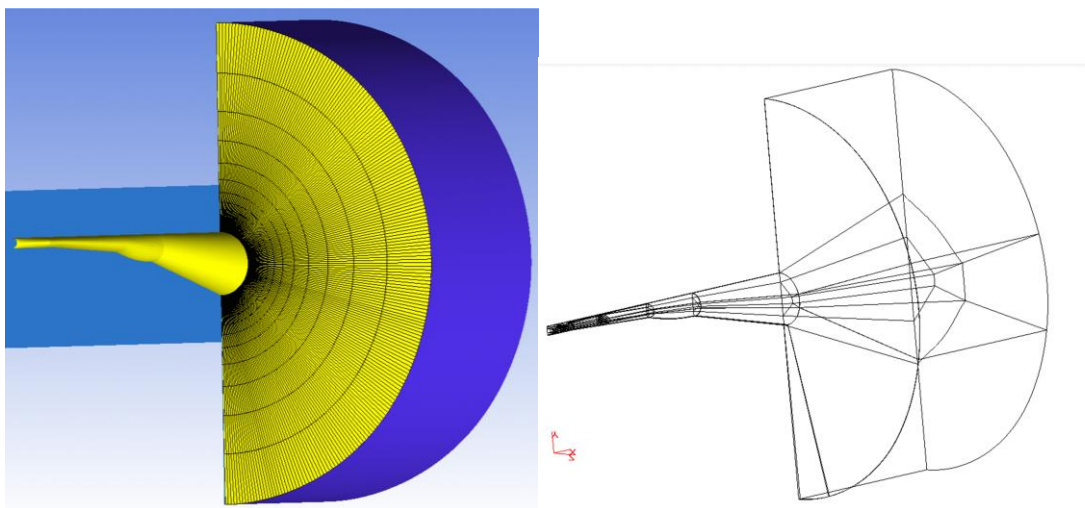


Рисунок 4.9 – Расчетная область и структура блоков сетки в расчетах камеры сгорания

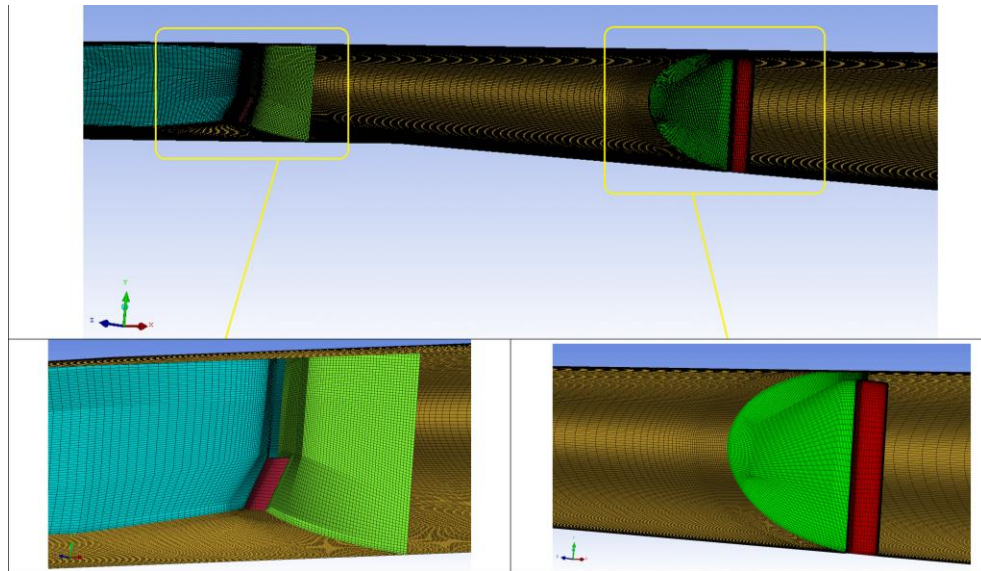


Рисунок 4.10 – Сетка в окрестности инжекторов внутри камеры сгорания

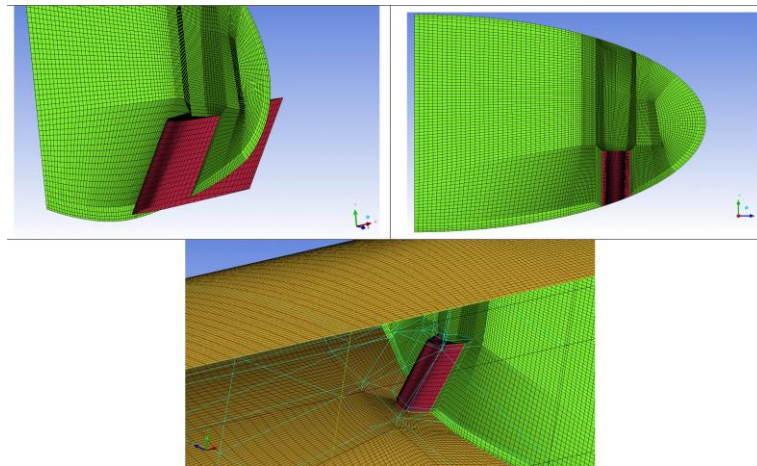


Рисунок 4.11 – Сетка (сверху слева – 3Dвид, сверху справа – вид со стороны оси x) и структура блоков (снизу) в окрестности прединжектора внутри камеры сгорания

§4.4. Моделирование инъекции топлива

Для моделирования подачи топлива при использовании сетки, не согласованной с отверстием, было разработано оригинальное ГУ (рис. 4.12). Для ячеек, в которых одна часть поверхности приходилась на отверстие, а другая – на твердую стенку, потоки рассчитывались как линейная комбинация потоков, соответствующих параметрам инъекции \vec{F}_i^{inj} , твердой стенке \vec{F}_i^{wall} :

$$\vec{F}_i = c_{inj} \cdot \vec{F}_i^{inj} + (1 - c_{inj}) \cdot \vec{F}_i^{wall}$$

Доли потоков определялись по соотношению площадей, приходящихся на отверстие и на стенку: $c_{inj} = dS_{inj}/dS_{\Sigma} \leq 1$ ($c_{inj} = 1$, если поверхность ячейки лежала внутри отверстия), где dS_{inj} – доля площади поверхности ячейки, приходящаяся на отверстие. dS_{inj} оценивалась приближенно по количеству точек грани приграничной ячейки, попадающих внутрь границы отверстия и их удаленности от центра отверстия. При этом осуществлялся контроль расхода и соответствия суммы всех площадей заданной площади отверстия: $\sum_S dS_{inj} = S_{inj}^{exp}$.

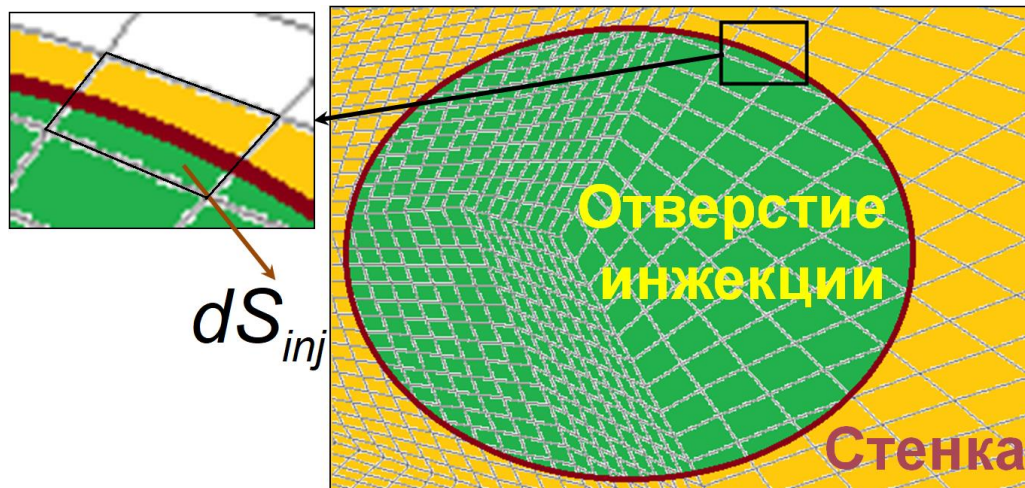


Рисунок 4.12 – Граничное условие инъекции топлива

§4.5. Результаты расчетов

На входе задавался профиль параметров, полученный из расчета течения в переходном сопле с радиусом критического сечения $R_{cr} = 20$ мм при следующих параметрах в подогревателе: $p_0 = 14.4$ атм, $T_0 = 1945$ К, суммарный расход через подогреватель $G_{\Sigma} = 1.549$ кг/сек, параметры турбулентности $q = 9$ м/сек, $\omega = 2000$ Гц. В подогревателе задавался равновесный состав горения керосина в смеси воздуха и кислорода ($G_{Ker} = 0.081$ кг/сек, $G_{O_2} = 0.382$ кг/сек, $G_{air} = 1.086$ кг/сек).

Суммарный расход водорода, подаваемый в камеру сгорания, был выбран так, чтобы обеспечить значение интегрального коэффициента избытка окислителя $\alpha = 1.07$ ($G_{H_2} = 0.0423$ кг/сек). Рассматривалась одна схема подачи водорода 43.4%–43.4%–13.2%, т.е. по 43.4% полного расхода водорода выдувалось из каждого предынжектора и оставшиеся 13.2% – в сумме из всех отверстий основного пилона. Число Маха в струях водорода полагалось равным 2 для всех инжекторов. Температура в невязком ядре потока была близка к 1000 К, но температура водорода в выдуваемых струйках была равна лишь 163 К.

На рисунках 4.13–4.17 показаны трехмерные виды со срезами полей температуры $[K]$, десятичного логарифма скорости тепловыделения вдоль линий тока ϕ $[Дж \cdot кг^{-1} \cdot м^{-1}]$, давления p $[Па]$, скорости u $[м/сек]$ и числа Маха, полученное в расчете без TCI. Показана часть канала, где протекают наиболее интересные процессы. Можно видеть распределение температуры в различных поперечных сечениях, в плоскости симметрии и в некоторой горизонтальной плоскости.

Основное выделение тепла происходит в струйках тока, берущих начало от инжекторов предварительной подачи. Сразу за боковыми пилонами создаются благоприятные условия для протекания реакции: пилон порождает косой скачок уплотнения, в котором давление и температура повышается примерно в несколько раз. Скачок вызван не только пилоном, но и поперечным выдувом топлива. В струйках топлива от предынжектора сразу начинается тепловыделение. Часть его идет на нагрев соседних струек топлива за счет молекулярной и турбулентной диффузии тепла. На поле температуры можно видеть ее рост вдоль границы струек топлива. Сначала это более заметно со стороны оси симметрии и снизу. Ниже по течению, за вторым сечением $x=const$, можно видеть повышение температуры в окрестности боковой стенки. Сопоставление полей давления и температуры в горизонтальной плоскости четко показывает, что рост последней вызван пришедшим скачком уплотнения, а также падением скорости. За вторым сечением в вертикальной плоскости через предынжектор у нижней стенки заметен рост температуры. Однако, основное тепловыделение происходит на некотором удалении от этой области, но прослеживается заметное падение продольной скорости с образованием небольшой отрывной зоны, так что этот рост температуры вызван торможением потока.

В поперечных сечениях, расположенных до центрального пилонa, заметно несколько областей замедления течения: 1) за первым сечением (проходящим через предынжектор) внизу иверху у оси; 2) в следе за пилоном; 3) у верхней стенки в сторону к оси от линии через предынжектор и 4) у боковой стенки сверху. В последнем сечении $x=const$ перед центральным пилоном можно видеть четыре отрывные зоны. При этом в нижних зонах тепловыделения нет – повышение температуры там обусловлено торможением потока. А по границе верхних отрывов идет интенсивное тепловыделение: топливо и воздух уже достаточно прогрелись – создаются все условия для протекания реакции. Также там заметен рост температуры выше температуры торможения потока.

Перед последним сечением до центрального пилонa располагается почти прямой скачок уплотнения, запирающий канал почти по всему сечению и переводящий большую часть течения в дозвуковое. Давление в области за скачком перед пилоном существенно повысилось (примерно в два раза). Это создает условия для интенсивного протекания реакции на границах

отрывных зон. За счет тепловыделения и поджата из-за центрального пилона дозвуковые зоны вскоре за пилоном ускоряются до сверхзвука.

В плоскости симметрии, начиная с первого сечения, от верхней стенки начинается расширяющаяся (с увеличением x) зона повышенной температуры, вызванной торможением потока за скачком уплотнения. За центральным пилоном у оси сверху температура оказывается выше, и топливо загорается сразу после инъекции из верхнего отверстия. Снизу температура ниже, а скорость выше – там реакция начинается не сразу. Основная часть топлива от предынжекторов успевает выгореть до центрального пилона, дальше происходит лишь небольшое догорание. При этом до самого выходного сечения камеры сгорания сохраняется некоторая концентрация топлива H_2 . Любопытно, что до какого-то момента ($x \sim 1.1$ м) у верхней стенки в следе за пилоном еще наблюдается немного O_2 , который постепенно выгорает (температура там не очень высокая $T \sim 1500$ К, а скорость $M > 1$) потом его уже там нет, но незначительное количество H_2 так и остается.

В этом течении основное тепловыделение происходит в областях сверхзвукового либо трансзвукового течения. Реакции практически прекращаются задолго до того места, где ширина канала начинает резко расти. Одновременно с прекращением тепловыделения начинается рост числа Маха. Это связано с ростом площади поперечного сечения канала

Структура течения в случае с горением меняется очень сильно по сравнению с расчетом без инъекции топлива (на рисунке 4.18 приведены поля температуры, давления и продольной скорости в расчете без горения). В последнем случае нет запираания канала, и почти нет отрывных зон до центрального пилона – одна сверху у плоскости симметрии за первым сечением и едва заметные следы другой у боковой стенки.

На рисунке 4.19 представлены полученные в расчетах продольные распределения статического давления вдоль нижней стенки камеры. Данные приводятся как для расчета без инъекции топлива, так и для расчета с горением. На верхнем рисунке показаны распределения вдоль центральной линии, а на нижнем рисунке – вдоль параллельных боковых линий, проходящих через предынжекторы. Эти линии показаны на рисунке 4.12. Рассматривалась половина камеры, поэтому на графике присутствует лишь одна кривая, соответствующая боковому распределению давления в расчете. Экспериментальные данные, полученные вдоль боковых линий, показаны разными маркерами. Разница между данными, соответствующими одной продольной координате, характеризует разброс экспериментальных данных. Синим цветом показаны данные, соответствующие холодному течению без подачи топлива, красным – горячему течению с подачей водорода и горением.

Получено удовлетворительное согласование с экспериментальными данными. Расчет без учета TSI улавливает основные качественные особенности экспериментальных распределений

давления. Расхождение может быть объяснено рядом причин. Во-первых, используется недостаточно подробная сетка. Было бы желательно повысить разрешение сетки в окрестности пилонов. Во-вторых, при получении профилей параметров на входе в канал не воспроизводилось существенно трехмерное, неоднородное, нестационарное течение в огневом подогревателе. Третьей причиной может быть неполное воспроизведение условий эксперимента ввиду отсутствия подробных измерений (например, данные по турбулентности, теплообмену, шероховатостям поверхностей). Расхождение расчета с данными эксперимента характерно для современного состояния моделирования течений в высокоскоростных камерах сгорания. Современные модели турбулентности, горения и их взаимодействия пока не способны дать адекватного описания реальных течений.

Применение комбинированного метода на основе EPaSR, как и в простых конфигурациях с $M > 1$, привело здесь к снижению интенсивности горения и не позволило улучшить результат. Это видно хотя бы по полям температуры (рисунок 4.20) – средняя температура везде ниже. Кроме того, хорошим индикатором является остаток несгоревшего топлива в выходном сечении – в расчете с учетом TCI топлива остается больше.

Таким образом, во всех рассмотренных задачах с преимущественно сверхзвуковым горением учет влияния TCI не играет определяющей роли.

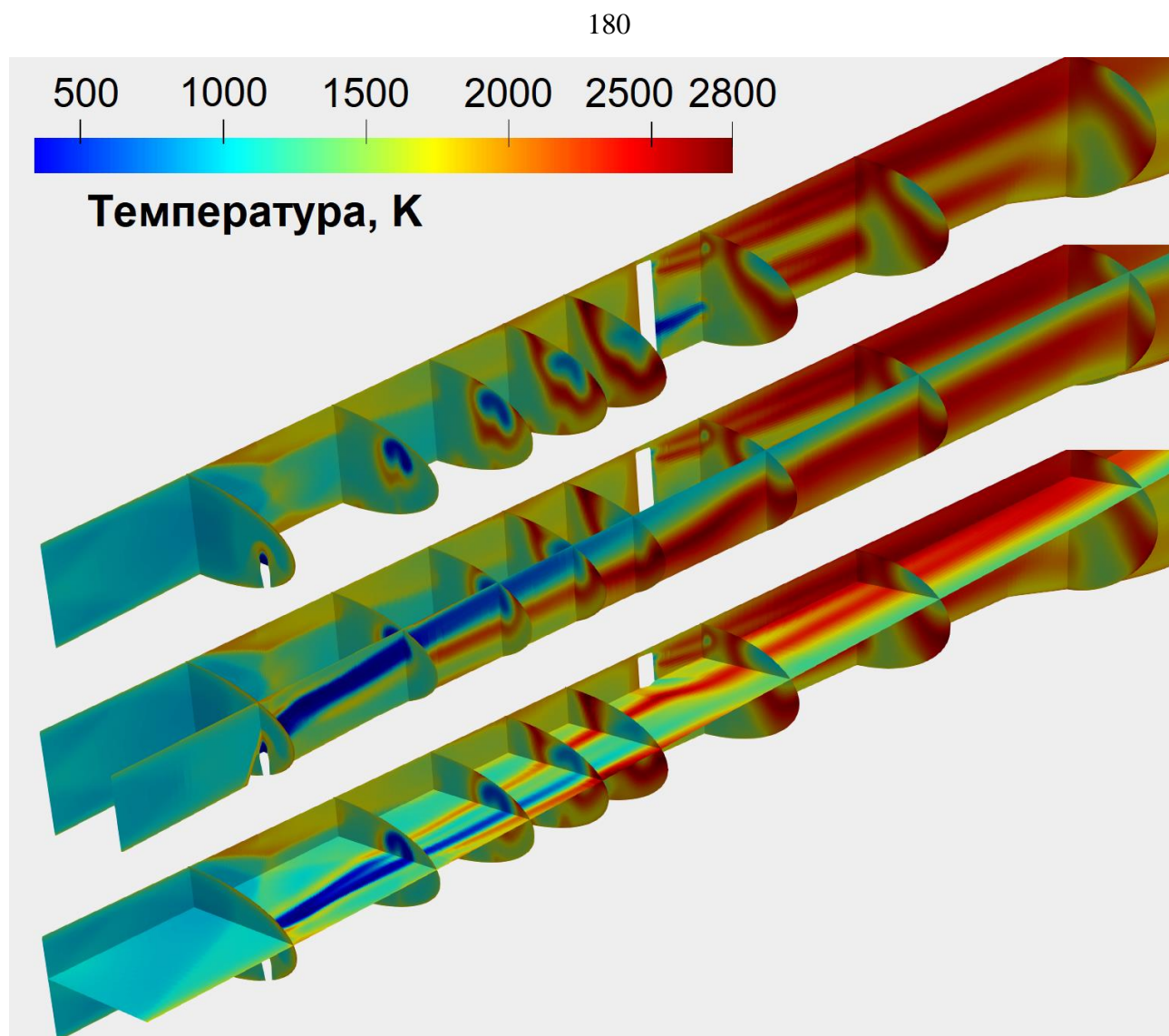


Рисунок 4.13 – Поле температуры (К) в расчетах
камеры сгорания HEXAFLY-INT без учета TCI

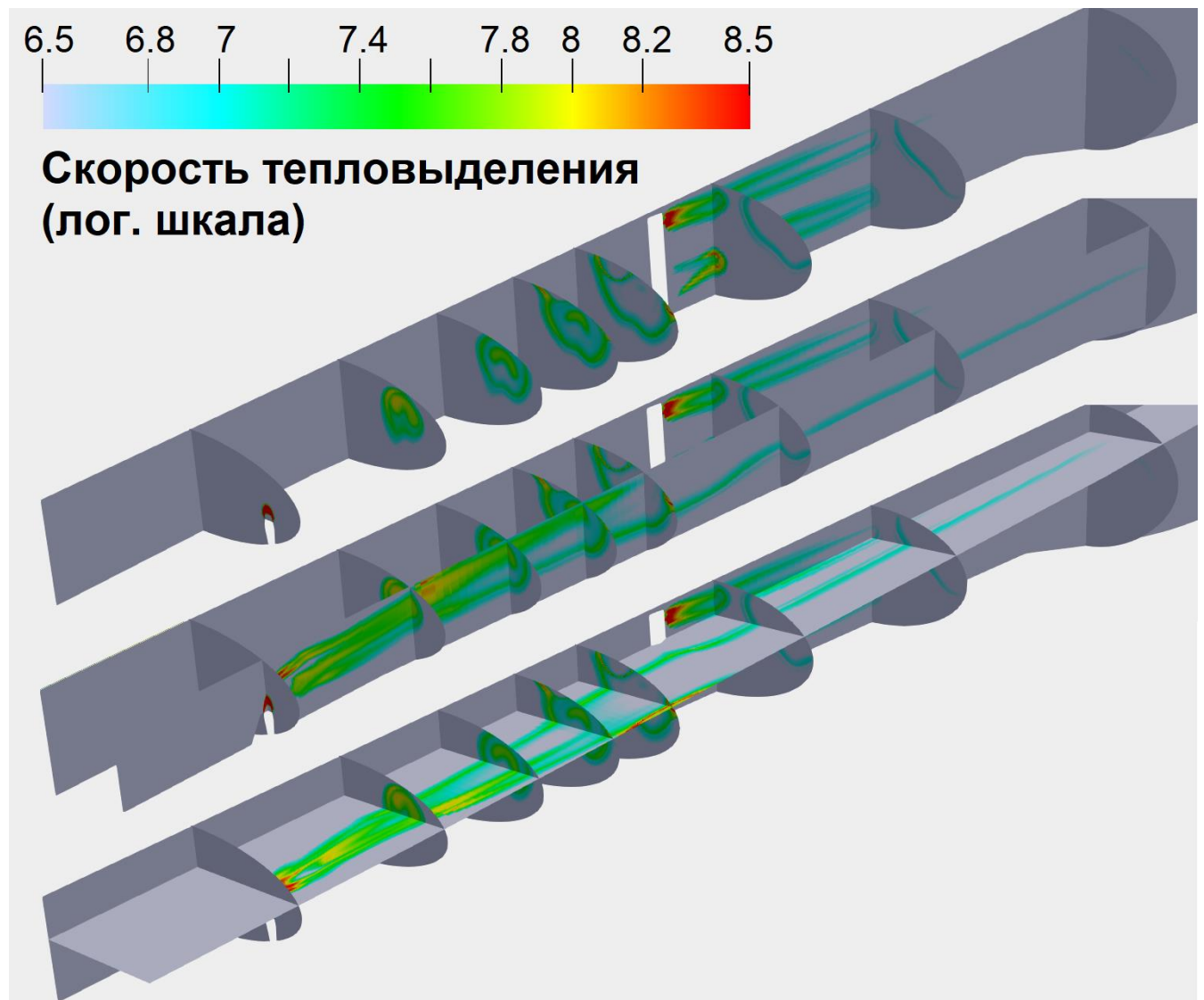


Рисунок 4.14 – Поле десятичного логарифма скорости тепловыделения вдоль линий тока ϕ [Дж·кг⁻¹·м⁻¹] ($\lg \phi$) в расчетах камеры сгорания HEXAFLY-INT без учета TCI

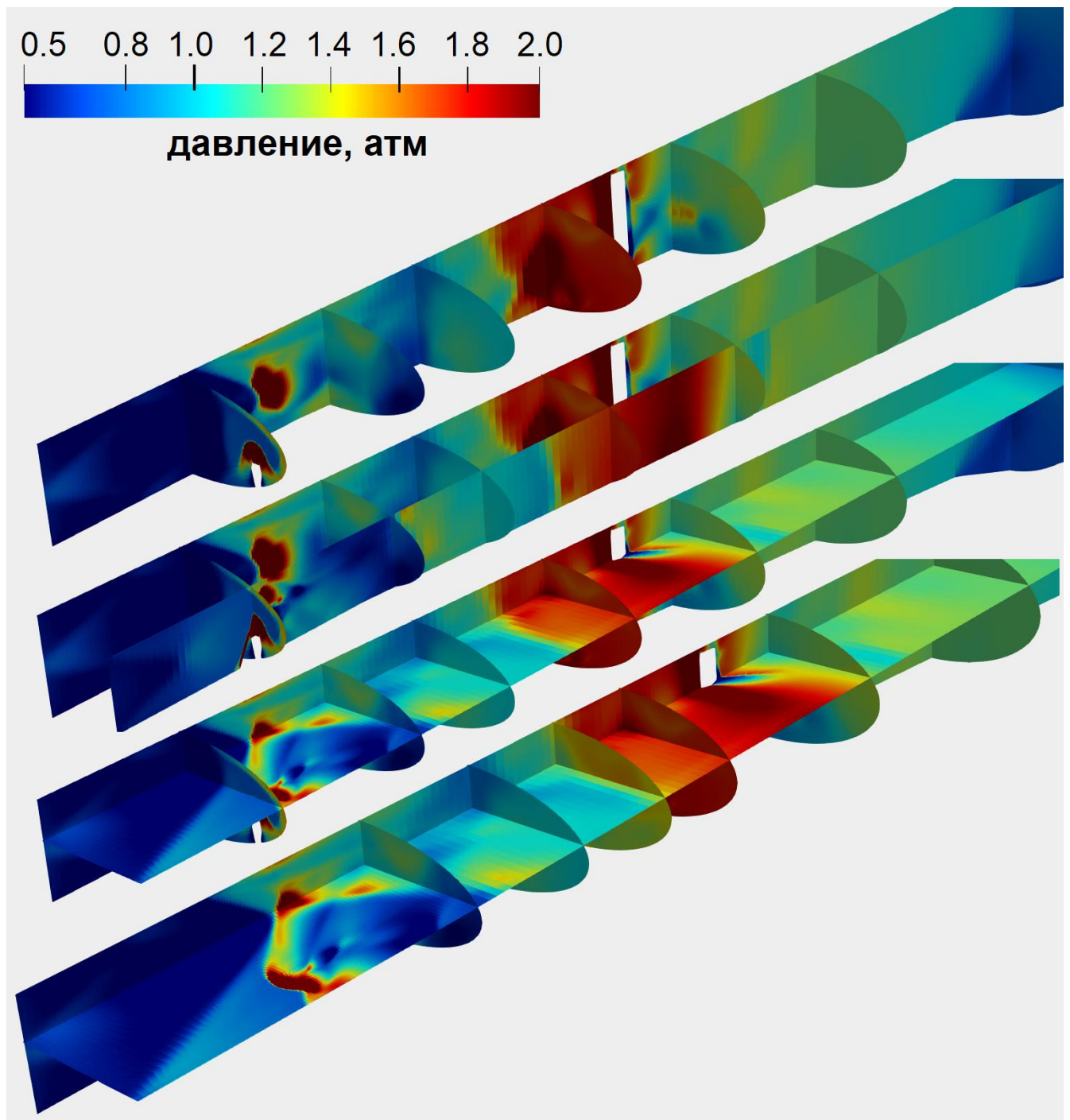


Рисунок 4.15 – Поле давления (атм) в расчетах
камеры сгорания HEXAFLY-INT без учета TCI

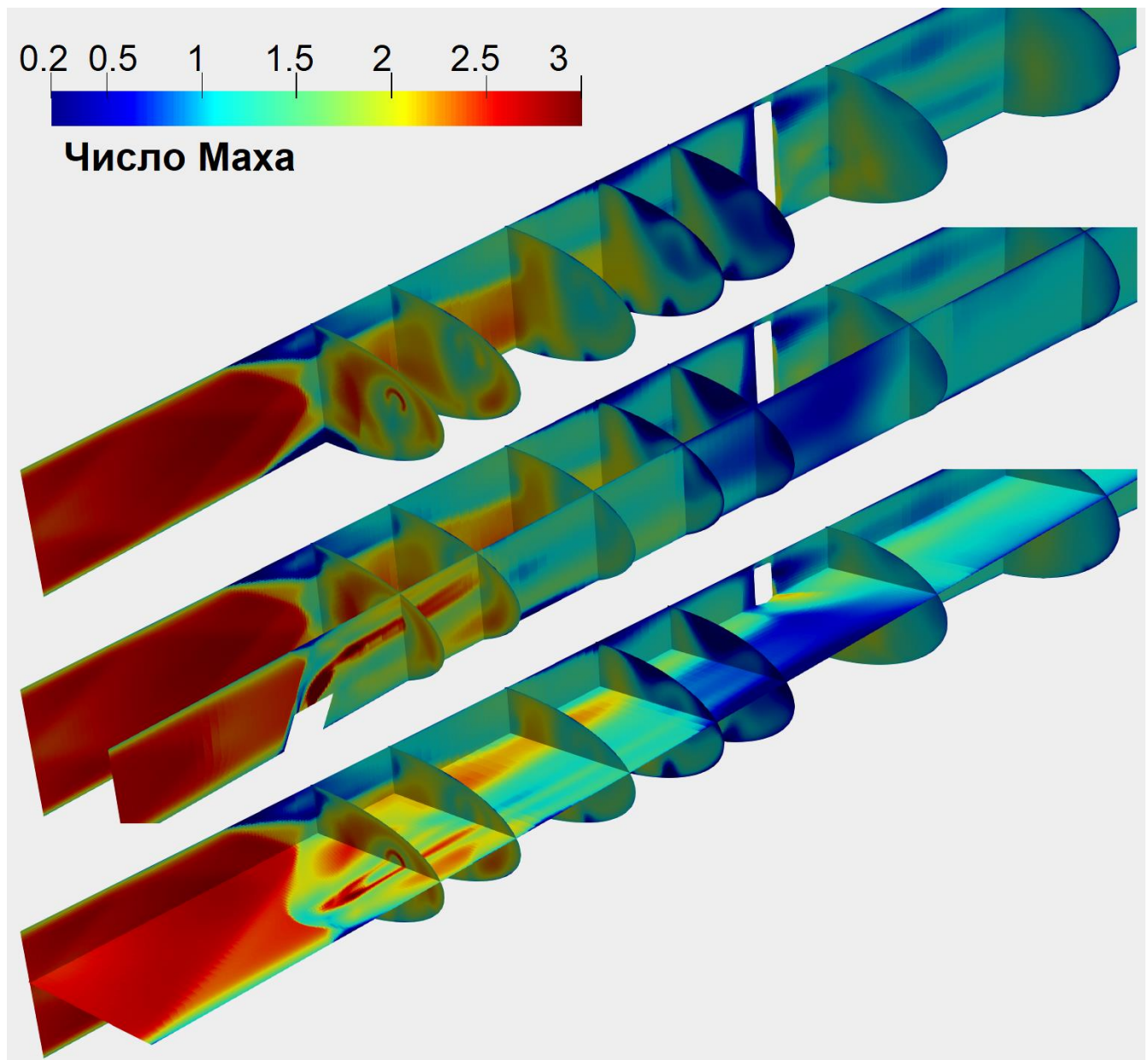


Рисунок 4.16 – Поле числа Маха (K) в расчетах
камеры сгорания HEXAFLY-INT без учета TCI

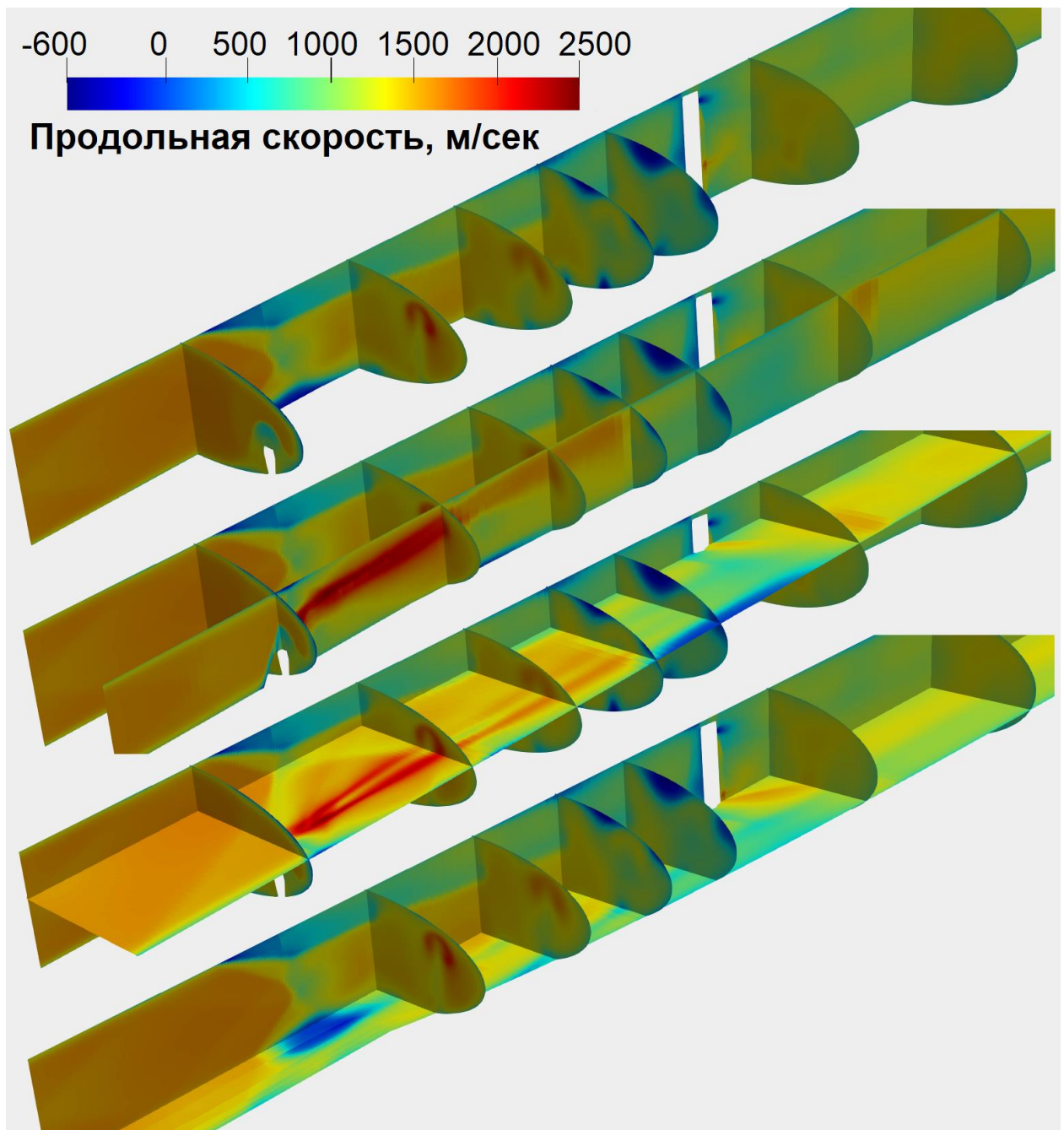


Рисунок 4.17 – Поле продольной скорости u (м/сек) в расчетах
камеры сгорания HEXAFLY-INT без учета TCI

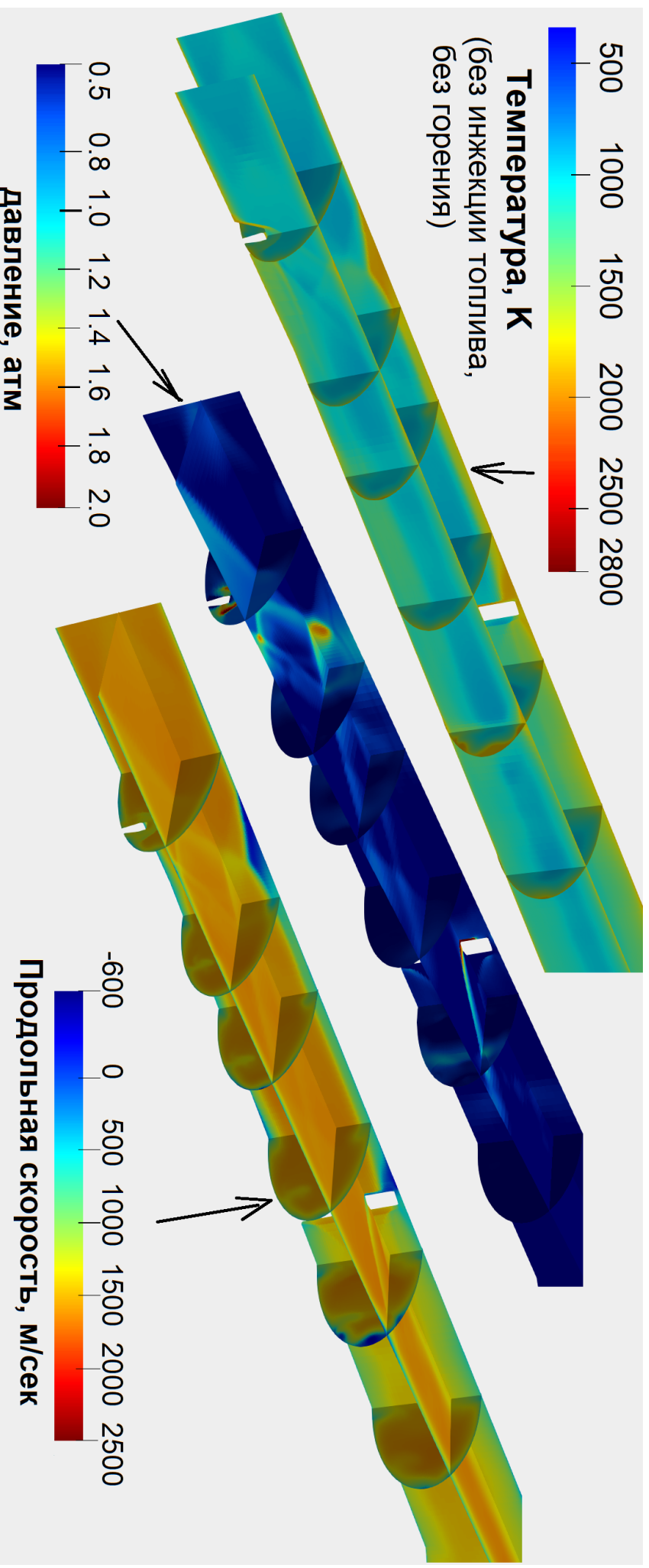


Рисунок 4.18 – Поля температуры (К), давления (атм), продольной скорости u (м/сек) в расчетах камеры сгорания HEXAFLY-INT без инъекции топлива без горения

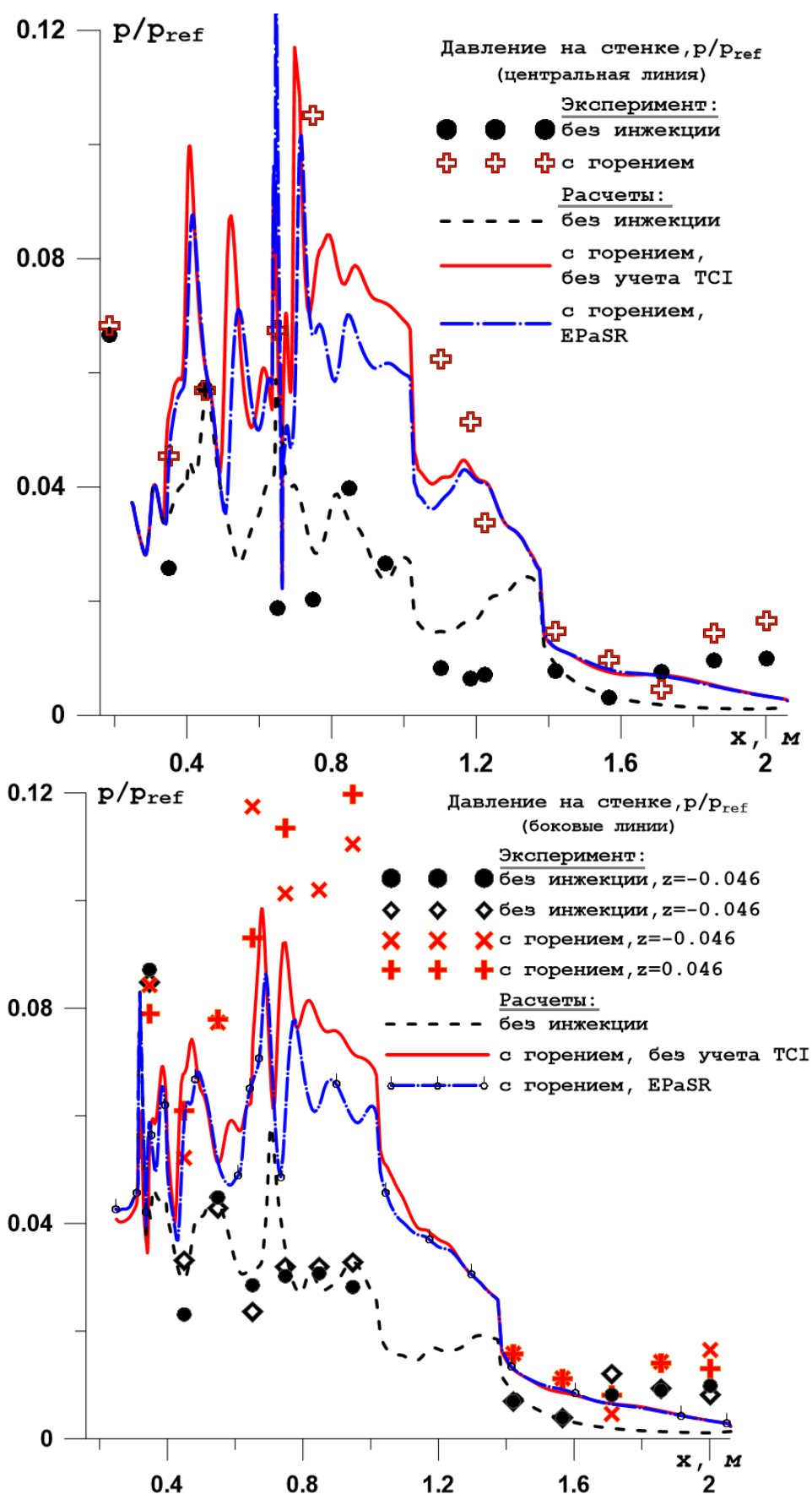


Рисунок 4.19 – Продольные распределения статического давления для $M_\infty = 7$, $\alpha = 1.07$, схема подачи топлива 43.4%–43.4%–13.2%, вдоль центральной линии (верхний рисунок) и боковых линий (нижний рисунок) и сопоставление с экспериментом

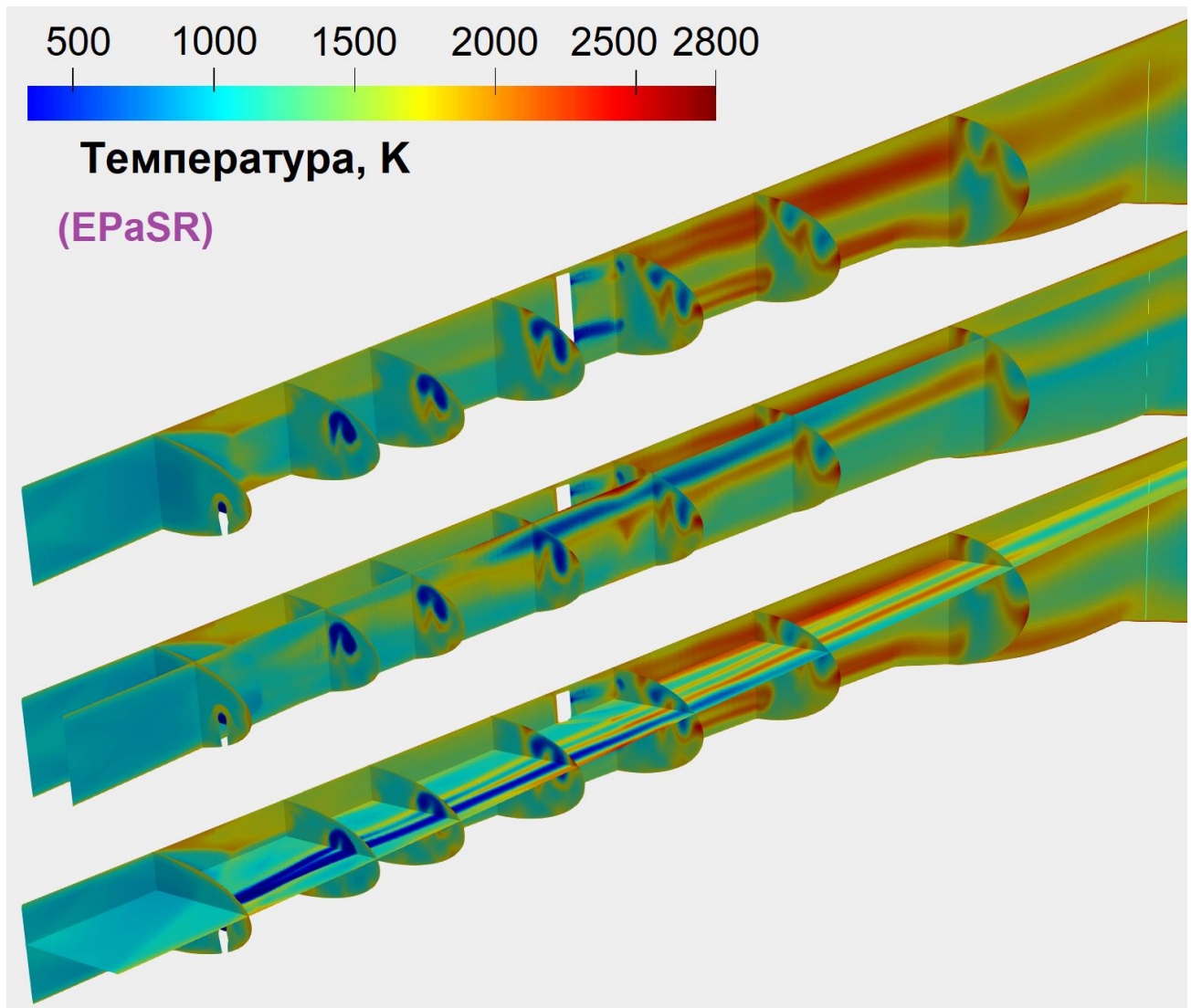


Рисунок 4.20 – Поле температуры (К) в расчетах камеры сгорания HEXAFLY-INT с учетом TCI комбинированным методом на основе EPaSR

Выводы к Главе 4

- 4.1. В расчете без TCI получено удовлетворительное согласование с экспериментальными данными.
- 4.2. Применение комбинированного метода на основе PaSR не позволило улучшить результаты. Во всех рассмотренных задачах с преимущественно сверхзвуковым горением (включая камеру сгорания HEXAFLY-INT) вклад различных газодинамических эффектов (неоднородность течения в подводящих каналах, нарастание пограничных слоев на боковых стенках канала, ударно-волновая структура сверхзвукового потока, особенности теплообмена на стенках) является сопоставимым или более существенным по сравнению с вкладом взаимодействия турбулентности с горением.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В диссертационной работе решена задача, которая имеет важное научное и практическое значение: разработан, обоснован, реализован в компьютерном коде и валидирован метод описания высокоскоростных течений со смешанными режимами турбулентного горения, ориентированный на исследования течений в камерах сгорания воздушно–реактивных двигателей на основе трехмерных уравнений Рейнольдса. На основе этого метода выполнен анализ влияния взаимодействия турбулентности с горением (ТСГ) на структуру пламени в областях преимущественно сверхзвукового течения.

Наиболее важные результаты, полученные в диссертации:

1. Предложен комбинированный метод учета взаимодействия турбулентности с горением, позволяющий рассчитывать смешанные режимы турбулентного горения. В ходе разработки этого метода выявлены существенные недостатки известной модели микроламинарных пламен с предписанной функцией плотности вероятности, ограничивающие ее применимость для описания течений в высокоскоростных камерах сгорания.
2. Доказано, что обнаруженное в расчетах “динамическое равновесие” реагирующей смеси газов является нефизичным, и предложен способ его устранения. Доказано, что при этом стационарное состояние единственно и соответствует истинному термодинамическому равновесию.
3. При численном моделировании классических экспериментов по сверхзвуковому горению учет взаимодействия турбулентности с горением на основе моделей двух различных классов (микроламинарных пламен и реактора частичного перемешивания) не позволил приблизиться к экспериментальным данным. Автором выявлен механизм стабилизации горения в эксперименте T.S. Cheng по горению в соосных струях топлива и окислителя, который объясняет слабый эффект от учета взаимодействия турбулентности с горением в сверхзвуковом потоке.
4. На основе экспериментальных данных по горению в дозвуковом потоке произведена настройка и сопоставление нескольких моделей взаимодействия турбулентности с горением, относящихся к классу реактора частичного перемешивания (PaSR).
 - Примененные в диссертации расширенная (EPaSR) и обобщенная (GPaSR) модели реактора частичного перемешивания Сабельникова В.А. улучшили согласование с экспериментом в области существенного проявления взаимодействия турбулентности с горением по сравнению с квазиламинарным расчетом. Средняя ошибка определения скорости уменьшилась в 1.7 раз с моделью EPaSR и в 2.7 раз с

моделью GPaSR, а температуры – в 2.3 раза с моделью EPaSR и в 3.2 раза с моделью GPaSR.

- Модель GPaSR впервые применена на практике и оказалась эффективнее расширенной на 10% по времени счета.
 - Выявлен смешанный механизм стабилизации горения в эксперименте с дозвуковым горением в камере сгорания с обратным уступом. Существенное влияние турбулентности на средние скорости химических реакций наблюдается только в области волнового распространения пламени, но не в области самовоспламенения возле обратного уступа, где основную роль играет нагрев потока за счет турбулентной диффузии тепла из зоны возвратного течения.
5. Во всех рассмотренных задачах с преимущественно сверхзвуковым горением (включая камеру сгорания HEXAFLY-INT) вклад различных газодинамических эффектов (неоднородность течения в подводящих каналах, нарастание пограничных слоев на боковых стенках канала, ударно-волновая структура сверхзвукового потока, особенности теплообмена на стенках) является сопоставимым или более существенным по сравнению с вкладом взаимодействия турбулентности с горением.

Накопленный автором опыт позволяет указать возможные перспективы дальнейших исследований по тематике, разработанной в данной диссертации:

- дальнейшее развитие моделей семейства PaSR (разработка более обоснованных физически моделей для объемной доли “тонких структур” γ^* , исследование влияния начальных и граничных условий для параметров “тонких структур” на решение);
- дальнейшее развитие комбинированного метода (более точная классификация режимов течения и использование специальных моделей горения для каждого из режимов);
- использование моделей для учета турбулентной диффузии тепла и массы в присутствии горения;
- исследование роли взаимодействия турбулентности с горением в высокоскоростных камерах сгорания с запирающим каналом и образованием псевдоскачка (с существенными областями дозвукового горения).

Список использованных источников

1. *Абрамович Г.Н.* Прикладная газовая динамика. т.1. 5-е изд.-е изд. М.: Наука, 1991. 600 С.
2. *Аврашков В.Н., Метёлкина Е.С.* Исследование высокоскоростных ПВРД // Физика горения и взрыва. – 2010. – Т.46. – №4. – С.36-44.
3. *Баев В.К., Бузуков А.А., Зудов В.Н, Третьяков П.К. Ш.В.В.* Физическое и математическое моделирование течений с горением в каналах с внезапным расширением при существенном проявлении нестационарности // Информационный бюллетень РФФИ. 1997. № 5.
4. *Баев В.К., Головичев В.И.* Горение в сверхзвуковом потоке. Новосибирск: “Наука”, 1984. 304 С.
5. *Басевич В.Я., Беляев А.А., Фролов С.М.* «Глобальные» кинетические механизмы для расчета турбулентных реагирующих течений. Ч. 1. Основной химический процесс тепловыделения // Химическая физика. 1998. Т. 17. № 9. С. 117–129.
6. *Босняков, С. М., Михайлов, С. В. , Подаруев, В. Ю., Трошин А.И.* Нестационарный разрывный метод Галеркина высокого порядка точности для моделирования турбулентных течений // Матем. моделирование. 2018. Т.30. № 5. С. 37–56.
7. *Босняков С.М.* Концепция программного продукта EWT-ЦАГИ и основные этапы ее развития // Труды ЦАГИ. 2007. № 2671. С. 3–19.
8. *Босняков С.М., Власенко В.В., Енгулатова М.Ф., Зленко Н.А., Матяш С.В., Михайлов С.В.* Программный комплекс для создания геометрии ЛА, создания многоблочной 3-х мерной расчетной сетки, получения полей течения при помощи решения системы уравнений Эйлера и системы уравнений Навье-Стокса, осредненных по времени обработка результатов расчета (EWT). Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2008610227 (от 9 января 2008 года) // Реестр программ для ЭВМ. – 2008.
9. *С.М. Босняков, В.В. Власенко, М.Ф. Енгулатова, Е.В. Кажан, С.В. Матяш, А.И. Трошин.* Промышленные солверы пакета EWT-ЦАГИ и их верификация на серии стандартных тестов. // Труды ЦАГИ. 2015. Выпуск 2735. С.50–89.
10. *Власенко В.В.* О математическом подходе и принципах построения численных методологий для пакета прикладных программ EWT-ЦАГИ // Труды ЦАГИ. 2007. № 2671. С. 20–85.
11. *Власенко В.В.* Численное исследование нестационарного распространения горения по каналу со сверхзвуковым течением вязкого газа // Химическая физика. 2011. Т. 30. № 7. С. 1–13.

12. *Власенко В.В.* SOLVER3: двадцатилетний опыт развития и использования научной программы для моделирования двумерных течений с горением // Труды ЦАГИ. 2015. № 2735. С. 156–219.
13. *Власенко В.В.* Расчетно-теоретические модели высокоскоростных течений газа с горением и детонацией в каналах. Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук. 2017.
14. *Власенко В.В., Мещеряков Е.А.* Расчетно-теоретическое исследование течений в модельных камерах сгорания двухрежимного высоко-скоростного прямоточного двигателя // Отчет ЦАГИ №7760. 2012.
15. *Власенко В.В., Сабельников В.А.* Численное моделирование невязких течений с горением водорода за скачками уплотнения и в детонационных волнах // Физика горения и взрыва. 1995. Т. 31. № 3. С. 118.
16. *Вулис Л.А.* Тепловой режим горения. М.-Л.: «Госэнергоиздат». 1954. 288 С.
17. *Годунов С.К., Забродин А.В., Иванов М.Я., Крайко А.Н., Прокопов Г.П.* Численное решение многомерных задач газовой динамики. М.: «Наука». 1976.
18. *Зангиев А.Э., Иванов В.С., Медведев С.Н., Фролов С.М.* Влияние турбулентности на развитие течения в высокоскоростной камере сгорания // Горение и взрыв. 2016. Т.9. № 3. С. 66–79.
19. *Зангиев А.Э., Иванов В.С., Фролов С.М.* Тяговые характеристики воздушно-реактивного импульсного детонационного двигателя в условиях сверхзвукового полета на разных высотах // Химическая физика. 2013. Т.32. № 5. С. 62–75.
20. *Зангиев А.Э., Иванов В.С., Фролов С.М.* Сравнение трехмерного и двумерного расчетов тяговых характеристик воздушно-реактивного импульсного детонационного двигателя в условиях сверхзвукового полета // Химическая физика. 2014. Т.33. № 12. С. 37–41.
21. *Колган В.П.* Применение принципа минимальных значений производной к построению конечно-разностных схем для расчета разрывных решений газовой динамики // Ученые записки ЦАГИ. 1972. Т.3. № 6. С. 68–77.
22. *Колесников О.М.* Влияние пульсаций концентраций на воспламенение пристенной струи водорода в сверхзвуковом потоке // Физика горения и взрыва. 1985. Т.21. № 1. С. 53–58.
23. *Колесников О.М.* Влияние горения водорода в сверхзвуковом пограничном слое на коэффициент трения // Ученые записки ЦАГИ. 1988. Т. 19. № 3. С. 104–109.
24. *Колесников О.М.* Численное моделирование псевдоскачка в плоском канале, вызванного сгоранием пристенных водородных струй // Механика жидкости и газа. 1997. Т. 32. № 2. С. 196–200.
25. *Краснов К.С.* Физическая химия. Т.2. М.: «Высшая школа». 1995.

26. *Лапин Ю.В., Стрелец М.Х.* Внутренние течения газовых смесей. М.: «Наука», 1989.
27. *Лойцянский Л.Г.* Механика жидкости и газа. Москва: «Наука». 1987. 840 С.
28. *Мещеряков Е.А.* Об эффекте замедления горения сверхзвуковых струй в расширяющихся каналах // Моделирование в механике. 1987. Т. 1 (18). № 6. С. 115–120.
29. *Михайлов С.В.* Объектно-ориентированный подход к созданию эффективных программ, реализующих параллельные алгоритмы расчета // Труды ЦАГИ. 2008. № 2671. С. 86-108.
30. *Михайлов С.В.* Адаптация коэффициентов ($q-\omega$) модели турбулентности к особенностям течения ЦАГИ // Материалы XX школы-семинара «Аэродинамика летательных аппаратов». ЦАГИ. 2009. С.97-98.
31. *Михайлов С.В.* Программа, реализующая зонный подход, для расчета нестационарного обтекания вязким потоком турбулентного газа сложных аэродинамических форм, включая крыло с механизацией (ZEUS) // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2013610172 (от 9 января 2013 года). Реестр программ для ЭВМ.
32. *Оран Э., Борис Д.* Численное моделирование реагирующих потоков. М.: «Мир». 1990. 660 С.
33. *Родионов А.В.* Монотонная схема второго порядка аппроксимации для маршевых расчетов неравновесных потоков // ЖВМ и МФ. 1987. Т. 27. № 4. С. 585–593.
34. *Сабельников В.А.* Частная беседа.
35. *Сивухин Д.В.* Общий курс физики. Т.2. М.: «Наука». 1990.
36. *Снегирев А.Ю., Талалов В.А.* Теоретические основы пожаро- и взрывобезопасности. Санкт-Петербург: Изд-во Политехнического ун-та. 2008. 211 С.
37. *Третьяков П.К., Забайкин В.А., Прохоров А.Н.* Высокоскоростной ПВРД с пульсирующим режимом запуска // XI Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики. Казань. 2015. 3779–3781 С.
38. *Тухватуллина Р.Р., Иванов В.С., Фролов С.М., Басара Б.* Моделирование турбулентного реагирующего течения методом крупных вихрей, совмещенным с методом монте карло для расчета подсеточных напряжений // Горение и взрыв. 2018. Т. 11. № 2. С. 66–75.
39. *Фролов С.М., Дубровский А.В., Иванов В.С.* Трехмерное численное моделирование рабочего процесса в камере сгорания с непрерывной детонацией при отдельной подаче горючего и окислителя // Химическая физика. 2013. Т. 32. № 2. С. 56–65.
40. *Хонькин А.Д.* О парадоксе бесконечной скорости распространения возмущений в гидродинамике вязкой теплопроводной среды и уравнениях гидродинамики быстрых процессов // Аэромеханика. М.: Наука. 1976. С. 289–299.
41. *Ширяева А.А.* О стационарном состоянии в потоке реагирующей смеси газов // Химическая физика. 2010. Т. 29. № 1. С. 21–30.

42. *Ширяева А.А.* Особенности численного метода и результаты тестирования программы ZEUS-S3pp для моделирования трехмерных течений с горением // Труды ЦАГИ. 2015. № 2735. С. 220–246.
43. *Шлихтинг Г.* Теория пограничного слоя. Москва: «Наука». 1974. 711 С.
44. *Щетинков Е.С.* Физика горения газов. Москва: «Наука». 1965. 740 С.
45. *Яворский Б.М., Детлаф А.А.* Справочник по физике. М.: «Наука». 1968.
46. Ту-144, Материал из Википедии — свободной энциклопедии [Электронный ресурс]. URL: <https://ru.wikipedia.org/wiki/Ту-144> (дата обращения: 25.10.2018).
47. ЦИАМ представил на МАКС-2015 «гиперэкспонат». [Электронный ресурс]. URL: <http://www.ciam.ru/press-center/news/ciam-presented-at-the-maks-2015-hyperextend/> (дата обращения: 25.10.2018).
48. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания. Под ред. В.П.Глушко. Т.1: Методы расчета. М.: АН СССР. 1971. 263 С.
49. Турбулентные течения реагирующих газов. Под ред. П.Либби, Ф.Вильямса. М.: «Мир». 1983. 328 С.
50. Химический энциклопедический словарь. М.: Советская энциклопедия. 1983.
51. *Aleksandrov V.Y., Danilov M.K., Gouskov O.V., Gusev S.V., Kukshinov N.V., Prokhorov A.N., Zakharov V.S.* Numerical and experimental investigation of different intake configurations of HEXAFLY-INT facility module // 30th Congress of the International Council of Aeronautical Sciences. 2016. 6 p.
52. *Baurle R.A., Alexopoulos G.A., Hassan H.A.* Modeling of supersonic turbulent combustion using assumed probability density functions // Journal of Propulsion and Power. 1994. Vol. 10. № 6. P. 777–786.
53. *Baurle R.A., Alexopoulos G.A., Hassan H.A.* Assumed joint probability density function approach for supersonic turbulent combustion // Journal of Propulsion and Power. 1994. Vol. 10. № 4. P. 473–484.
54. *Baurle R.A., Edwards J.R.* Hybrid Reynolds-Averaged/Large-Eddy Simulations of a Coaxial Supersonic Freejet Experiment // AIAA Journal. 2010. Vol. 48. № 3. P. 551–571.
55. *Baurle R.A., Girimaji S.S.* Assumed PDF turbulence-chemistry closure with temperature-composition correlations // Combustion and Flame. 2003. Vol. 134. № 1–2. P. 131–148.
56. *Baurle R.A., Hsu A.T., Hassan H.A.* Assumed and evolution probability density functions in supersonic turbulent combustion calculations // Journal of Propulsion and Power. 1995. Vol. 11. № 6. P. 1132–1138.
57. *Beach H.L.* A Study of reacting free and ducted hydrogen/air jets // NASA Technical Memorandum X-72678. 1975. 45 p.

58. *Berglund M., Fedina E., Fureby C., Tegnér J., Sabel'nikov V.* Finite Rate Chemistry Large-Eddy Simulation of Self-Ignition in Supersonic Combustion Ramjet // *AIAA Journal*. 2010. Vol. 48. № 3. P. 540–550.
59. *Berglund M., Fureby C.* LES of supersonic combustion in a scramjet engine model // *Proceedings of the Combustion Institute*. 2007. Vol. 31. № 2. P. 2497–2504.
60. *Bezgin L., Buriko Y., Guskov O., Kopchenov V.* Flamelet Model Application for Non-premixed Turbulent Combustion // *Final ECOLEN Report under NASA Cooperative Agreement NCCW-75*. 1996. 158 p.
61. *Bezgin L. V., Kopchenov V.I., Sharipov A.S., Titova N.S., Starik A.M.* Evaluation of prediction ability of detailed reaction mechanisms in the combustion performance in hydrogen/air supersonic flows // *Combustion Science and Technology*. 2013. Vol. 185. № 1. P. 62–94.
62. *Boivin P.* Reduced-Kinetic Mechanisms for Hydrogen and Syngas Combustion Including Autoignition. Ph.D. thesis. 2011. 96 p.
63. *Borghi R.* Turbulent combustion modelling // *Progress in Energy and Combustion Science*. 1988. Vol. 14. № 4. P. 245–292.
64. *Bouheraoua L.* Simulation aux grandes échelles et modélisation de la combustion supersonique. Ph.D. thesis. 2014. 194 p.
65. *Bray K.N.C.* The challenge of turbulent combustion // *Symposium (International) on Combustion*. 1996. Vol. 26. № 1. P. 1–26.
66. *Brinckman K., Kenzakowski D., Dash S.* Progress in Practical Scalar Fluctuation Modeling for High-Speed Aeropropulsive Flows // *43rd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*. 2005. AIAA Paper 2005-508. 18 p.
67. *Burrows M.C., Kurkov A.P.* Analytical and Experimental Study of Supersonic Combustion of Hydrogen in a Vitiated Air Stream // *NASA TM X-67840*. 1971. 15 p.
68. *Calhoon W.H., Brinckman K.W., Tomes J., Mattick S.J. and Dash S.M.* Scalar Fluctuation and Transport Modeling for Application to High Speed Reacting Flows // *44th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*. 2006. AIAA Paper 2006-1452. 13 P.
69. *Candler G., Peterson D., Drayna T.* Detached Eddy Simulation of a Generic Scramjet Inlet and Combustor // *Reston, Virginia: American Institute of Aeronautics and Astronautics*, 2009.
70. *Cao C., Ye T., Zhao M.* Large eddy simulation of hydrogen/air scramjet combustion using tabulated thermo-chemistry approach // *Chinese Journal of Aeronautics*. 2015. Vol. 28. № 5. P. 1316–1327.
71. *Chen J.Y., Kollmann W.* Chemical models for pdf modeling of hydrogenair nonpremixed turbulent flames // *Combustion and Flame*. 1990. Vol. 79. № 1. P. 75–99.

72. *Cheng T.S., Wehrmeyer J.A., Pitz R.W., Jarrett O., Northam G.B.* Raman measurement of mixing and finite-rate chemistry in a supersonic hydrogen-air diffusion flame // *Combustion and Flame*. 1994. Vol. 99. № 1. P. 157–173.
73. *Chomiak J.* A possible propagation mechanism of turbulent flames at high Reynolds numbers // *Combustion and Flame*. 1970. Vol. 15. № 3. P. 319–321.
74. *Chomiak J.* Basic considerations in the turbulent flame propagation in premixed gases // *Progress in Energy and Combustion Science*. 1979. Vol. 5. № 3. P. 207–221.
75. *Chomiak J., Karlsson A.* Flame liftoff in diesel sprays // *Symposium (International) on Combustion*. 1996. Vol. 26. № 2. P. 2557–2564.
76. *Clifton C.W., Cutler A.D.* A Supersonic Argon/Air Coaxial Jet Experiment for Computational Fluid Dynamics Code Validation // *Technical Report NASA/CR-2007-214866*. 2007.
77. *Coakley T., Hsieh T.* A comparison between implicit and hybrid methods for the calculation of steady and unsteady inlet flows // *AIAA Paper 85-1125*. 1985.
78. *Coakley T.J.* Turbulence modeling methods for the compressible Navier-Stokes equations // *AIAA Paper 1983-1693*. 1983. P. 9.
79. *Cocks P.* Large eddy simulation of supersonic combustion with application to scramjet engines. Ph.D. thesis. 2011. 293 p.
80. *Cocks P., Dawes W., Cant S.* The Influence of Turbulence-Chemistry Interaction Modelling for Supersonic Combustion // *49th AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition*. 2011. AIAA Paper 2011-306.
81. *Correa S.* Non-equilibrium step-stabilized combustion of hydrogen in supersonic air // *24th Joint Propulsion Conference*. 1988. 3223 p.
82. *Cutler A.D., Carty A.A., Doerner S.E., Diskin G.S., Drummond J.P.* Supersonic Coaxial Jet Experiment for CFD Code Validation // *AIAA Paper 99-3588*. 1999. 13 p.
83. *Cutler A.D., Danehy P.M., O'Byrne S., Rodriguez C.G., Drummond J.P.* Supersonic Combustion Experiments for CFD Model Development and Validation (Invited) // *42nd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*. 2004. AIAA Paper 2004-266. 13 p.
84. *Cutler A.D., Danehy P.M., Springer R.R., O'Byrne S., Capriotti D.P., Deloach R.* Coherent Anti-Stokes Raman Spectroscopic Thermometry in a Supersonic Combustor // *AIAA Journal*. 2003. Vol. 41. № 12. P. 2451–2459.
85. *Cutler A.D., Diskin G.S., Drummond J.P., White J.A.* Supersonic Coaxial Jet Experiment for Computational Fluid Dynamics Code Validation // *AIAA Journal*. 2006. Vol. 44. № 3. P. 585-592.
86. *Dash S., Weilerstein G., Vaglio-Laurin R.* Compressibility effects in free turbulent shear flows // *NASA STI/Recon Technical Report N*. 1975. Vol. 76. P. 20432.

87. *Davidenko D., Gökalp I., Dufour E., Magre P.* Systematic Numerical Study of the Supersonic Combustion in an Experimental Combustion Chamber // 14th AIAA/AHI Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference. 2006. P. 1–25.
88. *Deepu M., Dhrishit M.P., Shyji S.* Numerical simulation of high speed reacting shear layers using AUSM+-up scheme-based unstructured finite volume method solver // International Journal of Modeling, Simulation, and Scientific Computing. 2017. Vol. 8 № 3. P. 1750020.
89. *Dopazo C.* On conditioned averages for intermittent turbulent flows // Journal of Fluid Mechanics. 1977. Vol. 81. № 3. P. 433.
90. *Drummond J.P., Diskin G.S.* Fuel-Air Mixing and Combustion in Scramjets // AIAA Paper-2002-3878. 2002. P. 18.
91. *Edwards J.* Advanced implicit algorithms for finite-rate hydrogen-air combustion calculations // 32nd Joint Propulsion Conference and Exhibit. 1996. № July.
92. *Edwards J., Boles J., Baurle R.* LES / RANS Simulation of a Supersonic Reacting Wall Jet 2010. № January. P. 1–19.
93. *Edwards J., Potturi A., Fulton J.* Large Eddy/Reynolds-Averaged Navier-Stokes Simulations of Scramjet Combustor Flow Fields // 48th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit. 2012. № August.
94. *Edwards J., Royt C.* Preconditioned multigrid methods for two-dimensional combustion calculations at all speeds // AIAA journal. 1998. Vol. 36. № 2. P. 185–192.
95. *Edwards J.R., Boles J.A., Baurle R.A.* Large-eddy/Reynolds-averaged Navier-Stokes simulation of a supersonic reacting wall jet // Combustion and Flame. 2012. Vol. 159. № 3. P. 1127–1138.
96. *Edwards J.R., Boles J.A., Baurle R.A.* Large-eddy/Reynolds-averaged Navier–Stokes simulation of a supersonic reacting wall jet // Combustion and Flame. 2012. Vol. 159. № 3. P. 1127–1138.
97. *Eklund D.R., Drummond J.P., Hassanj H.A.* Calculation of Supersonic Turbulent Reacting Coaxial Jets // Journal. 1990. Vol. 28. № 9. P. 1633–1641.
98. *Engblom W., Fletcher B., Georgiadis N.* Validation of Conjugate Heat-Transfer Capability for Water-Cooled High-Speed Flows // AIAA Paper 2007-4392. 2007. P. 19.
99. *Engblom W., Frate F., Nelson C.* Progress in validation of WIND-US for ramjet/scramjet combustion // AIAA Paper 2005-1000. 2005. P. 18.
100. *Evans J., Schexnayder C., Beach H.* Application of a two-dimensional parabolic computer program to prediction of turbulent reacting flows // NASA Technical Paper 1169. 1978. 56 p.
101. *Evans J.S., Schexnayder C.J.* Influence of Chemical Kinetics and Unmixedness on Burning in Supersonic Hydrogen Flames // AIAA Journal. 1980. Vol. 18. № 2. P. 188–193.

102. *Favre A.J.* The equations of compressible turbulent gases. Marceille Univercity Institutute de Meanique Statustuc de la Turbulence. 1965.
103. *Fernholz H.H.* External flows Springer, Berlin, Heidelberg, 1976. 45–107 p.
104. *Ferreira J.C.* Flamelet modelling of stabilization in turbulent non-premixed combustion 1996.
105. *Fichot F., Lacas F., Veynante D., Candel S.* One-Dimensional Propagation of a Premixed Turbulent Flame With a Balance Equation for the Flame Surface Density // *Combustion Science and Technology*. 1993. Vol. 90. № 1–4. P. 35–60.
106. *Frankel S., Hassan H., Drummond J.* A hybrid Reynolds averaged/PDF closure model for supersonic turbulent combustion // 21st Fluid Dynamics, Plasma Dynamics and Lasers Conference. 1990. AIAA Paper 90-1573. 15 p.
107. *Friedrich R.* Compressible turbulence. Space Course. TU Munich. 1993.
108. *Fureby C.* Comparison of Flamelet and Finite Rate Chemistry LES for Premixed Turbulent Combustion // 45th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. 2007. № January. P. 1–16.
109. *Fureby C.* A Comparative Study of Flamelet and Finite Rate Chemistry LES for a Swirl Stabilized Flame // *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*. 2012. Vol. 134. № 4. P. 041503.
110. *Gao Z., Lee C.* A flamelet model for turbulent diffusion combustion in supersonic flow // *Science China Technological Sciences*. 2010. Vol. 53. № 12. P. 3379–3388.
111. *Gao Z., Wang J., Jiang C., Lee C.* Application and theoretical analysis of the flamelet model for supersonic turbulent combustion flows in the scramjet engine // *Combustion Theory and Modelling*. 2014. Vol. 18. № 6. P. 652–691.
112. *Génin F., Menon S.* Simulation of Turbulent Mixing Behind a Strut Injector in Supersonic Flow // *AIAA Journal*. 2010. Vol. 48. № 3. P. 526–539.
113. *Gerlinger P.* Investigation of an assumed PDF approach for finite-rate chemistry // *Combustion Science and Technology*. 2003. Vol. 175. № 5. P. 841–872.
114. *Gerlinger P., Möbus H., Brüggemann D.* An implicit multigrid method for turbulent combustion // *Journal of Computational Physics*. 2001. Vol. 167. № 2. P. 247–276.
115. *Gerlinger P., Nold K., Aigner M.* Influence of reaction mechanisms, grid spacing, and inflow conditions on the numerical simulation of lifted supersonic flames // *International Journal for Numerical Methods in Fluids*. 2009. Vol. 62. № 12.
116. *Golovitchev V.I., Chomiak J.* Numerical Modeling of High-Temperature Air Flameless Combustion // *Proceeding of the 6th European Conference INFUB*. 2002. P. 325–340.

117. *Gomet L., Robin V., Mura A.* Influence of residence and scalar mixing time scales in non-premixed combustion in supersonic turbulent flows // *Combustion Science and Technology*. 2012. Vol. 184. № 10–11. P. 1471–1501.
118. *Gran I.R., Magnussen B.F.* A numerical study of a bluff-body stabilized diffusion flame. Part 2. Influence of combustion modeling and finite-rate chemistry // *Combustion Science and Technology*. 1996. Vol. 119. № 1–6. P. 191–217.
119. *Gran I.R., Magnussen B.F.* A numerical study of a bluff-body stabilized diffusion flame. Part 1. Influence of turbulence modeling and boundary conditions // *Combustion Science and Technology*. 1996. Vol. 119. № 1–6. P. 171–190.
120. *Guerlac H.* Lavoisier – The Crucial Year. The background and origin of his first experiments on combustion in 1772. 1961.
121. *Hannemann K., Martinez Schramm J., Laurence S., Karl S., Langener T., Steelant J.* Experimental and Numerical Analysis of the small Scale LAPCAT II Scramjet Flow Path in High Enthalpy Shock Tunnel Conditions // *Space Propulsion*. 2014. Vol. 19. P. 22.
122. *Harinaldi, Ueda T., Mizomoto M.* Effect of slot gas injection to the flow field and coherent structure characteristics of a backstep flow // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2001. Vol. 44. № 14. P. 2711–2726.
123. *Haworth D.C., Pope S.B.* A second-order Monte Carlo method for the solution of the Ito stochastic differential equation // *Stochastic Analysis and Applications*. 1986. Vol. 4. № 2. P. 151–186.
124. *Hirsch C.* Numerical computation of internal and external flows: fundamentals of computational fluid dynamics. 2007. 656 P.
125. *Hsu A.T., Tsai Y.-L.P., Raju M.S.* Probability density function approach for compressible turbulent reacting flows // *AIAA Journal*. 1994. Vol. 32. № 7. P. 1407–1415.
126. *Hsu A.T., Tsai Y.P., Rajut M.S.* Probability Density Function Approach for Compressible Turbulent Reacting Flows 1994. Vol. 32. № 7.
127. *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.
128. *Keistler P., Hassan H., Xiao X.* Role of Chemistry/Turbulence Interactions in 3d Supersonic Combustion // 46th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. 2008. AIAA Paper 2008-89. 15 p.
129. *Keistler P., Xiao X., Hassan H., Cutler A.* Simulation of the SCHOLAR Supersonic Combustion Experiments // 45th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. 2007. AIAA Paper 2007-835. 23 p.

130. *Keistler P.G., Gaffney R.L., Xiao X., Hassan H.A.* Turbulence Modeling for Scramjet Applications // AIAA Paper 2005-5382. 2005. 11 p.
131. *Kerstein A.R., Ashurst W.T., Williams F.A.* Field equation for interface propagation in an unsteady homogeneous flow field // Physical Review A. 1988. Vol. 37. № 7. P. 2728–2731.
132. *Klimenko A.Y., Bilger R.W.* Conditional moment closure for turbulent combustion // Progress in Energy and Combustion Science. 1999. Vol. 25. № 6. P. 595–687.
133. *Kollmann W.* The pdf approach to turbulent flow // Theoretical and Computational Fluid Dynamics. 1990. Vol. 1. № 5. P. 249–285.
134. *Koo H., Donde P., Raman V.* A quadrature-based LES/transported probability density function approach for modeling supersonic combustion // Proceedings of the Combustion Institute. 2011. Vol.33. № 2. P. 2203–2210.
135. *Launder B.E., Sharma B.I.* Application of the energy-dissipation model of turbulence to the calculation of flow near a spinning disc // Letters in heat and mass transfer. 1974. Vol.2. № 2. P. 131–137.
136. *Lee R.A., Hosangadi A., Cavallo P.A., Dash S.M.* Application of Unstructured Grid Methodology to Scramjet Combustor Flowfields // 37th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit 1999. AIAA Paper 99-87. 15 p.
137. *Magnussen B.* On the structure of turbulence and a generalized eddy dissipation concept for chemical reaction in turbulent flow // 19th Aerospace Sciences Meeting. 1981. AIAA Paper 82-42. 7 p.
138. *Magnussen B.F.* The eddy dissipation concept a bridge between science and technology // ECCOMAS Thematic Conference on Computational Combustion. 2005. 24 p.
139. *Magre P., Moreau P., Collin G., Borghi R., Péalat M.* Further studies by CARS of premixed turbulent combustion in a high velocity flow // Combustion and Flame. 1988. № 2 (71). P. 147–168.
140. *Mastorakos E.* Ignition of turbulent non-premixed flames // Progress in Energy and Combustion Science. 2008. Vol. 35. № 1. P. 57–97.
141. *Mattick S., Frankel S.* Numerical Modeling of Supersonic Combustion: Validation and Vitiating Studies Using FLUENT // 41st AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference. 2005. AIAA Paper 4287. 15 p.
142. *Menon S., Genin F., Chernyavsky B.* Large Eddy Simulation of Scramjet Combustion Using a Subgrid Mixing/combustion Model // 12th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies. 2003. AIAA Paper 2003-7035. 14 p.
143. *Menter F.R.* Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications // AIAA Journal. 1994. Vol. 32. № 8. P. 1598–1605.

144. *Meshcheryakov E.A., Sabel'nikov V.A.* Combustion of hydrogen in a supersonic turbulent flow in a channel with simultaneous delivery of fuel and oxidant // *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. 1981. Vol. 17. № 2. P. 159–167.
145. *Meshcheryakov E.A., Sabel'nikov V.A.* Reduced heat production due to mixing and kinetic factors in supersonic combustion of unmixed gases in an expanding channel // *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. 1989. Vol. 24. № 5. P. 526–533.
146. *Missiles2Go* МАКС-2015: за два дня до начала... [Электронный ресурс]. URL: https://missiles2go.ru/2015/08/23/maks-2015-dva-dnia-do-nachala/wp_20150823_11_02_21_pro_highres/ (дата обращения: 27.10.2018).
147. *Möbus H., Gerlinger P., Brüggemann D.* Scalar and joint scalar-velocity-frequency Monte Carlo PDF simulation of supersonic combustion // *Combustion and Flame*. 2003. Vol. 132. № 1–2. P. 3–24.
148. *Molchanov A.M., Bykov L. V., Nikitin P. V* Modeling high-speed reacting flows with variable turbulent Prandtl and Schmidt numbers 2012. 326–332 p.
149. *Molchanov A.M., Yanyshchikov D.S., Bykov L. V.* Influence of turbulent fluctuations on non-equilibrium chemical reactions in the flow // *Journal of Physics: Conference Series*. 2017. Vol. 891. № 1. 7 p.
150. *Moon H.-J., Borghi R.* A lagrangian based scalar pdf method for turbulent combustion models // *KSME International Journal*. 2004. Vol. 18. № 8. P. 1470–1478.
151. *Moretti* A new technique for the numerical analysis of nonequilibrium flows // *AIAA Journal*. 1965. Vol. 3. № 2. P. 223–229.
152. *Moule Y.* Modélisation et Simulation de la Combustion dans les Écoulements Rapides. Applications aux Superstatoréacteurs. Ph.D. Thesis. 2006. 196 p.
153. *Moule Y., Sabel'nikov V., Mura A.* Modelling of Self-Ignition Processes in Supersonic Non Premixed Coflowing Jets Based on a PaSR Approach // 17th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference. AIAA Paper 2011-2396. 9 p.
154. *Moule Y., Sabelnikov V., Mura A.* Highly resolved numerical simulation of combustion in supersonic hydrogen-air coflowing jets // *Combustion and Flame*. 2014. Vol. 161. № 10. P. 2647-2668.
155. *Myhrvold T., Ertesvåg I.S., Gran I.R., Cabra R., Chen J.Y.* A numerical investigation of a lifted H₂/N₂turbulent jet flame in a vitiated coflow // *Combustion Science and Technology*. 2006. Vol. 178. № 6. P. 1001–1030.
156. *Narayan J.* Prediction of Turbulent Reacting Flows Related to Hypersonic Airbreathing // 30th AIAA / ASME / SAE / ASEE Joint Propulsion Conference. 1994. AIAA Paper 94-2948. 17 p.

157. *Narayan J.R.* A Two-Equation Turbulence Model for Compressible Reacting Flows // *AIAA Journal*, Vol. 31, № 2 P. 398-401.
158. *Norris J., Edwards J., Norris J., Edwards J.* Large-eddy simulation of high-speed, turbulent diffusion flames with detailed chemistry // 35th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. 1997. AIAA Paper 1997-370. 15 p.
159. *Oevermann M.* Numerical investigation of turbulent hydrogen combustion in a SCRAMJET using flamelet modeling // *Aerospace Science and Technology*. 2000. Vol. 4. № 7. P. 463–480.
160. *Peters N.* Laminar flamelet concepts in turbulent combustion // *Symposium (International) on Combustion*. 1988. Vol. 21. № 1. P. 1231–1250.
161. *Petrova N.* Turbulence-chemistry interaction models for numerical simulation of aeronautical propulsion systems. Ph.D. Thesis. 2015. 316 p.
162. *Petrova N., Sabelnikov V., Bertier N.* Numerical simulation of a backward-facing step combustor using RANS/Extended Partially Stirred Reactor model // 6-th European Conference for Aeronautics and Space Sciences (EUCASS). 2015. 15 p.
163. *Piffaretti S.G.* Flame age model. Ph.D. Thesis. 2007. 194 p.
164. *Pitsch H., Chen M., Peters N.* Unsteady flamelet modeling of turbulent hydrogen-air diffusion flames // *Twenty-Seventh Symposium on Combustion/The Combustion Institute*. 1998. P. 1057–1064.
165. *Poinsot, T., Veynante D.* Theoretical and Numerical Combustion. Philadelphia. 2001.
166. *Poinsot T., T. E., Mungal M.G.* A Study of the Laminar Flame Tip and Implications for Premixed Turbulent Combustion // *Combustion Science and Technology*. 1992. Vol. 81. № 1-3. P. 45–73.
167. *Powers J.M., Paolucci S.* Uniqueness of chemical equilibria in ideal mixtures of ideal gases // *American Journal of Physics*. 2008. Vol. 76. № 9. P. 848–855.
168. *Ramaekers W.J.S., Goey L.P.H., Oijen J.A., Albrecht B.A., Eggels R.L.G.M.* The application of flamelet generated manifolds in modelling of turbulent partially-premixed flames. Technische Universiteit Eindhoven, 2005. 16 P.
169. *Ramaekers W.J.S., Oijen J.A. van, Goey L.P.H. de* A Priori Testing of Flamelet Generated Manifolds for Turbulent Partially Premixed Methane/Air Flames // *Flow, Turbulence and Combustion*. 2010. Vol. 84. № 3. P. 439–458.
170. *Reynolds O.* On the Dynamical Theory of Incompressible Viscous Fluids and the Determination of the Criterion Royal Society, 1894. 336–339 p.
171. *Rodriguez C., Cutler A.* Computational Simulation of a Supersonic-Combustion Benchmark Experiment Reston, Virginia: American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2005.

172. *Rodriguez C.G., Cutler A.D.* Numerical Analysis of the SCHOLAR Supersonic Combustor // Nasa Cr-2003-212689. 2003. 35 p.
173. *Sabel'nikov V.* Supersonic turbulent combustion of nonpremixed gases – status and perspectives // Moscow: ENAS Publishers. 1997. 208 p.
174. *Sabel'nikov V., Deshaies B., Figueira da Silva L.F.* Revisited Flamelet Model for Nonpremixed Combustion in Supersonic Turbulent Flows // Combustion and Flame. 1998. Vol. 114. № 3–4. P. 577–584.
175. *Sabel'nikov V., Soulard O.* Rapidly decorrelating velocity-field model as a tool for solving one-point Fokker-Planck equations for probability density functions of turbulent reactive scalars // Physical Review E. 2005. Vol. 72. № 1. P. 016301.
176. *Sabelnikov V., Fureby C.* LES combustion modeling for high Re flames using a multi-phase analogy // Combustion and Flame. 2013. Vol. 160. № 1. P. 83–96.
177. *Seleznev R., Surzhikov S.* Quasi-One-Dimensional and Two-Dimensional Numerical Simulation of Scramjet Combustors // 51st AIAA/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference. 2015. AIAA Paper 2015-4166. 28 p.
178. *Spalding D.B.* Concentration fluctuation in a round turbulent free jet // Chemical Engineering Science. 1971. Vol. 26. P. 95–107.
179. *Spalding D.B.* Development of the eddy-break-up model of turbulent combustion // Symposium (International) on Combustion. 1977. Vol. 16. № 1. P. 1657–1663.
180. *Steelant J., Hannemann K., Martinez Schramm, J., Laurence S., Karl S., Langener T.* LAPCAT: high-speed propulsion technology // Advances on propulsion technology for high-speed aircraft. 2008. Vol. 12. № 1. 38 p.
181. *Steelant J., Langener T., Hannemann K., Marini M., Serre L., Bouchez M., Falempin F.* Conceptual Design of the High-Speed Propelled Experimental Flight Test Vehicle HEXAFLY // 20th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference. 2015. AIAA Paper 2015-3539. 27 p.
182. *Steelant J., Varvill R., Walton C., Defoort S., Hannemann K., Marini M.* Achievements obtained for sustained hypersonic flight within the LAPCAT-II project // 20th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference. 2015. AIAA Paper 2015-2578. 15 p.
183. *Tourani C.* Computational Simulation of Scramjet Combustors - A Comparison between Quasi-One Dimensional and 2-D Numerical Simulations // 17th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference. 2011. AIAA Paper 2011-2285. 13 p.

184. *Trouvé A., Poinso T.* The evolution equation for the flame surface density in turbulent premixed combustion // *Journal of Fluid Mechanics*. 1994. Vol. 278. P. 1–31.
185. *Valiño L.* A Field Monte Carlo Formulation for Calculating the Probability Density Function of a Single Scalar in a Turbulent Flow // *Flow, Turbulence and Combustion*. 1998. Vol. 60. № 2. P. 157–172.
186. *Veynante D., Vervisch L.* Turbulent combustion modeling // *Progress in Energy and Combustion Science*. 2002. Vol. 28. № 3. 193–266 p.
187. *Vieser W., Esch T., Menter F.* Heat Transfer Predictions Using Advanced Two-Equation Turbulence Models // *CFX Technical Memorandum (CFX-VAL10/0602)*. 2002.
188. *Villasenor R., Chen J.Y., Pitz R.W.* Modeling ideally expanded supersonic turbulent jet flows with nonpremixed H₂-air combustion // *AIAA JOURNAL*. 1992. Vol. 30. № 2. P. 395–402.
189. *Vincent-Randonnier A., Sabelnikov V., Ristori A., Zettervall N., Fureby C.* An experimental and computational study of hydrogen–air combustion in the LAPCAT II supersonic combustor // *Proceedings of the Combustion Institute*. 2018. P. 1-9.
190. *Vlasenko V.V., Shiryayeva A.A.* 2.5 D approximation for numerical simulation of flows in engine ducts // *Proceedings of 6th European Conference for Aeronautics and Space Sciences (EUCASS)*. 2015. 14 pages.
191. *Waidmann W., Alff F., Böhm M., Brummund U., Clauß W., Oswald M.* Supersonic combustion of hydrogen/air in a scramjet combustion chamber // *Space Technology*. 1995. Vol. 15. № 6. P. 421–429.
192. *Wang H., Qin N., Sun M., Wu H., Wang Z.* A hybrid LES (Large Eddy Simulation)/assumed sub-grid PDF (Probability Density Function) model for supersonic turbulent combustion // *Science China Technological Sciences*. 2011. Vol. 54. № 10. P. 2694–2707.
193. *Wang J., Chen F., Liu H.* Modeling Supersonic Turbulent Reacting Flows with a Variable Turbulent Prandtl and Schmidt Numbers Model // *AIAA Paper 2014-1027*. 2014. P. 1–13.
194. *Wankhede M.J., Tap F.A., Schapotschnikow P., Ramaekers W.J.S.* Numerical Study of Unsteady Flow-Field and Flame Dynamics in a Gas Turbine Model Combustor // *Proceedings of ASME Turbo Expo 2014: Turbine Technical Conference and Exposition*. GT 2014-25784. 14 p.
195. *Westbrook C.K., Mizobuchi Y., Poinso T.J., Smith P.J., Warnatz J.* Computational combustion // *Proceedings of the Combustion Institute*. 2005. Vol. 30. № 1. P. 125–157.
196. *Wilcox D.C.* Reassessment of the scale-determining equation for advanced turbulence models // *AIAA Journal*. 1988. Vol. 26. № 11. P. 1299–1310.
197. *Wilcox D.C.* Turbulence modeling for CFD. 3rd ed. La Canada : DCW Industries. 2006. 522 P.

198. *Williams F.A.* The role of theory in combustion science // Symposium (International) on Combustion. 1992. Vol. 24. № 1. P. 1–17.
199. *Won S., Jeung I., Parent B., Choi J.* Numerical investigation of transverse hydrogen jet into supersonic crossflow using detached-eddy simulation // AIAA Journal. 2010. Vol. 48. № 6. P. 1047–1058.
200. *Xiao X., Hassan H.A., Baurle R.A.* Modeling Scramjet Flows with Variable Turbulent Prandtl and Schmidt Numbers // AIAA Journal. 2007. Vol. 45. № 6. P. 1415–1423.
201. *Zaitsev S., Buriko Y., Guskov O., Kopchenov V., Lubimov D., Tshepin S., Volkov D.* Verification and Improvement of Flamelet Approach for Non-Premixed Flames // Technical Report NASA-CR-205550. 1997. 132 p.
202. *Zhapbasbaev U.K., Makashev E.P.* Diffusion Combustion of a System of Plane Supersonic Hydrogen Jets in a Supersonic Flow // Combustion, Explosion, and Shock Waves. 2003. Vol. 39. № 4. P. 415–422.
203. *Zhapbasbayev U., Zabaykin V., Makashev Y., Tursynbay A., Urmashev B.* Some Effects of Hydrogen Self-Ignition and Combustion in Supersonic Flow // Eurasian Chemico-Technological Journal. 2014. Vol. 16. № 2–3. P. 245.
204. *Zheng L.L., Bray K.N.C.* The application of new combustion and turbulence models to H₂-air nonpremixed supersonic combustion // Combustion and Flame. 1994. Vol. 99. № 2. P. 440–448.
205. *Zhenxun Gao, Wang, J., Jiang, C., Lee, C.* Application and theoretical analysis of the flamelet model for supersonic turbulent combustion flows in the scramjet engine // Combustion Theory and Modelling. Vol. 6. № 18. P. 652–691.
206. *Zimont V.L., Meshcheryakov E.A., Sabel'nikov V.A.* A simple model for calculation of molecular mixing in the turbulent combustion of unmixed gases // Combustion, Explosion, and Shock Waves. 1978. Vol. 14. № 3. P. 315–320.
207. HEXAFLY-INT. [Электронный ресурс]. URL: http://www.esa.int/techresources/hexafly_int (дата обращения: 08.05.2017).

Список публикаций по теме диссертации

Публикации в изданиях, рекомендованных ВАК:

1. *Ширяева А. А.* О стационарном состоянии в потоке реагирующей смеси газов //Химическая физика. 2010. Т. 29. №. 6. С. 21-30.
2. *Ширяева А.А.* Применение модели реактора частичного перемешивания для учета взаимодействия турбулентности и горения на основе уравнений Рейнольдса // Ученые записки ЦАГИ. 2018. Т.48 №8.
3. *Vlasenko V., Shiryayeva A.* Numerical simulation of non-stationary propagation of combustion along a duct with supersonic flow of a viscid gas //Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part G: Journal of Aerospace Engineering. 2013. Т. 227. №. 3. С. 480-492.
4. *Vlasenko V., Shiryayeva A.* Effect of viscosity on a propagation of strong compression wave in a cylindrical duct with damping device //Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part G: Journal of Aerospace Engineering. 2013. Т. 227. №. 3. С. 493-501.

Публикации в прочих изданиях:

5. *Shiryayeva A.A.* Numerical simulation of turbulent diffusion combustion with the use of PDF method // XVII school-seminar of young scientists and specialists under the leadership of acad. Academy of Sciences A.I. Leont'ev "Gas dynamics and heat and mass exchange problems in aerospace technology" proceedings. Moscow. Publishing House MPEI. 2009. Vol.1. pp. 437–440.
6. *Ширяева А.А.* Новая программа для расчета 3D течений с горением // XXIV Научно-техническая конференция по аэродинамике ЦАГИ. 2013.
7. *Ширяева А.А.* Особенности численного метода и результаты тестирования программы ZEUS-S3pp для моделирования трехмерных течений с горением // Труды ЦАГИ. 2015. № 2735. С. 220–246.
8. *Shiryayeva A.A, Anisimov K., Vlasenko V.* Development and Application of Numerical Technology for simulation of different combustion types in high-speed viscous gas turbulent flow // 20th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference. 2014. AIAA Paper 2014-2097.
9. *Ширяева А.* Численный метод для моделирования разных режимов горения в высокоскоростных вязких турбулентных потоках: разработка и тестирование // Горение и взрыв. 2015. Т. 7. №7. С.144-149.

10. *Shiryayeva A., Anisimov K., Vlasenko V.* Numerical Method for Simulation of Different Combustion Types in High-Speed Viscous Turbulent Flows: Development & Application // Proc. Int. Conf. Space Propulsion. 2014.
11. *Shiryayeva A.* Technology and code for numerical simulation of different combustion types in high-speed viscous gas turbulent flows // Proc. Int. congress ICAS. 2014.
12. *Ширяева А.А.* Разработка и тестирование численного метода для моделирования разных режимов горения в высокоскоростных вязких турбулентных потоках // XXV научно-техническая конференция по аэродинамике ЦАГИ Пос.Володарского, ЦАГИ, 2014.
13. *Shiryayeva A., Anisimov K.* Development and application of numerical technology for simulation of different combustion types in high-speed viscous gas turbulent flows // Proceedings of 6th European Conference for Aerospace Sciences (Proceedings of 6th European Conference for Aeronautics and Space Sciences (EUCASS)). 2015.
14. *Shiryayeva A., Anisimov K.* Numerical Technology for Simulation of High-Speed Viscous Gas Turbulent Flows with Different Combustion Regimes and its Application // 20th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference. AIAA Paper 2015-3519.
15. *Shiryayeva A., Sabelnikov V.* "Critical Analysis of Classical Turbulent Combustion Experiments on the Basis of RANS Simulations" // AIP Conference Proceedings. 2018. Т. 2027. №. 1. С. 030078. Полный текст статьи доступен по адресу: <https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.5065172>
16. *Ширяева А.А.* О влиянии переменных газодинамических свойств и состава газа на газодинамическую структуру струи // Труды ЦАГИ. 2013. №2710.
17. *Vlasenko V.V., Shiryayeva A.A.* Numerical simulation of non-stationary propagation of combustion along a duct with supersonic flow of a viscid gas // Proceedings of 4th European Conference for Aerospace Sciences, St.Petersburg. 2011.
18. *Vlasenko V.V., Shiryayeva A.A.* Application of the fast calculation technologies to simulation of non-stationary supersonic viscid flow with combustion // Proceedings of 28th International Congress of the Aeronautical Sciences, ICAS 2012
19. *Власенко В.В., Ширяева А.А.* Расчеты течения в модельной высокоскоростной камере сгорания с использованием различных моделей химической кинетики // Горение и взрыв. 2015. Т.8. №1. С.116-125.
20. *Фролов С.М., Зангиев А.Э., Семенов И.В., Власенко В.В., Волощенко О.В., Николаев А.А., Ширяева А.А.* Моделирование течения в высокоскоростной камере сгорания в трехмерной и двумерной постановке // Горение и взрыв. 2015. Т. 8. №1. С.126-135.

ПРИЛОЖЕНИЕ А
МОДЕЛЬ FLAMELET: ВЫВОД УРАВНЕНИЙ И
АЛГОРИТМ ПОСТРОЕНИЯ НЕСТАЦИОНАРНОЙ БИБЛИОТЕКИ

А.1. Вывод уравнения энергии для модели flamelet

Уравнение энергии при основных предположениях модели flamelet:

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial [\tau_{ik} u_k + q_i]}{\partial x_i} = 0, \quad (\text{A.1})$$

Левая часть (1)

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial [\tau_{ik} u_k + q_i]}{\partial x_i} = \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial [\tau_{ik} u_k]}{\partial x_i} + \frac{\partial q_i}{\partial x_i}, \quad (\text{A.2})$$

При выводе уравнения энергии дополнительно предполагается, что нестационарные флуктуации давления и вязкая диссипация малы; числа Шмидта для всех компонент смеси одинаковы ($Sc_i = Sc$), число Льюиса $Le = \frac{\lambda}{D} = \frac{Sc}{Pr} = 1$, где $\lambda = \frac{\mu}{Pr}$ – коэффициент молекулярной диффузии тепловой энергии, число Прандтля при выводе полагается $Pr=1$. Это означает, что все коэффициенты диффузии одинаковы и равны D : $D_i = \lambda = D$. Предположение малости толщины зоны реакций приводит к двум дополнительным упрощениям: 1) пренебрежение изменением ρD внутри этой области; 2) зона протекания реакций рассматривается как локально плоская, что позволяет пренебречь производными вдоль поверхности стехеометрической смеси.

Нестационарные флуктуации давления и вязкая диссипация малы. Нестационарным членом $\partial(\rho E)/\partial t$ пренебрегается. Преобразуем последний член в левой части (q_i – потоки тепла за счет теплопроводности и массовой молекулярной диффузии):

$$\begin{aligned} \frac{\partial q_i}{\partial x_i} &= -D \cdot \frac{\partial \left[\frac{c_p}{Pr} \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{m=1}^{N_{sp}} h_m \frac{\partial Y_m}{\partial x_i} \right]}{\partial x_i} = -D \frac{c_p}{Pr} \frac{\partial^2 T}{\partial x_i^2} - D \sum_{m=1}^{N_{sp}} h_m \frac{\partial^2 Y_m}{\partial x_i^2} - D \sum_{m=1}^{N_{sp}} \frac{\partial h_m}{\partial x_i} \frac{\partial Y_m}{\partial x_i} = \\ &= -D \frac{c_p}{Pr} \frac{\partial^2 T}{\partial x_i^2} - D \sum_{m=1}^{N_{sp}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(h_m \frac{\partial Y_m}{\partial x_i} \right) = -D \frac{c_p}{Pr} \frac{\partial^2 T}{\partial x_i^2} - D \sum_{m=1}^{N_{sp}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial (h_m Y_m)}{\partial x_i} - Y_m \frac{\partial h_m}{\partial x_i} \right) = \\ &= -D \frac{c_p}{Pr} \frac{\partial^2 T}{\partial x_i^2} - D \frac{\partial^2 \sum_{m=1}^{N_{sp}} (h_m Y_m)}{\partial x_i^2} + D \sum_{m=1}^{N_{sp}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(Y_m \frac{\partial h_m}{\partial x_i} \right) = \\ &= -D \frac{c_p}{Pr} \frac{\partial^2 T}{\partial x_i^2} - D \frac{\partial^2 h}{\partial n^2} + D \sum_{m=1}^{N_{sp}} \left(\frac{\partial Y_m}{\partial n} \frac{\partial h_m}{\partial n} \right) + \boxed{D \sum_{m=1}^{N_{sp}} \left(Y_m \frac{\partial^2 h_m}{\partial n^2} \right)} \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Заметим, что:

$$h_i = \int_{T_0}^T c_{pi} dT + \Delta h_i(T_0) \Rightarrow \frac{\partial h_i}{\partial n} = \frac{\partial \int_{T_0}^T c_{pi} dT}{\partial n} = c_{pi} \frac{\partial T}{\partial n}, \quad (\text{A.4})$$

$$\frac{\partial^2 h_i}{\partial n^2} = \frac{\partial}{\partial n} \left(c_{pi} \frac{\partial T}{\partial n} \right) = c_{pi} \frac{\partial^2 T}{\partial n^2}. \quad (\text{A.5})$$

Преобразуем с учетом (A.4)–(A.5) последний (выделенный) член нижней строчки в (A.3):

$$D \sum_{m=1}^{N_{sp}} \left(Y_m \frac{\partial^2 h_m}{\partial n^2} \right) = D \sum_{m=1}^{N_{sp}} \left(Y_m c_{pi} \frac{\partial^2 T}{\partial n^2} \right) = D \frac{\partial^2 T}{\partial n^2} \sum_{m=1}^{N_{sp}} (Y_m c_{pi}) = D c_p \frac{\partial^2 T}{\partial n^2}. \quad (\text{A.6})$$

Используя (A.6), (A.3) приводится к:

$$\begin{aligned} \frac{\partial q_i}{\partial x_i} &= -D \frac{c_p}{Pr} \frac{\partial^2 T}{\partial x_i^2} - D \frac{\partial^2 h}{\partial n^2} + D \sum_{m=1}^{N_{sp}} \left(\frac{\partial Y_m}{\partial n} \frac{\partial h_m}{\partial n} \right) + D c_p \frac{\partial^2 T}{\partial n^2} = \\ &= -D \underbrace{\frac{c_p}{Pr} (1 - Pr)}_{0 \text{ (Pr=1)}} \frac{\partial^2 T}{\partial n^2} - D \frac{\partial^2 h}{\partial n^2} + D \sum_{m=1}^{N_{sp}} \left(\frac{\partial Y_m}{\partial n} \frac{\partial h_m}{\partial n} \right) = -D \frac{\partial^2 h}{\partial n^2} + D \frac{\partial T}{\partial n} \sum_{m=1}^{N_{sp}} \left(c_{pm} \frac{\partial Y_m}{\partial n} \right) = \\ &= -D \frac{\partial^2 h}{\partial n^2} + D \frac{\partial T}{\partial n} \sum_{m=1}^{N_{sp}} \frac{\partial (c_{pm} Y_m)}{\partial n} = -D \frac{\partial^2 h}{\partial n^2} + D \frac{\partial T}{\partial n} \frac{\partial}{\partial n} \sum_{m=1}^{N_{sp}} (c_{pm} Y_m) = \\ &= -D \frac{\partial^2 h}{\partial n^2} + D \underbrace{\frac{\partial T}{\partial n} \frac{\partial c_p}{\partial n}}_{0 \text{ (} c_p = \text{const)}} = -D \frac{\partial^2 h}{\partial n^2} \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Преобразуем второй член в (A.2) ($\partial[\tau_{ik} u_k]/\partial x_i$):

$$\begin{aligned} \frac{\partial (u_k \tau_{ik})}{\partial x_i} &= -\mu \frac{\partial \left[u_k \frac{\partial u_k}{\partial x_i} + u_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k} - \frac{2}{3} u_k d \delta_{ik} \right]}{\partial x_i} = -\mu \frac{\partial^2 \left(\frac{u_k^2}{2} \right)}{\partial x_i^2} - \mu \frac{\partial \left[u_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k} - \frac{2}{3} u_k d \delta_{ik} \right]}{\partial x_i} = \\ &\stackrel{\text{остается}}{=} \underset{i=k=n}{- \mu \frac{\partial^2 \left(\frac{U^2}{2} \right)}{\partial n^2} - \mu \frac{\partial \left[u_n \frac{\partial u_n}{\partial n} \right]}{\partial n} + \frac{2}{3} \mu \frac{\partial \left[u_n \frac{\partial u_n}{\partial n} \right]}{\partial n}} = -\mu \frac{\partial^2 \left(\frac{U^2}{2} \right)}{\partial n^2} - \frac{1}{3} \mu \frac{\partial \left[u_n \frac{\partial u_n}{\partial n} \right]}{\partial n} \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Последним членом в (A.8) пренебрегается. Таким образом, (A.2) с учетом (A.7):

$$-D \frac{\partial^2 h}{\partial n^2} - \mu \frac{\partial^2 \left(\frac{U^2}{2} \right)}{\partial n^2} \underset{D=\mu/Sc}{=} -\mu \frac{\partial^2 \left(\frac{h}{Sc} + \frac{U^2}{2} \right)}{\partial n^2} \underset{Sc=1}{=} -\mu \frac{\partial^2 \left(h + \frac{U^2}{2} \right)}{\partial n^2} = -\mu \frac{\partial^2 H}{\partial n^2}.$$

А уравнение энергии (A.1) преобразуется к виду (1.9) из Главы 1:

$$\frac{\partial^2 H}{\partial n^2} = 0. \quad (\text{A.9})$$

A.2. Вывод уравнения для $\overline{z'^2}$

В настоящем Приложении будет дан вывод уравнения для среднего квадрата пульсаций массовой концентрации z инертного вещества. Берем из мгновенной, нестационарной системы уравнений Навье–Стокса для многокомпонентного газа уравнение неразрывности и уравнение для массовой концентрации инертного вещества ((1.2)–(1.3) из Главы 1 до осреднения):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_k}{\partial x_k} = 0, \quad (\text{A.10})$$

$$\frac{\partial(\rho z)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\rho z u_k - \frac{\mu}{Sc} \frac{\partial z}{\partial x_k} \right] = 0. \quad (\text{A.11})$$

Представим

$$d[\rho z^2] = z^2 d\rho + 2\rho z dz = z^2 d\rho + 2z d(\rho z) - 2z^2 d\rho = 2z d(\rho z) - z^2 d\rho. \quad (\text{A.12})$$

В соответствии с (A.12), проделываем преобразование $2z \times (\text{A.11}) - z^2 \times (\text{A.10})$. Получим уравнение, которое начнется с $\frac{\partial}{\partial t}[\rho z^2]$.

В ходе преобразования также учтем, что

$$\begin{aligned} d[\rho z^2 u_k] &= z^2 d(\rho u_k) + 2\rho u_k z dz = \\ &= z^2 d(\rho u_k) + 2z d(\rho z u_k) - 2z^2 d(\rho u_k) = 2z d(\rho z u_k) - z^2 d(\rho u_k). \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Результат преобразования $2z \times (\text{A.11}) - z^2 \times (\text{A.10})$:

$$\frac{\partial}{\partial t}[\rho z^2] + \frac{\partial}{\partial x_k}[\rho z^2 u_k] - 2z \frac{\partial}{\partial x_k} \left[D \frac{\partial z}{\partial x_k} \right] = 0. \quad (\text{A.14})$$

$$\frac{\partial}{\partial t}[\rho z^2] + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\rho z^2 u_k - D \frac{\partial [z^2]}{\partial x_k} \right] = -2D \left(\frac{\partial z}{\partial x_k} \right)^2. \quad (\text{A.15})$$

Теперь представим $\rho = \bar{\rho}$, $u_k = \bar{u}_k + u'_k$, $z = \bar{z} + z'$. Подставляем в (A.15):

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t} \left[\bar{\rho} (\bar{z}^2 + 2\bar{z}z' + z'^2) \right] + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\bar{\rho} (\bar{z}^2 \bar{u}_k + 2\bar{z}z' \bar{u}_k + z'^2 \bar{u}_k + \bar{z}^2 u'_k + 2\bar{z}z' u'_k + z'^2 u'_k) \right] - \\ &- \frac{\partial}{\partial x_k} \left[D \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{z}^2 + 2\bar{z}z' + z'^2) \right] = -2D \left(\frac{\partial \bar{z}}{\partial x_k} \frac{\partial \bar{z}}{\partial x_k} + 2 \frac{\partial \bar{z}}{\partial x_k} \frac{\partial z'}{\partial x_k} + \frac{\partial z'}{\partial x_k} \frac{\partial z'}{\partial x_k} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Применяем к этому уравнению осреднение по времени. Получаем:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left[\bar{\rho} \left(\bar{z}^2 + \overline{z'^2} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\bar{\rho} \left(\bar{z}^2 \bar{u}_k + \overline{z'^2 u'_k} + 2 \bar{z} \overline{z' u'_k} + \overline{z'^2 u'_k} \right) \right] - \\ & - \frac{\partial}{\partial x_k} \left[D \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\bar{z}^2 + \overline{z'^2} \right) \right] = -2D \left(\left(\frac{\partial \bar{z}}{\partial x_k} \right)^2 + \overline{\left(\frac{\partial z'}{\partial x_k} \right)^2} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

Теперь берем из осредненной по времени системы уравнений Навье–Стокса (системы уравнений Рейнольдса) для многокомпонентного газа ((1.2)–(1.3) из Главы 1) уравнение неразрывности и уравнение для массовой концентрации инертного вещества:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \bar{u}_k}{\partial x_k} = 0, \quad (\text{A.18})$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \bar{z})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\bar{\rho} \bar{z} \bar{u}_k + \bar{\rho} \overline{z' u'_k} - D \frac{\partial \bar{z}}{\partial x_k} \right] = 0. \quad (\text{A.19})$$

Применяем к этим уравнениям аналогичное преобразование – $2\bar{z} \times (2.19) - \overline{z'^2} \times (2.18)$:

$$\frac{\partial}{\partial t} [\bar{\rho} \bar{z}^2] + \frac{\partial}{\partial x_k} [\bar{\rho} \bar{z}^2 \bar{u}_k] + 2\bar{z} \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\bar{\rho} \overline{z' u'_k} - D \frac{\partial \bar{z}}{\partial x_k} \right] = 0. \quad (\text{A.20})$$

Дальнейшие действия аналогичны переходу от (A.5) к (A.6):

$$\frac{\partial}{\partial t} [\bar{\rho} \bar{z}^2] + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\bar{\rho} \bar{z}^2 \bar{u}_k + 2\bar{z} \bar{\rho} \overline{z' u'_k} - 2\bar{z} D \frac{\partial \bar{z}}{\partial x_k} \right] = 2\bar{\rho} \overline{z' u'_k} \frac{\partial \bar{z}}{\partial x_k} - 2\bar{z} D \left(\frac{\partial \bar{z}}{\partial x_k} \right)^2, \quad (\text{A.21})$$

И, наконец, вычитаем уравнение (A.21) из уравнения (A.17):

$$\frac{\partial}{\partial t} [\bar{\rho} \overline{z'^2}] + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\bar{\rho} \left(\overline{z'^2 u'_k} + \overline{z'^2 u'_k} \right) - D \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{z'^2} \right) \right] = -2\bar{\rho} \overline{z' u'_k} \frac{\partial \bar{z}}{\partial x_k} - 2D \overline{\left(\frac{\partial z'}{\partial x_k} \right)^2}. \quad (\text{A.22})$$

Обозначим $\overline{z'^2} = \sigma$. Тогда окончательный вид уравнения для σ :

$$\frac{\partial}{\partial t} [\bar{\rho} \sigma] + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\bar{\rho} \sigma \bar{u}_k + \bar{\rho} \overline{z'^2 u'_k} - D \frac{\partial \sigma}{\partial x_k} \right] = 2 \left[-\bar{\rho} \overline{z' u'_k} \frac{\partial \bar{z}}{\partial x_k} - D \overline{\left(\frac{\partial z'}{\partial x_k} \right)^2} \right]. \quad (\text{A.23})$$

Используя для корреляций $\overline{z' u'_k}$, $\overline{z'^2 u'_k}$ линейные градиентные модели:

$$\overline{z'^2 u'_k} \approx -\frac{\mu_t}{\text{Pr}_t^\sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial x_k}, \quad \overline{z' u'_k} \approx -\frac{\mu_t}{\text{Sc}_t^z} \frac{\partial \bar{z}}{\partial x_k},$$

учитывая, что $N = D(\nabla z)^2$ и полагая $\frac{\partial \bar{z}}{\partial x_k} \square \frac{\partial z'}{\partial x_k}$, окончательно получаем уравнение в

виде (1.26) из Главы 1:

$$\frac{\partial}{\partial t} [\bar{\rho} \sigma] + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\bar{\rho} \bar{u}_k \sigma - \left(\frac{\mu}{\text{Sc}} + \frac{\mu_t}{\text{Pr}_t^\sigma} \right) \frac{\partial \sigma}{\partial x_k} \right] = 2 \frac{\mu_t}{\text{Sc}_t^z} \left(\frac{\partial \bar{z}}{\partial x_k} \right)^2 - 2\bar{N} \quad (\text{A.24})$$

А.3. Алгоритм построения нестационарной библиотеки flamelet при использовании комбинированного метода

- 1) Строится стационарная флеймлет–библиотека значений $f_\infty = f(z, p, N^{st}, t \rightarrow \infty)$
- 2) Определяется промежуток времени, в течении которого происходят основные процессы установления при построении флеймлет–библиотеки и параметры меняются от f_0 до f_∞ . Выбор моментов времени $t_i = f(i)$, $i = 1, N_t$, (где N_t – количество значений по времени в библиотеке) которые записываются во вспомогательной библиотеке
- 3) Построение вспомогательной нестационарной библиотеки: $f_\infty = f(z, p, N^{st}, t_i)$, $i = 1, N_t$
- 4) Осреднение библиотеки с помощью ФПВ для каждого набора параметров \bar{z} и $\sigma = \bar{z}'^2$. При этом важно помнить об ограничении $\sigma_{\max}(\bar{z})$, из-за которого шаг библиотеки по σ свой для каждого \bar{z} – получается вспомогательная библиотека значений $\overline{SY}_i^{pdf}(\bar{z}, \bar{z}'^2, \bar{N}^{st}, \bar{p}, t)$ и $\bar{Y}_i^{pdf}(\bar{z}, \bar{z}'^2, \bar{N}^{st}, \bar{p}, t)$ – зависящая от времени
- 5) Для связи между временем и переменной полноты протекания реакции для каждого набора параметров $(\bar{z}, \bar{z}'^2, \bar{N}^{st}, \bar{p})$ определяется минимальное c_{\min} и максимальное c_{\max} значения концентрации воды по времени (во вспомогательной нестационарной библиотеке после осреднения с ФПВ). Из-за монотонного роста $\bar{Y}_{H_2O}^{pdf}(\bar{z}, \bar{z}'^2, \bar{N}^{st}, \bar{p}, \tilde{t})$ со временем c_{\max} совпадает с c_∞ , а c_{\min} – с c_0 . Далее с учетом особенностей протекания процессов (для сгущения библиотеки в окрестности более резкое изменение параметров) определяется набор значений $\tilde{c}_i \in [c_{\min}, c_{\max}]$. Потом для каждого набора параметров $(\bar{z}, \bar{z}'^2, \bar{N}^{st}, \bar{p})$ совершается проход по всем значениям по времени и в соответствие каждому c ставится момент времени $t(c)$: $\bar{Y}_i^{pdf}(\bar{z}, \bar{z}'^2, \bar{N}^{st}, \bar{p}, t) = c$. В промежутках между дискретными значениями времени t_{l-1} и t_l ($\bar{Y}_i^{pdf}(\bar{z}, \bar{z}'^2, \bar{N}^{st}, \bar{p}, t_{l-1}) \leq c < \bar{Y}_i^{pdf}(\bar{z}, \bar{z}'^2, \bar{N}^{st}, \bar{p}, t_l)$) значение аппроксимируется линейной интерполяцией. Таким образом в память компьютера записываются значения интегралов $\int_0^1 \int_0^1 f_i^{flamelet}(z, \bar{p}, \bar{N}^{st}, t(c)) \text{pdf}(z, c) dz dc$ для каждого набора значений $(\bar{z}, \bar{z}'^2, \bar{N}^{st}, \bar{p}, \bar{c})$.

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

ПРОБЛЕМА “ДИНАМИЧЕСКОГО РАВНОВЕСИЯ”

В настоящем Приложении рассматривается задача о получении равновесного состава при заданных значениях коэффициента избытка окислителя $\alpha = \frac{Y(O)}{8Y(H)}$, температуры T и давления p . Рассмотрим замкнутый упругий объем (для простоты – без течения газа), который заполнен однородной смесью водорода и воздуха и в котором идут химические реакции. Предположим, что какими-то средствами мы поддерживаем постоянными давление и температуру смеси. Поскольку внешние условия неизменны, процесс рано или поздно придет в равновесие.

Так как давление и температура поддерживаются постоянными, а состав однороден по объему, то процесс установления полностью описывается дифференциальными уравнениями химической кинетики:

$$\rho \frac{dY_i}{dt} = -m_i S_i. \quad (\text{Б.1})$$

Источниковый член S_i – линейная комбинация скоростей реакций (см. (1.4)–(1.5) из Главы 1). Для набора реакций (1.68):

$$\begin{aligned} S_H &= -W_1 + W_2 + W_3 + 2W_5 + W_6 + W_7, & S_{H_2O} &= W_3 + W_4 - W_6, \\ S_O &= W_1 - W_2 + W_4 + W_7 + 2W_8, & S_{O_2} &= -W_1 - W_8, \\ S_{OH} &= W_1 + W_2 - W_3 - 2W_4 + W_6 - W_7, & S_{H_2} &= -W_2 - W_3 - W_5. \end{aligned} \quad (\text{Б.2})$$

Когда система придет в равновесие, скорости реакций обратятся в нуль. Тогда обратятся в нуль и источниковые члены, являющиеся линейными комбинациями скоростей, и концентрации компонент газа перестанут меняться. Этот стационарный предел и должен описывать равновесие системы.

Расчет ведется маршевым методом. Известны все параметры газа в момент времени t_n , и требуется найти параметры в следующий момент времени $t_{n+1} = t_n + \tau$. Была выбрана аппроксимация уравнений (Б.1) 1-го порядка точности по времени:

$$\frac{Y_i^{n+1} - Y_i^n}{\tau} = -m_i \frac{S_i^{n+1}}{\rho^{n+1}}. \quad (\text{Б.3})$$

Уравнение (Б.3) решается для любых четырех компонент смеси. Система уравнений замыкается соотношениями:

$$\begin{aligned}\rho^{n+1} R_0 T \cdot \sum_{i=1}^{N_{sp}} \frac{Y_i^{n+1}}{m_i} &= p; \\ \sum_{i=1}^{N_{sp}} Y_i^{n+1} &= 1; \\ Y_{H_2}^{n+1} + Y_H^{n+1} + \frac{2}{18} Y_{H_2O}^{n+1} + \frac{1}{17} Y_{OH}^{n+1} &= Y(H); \\ Y_{N_2}^{n+1} &= Y(N).\end{aligned}$$

В качестве параметра, по которому можно судить об окончании расчета, рассматривается величина $\Delta = \max_{i=1, N_{sp}} \left\{ \frac{|Y_i^{n+1} - Y_i^n|}{\max\{10^{-6}; Y_i^n\}} \right\}$. Расчет завершается при выполнении условия: $\Delta < 10^{-10}$. Это условие означает малость величины относительного изменения всех концентраций, кроме тех, которые сами по себе пренебрежимо малы (меньше 10^{-6}).

В качестве одного из параметров на выходе для контроля определяется параметр $W_{max} = \max_{s=1, N_r} |W_s^f - W_s^b|$ – максимальная величина скорости реакции в сошедшемся решении. Оказалось, что в некоторых режимах реализуется стационарное состояние, в котором источники члены становятся малыми: $S_i \approx 0, i = 1, \dots, 6$, но при этом $W_{max} \neq 0$ и $W_{max} \gg \max_{i=1, N_{sp}} |S_i|$.

Действительно, мы перешли от требования равенства нулю полных скоростей реакций $W_s = W_s^f - W_s^b, s = 1, \dots, N_r$ к требованию равенства нулю их линейных комбинаций $S_i = \sum_{s=1}^{N_r} \Delta \nu_{i,s} W_s, i = 1, \dots, N_{sp} \ (N_{sp} < N_r)$. Последнее может иметь место не только тогда, когда имеет место первое.

Будем называть особое стационарное состояние, в котором полные скорости реакций не равны нулю, “динамическим равновесием”.

Для примера в Таблице Б.1 сравниваются классическое химическое равновесие, при котором полные скорости всех индивидуальных реакций равны нулю, и “динамическое

равновесие” для режима $p = 10^4$ Па, $T = 3500\text{K}$ при коэффициенте избытка окислителя

$$\alpha = \frac{Y(O)}{8Y(H)} = 0.1.$$

Таблица Б.1. Сравнение классического равновесия с “динамическим”

для режима $p = 10^4$ Па, $T = 3500\text{K}$, $\alpha = 0.1$

Концентрации, Y_i		Источниковые члены, $S_i \times 10^{10}$		Скорости реакций, $W_k \times 10^{10}$	
Классич. равновесие	“Динамич.” равновесие	Классич. равновесие	“Динамич.” равновесие	Классич. равновесие	“Динамич.” равновесие
$Y_H = 0.1558$	$Y_H = 0.1532$	$S_H = 57.1$	$S_H = 33.6$	$W_1 = 0.05$	$W_1 = 4.1316 \cdot 10^6$
$Y_O = 0.1220$	$Y_O = 0.1192$	$S_O = 3.59$	$S_O = 2.44$	$W_2 = -1.96$	$W_2 = -1.7772 \cdot 10^{11}$
$Y_{OH} = 0.0410$	$Y_{OH} = 0.0422$	$S_{OH} = -1.56$	$S_{OH} = -1.12$	$W_3 = 2.15$	$W_3 = 2.0681 \cdot 10^{11}$
$Y_{H_2O} = 0.0199$	$Y_{H_2O} = 0.0217$	$S_{H_2O} = -1.92$	$S_{H_2O} = -1.26$	$W_4 = 0.22$	$W_4 = -1.8340 \cdot 10^{11}$
$Y_{O_2} = 0.0032$	$Y_{O_2} = 0.0033$	$S_{O_2} = -0.05$	$S_{O_2} = -0.03$	$W_5 = 25.6$	$W_5 = -2.9083 \cdot 10^{10}$
$Y_{H_2} = 0.0663$	$Y_{H_2} = 0.0686$	$S_{H_2} = -25.8$	$S_{H_2} = -15.0$	$W_6 = 4.28$	$W_6 = 2.3407 \cdot 10^{10}$
				$W_7 = 1.35$	$W_7 = 0.5680 \cdot 10^{10}$
				$W_8 = -0.004$	$W_8 = -4.1316 \cdot 10^6$

Любопытно, что в этом режиме, кроме замкнутой цепочки реакций $(\{2\} + \{4\} - \{3\})$, с заметными скоростями идут и другие замкнутые цепочки реакций. Скорости зависимых реакций 7, 5 и 3 находятся примерно в соотношении 1:5:37. Это означает, что одновременно с осуществлением одной замкнутой цепочки реакций $(\{4\} + \{6\} - \{7\})$ осуществляются примерно 5 замкнутых цепочек реакций $(\{2\} + \{4\} + \{6\} - \{5\})$ и 37 замкнутых цепочек реакций $(\{2\} + \{4\} - \{3\})$. Скорости независимых реакций 2, 4 и 6 соответствуют этой структуре процесса.

Как показано в §1.14 Главы 1, динамическое равновесие не может возникнуть, если константы равновесия зависимых реакций выражаются через константы равновесия независимых реакций:

$$\begin{aligned} K_3^{eq} &= K_2^{eq} \cdot K_4^{eq}, & K_7^{eq} &= K_4^{eq} \cdot K_6^{eq} \\ K_5^{eq} &= K_2^{eq} \cdot K_4^{eq} \cdot K_6^{eq}, & K_8^{eq} &= K_1^{eq} \cdot K_4^{eq} \cdot K_6^{eq}. \end{aligned} \quad (\text{Б.4})$$

Был проведен расчет, в котором константы скоростей обратных реакций в модели Моретти были подправлены так, чтобы удовлетворить условиям (Б.4):

$$\begin{aligned} K_3^b &= K_3^f \frac{K_2^b \cdot K_4^b}{K_2^f \cdot K_4^f}, & K_7^b &= K_7^f \frac{K_4^b \cdot K_6^b}{K_4^f \cdot K_6^f} \\ K_5^b &= K_5^f \frac{K_2^b \cdot K_4^b \cdot K_6^b}{K_2^f \cdot K_4^f \cdot K_6^f}, & K_8^b &= K_8^f \frac{K_1^b \cdot K_4^b \cdot K_6^b}{K_1^f \cdot K_4^f \cdot K_6^f}. \end{aligned} \quad (\text{Б.5})$$

В результате было получено стационарное состояние системы, совпадающее с классическим химическим равновесием.

Доказательство неосуществимости “динамического” равновесия в системе реакций Моретти при выполнении условий (Б.4)

“Динамическое” равновесие в системе реакций (1.68) реализуется, если с некоторыми скоростями идут замкнутые цепочки реакций $\{2\} + \{4\} - \{3\}$, $\{2\} + \{4\} + \{6\} - \{5\}$, $\{4\} + \{6\} - \{7\}$, $\{1\} + \{4\} + \{6\} - \{8\}$. Пусть скорости зависимых реакций равны $W_3 = -\omega_1$, $W_5 = -\omega_2$, $W_7 = -\omega_3$, $W_8 = -\omega_4$. Потребовав, чтобы источниковые члены обратились в 0, получим, что скорости независимых реакций равны $W_1 = \omega_4$, $W_2 = \omega_1 + \omega_2$, $W_6 = \omega_3 + \omega_4 + \omega_2$, $W_4 = \omega_3 + \omega_4 + \omega_1 + \omega_2$. Расписав скорости реакций подробно, получим:

$$\begin{aligned} W_1 &= W_1^f \left(1 - \frac{\gamma_{OH} \gamma_O}{K_{p1} \gamma_H \gamma_{O_2}} \right) = \omega_4, & W_5 &= W_5^f \cdot \left(1 - \frac{\rho}{K_{p5}} \frac{\gamma_H \gamma_H}{\gamma_{H_2}} \right) = -\omega_2, \\ W_2 &= W_2^f \cdot \left(1 - \frac{\gamma_{OH} \gamma_H}{K_{p2} \gamma_O \gamma_{H_2}} \right) = \omega_1 + \omega_2, & W_6 &= W_6^f \cdot \left(1 - \frac{\rho}{K_{p6}} \frac{\gamma_H \gamma_{OH}}{\gamma_{H_2 O}} \right) = \omega_2 + \omega_3 + \omega_4, \\ W_3 &= W_3^f \cdot \left(1 - \frac{\gamma_H \gamma_{H_2 O}}{K_{p3} \gamma_{OH} \gamma_{H_2}} \right) = -\omega_1, & W_7 &= W_7^f \cdot \left(1 - \frac{\rho}{K_{p7}} \frac{\gamma_O \gamma_H}{\gamma_{OH}} \right) = -\omega_3, \\ W_4 &= W_4^f \cdot \left(1 - \frac{\gamma_O \gamma_{H_2 O}}{K_{p4} \gamma_{OH} \gamma_{OH}} \right) = \omega_1 + \omega_2 + \omega_3 + \omega_4, & W_8 &= W_8^f \cdot \left(1 - \frac{\rho}{K_{p8}} \frac{\gamma_O \gamma_O}{\gamma_{O_2}} \right) = -\omega_4, \end{aligned} \quad (\text{Б.6})$$

Теперь потребуем, чтобы для констант равновесия зависимых реакций выполнялись условия (Б.4). Выразив из (Б.6) константы равновесия, перепишем условия (Б.4) в виде:

$$\left(1 - \frac{\omega_1 + \omega_2}{W_2^f} \right) \left(1 - \frac{\omega_1 + \omega_2 + \omega_3 + \omega_4}{W_4^f} \right) = 1 + \frac{\omega_1}{W_3^f} \quad (\text{Б.7})$$

$$\left(1 - \frac{\omega_1 + \omega_2}{W_2^f} \right) \left(1 - \frac{\omega_1 + \omega_2 + \omega_3 + \omega_4}{W_4^f} \right) \left(1 - \frac{\omega_2 + \omega_3 + \omega_4}{W_6^f} \right) = 1 + \frac{\omega_2}{W_5^f} \quad (\text{Б.8})$$

$$\left(1 - \frac{\omega_1 + \omega_2 + \omega_3 + \omega_4}{W_4^f}\right) \left(1 - \frac{\omega_2 + \omega_3 + \omega_4}{W_6^f}\right) = 1 + \frac{\omega_3}{W_7^f} \quad (\text{Б.9})$$

$$\left(1 - \frac{\omega_4}{W_1^f}\right) \left(1 - \frac{\omega_1 + \omega_2 + \omega_3 + \omega_4}{W_4^f}\right) \left(1 - \frac{\omega_2 + \omega_3 + \omega_4}{W_6^f}\right) = 1 + \frac{\omega_4}{W_8^f} \quad (\text{Б.10})$$

Система (Б.7)–(Б.10) – это система нелинейных уравнений для скоростей зависимых реакций ω_i . Она допускает тривиальное решение, соответствующее классическому химическому равновесию – $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = \omega_4 = 0$. Докажем, что нетривиальных решений нет, т.е. “динамическое” равновесие невозможно.

Из (Б.6) следует, что каждая из скобок в левых частях, а также каждая правая часть в (Б.7)–(Б.10) – неотрицательные числа. Будем далее называть числа a, b числами одного знака, если $a \cdot b \geq 0$, и числами противоположного знака, если $a \cdot b \leq 0$. Легко убедиться, что если все знаки всех скоростей $\omega_i, i = 1, 2, 3, 4$ одинаковы, то в каждом из равенств (Б.7)–(Б.10) одна из частей не меньше 1, а другая – не больше 1. Равенство возможно, только если $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = \omega_4 = 0$. Значит, знаки всех $\omega_i, i = 1, 2, 3, 4$ не могут быть одинаковы.

Преобразуем (Б.10), используя (Б.9):

$$\left(1 - \frac{\omega_4}{W_1^f}\right) \left(1 + \frac{\omega_3}{W_7^f}\right) = 1 + \frac{\omega_4}{W_8^f}. \quad (\text{Б.11})$$

Если $\omega_4 \geq 0$, то $1 + \frac{\omega_4}{W_8^f} \geq 1$. Т.к. $1 - \frac{\omega_4}{W_1^f} \in (0; 1]$, то для выполнения (Б.11) необходимо, чтобы $\omega_3 \geq 0$. Аналогично, в случае $\omega_4 \leq 0$ получим $\omega_3 \leq 0$. Следовательно, $\omega_3 \cdot \omega_4 \geq 0$.

Из (Б.8), используя (Б.9), получим:

$$\left(1 - \frac{\omega_1 + \omega_2}{W_2^f}\right) \left(1 + \frac{\omega_3}{W_7^f}\right) = 1 + \frac{\omega_2}{W_5^f} \quad (\text{Б.12})$$

Если $\omega_2 \cdot \omega_3 \leq 0$, то из (Б.12) следует, что $-(\omega_1 + \omega_2)$ и ω_2 должны быть одного знака и, как следствие, $-(\omega_1 + \omega_2)$ и ω_3 – противоположного знака:

$$\begin{cases} -(\omega_1 + \omega_2) \cdot \omega_2 \geq 0 \\ -(\omega_1 + \omega_2) \cdot \omega_3 \leq 0 \\ \omega_2 \omega_3 \leq 0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} 0 \leq \omega_2^2 \leq -\omega_1 \omega_2 \\ -\omega_1 \omega_3 \leq \omega_2 \omega_3 \leq 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} |\omega_2| \leq |\omega_1| \\ \omega_1 \omega_3 \geq 0 \\ \omega_1 \omega_2 \leq 0 \end{cases}$$

Если же ω_2 и ω_3 одного знака, то из того, что знаки всех $\omega_i, i = 1, 2, 3, 4$ не могут быть одинаковы, следует, что $\omega_1 \omega_3 \leq 0$ и $\omega_1 \omega_2 \leq 0$.

Получаем всего 2 возможных варианта нетривиального решения:

I вариант: ω_2 отличается по знаку от $\omega_1, \omega_3, \omega_4$ и $|\omega_2| \leq |\omega_1|$. Из последнего неравенства следует, что знаки $(\omega_1 + \omega_2)$ и ω_1 совпадают. Тогда для выполнения (Б.7) необходимо, чтобы $(\omega_1 + \omega_2 + \omega_3 + \omega_4)$ было противоположно по знаку ω_1 . Но $(\omega_1 + \omega_2)$, ω_3 и ω_4 одного знака с ω_1 , а значит и их сумма $(\omega_1 + \omega_2 + \omega_3 + \omega_4)$ одного знака с ω_1 . Это возможно, только если $(\omega_1 + \omega_2 + \omega_3 + \omega_4) = \omega_1 = 0$. Тогда из (Б.7) следует, что и $\omega_2 = 0$. А из (Б.9), $\omega_3 = 0 \Rightarrow \omega_4 = 0$. Значит, нетривиальных решений в этом случае нет.

II вариант: ω_1 отличается по знаку от $\omega_2, \omega_3, \omega_4$. Тогда, т.к. $(\omega_2 + \omega_3 + \omega_4)$ и ω_4 — одного знака, то для выполнения (Б.10) необходимо, чтобы знак суммы $(\omega_1 + \omega_2 + \omega_3 + \omega_4)$ совпадал со знаком ω_1 . Значит, $|\omega_1| \geq |\omega_2| + |\omega_3| + |\omega_4|$. Тогда для выполнения (Б.7) необходимо, чтобы $(\omega_1 + \omega_2)$ было противоположно по знаку ω_1 . Значит, $|\omega_2| \geq |\omega_1|$. Но тогда выполнение неравенства $|\omega_1| \geq |\omega_2| + |\omega_3| + |\omega_4|$ возможно только когда $|\omega_3| = |\omega_4| = 0, \omega_2 = -\omega_1$. Тогда из (Б.7) следует, что и $\omega_1 = 0$, а значит и $\omega_2 = 0$. Значит, нетривиального решения нет и в этом случае.

Итак, единственным решением системы (Б.7)–(Б.10) является классическое химическое равновесие ($\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = \omega_4 = 0$).

Из этих доказательств следует, что при выполнении условий (Б.4) “динамическое” равновесие не может возникнуть не только в случае $p, T = const$, но вообще никогда.