

УДК 544.45

На правах рукописи



Лю Вэнъчо

**ВЛИЯНИЕ МОДЕЛИ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ НА РЕЗУЛЬТАТЫ
ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ
ТУРБУЛЕНТНЫХ ТЕЧЕНИЙ С ГОРЕНИЕМ**

Специальность: 1.1.9 — механика жидкости, газа и плазмы

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Долгопрудный – 2023

Работа выполнена в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)».

Научный руководитель: **Власенко Владимир Викторович**,
доктор физико-математических наук, доцент,
ФАУ «Центральный аэрогидродинамический институт имени профессора Н.Е. Жуковского», заместитель начальника Лаборатории физического и численного моделирования течений с турбулентностью и горением (Лаборатория №14 НИО-1 ЦАГИ), профессор кафедры компьютерного моделирования ИАЛТ ФАКТ МФТИ.

Официальные оппоненты: **Федорова Наталья Николаевна**,
доктор физико-математических наук, профессор,
ФГБУН «Институт теоретической и прикладной механики имени С.А. Христиановича Сибирского отделения РАН», ведущий научный сотрудник лаборатории № 12 «Волновые процессы в ультрадисперсных средах».

Лебедев Александр Борисович,
кандидат физико-математических наук, ФАУ «Центральный институт авиационного моторостроения имени П.И. Баранова», ведущий научный сотрудник Отдела 600 «Неравновесные физико-химические процессы в газовых потоках и в элементах реактивных двигателей».

Ведущая организация: ФГБУН «Федеральный исследовательский центр химической физики имени Н.Н. Семёнова Российской академии наук».

Защита состоится «14» сентября 2023 г. в 15 часов на заседании диссертационного совета 24.1.224.02, созданного на базе ФГУ «Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук» (ФИЦ ИУ РАН) по адресу: 119333, Москва, ул. Вавилова, д. 40, конференц-зал.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФИЦ ИУ РАН по адресу: 119333, Москва, ул. Вавилова, д. 42, а также на сайте организации <http://www.frccsc.ru>.

Автореферат разослан «___» ____ 2023 г.

Учёный секретарь
диссертационного совета 24.1.224.02,
кандидат физико-математических наук

В.И. Никонов

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследования. Горение в различных энергетических устройствах (двигателях внутреннего сгорания, газотурбинных установках, авиационных двигателях и др.) – сложный процесс, включающий взаимодействие тепловыделения, молекулярного и конвективного переноса с турбулентностью. Численное моделирование таких течений имеет большое практическое значение. Из-за огромных вычислительных затрат при расчете трехмерных течений с горением приходится использовать упрощенные модели кинетики, что приводит к погрешностям и может влиять на структуру течения и на характеристики энергетических устройств. Поэтому исследование взаимодействия модели кинетики с другими математическими моделями (турбулентности и турбулентного горения) важно для правильного воспроизведения физических процессов в расчетах.

Степень разработанности темы. Разработано множество моделей горения водорода и углеводородов в воздухе. Разработаны различные модели для описания влияния турбулентности на средние скорости реакций. Вопрос о влиянии модели кинетики на результаты расчета течений с горением изучен недостаточно. Взаимодействие кинетики с моделью турбулентного горения почти не изучено.

Цель работы: на примере моделирования двух классических экспериментов по высокоскоростному неперемешанному и низкоскоростному перемешанному турбулентному горению в каналах проанализировать влияние модели химической кинетики на структуру и характеристики течения, получаемые при численном моделировании данных классов течений.

Для достижения данной цели решены следующие задачи:

1. Изучены и реализованы в собственной программе различные методы определения скорости и структуры ламинарного пламени в предварительно перемешанной смеси. Исследованы влияние химической кинетики и на время задержки воспламенения в реакторе постоянного давления, а также влияние химической кинетики и модели молекулярной диффузии на структуру и скорость распространения ламинарного пламени.
2. Проанализированы факторы, определяющие структуру течения с высокоскоростным неперемешанным турбулентным горением водорода в экспери-

ментальной модели ONERA LAPCAT II. Обеспечено согласование с экспериментальными данными по распределениям давления. После этого сравняны и проанализированы результаты расчетов с различными моделями химической кинетики.

3. Проанализированы факторы, определяющие структуру течения с дозвуковым предварительно перемешанным турбулентным горением в экспериментальной модели ONERA с обратным уступом. Обеспечено согласование с экспериментальными данными по профилям температуры и продольной скорости. После этого сравнены и проанализированы результаты расчетов с различными моделями химической кинетики.

Научная новизна работы состоит в том, что:

1. Впервые исследовано влияние кинетической модели горения водорода в воздухе на распределение статического давления и тепловых потоков по стенкам канала, на трехмерную структуру течения и на полноту сгорания в экспериментальной модели ONERA LAPCAT II.
2. Впервые дано объяснение причин, по которым модель турбулентного горения PaSR более точно описывает турбулентное диффузионного предварительно перемешанное пламя при использовании глобальных, а не многостадийных кинетических механизмов.
3. Впервые проведён анализ влияния модели молекулярной диффузии на структуру течения в расширяющемся канале с шероховатостью.

Теоретическая значимость заключается в том, что для двух классов задач (высокоскоростное неперемешанное горение в канале без стабилизаторов горения и низкоскоростное перемешанное горение со стабилизатором горения - уступом) выявлены механизмы взаимодействия химической кинетики с другими физическими процессами, которые оказывают существенное влияние на структуру течения. Даны рекомендации по выбору модели химической кинетики при использовании модели турбулентного горения PaSR.

Практическая значимость работы заключается в том, что описан успешный опыт настройки расчета и модификации математической модели течения при использовании коммерческого пакета ANSYS FLUENT.

Личный вклад автора. Разработка программы для моделирования распространения ламинарного пламени; построение геометрий и расчетных сеток; настройка расчетов и модификация моделей течения в ANSYS FLUENT; проведение расчетов; обработка и анализ данных экспериментов и расчетов.

Методология и метод исследования. Основная часть исследования выполнена на основе численного решения системы нестационарных, осреднённых по времени уравнений Навье-Стокса (URANS) для многокомпонентного газа с неравновесными реакциями. Использовался коммерческий пакет вычислительной аэродинамики ANSYS FLUENT. Аппроксимация уравнений выполнена на основе метода конечного объема и имеет 2-й порядок по пространству. Для каждой задачи сначала проводился поиск физических факторов (помимо химической кинетики), которые наиболее сильно влияют на структуру решения, и достигалось наилучшее согласование с данными эксперимента. Затем сравнивались расчеты с разными моделями кинетики, и анализировались причины различия результатов.

Достоверность результатов обосновывается сопоставлением полученных численных результатов с опубликованными в научной литературе детальными экспериментальными данными и расчетами других авторов, а также сопоставлением результатов расчетов на разных сетках и расчетов с использованием различных моделей турбулентности, химической кинетики и турбулентного горения.

На защиту выносятся:

- Результаты численного моделирования высокоскоростного турбулентного горения водорода в экспериментальной модели ONERA LAPCAT II с использованием пакета ANSYS FLUENT, в том числе:
 - а) вывод о том, что при моделировании высокоскоростного горения в канале с преобладающей ролью самовоспламенения модель химической кинетики мало влияет на распределение давления по стенкам канала, но оказывает значительное влияние на трехмерную структуру течения, на распределение тепловых потоков по стенкам канала, а также влияет на полноту сгорания топлива;
 - б) демонстрация слабого влияния модели молекулярной диффузии на структуру течения в экспериментальной модели;

- Результаты численного моделирования низкоскоростного турбулентного горения метана в экспериментальной модели ONERA с обратным уступом с использованием пакета ANSYS FLUENT, в том числе:
 - а) объяснение причин, по которым модель турбулентного горения PaSR более точно описывает турбулентное диффузионного предварительно перемешанное пламя при использовании глобальных, а не многостадийных кинетических механизмов;
 - б) настройка эмпирического коэффициента в модели турбулентного горения PaSR при использовании этой модели в сочетании с моделью турбулентности BSL k-ω Ментера.

Соответствие паспорту специальности 1.1.9. В работе на основе механики сплошной среды исследуются процессы и явления из следующих областей: 4. Ламинарные и турбулентные течения; 5. Течения сжимаемых сред и ударные волны; 9. Физико-химическая гидромеханика (течения с химическими реакциями, горением и др.); 12. Пограничные слои, слои смешения, течения в следе; 19. Точные, асимптотические, приближенные аналитические, численные и комбинированные методы исследования уравнений континуальных и кинетических моделей однородных и многофазных сред.

Апробация работы. Результаты работы прошли апробацию на 5 международных и отраслевых конференциях:

- 1) The 1st International Aerospace Symposium «The Silk Road», 2018, Moscow;
- 2) 13-я конференция по горению и взрыву, 2020 г. ФИЦ ХФ РАН, Москва;
- 3) The 21st International Conference on the Methods of Aerophysical Research (ICMAR 2022), 2022, Novosibirsk;
- 4) 16-я конференция по горению и взрыву, 2023 г., ФИЦ ХФ РАН, Москва;
- 5) Научный семинар кафедры информатики МФТИ под председательством члена-корр. РАН И.Б.Петрова, 20 апреля 2023 г., МФТИ, г.Долгопрудный.

Основные результаты работы **получены автором лично** и опубликованы в 4 печатных работах, 2 из которых – в журнале из списка ВАК [1-2], 1 - в журнале из базы данных Scopus [3] и 1 – в журнале из списка ВАК и базы данных RSCI [4].

Структура и объем диссертации. Текст диссертации включает в себя 154 страницы (основной текст – 147 страниц и 2 приложения на 7 страницах), 80 иллюстраций, 14 таблиц и ссылается на 161 источник литературы.

Данная диссертационная работа выполнена при финансовой поддержке Китайского стипендиального совета (договор № 201606120286).

Содержание диссертации

Работа содержит Введение, 4 Главы, Заключение, Список использованных источников и 2 Приложения.

Во **Введении**, помимо формальной части, дан обзор научной литературы по теме диссертации. Рассмотрены 4 основных типа моделей химической кинетики: *детальные, скелетные, редуцированные и глобальные*. *Детальные механизмы горения водорода в воздухе* (без реакций с участием атомов N и C) обычно содержат около 20 реакций между 9 компонентами. Детальные механизмы для углеводородов включают сотни компонент и тысячи реакций. *Скелетные механизмы* получаются путем исключения несущественных для условий задачи веществ и реакций; для углеводородов они включают десятки компонент и сотни реакций. *Редуцированные кинетические схемы* получаются с помощью методов квазистационарного состояния и квазиравновесных реакций. Самыми компактными (но и наиболее узкими по применимости) являются *глобальные кинетические схемы* – небольшой набор брутто-реакций, заменяющих целые этапы реального процесса. *Квазиглобальными* в диссертации называются модели кинетики, в которых одна или несколько глобальных реакций дополнены элементарными реакциями.

В научных исследованиях и в цикле аэродинамического проектирования неизбежно использование коммерческих пакетов вычислительной аэродинамики, т.к. 1) в них реализован широкий набор физических моделей; 2) они обладают интерфейсом, понятным для инженеров; 3) такие программы способны сохранять устойчивость в автоматическом режиме при возникновении нефизичного поведения решения. Поэтому опыт анализа турбулентных течений с горением на базе коммерческих программ актуален. Основные результаты диссертации, описанные в Главах 3 и 4, получены с использованием пакета ANSYS FLUENT.

Далее дан обзор предыдущих работ по теме диссертации. Рассмотрены работы, где показано влияние кинетики горения водорода в воздухе на результаты моделирования различных экспериментов (Evans & Schexnayder, 1980; Gerlinger et al, 2008; Berglund et al, 2010; Fureby et al, 2014; Ширяева и др., 2014; Liu et al, 2019; Fureby, 2021, Соломатин и др., 2022). Приведены примеры аналогичных работ по влиянию модели кинетики горения углеводородных топлив в воздухе (Salvador B.R., 2020; Власенко и др., 2015, 2018). Сделаны следующие выводы: 1) выбор кинетической схемы может играть определяющую роль в результатах расчета течений; 2) механизмы кинетики водорода с 9 компонентами (с учетом пероксидов HO_2 и H_2O_2) более предпочтительны для предсказания самовоспламенения, чем механизмы без пероксидов; 3) глобальные модели слишком чувствительны к режиму течения и обычно неприменимы к описанию сложных течений; 4) различные детальные механизмы могут давать различную структуру пламени, даже если они предсказывают близкие значения задержки воспламенения и скорости ламинарного пламени; 5) разные химические механизмы могут требовать различное сеточное разрешение для достижения одинаковых полей течения.

В Главе 1 описана математическая постановка задачи. В расчетах решались нестационарные осреднённые по Рейнольдсу уравнения Навье-Стокса (URANS - Unsteady RANS) для реагирующего многокомпонентного сжимаемого газа:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} &= 0, \\ \frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i u_j)}{\partial x_j} &= -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tau_{ij} + \rho R_{ij}), \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_j E)}{\partial x_j} &= -\frac{\partial (p u_j)}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} [u_i (\tau_{ij} + \rho R_{ij}) + q_j + \rho \sigma_j + Q_j (Y_k) + J_j(k)], \\ \frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_j Y_k)}{\partial x_j} &= -\frac{\partial J_j(Y_k)}{\partial x_j} + S_k. \end{aligned} \quad (1)$$

В системе уравнений (1) t – время; $x_j (j = 1, 2, 3)$ – декартовы координаты; ρ – плотность; u_j – компоненты вектора скорости; $p = \rho R_0 T \sum_k Y_k / m_k$ – давление; Y_k – массовая доля k -го компонента смеси; $R_0 \approx 8.314 \text{ Дж} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$ – универсальная газовая постоянная; T – температура; m_k – молекулярный вес k -го ком-

понента; $E = \frac{1}{2}u_i u_i + k + \sum_k Y_k h_k(T) - \frac{p}{\rho}$ – полная энергия единицы массы газа, где k – кинетическая энергия турбулентности; $h_k(T) = \Delta h_{f,k}^0 + \int_{T_0}^T c_{p,k}(T) dT$ – энталпия k -го компонента (включая энталпии образования $\Delta h_{f,k}^0$), $\tau_{ij} = 2\mu(S_{ij} - S_{mm}\delta_{ij}/3)$ – тензор вязких напряжений; $S_{ij} = \frac{1}{2}(\partial u_i / \partial x_j + \partial u_j / \partial x_i)$ – тензор скоростей деформации; $q_j = \lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} \approx \frac{\mu c_p}{Pr} \frac{\partial T}{\partial x_j}$ – молекулярные потоки тепла; $\rho\sigma_j \approx \frac{\mu_t c_p}{Pr_t} \frac{\partial T}{\partial x_j}$ – турбулентные потоки тепла, где турбулентное число Прандтля $Pr_t = 0.9$, $c_p = \sum_k Y_k c_{p,k}(T)$ – удельная теплоемкость единицы массы газовой смеси при $p = const$; $Q_j(Y_k) = \sum_k h_k(T) J_j(Y_k)$ – суммарный диффузационный поток тепла, обусловленный неоднородностью полей массы различных компонент смеси; $J_j(Y_k) \approx \left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial Y_k}{\partial x_j}$ – выражения для суммарных диффузационных потоков массы k -го компонента смеси; $\rho R_{ij} = -\overline{\rho u_i'' u_j''} \approx 2\mu_t(S_{ij} - S_{mm}\delta_{ij}/3) - 2\rho k \delta_{ij}/3$ – тензор напряжений Рейнольдса; $J_j(k) = \overline{\tau_{ij} u_i''} - \overline{\rho u_i'' u_j''}/2 \approx (\mu + \mu_t/\sigma_k) \partial k / \partial x_j$ – диффузационный поток кинетической энергии турбулентности; S_k – источник массы k -го компонента смеси за счет химических реакций. Набор химических компонент и набор химических реакций определяется моделью кинетики.

Для замыкания системы уравнений (1), помимо модели химической кинетики и выражений для коэффициентов молекулярного переноса, необходимы модель турбулентности и модель турбулентного горения.

В диссертации используются модели турбулентности класса $k - \omega$, основанные на гипотезе Буссинеска. В этом случае для определения турбулентных потоков достаточно задать среднюю кинетическую энергию турбулентности k и турбулентную вязкость μ_t . В моделях класса $k - \omega$ турбулентная вязкость рассчитывается по формуле $\mu_t = \rho F_\mu k / \omega$, где ω – характерная частота турбулентных пульсаций скорости, а F_μ – пристеночная функция, равная 1 в свободной турбулентности. Для определения параметров k и ω решаются дополнительные дифференциальные уравнения в частных производных. В Главе 3 используется модель турбулентности SST (Menter, 1994), в которой $F_\mu = \min(1; 0.31\omega / (SF_2))$,

$S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}$ – характерная величина сдвиговой деформации, а функция F_2 равна единице на твердых стенках и стремится к нулю вдали от стенок. В Главе 4 используется также модель BSL $k - \omega$ (Menter, 1994), в которой $F_\mu \equiv 1$.

Модель турбулентного горения описывает взаимодействие турбулентности с горением (Turbulence-Combustion Interaction, TCI). В настоящей работе рассмотрены модели учета влияния турбулентных пульсаций на средние скорости реакций (т.е. способ вычисления среднего по времени значения химического источника k -го компонента смеси $S_k = \overline{S_k(\rho + \rho', T + T'', Y_1 + Y_1'', \dots, Y_N + Y_N'')}$). Согласно выводам А.А.Ширяевой (2018), если горение протекает преимущественно в сверхзвуковом режиме (Глава 3 диссертации), то эффекты TCI не играют определяющей роли. Тогда можно использовать *квазиламинарное приближение*:

$$S_k \approx S_k(\rho, T, Y_1, \dots, Y_N). \quad (2)$$

В Главе 4 диссертации эффекты TCI существенны, и используются модели TCI класса PaSR (Partially Stirred Reactor). В моделях PaSR ячейки сетки разделяются на “тонкие структуры”, где идет горение, и окружающее пространство, где горения нет. “Тонкие структуры” рассматриваются как реакторы; диффузия подводит к ним исходные вещества и отводит продукты реакции и тепло. Базовые модели класса PaSR (EDC Магнуссена и PaSR Хомяка и Карлссона) предполагают, что процессы в “тонких структурах” протекают квазистационарно. Поэтому средний химический источник находится из системы алгебраических уравнений

$$S_k \approx \gamma^* S_k(\rho^*, T^*, Y_1^*, \dots, Y_N^*), \quad S_k(\rho^*, T^*, Y_1^*, \dots, Y_N^*) = \rho^* \frac{Y_k^* - Y_k^0}{\tau_*}. \quad (3)$$

Здесь верхний индекс * соответствует “тонким структурам”, индекс 0 – окружающему пространству. τ^* – характерное время пребывания газа в “тонких структурах”, а γ^* – их объемная доля. В модели EDC (Magnussen, 1981) $\gamma^* = 9.7 \left(\mu \varepsilon / (\rho k^2) \right)^{3/4}$, $\tau^* = 0.41 \sqrt{\mu / (\rho \varepsilon)}$, где $\varepsilon = 0.09k\omega$ – скорость диссипации кинетической энергии турбулентности. В модели PaSR (Chomiak, Karlsson, 1996)

$$\gamma^* = \frac{\tau_{xum}}{\tau_{xum} + \tau_*}, \quad \tau^* = C_\tau \sqrt{\frac{k}{\varepsilon} \cdot \sqrt{\frac{\mu}{\rho \varepsilon}}}, \quad (4)$$

где $\tau_{x_{\text{хим}}}$ – характерный масштаб времени химических процессов.

Наиболее важные характеристики модели химической кинетики - время задержки воспламенения при локальном горении $\tau_{u_{\text{нод}}}$ и характеристики ламинарного пламени, распространяющегося по предварительно перемешанной горючей смеси за счет переноса тепла. Характеристики ламинарного пламени определяют турбулентное горение перемешанной смеси, т.к. сильно искривленное за счет турбулентности пламя в первом приближении локально распространяется по ламинарному механизму. При расчете перемешанного турбулентного горения по модели PaSR можно принять $\tau_{x_{\text{хим}}} \sim \delta_f / S_f$, где δ_f и S_f - толщина фронта и скорость одномерного ламинарного пламени. Поэтому в **Главе 2** с использованием собственной программы решена вспомогательная задача об одномерном распространении ламинарного пламени. При этом исследованы кинетические механизмы, которые далее применяются для решения основных задач диссертации.

Распространение ламинарного пламени трудно описать уравнениями Навье-Стокса, т.к. в задаче возникают акустические волны, которые движутся гораздо быстрее, чем ламинарное пламя, отражаются от границ расчетной области и формируют “шум”, искажающий распространение пламени. Для устранения этого “шума” можно положить $p = \text{const}$ в одномерных уравнениях Навье-Стокса:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [\rho u h] = \frac{\partial}{\partial x} \left[\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\sum_{k=1}^{N_{\text{sp}}} h_k \cdot \rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x} \right], \\ \frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [\rho u Y_k] = \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x} \right] + S_k, \end{array} \right. \quad (5)$$

где $h = \sum_k Y_k h_k(T)$. Задача – найти стационарное решение (5) в системе покоя пламени. Если “L” и “R” соответствуют холодной и горячей сторонам пламени, то

скорость пламени равна $S_f = u_L = \left[\rho_L ((Y_k)_R - (Y_k)_L) \right]^{-1} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} S_k dx$. Интересно лишь

стационарное решение задачи, поэтому переходный процесс можно описать неточно. Потребуем, чтобы стационарное уравнение сохранения массы

$\rho u = \rho_L u_L = const$ выполнялось поперек всего пламени на каждом шаге по времени. Тогда распределение скорости потока будет таким:

$$u(x) = S_f \rho_L / \rho(x). \quad (6)$$

На рис. 1,а представлена структура метано-воздушного ламинарного пламени, рассчитанная по глобальному механизму BFER2 (B.Franzelli et al., 2012). Полученная автором зависимость скорости пламени от коэффициента избытка топлива при $T_L=300\text{K}$, $p_L=1\text{атм}$ близка к экспериментальным данным (рис. 2).

Для исследования влияния модели кинетики, в тех же условиях был испытан квазиглобальный механизм горения метана в воздухе с 6 компонентами и 4 реакциями “Фролов4” (В. Я. Басевич, А. А. Беляев, С. М. Фролов, 1998). Оказалось, что при его использовании стационарная формула (6) приводит к нефизичному решению из-за постепенного накопления ошибок в составе смеси.

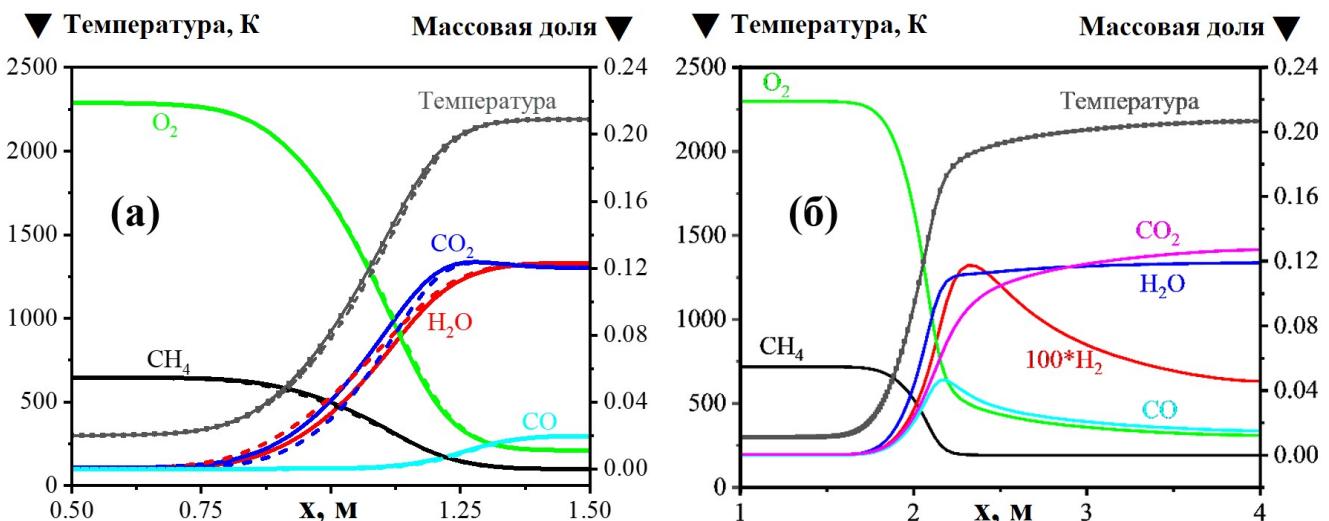


Рисунок 1 – Одномерная структура метано-воздушного пламени: (а) кинетика BFER2: сплошная линия – упрощенный подход ($Pr=0.7$, $Sc=0.7$), пунктирные линии – детальная теория диффузии; (б) кинетика Фролов4, упрощенный подход

Поэтому рассмотрен метод Сполдинга (1971). Для исключения из (5) конвективных членов вводится функция тока $\psi(x,t)$, определяемая соотношениями $\partial\psi/\partial x=\rho$, $\partial\psi/\partial t=-\rho u$. Тогда система (5) приводится к виду:

$$\begin{cases} \frac{\partial h}{\partial t} = \rho \frac{\partial}{\partial \psi} \left[\frac{\mu C_p}{Pr} \frac{\partial T}{\partial \psi} \right] + \rho \frac{\partial}{\partial \psi} \left[\sum_{k=1}^{N_{sp}} h_k \frac{\mu}{Sc} \frac{\partial Y_k}{\partial \psi} \right], \\ \frac{\partial Y_k}{\partial t} = \rho \frac{\partial}{\partial \psi} \left[\frac{\mu}{Sc} \frac{\partial Y_k}{\partial \psi} \right] + \frac{S_k}{\rho}. \end{cases} \quad (7)$$

Затем ламинарное пламя при $T_L=300\text{K}$, $p_L=1\text{атм}$, коэффициенте избытка топлива $\varphi = 1.0$ было рассчитано по механизму Фролов4. Благодаря подходу (7) была получена нормальная структура пламени – см. рис. 1,б.

На рис. 2 полученные зависимости скорости ламинарного пламени от φ сравниваются с экспериментом.

В написанной автором программе реализованы различные способы описания молекулярной диффузии тепла и массы. Модели диффузии сильнее влияют на распределение продуктов сгорания (CO_2 , H_2O) - рис. 1,а.

Упрощенный подход (одинаковые коэффициенты диффузии и теплопроводности для всех компонентов) завышает скорость ламинарного пламени метана в воздухе по сравнению с детальной теорией диффузии до 8.69% (рис. 2). Также рассмотрен скелетный механизм с 25 реакциями между 16 компонентами (“Smooke25”). Модели кинетики горения метана в воздухе BFER2, Фролов4 и Smooke25 правильно предсказывают скорость ламинарного пламени при $\varphi = 0.7 – 1.0$ (рис. 2).

В Главе 3 с использованием ANSYS FLUENT в рамках уравнений URANS (1) выполнено численное моделирование эксперимента, проведенного ONERA в рамках проекта LAPCAT II, где исследовалось горение водорода, подаваемого со стенок канала экспериментальной модели в сверхзвуковой поток воздуха, нагретый в огневом подогревателе и содержащий продукты сгорания (рис.3).

В эксперименте происходит самовоспламенение, поэтому модель кинетики должна предсказывать время задержки воспламенения $\tau_{инд}$. Рассмотрены три модели горения водорода в воздухе: детальная модель Яхимовского с 19 реакциями и 9 компонентами, детальная модель Зеттервала и Фюргби (22 реакции, те же 9

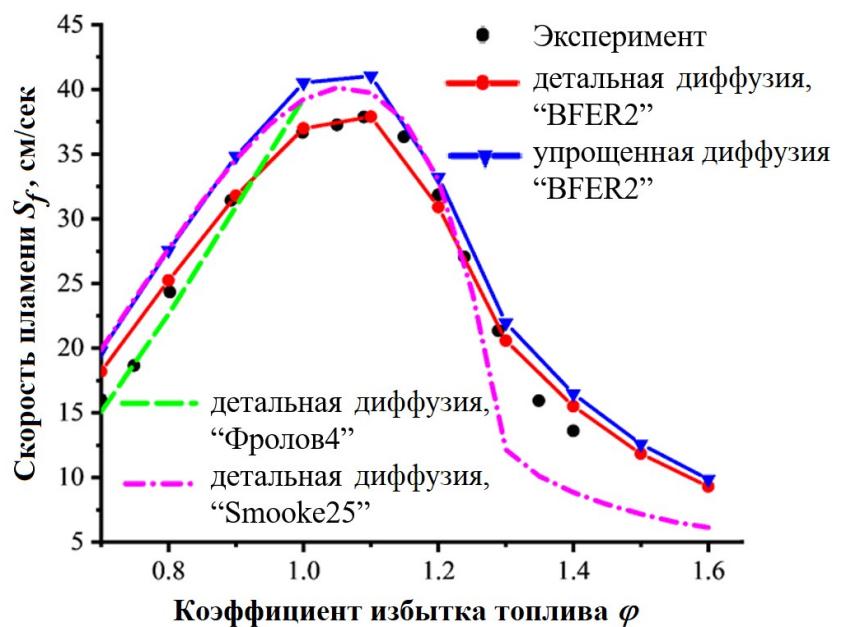


Рисунок 2 – Скорость ламинарного пламени метана в воздухе: сравнение расчетов с экспериментом

компонентов), и упрощенная модель Яхимовского (7 реакций, 7 веществ - без пероксидов HO_2 и H_2O_2). При $T_{\text{нач}} > 1000\text{K}$ все модели дают $\tau_{\text{инд}}$, близкое к эксперименту, а Зеттервалл лучше предсказывает $\tau_{\text{инд}}$ при $T_{\text{нач}} < 1000\text{K}$. В расчетах Главы 3 использовалась модель турбулентности SST, а эффекты TCI не учитывались.

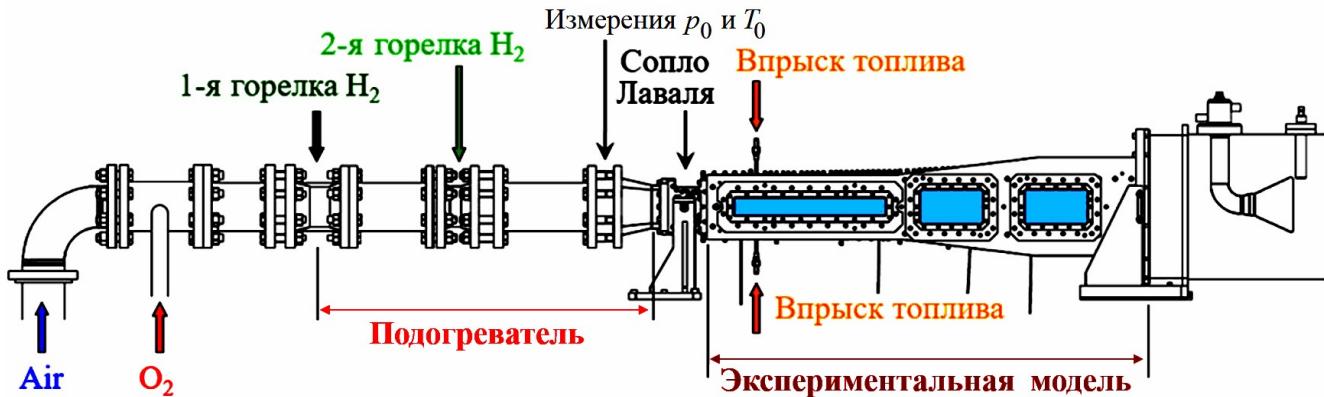


Рисунок 3 – Схема эксперимента ONERA LAPCAT II

Рассматривается режим работы подогревателя с параметрами торможения $p_0 \approx 4$ атм., $T_0 \approx 1700$ К. Расчеты подогревателя по моделям кинетики Яхимовский7 и Яхимовский19 дали почти одинаковые поля основных параметров течения. На рис. 4 показаны полученные поля статической температуры (а, б) и массовой доли радикала OH (в, г) в подогревателе. Верхние рисунки (а, в) получены по модели Яхимовский7, нижние (б, г) – по модели Яхимовский19. Поля температуры близки. Но поля массовой доли OH существенно отличаются. Более достоверными следует считать данные, полученные по кинетике Яхимовский-19.

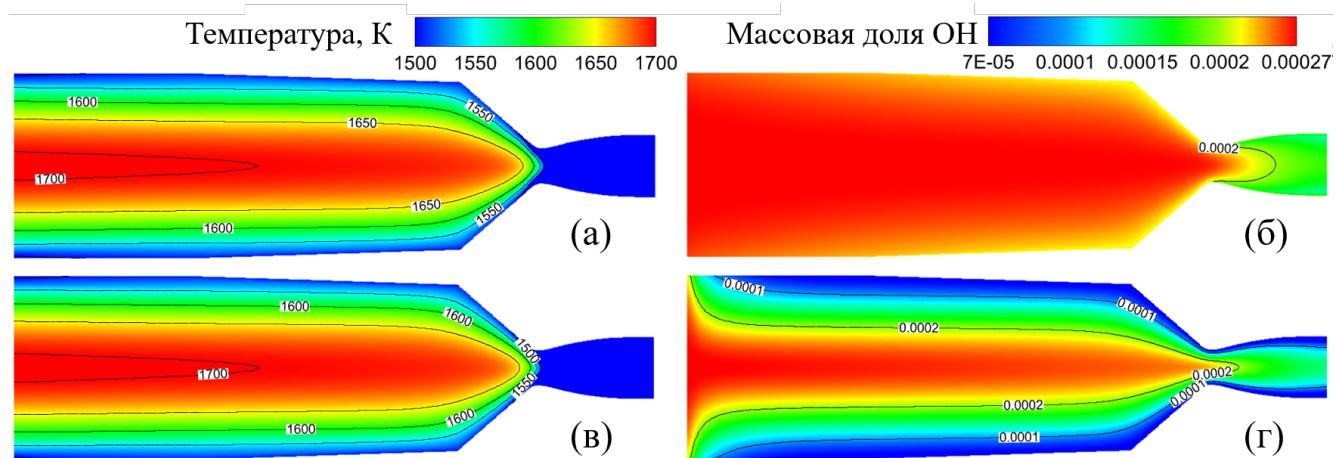


Рисунок 4 – Полученные в расчетах поля течения в подогревателе: (а), (б) – поля температуры, (в), (г) – поля массовой доли OH; (а), (в) – расчеты с 7 реакциями, (б), (г) – расчеты с 19 реакциями; показаны изолинии параметров

Химически активные радикалы (в том числе OH) определяют путь реакции. Поэтому на входе в канал модели ONERA в расчетах с любыми моделями кинетики задавались поля течения из расчета подогревателя по модели Яхимовский19.

Для рассмотренного режима на входе в канал модели ONERA в невязком ядре потока число Маха $M \approx 2$, температура $T \approx 1080K$, давление $p \approx 0.546$ атм. Расходы топлива и подогретого воздуха соответствуют $\varphi = 0.153$. В этом режиме наблюдалось сверхзвуковое горение, индуцированное ударными волнами. Согласно оценкам, проведенным в ONERA, температура стенок близка к $T_w = 716$ К.

На стенки канала было нанесено жаростойкое покрытие. В расчетах Pelletier (ONERA) было показано, что учет шероховатости стенок канала необходим для согласования с экспериментом. Поэтому в расчетах автора использовалась модель шероховатости для SST, предложенная В.Аироих (2015). В качестве характерного размера шероховатости h_s в этой модели задается *эквивалентный диаметр песчинки*. В ONERA при помощи электронного микроскопа было установлено, что высота шероховатости ~ 100 мкм. Авторы работы (Pelletier et al, 2021) рекомендуют задавать $h_s = 65$ мкм. Однако в аналогичных расчетах ЦАГИ (Сабельников и др., 2021) и автора (зеленая линия на рис. 5,а) при $h_s = 65$ мкм максимум давления получился гораздо ниже по течению, чем в эксперименте.

В работе [Сабельников и др., 2021] показано, что сильнее всего на положение пика давления влияют температура и шероховатость стенок. В настоящей диссертации проверено также влияние точности описания молекулярной диффузии. Сопоставлены расчеты с использованием детальной теории диффузии и упрощенного подхода (см. выше) при $h_s=65$ мкм, $T_w = 716$ К. Полученные распределения давления показаны в рис. 5,а (зеленая и красная линия). Видно, что влияние способа описания молекулярной диффузии оказалось незначительным.

В работе [Сабельников и др., 2021] для достижения правильного положения максимума давления при использовании $h_s=65$ мкм температура стенок была увеличена до $T_w = 1413$ К. Но проведённые позднее в ЦАГИ оценки прогрева стенок показали, что за время эксперимента температура стенок не могла стать больше 850 К. Тогда высота шероховатости - единственный параметр, существенно

влияющий на положение пика давления. В работе [Volino et al., 2022] сделан вывод, что при использовании условия Aupoix h_s следует рассматривать как настроенный параметр, который должен обеспечить правильное трение на стенке. Автор диссертации выполнил расчеты при $T_w = 716$ К с $h_s = 65$ мкм, $h_s = 100$ мкм, $h_s = 200$ мкм и $h_s = 300$ мкм. Полученные распределения давления представлены на рис. 5,а. Наиболее близкое к эксперименту распределение достигнуто при $h_s = 200$ мкм. Поэтому далее в расчетах принималось $T_w = 716$ К, $h_s = 200$ мкм.

Далее было исследовано влияние модели кинетики. На рис. 5,б представлены распределения статического давления по нижней стенке канала, полученные с использованием механизмов Яхимовский7, Яхимовский19 и Зеттервал22. Видно, что распределения статического давления близки. Тем не менее, разные модели кинетики порождают существенно различную трехмерную структуру течения – см. рис.6. Воспламенение водорода происходит в зоне отрыва потока, вызванного взаимодействием пограничного слоя с ударной волной. В расчетах с 19 и 22 реакциями воспламенение происходит в области падения отраженной от плоскости симметрии головной волны (рис. 6,б,в), а в расчете с 7 реакциями (рис. 6,а) отрыв и воспламенение возникают лишь в области максимального сужения ядра потока.

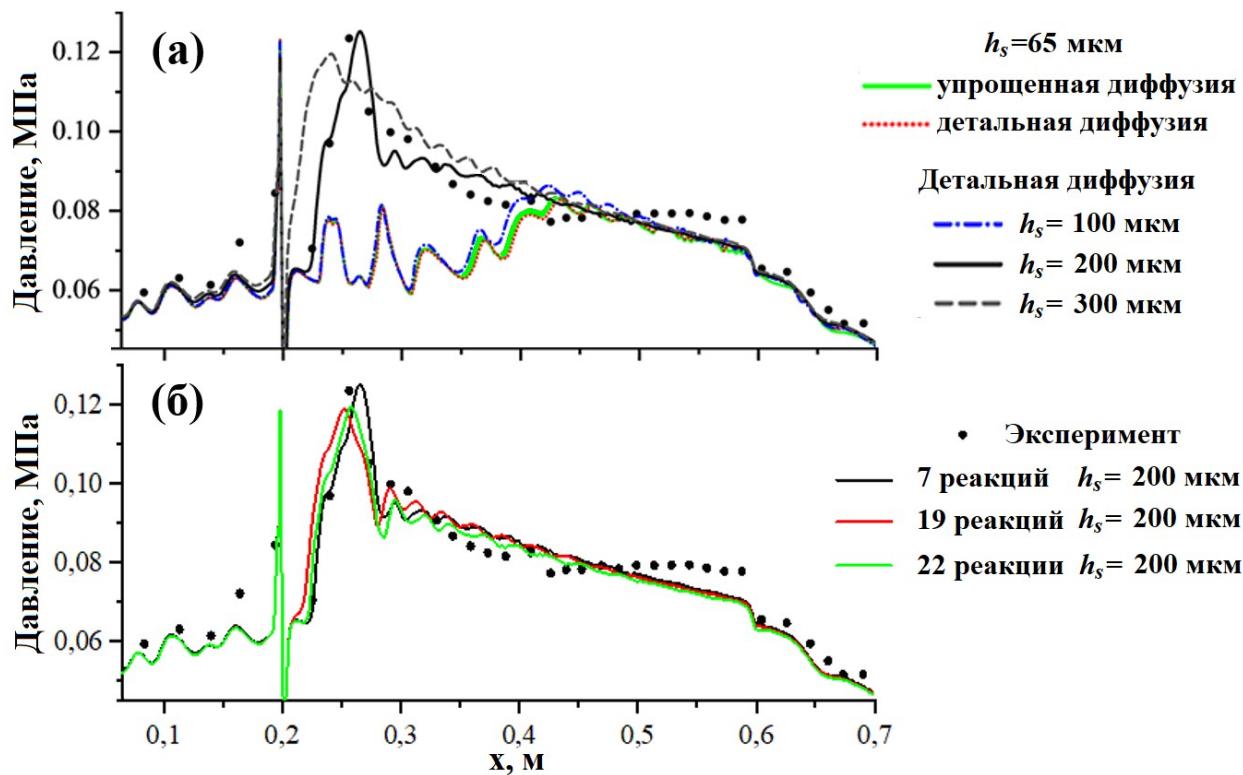


Рисунок 5 – Распределения статического давления по нижней стенке канала:
(а) влияние модели диффузии и диаметра песчинки h_s ; (б) влияние кинетики

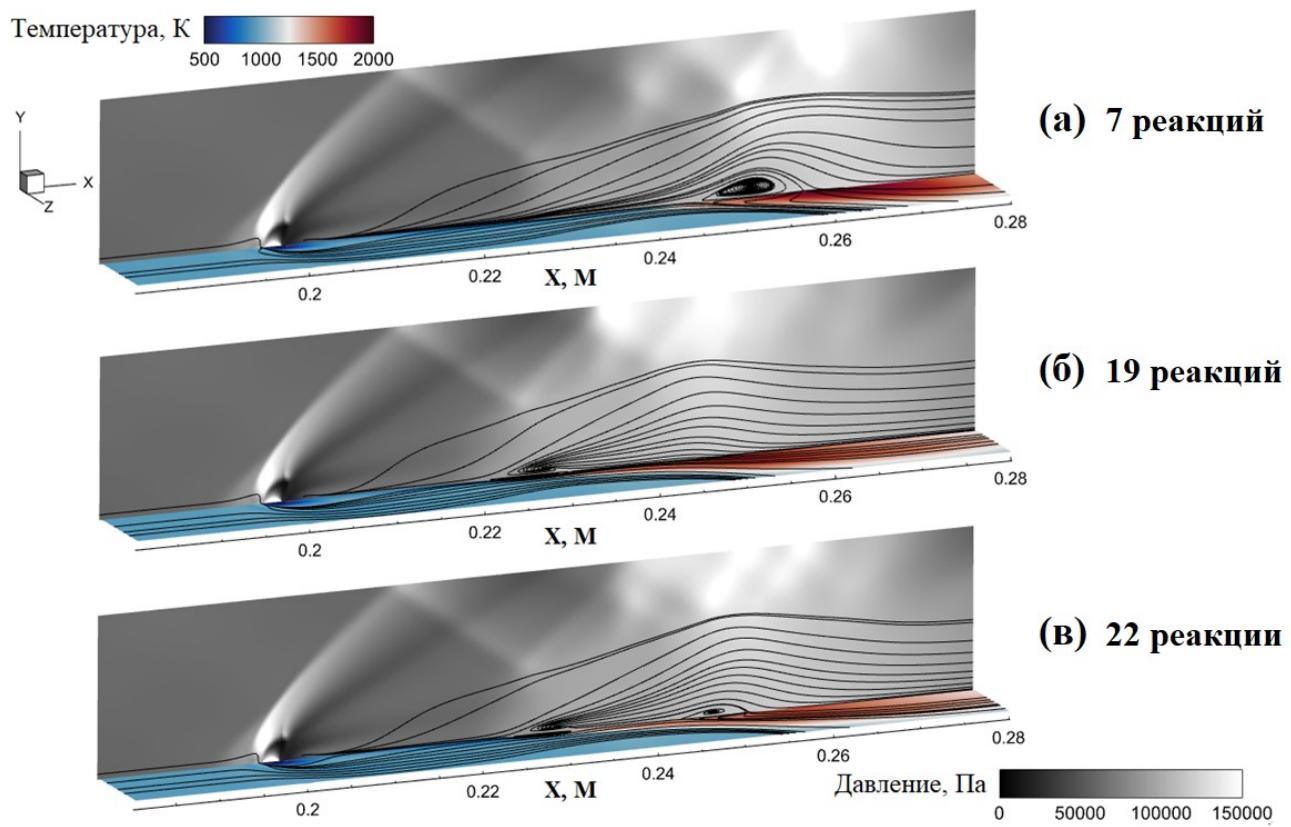


Рисунок 6 – Поле статического давления в плоскости симметрии канала и температура в плоскости 0,1 мм над нижней стенкой, с наложением линий тока

На рис. 7,а даны распределения массовой доли радикала Н вдоль линии $y=-0.0165$ м в плоскости симметрии канала. В расчете с 7 реакциями начальная концентрация радикала Н на порядок больше, и наблюдается её монотонный рост по длине с достижением максимума в области горения. Это соответствует процессу самовоспламенения. В расчетах с 19 реакциями и 22 реакциями концентрация радикалов Н, О и OH падает, пока не увеличивается резко в зоне горения. Значит, тепловыделение в этих расчетах не связано с размножением этих радикалов.

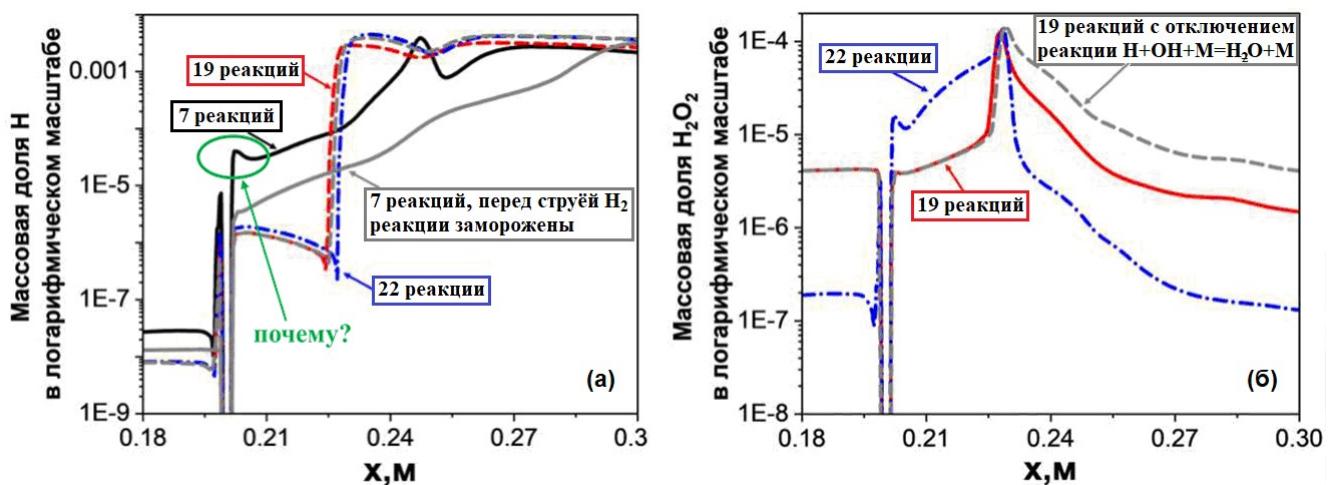


Рисунок 7 – Распределение десятичного логарифма массовой доли радикалов Н (а) и H_2O_2 (б) вдоль линии $y=-0.0165$ м в плоскости симметрии канала

Начальная концентрация радикалов Н за струей водорода в случае 7 реакций на порядок больше, т.к. Н производится в зоне рециркуляции перед струей (рис.8, а, г). Если отключить реакции перед струей, то концентрация Н за струей падает, и самовоспламенение затягивается (серая линия на рис. 7, а и рис.8, в). В случае 19 реакций этого нет (рис. 8,б). Дело в том, что время увеличения массовой доли Н до 0.0002 в случае 7 реакций – $2 \cdot 10^{-5}$ сек, а в случае 19 реакций – $8 \cdot 10^{-5}$ сек. Характерное же время пребывания газа внутри отрыва – $\sim 6.7 \cdot 10^{-5}$ сек. При 7 реакциях этого достаточно для достижения $Y(H)=0.0002$, при 19 реакциях - нет.

В случае 19 и 22 реакций вдоль линии $y = -0.0165$ м в плоскости симметрии канала наблюдается рост массовой доли H_2O_2 (рис. 7,б). Реакция образования H_2O_2 производит тепло и может стать источником самовоспламенения. Если отключить основную реакцию, производящую тепло на стадии взрыва в кинетике с 7 реакциями ($H + OH + M \rightarrow H_2O + M$), то в расчете с 19 реакциями распределения параметров почти не меняются (ср. синюю штрих-пунктирную и серую пунктирную кривые на рис 7, б). Значит, самовоспламенение за струей связано не с ростом Н, О и OH, как в расчетах с 7 реакциями, а с ростом пероксидов HO_2 и H_2O_2 .

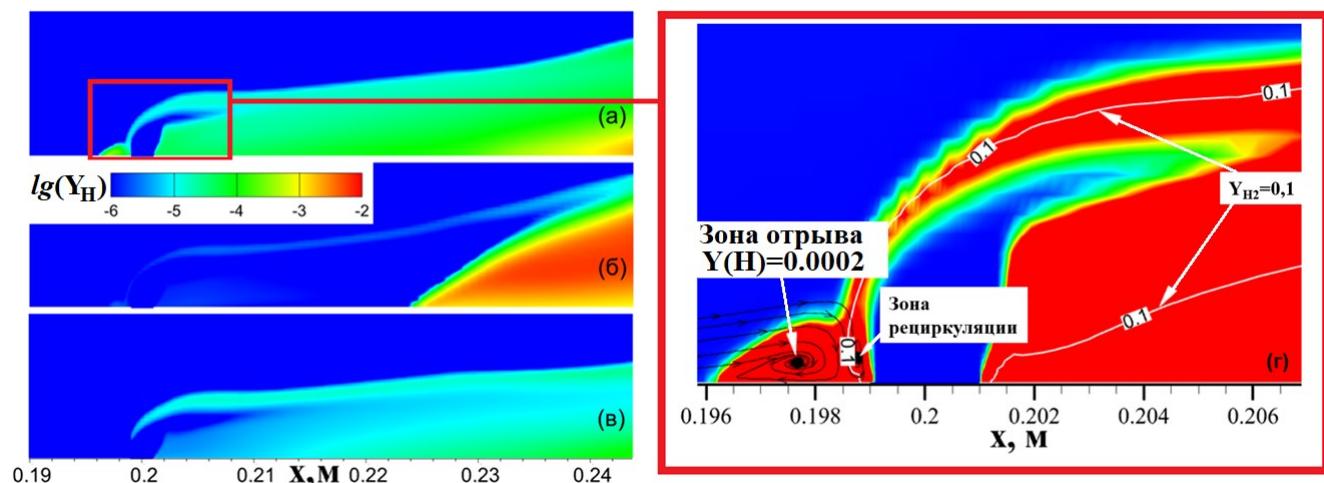


Рисунок 8 – Поле логарифма массовой доли радикала Н в области инжекции топлива в плоскости симметрии канала: (а) – 7 реакций; (б) – 19 реакций; (в) – 7 реакций, реакции отключены перед струей; (г) структура течения у инжектора

Хотя все кинетические механизмы, рассмотренные в работе, дали близкие распределения давления по стенкам модели (рис. 5,б), наблюдаемые на рис. 6 значительные отличия в структуре отрывных зон должны приводить к другому распределению тепловых потоков по стенкам канала (рис. 9). Это необходимо

учитывать при расчете конструкции для обеспечения ее прочности.

Кроме того, потери в стенки канала влияют на тепловую полноту сгорания топлива. По этой причине расчеты с использованием кинетики Яхимовский⁷ дают значение полноты сгорания примерно на 5% ниже, чем в расчетах с использованием других кинетических моделей.

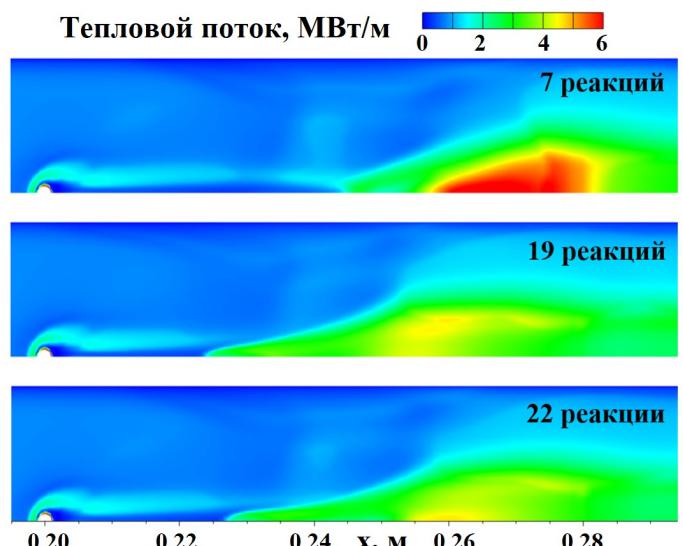


Рисунок 9 – Распределения тепловых потоков по нижней стенке канала вид сверху

В Главе 4 с использованием ANSYS FLUENT в рамках нестационарных уравнений Рейнольдса (URANS) выполнено численное моделирование классического эксперимента ONERA (P. Magre et al., 1988) по дозвуковому предварительно перемешанному турбулентному горению метана в канале со ступенькой.

Экспериментальная модель (рис. 10) представляет собой канал постоянной ширины (0.1 м) с обратным уступом. Вверх по течению от уступа длина канала – 1.5 м, высота – 0.065 м; а вниз по течению длина – 1.4 м, высота – 0.1 м.



Рисунок 10 – Схема установки ONERA A3C (Magre, Moreau, 1988)

На вход в канал экспериментальной модели поступает предварительно перемешанная смесь метана с воздухом (коэффициент избытка топлива $\varphi = 0.8$) с температурой 525 К, скорость газа близка к 50 м/сек. В расчете рассматривалась часть канала $-0.1 \text{ м} \leq x \leq 1 \text{ м}$ (начало координат - в угловой точке ступеньки). На входе были заданы однородный состав газа ($Y_{\text{CH}_4}=0.0446557$, $Y_{\text{O}_2}=0.22269$, $Y_{\text{N}_2}=0.7326543$) и постоянная температура $T=525$ К (число Maxa $M \sim 0.1$). Темпе-

ратура стенок в соответствии с рекомендациями работы (Бахнэ и др., 2022) была принята равной $T_W = 800$ К. Профили скорости и параметров турбулентности на входе в расчетную область, полученные путем расчета канала экспериментальной установки вверх по потоку от входа, были предоставлены автору Лабораторией JetSim ЦАГИ. В расчётах были использованы рассмотренные в Главе 2 квазиглобальная модель кинетики Фролов4 (базовый вариант кинетики), глобальный механизм BFER2 и скелетный механизм Smooke25.

Предварительные расчеты проводились без учета TCI (квазиламинарное приближение, см. (2)), по модели Фролов4. В расчете на базе модели турбулентности SST угол наклона пламени оказался существенно меньшим, чем в эксперименте (рис. 11,а). Поэтому рассмотрена другая модель класса $k-\omega$, реализованная в ANSYS FLUENT, – BSL $k-\omega$ (Menter, 1994). При использовании BSL $k-\omega$ наклон пламени стал больше (рис 11,б) и приблизился к эксперименту.

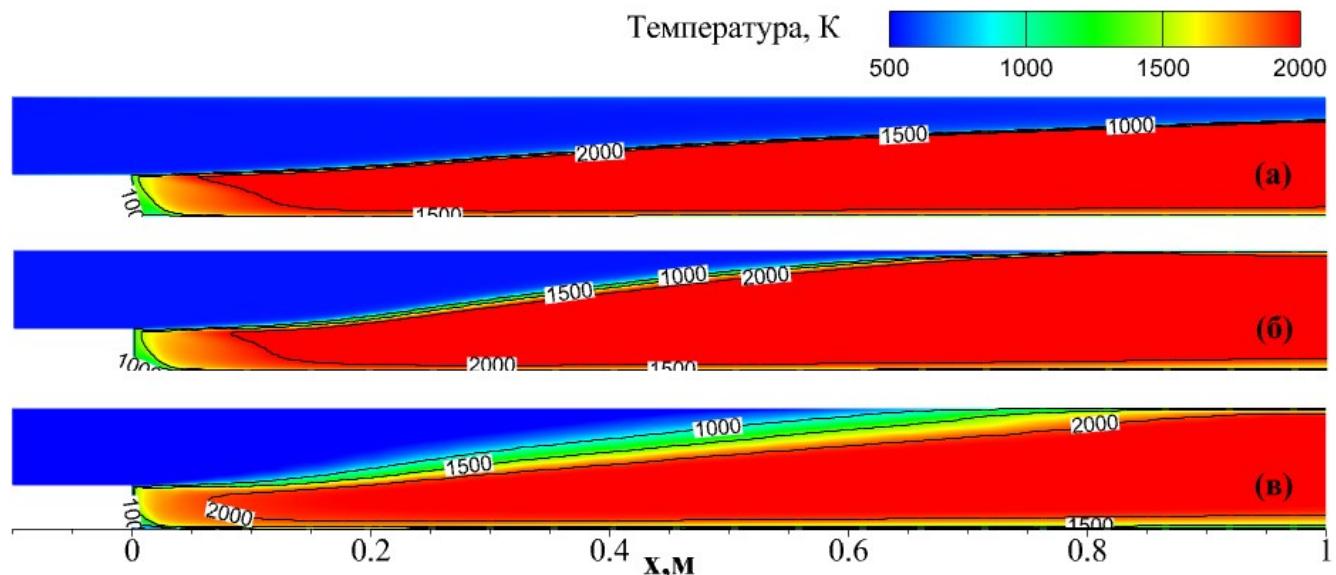


Рисунок 11 – Поля средней температуры, полученные в расчетах с кинетикой Фролов4: (а) модель SST, без TCI; (б), (в) - модель BSL $k-\omega$; (б) – без TCI, (в) – PaSR

Угол наклона пламени определяется отношением средней скорости пламени относительно газа к скорости исходной смеси. В классической теории Зельдовича и Франк-Каменецкого для случая одной брутто-реакции в газе с числом Льюиса $Le=1$ получена простая формула для скорости ламинарного пламени:

$$S_f \approx \frac{\sqrt{2\lambda q \int_{T_{\text{нач}}}^{T_{\text{кон}}} \dot{\omega}(T) dT}}{\rho_{\text{нач}} c_p (T_{\text{кон}} - T_{\text{нач}})}. \quad (8)$$

Здесь λ – коэффициент теплопередачи, q – тепловыделение на единицу массы. Для ламинарного пламени $\lambda = \mu c_p / \text{Pr}$. В турбулентном случае в первом приближении $\lambda \sim \mu c_p / \text{Pr}$. Следовательно, в турбулентном случае средняя скорость пламени относительно газа $\overline{S_f} \sim \sqrt{\mu_t}$. При использовании модели SST турбулентная вязкость ниже. Отсюда и получается малый угол наклона пламени.

В квазиламинарном приближении толщина фронта пламени сильно занижена по сравнению с экспериментом. Для получения правильной ширины фронта пламени необходимо учесть TCI. По данным ONERA и ЦАГИ, хорошие результаты дают модели TCI класса PaSR, особенно модель, предложенная В.А. Сабельниковым и К. Фюрби – EPaSR (2013). К сожалению, EPaSR недоступна в ANSYS FLUENT, а из моделей класса PaSR реализована модель EDC Магнуссена. Поэтому автор модифицировал в ANSYS FLUENT модель EDC при помощи UDF (User-Defined Functions), превратив ее в модель PaSR Хомяка и Карлссона (1996).

В данной задаче при турбулентном горении реализуется примерно такой же путь реакции, как и внутри ламинарного пламени. В базовых расчетах автора, как и в расчетах ЦАГИ (Власенко и др., 2019; Бахнэ и др., 2022) при оценке γ^* (см. (4)) химическое время во всем поле течения полагалось равным $\tau_{xim} \sim \delta_f / S_f = 6.09 \times 10^{-4}$ сек. Коэффициент C_τ в формуле для τ^* (см. (4)) в оригинальной модели PaSR равен 1. Этот коэффициент сильно влияет на ширину фронта турбулентного пламени. В расчетах ЦАГИ с моделью турбулентности $q\omega$ использовалось значение $C_\tau = 0.2$. В расчетах с моделью турбулентности BSL $k\omega$ для получения правильной ширины фронта пламени автор подобрал значение $C_\tau = 0.11$ (рис. 12,а). Соответствующее поле температуры показано на рис. 11,в.

На рис. 12,б вертикальные профили средней температуры, полученные автором по модели PaSR при $C_\tau = 0.11$, сравниваются с экспериментом и расчетами, полученными в ЦАГИ с использованием более совершенной модели EPaSR. Для данной задачи с простой геометрией течения результаты, полученные автором при помощи простой модели PaSR, не уступают по точности результатам ЦАГИ.

На рис. 13 сравниваются поля скорости тепловыделения за счет химических

реакций $Q = -\sum_k S_k \Delta h_{f,k}^0$, полученные в расчетах по моделям кинетики Фролов4, BFER2 и Smooke25. Применялись модель турбулентности BSL $k-\omega$ и модель PaSR с $C_\tau = 0.11$. В расчетах с моделями BFER2 (рис. 13,а) и Фролов4 (рис. 13,б) получены подобные структуры течения. Но скелетный (самый точный из рассмотренных!) механизм Smooke25 дал слишком малый угол наклона пламени (рис. 13,в). Это свидетельствует об уменьшении средней скорости пламени относительно исходной смеси S_f . Согласно (8), это означает, что внутри фронта выделяется меньшее количество тепла (в модели Зельдовича оно равно $q \cdot \int_{T_{\text{нач}}}^{T_{\text{кон}}} \dot{\omega}(T) dT$).

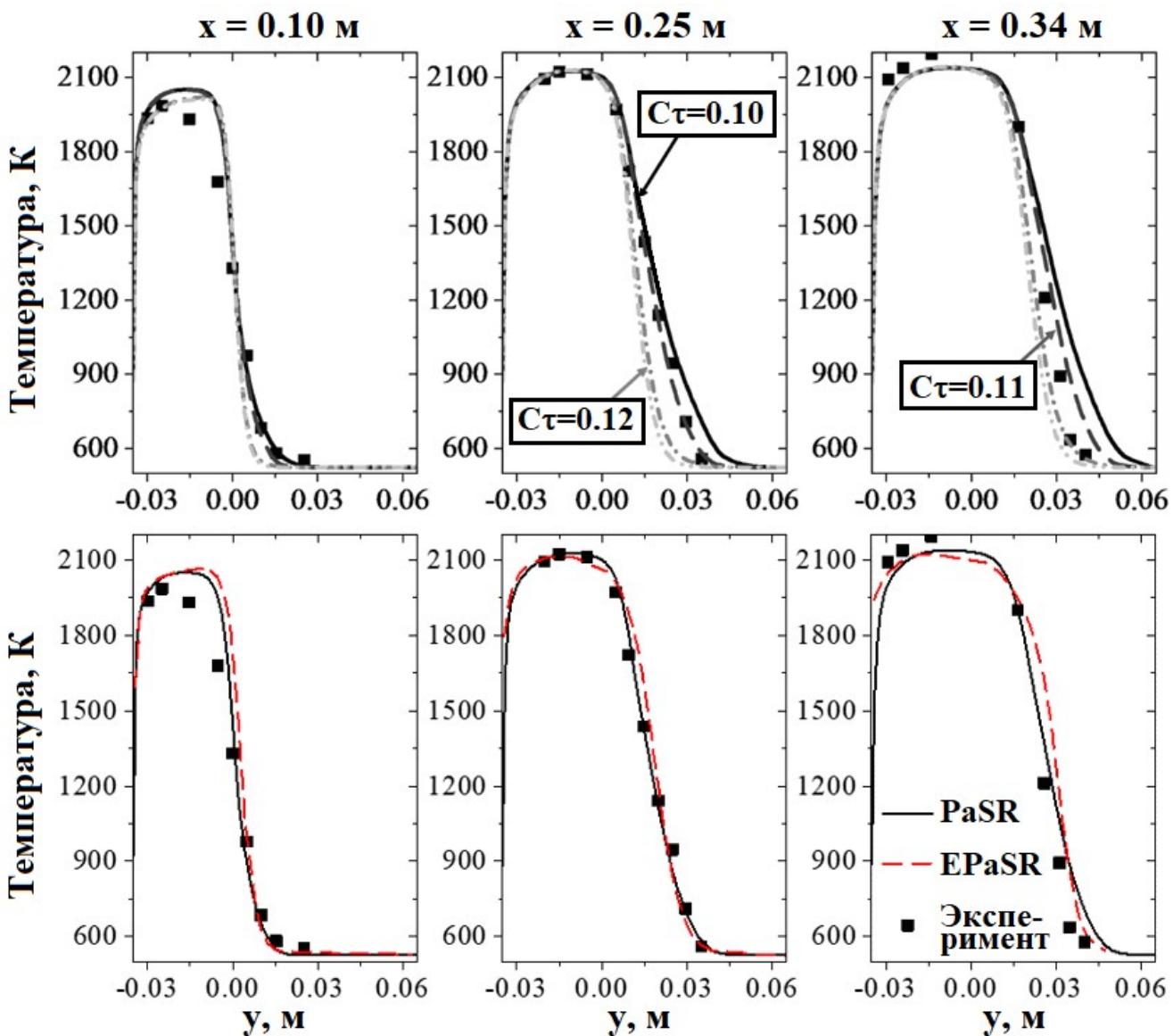


Рисунок 12 – Вертикальные профили средней температуры: (а) полученные автором при разных значениях C_τ ; (б) полученные автором по модели PaSR, BSL $k-\omega$, $C_\tau=0.11$ и в ЦАГИ по модели EPaSR, $q-\omega$, $C_\tau=0.2$

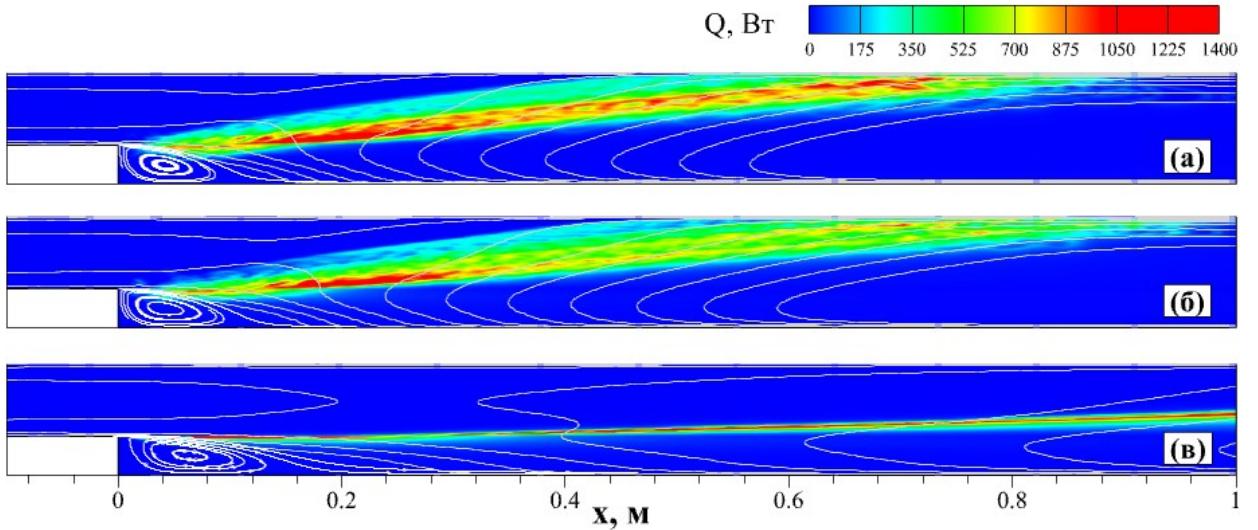


Рисунок 13 – Поля скорости тепловыделения и изолинии скорости, полученные на базе модели PaSR. Модель кинетики: (а) BFER2, (б) Frolov4, (в) Smooke25

В данной задаче реализуется волна горения, распространяющаяся за счет диффузионных потоков тепла и массы от продуктов сгорания к холодной смеси, что меняет путь химической реакции, добавляя вещества, которых нет в исходной смеси, и ускоряет протекание реакций. Модели Фролов4, BFER2, Smooke25 дают близкие результаты при описании ламинарного пламени (рис. 14,а).

Изменение пути реакции меняет скорость тепловыделения. Например, рассмотрим горение в замкнутом объеме при $p=const$. В этом случае реализуется механизм самовоспламенения, и путь реакции не такой, как в ламинарном пламени. На рис 14,б показаны зависимости температуры от времени в таком процессе при начальных условиях $T = 1200\text{K}$, $p = 1$ атм, $\varphi = 1$. Несмотря на хорошее согласие моделей в задаче о ламинарном пламени, в реакторе $p=const$ Smooke25 предсказывает на три порядка большую задержку воспламенения, чем Фролов4 и BFER2.

Сильно упрощенные кинетические схемы Фролов4 и BFER2 рассчитаны на описание ламинарного пламени. Они не описывают реальный путь реакции. На рис. 14,в приведены зависимости $\dot{\omega}(T)$ в ламинарном пламени для всех трех моделей. Видно, что модели Фролов4, BFER2 и Smooke25 дают разные зависимости $\dot{\omega}(T)$. Тем не менее, площади под этими тремя кривыми примерно одинаковы: Фролов4 отличается от BFER2 на 5%, а от Smooke25 на 17%. Итак, Фролов4 и BFER2 неплохо предсказывают значение интеграла $\int_{T_{\text{нач}}}^{T_{\text{кон}}} \dot{\omega}(T) dT$; поэтому, согласно (8), они неплохо предсказывают и скорость ламинарного пламени (рис.14, а).

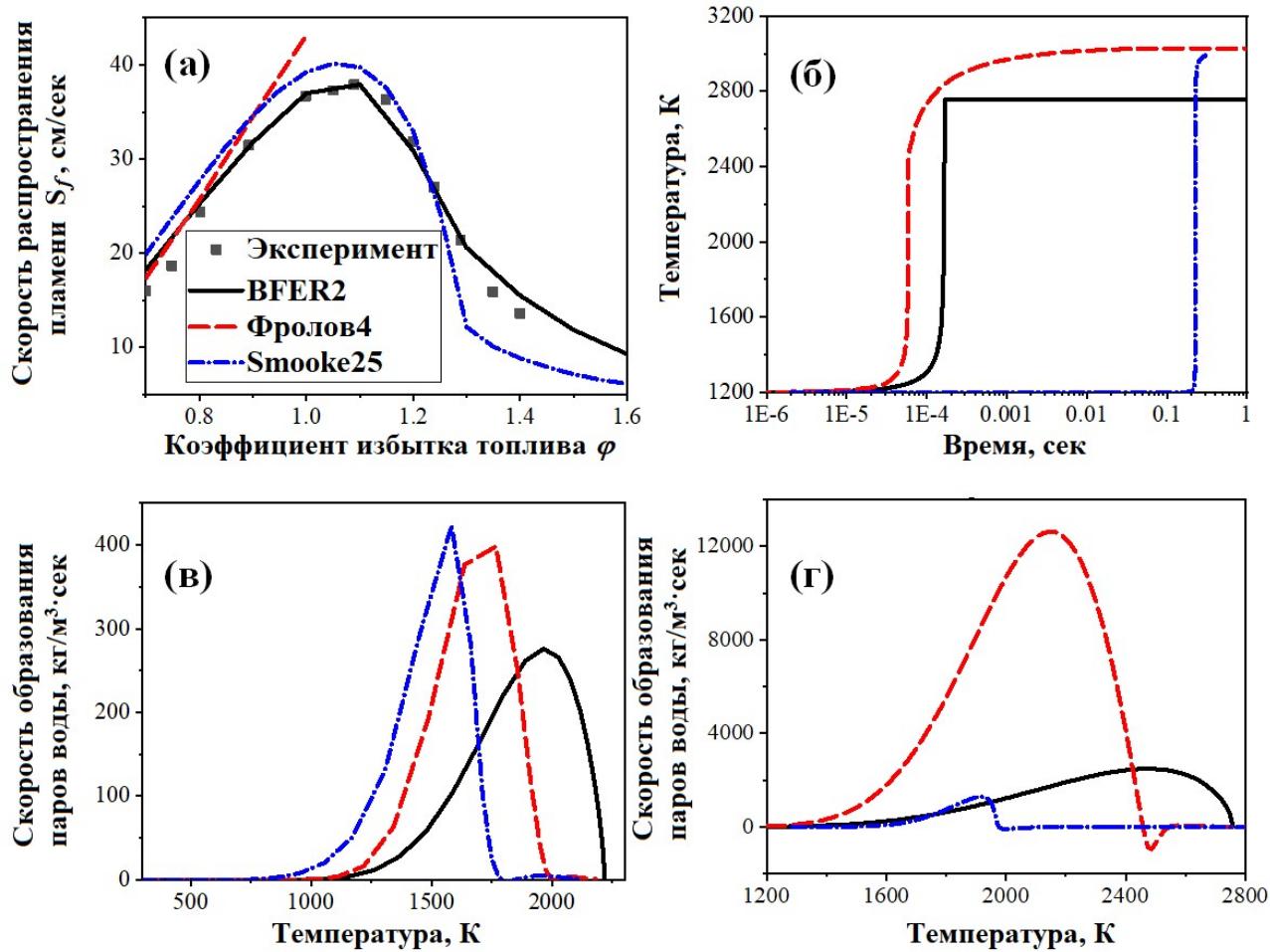


Рисунок 14 – Сравнение трех моделей кинетики: (а) скорость ламинарного пламени при разных значениях коэффициента избытка топлива; (б) зависимости температуры от времени в реакторе $p=const$; (в), (г) - зависимости скорости образования H_2O от температуры: (в) соответствует (а) при $\varphi=1.0$, (г) соответствует (б)

На рис. 14,г приведены зависимости $\dot{\omega}(T)$ для самовоспламенения в замкнутом объеме ($p=const$). В этой локальной задаче, где нет диффузии тепла и массы, влияющих на развитие процесса, интеграл тепловыделения для скелетного механизма Smooke25 гораздо меньше, чем для механизмов Фролов4 и BFER2.

Но в модели PaSR состав смеси в “тонких структурах” находится из решения системы алгебраических уравнений (3), в которой также нет диффузии тепла и массы. Вот почему в модели PaSR скелетный механизм дает существенно меньший интеграл тепловыделения и, соответственно, гораздо меньший угол наклона пламени к потоку, чем указанные выше квазиглобальные схемы.

Если вести расчет без PaSR (квазиламинарное приближение, см. (2)), то в уравнениях появляется диффузия (см. (1)). В этом случае скелетный механизм Smooke25 описывает правильный путь реакции и даёт интеграл тепловыделения и

угол наклона пламени, близкие к эксперименту, как и Фролов4 – ср. рис. 10,б (Фролов4) и на рис. 15,а (Smooke25). Но в квазиламинарном приближении фронт пламени очень узкий. Для повышения его ширины нужно применять Smooke25 с более совершенной моделью TCI, учитывающей диффузию тепла и массы, - напр., EPaSR. На рис.15,б показан результат расчета по Smooke25 и EPaSR, предоставленный ЦАГИ. Получены корректный наклон пламени и утолщенное пламя.

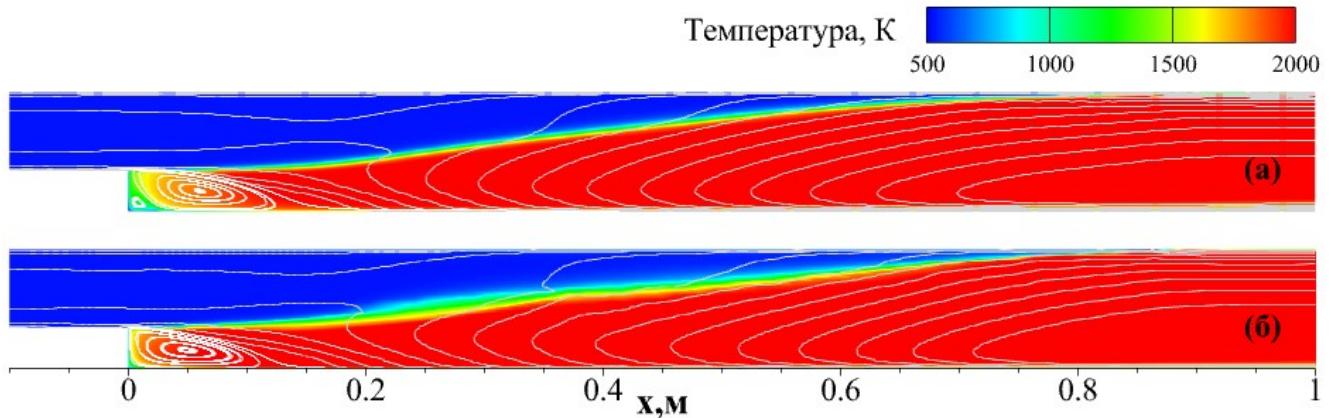


Рисунок 15 – Поля температуры, полученные в расчетах с кинетикой Smooke25:
(а) автор, без учета ТСI; (б) ЦАГИ, с учетом ТСI по модели ЕРaSR

Выводы

В диссертации на основе расчетных исследований получено решение задачи о влиянии кинетического механизма на результаты численного моделирования турбулентных течений с горением в каналах. Сделаны выводы и предложены новые научно обоснованные разработки, имеющие важное значение для развития численного моделирования различных энергетических устройств.

По итогам проделанной работы можно сделать следующие выводы.

1. Решена задача о высокоскоростном неперемешанном турбулентном горении водорода в экспериментальной модели ONERA LAPCAT II. Сделаны следующие выводы:

- При определении профилей радикалов на входе в экспериментальную модель (путем расчета горения в подогревателе) нужно использовать детальные или скелетные механизмы. Квазиглобальные модели кинетики дают ошибку в 3 раза в ядре потока и много больше – у стенок.
- При описании высокоскоростного горения водорода в воздухе в канале коэффициенты молекулярной диффузии газовой смеси могут быть приняты

равными коэффициентам для воздуха.

- При моделировании высокоскоростного горения в канале с существенной ролью самовоспламенения, модель химической кинетики мало влияет на распределение давления по стенкам канала, но оказывает значительное влияние на трехмерную структуру течения. Это приводит к различиям в предсказании распределения и величины тепловых потоков, а также полноты сгорания топлива. Тепловые потоки могут отличаться на 70%, полнота сгорания - на 5%.

2. Решена задача о дозвуковом предварительно перемешанном турбулентном горении в экспериментальной модели ONERA с обратным уступом. Сделаны следующие выводы:

- Показано, что при переходе к другой модели турбулентности необходима настройка коэффициентов модели турбулентного горения PaSR. Выполнена настройка PaSR для работы с моделью турбулентности BSL $k-\omega$. Достигнуто качество моделирования турбулентного диффузионного пламени в канале, сопоставимое с наилучшими из результатов, полученных в ЦАГИ с использованием модели EPaSR.
- При описании волны диффузионного пламени глобальные механизмы BFER2 и Фролов4 некорректно описывают внутреннюю структуру пламени, но дают близкие значения интеграла тепловыделения (ошибка в пределах 20%) и предсказывают скорость пламени с точностью 8%. При описании локального самовоспламенения в реакторе постоянного давления эти модели дают ошибку на 2-3 порядка величины в интеграле тепловыделения и в задержке воспламенения.
- При использовании моделей TCI, не учитывающих диффузию и другие пространственные процессы (например, PaSR), рекомендуется использовать не многостадийные кинетические механизмы, а квазиглобальные модели, которые дают хорошую оценку интеграла тепловыделения. Детальные и скелетные кинетические механизмы можно использовать вместе с моделями TCI, учитывающими пространственный перенос (например, EPaSR).

Публикации автора по теме диссертации

1. Власенко В.В., Лю Б., Молев С.С. Сабельников В.А. Влияние условий теплообмена и химической кинетики на структуру течения в модельной камере сгорания ONERA LAPCAT II // Горение и взрыв, 2020. Т.13, № 2, С. 36-47.
2. Лю Б. Опыт численного моделирования турбулентного горения метано-воздушной смеси в канале с уступом с использованием пакета вычислительной аэродинамики Ansys Fluent на базе различных моделей химической кинетики // Горение и взрыв, 2023, Т.16, № 2. С. 89-106.
3. Лю Б. Анализ факторов, определяющих структуру численного решения при расчете течения с горением в экспериментальной модели ONERA // Теплофизика и аэромеханика, 2023, Т. 30, № 3. С. 539-556.
4. Лю Б. Влияния модели химической кинетики на результаты численного моделирования турбулентных течений с горением // Труды МФТИ, 2023, Т. 15, № 2. С. 133-152.

