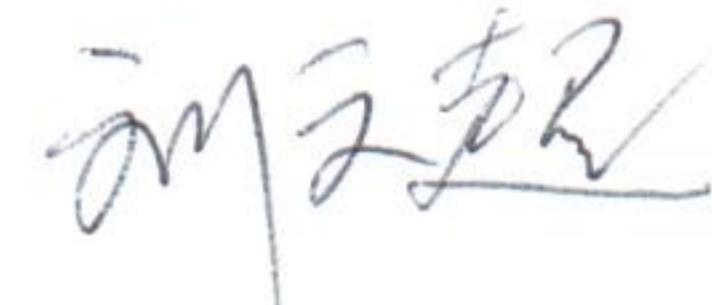


**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ**

**«Московский физико-технический технический институт
(национальный исследовательский университет)»
(МФТИ, Физтех)**

На правах рукописи



Лю Вэньчao

**Влияние модели химической кинетики на результаты
численного моделирования
турбулентных течений с горением**

Специальность: 1.1.9 — механика жидкости, газа и плазмы

**ДИССЕРТАЦИЯ
на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук**

Научный руководитель:
Власенко Владимир Викторович – доктор
физико-математических наук

Долгопрудный – 2023

ОГЛАВЛЕНИЕ

Список обозначений.....	4
Введение	7
Общая характеристика работы	8
Обзор литературы по теме диссертации.....	15
Содержание диссертации	34
Глава 1. Модели и методы для описания турбулентных течений реагирующего газа	36
1.1 Система уравнений Рейнольдса для течений реагирующего газа	36
1.2 Источниковые члены в уравнениях компонентов смеси.....	37
1.3 Теория физических свойств газовых смесей.....	39
1.4 Модели турбулентности класса $k-\omega$	42
1.5 Граничные условия на стенках с шероховатостью	43
1.6 Модели реактора частичного перемешивания (PaSR)	47
Глава 2. Моделирование распространения ламинарного пламени	51
2.1 Одномерная система уравнений ламинарного пламени	51
2.2 Решение уравнений пламени в случае механизмов химической кинетики	54
2.2.1 Численный метод для решения уравнений	54
2.2.2 Методы определения скорости пламени и распределения скорости потока.....	55
2.2.3 Результаты расчетов глобального механизма горения метана в воздухе	57
2.3 Решение уравнений редуцированных механизмов химической кинетики	60
2.3.1 Трудность в нахождении правильного решения	60
2.3.2 Описание пламени, основанное на введении функции тока	62
2.3.3 Результаты расчетов с применением функции тока	64
2.4 Влияние модели молекулярной диффузии.....	67
Выводы к Главе 2	72

Глава 3. Моделирование высокоскоростного горения в экспериментальной модели ONERA LAPCAT-II.....	73
3.1 Постановка эксперимента и организация расчетов.....	74
3.1.1 Постановка эксперимента	74
3.1.2 Расчетная область, сетка и граничные условия.....	76
3.2 Течение в подогревателе (с соплом Лаваля) и в гладком канале	80
3.3 Анализ факторов, определяющих структуру течения	88
3.3.1 Выбор сетки и условий инжекции топлива	88
3.3.2 Влияние точности описания молекулярной диффузии	92
3.3.3 Проблема выбора эквивалентного диаметра песчинки	94
3.4 Течение в канале с шероховатыми стенками при разных механизмах химической кинетики	97
Выводы к Главе 3	106
Глава 4. Моделирование дозвукового горения в экспериментальной модели ONERA с обратным уступом	107
4.1 Постановка эксперимента и организация расчетов.....	108
4.2 Расчеты течения без горения	111
4.3 Расчеты с глобальными механизмами химической кинетики	114
4.3.1 Расчеты течения с горением в квазиламинарном приближении .	114
4.3.2 Расчеты течения с горением с учетом TCI.....	116
4.4 Расчеты со скелетным механизмом химической кинетики.....	121
4.4.1 Расчеты течения с горением на базе классической модели PaSR	121
4.4.2 Объяснение расхождения расчетов по разным моделям кинетики	124
4.4.3 Расчеты течения по скелетному механизму с учетом диффузии	131
Выводы к Главе 4	133
Заключение	135
Приложение А. Механизмы горения метана в воздухе	137
Приложение Б. Механизмы горения водорода в воздухе	141
Список использованных источников	144

Список обозначений

$A(T)$	—	пред-экспоненциальный коэффициент в формуле Аррениуса
c_p	—	теплоемкость единицы массы газа при постоянном давлении
D	—	коэффициент массовой диффузии
D_{ij}	—	бинарный коэффициент массовой диффузии i -й компонента в j -ом компоненте
Da	—	число Дамкёлера
E	—	полная энергия единицы массы газа
E_a	—	энергия активации реакции в формуле Аррениуса
h	—	энталпия единицы массы
h_s	—	характерный размер шероховатости
k	—	кинетическая энергия турбулентности
Ka	—	число Карловица
$Le = \frac{Pr}{Sc}$	—	число Льюиса
m	—	молекулярная масса смеси газа
m_k	—	молекулярная масса k -й компонента
M	—	число Maxa
P	—	давление
Pr	—	молекулярное число Прандтля
Pr_t	—	турбулентное число Прандтля
R_0	—	универсальная газовая постоянная, $8.31446 \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{моль})$
$R = R_0 \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{Y_k}{m_k}$	—	газовая постоянная
Re	—	число Рейнольдса
s_i	—	энтропия k -го компонента
S_k	—	источниковый член k -й компонента в уравнении компонентов

Sc	—	молекулярное число Шмидта
Sc_t	—	турбулентное число Шмидта
t	—	время
T	—	температура
u^+	—	безразмерная касательная скорость в пристеночной области
W_i	—	скорость i -й химической реакции
X_k	—	мольная доля k -й компонентов смеси
y_w	—	расстояние до ближайшей твердой поверхности
Y_k	—	массовая доля k -й компонентов смеси

Греческие символы

λ	—	коэффициент теплопроводности
β	—	показатель температуры.
τ	—	величина шага по времени
$\tau_T = k/\varepsilon$	—	характерное время крупномасштабной турбулентности
$\tau_K = \sqrt{\nu/\varepsilon}$	—	характерное время мельчайших вихрей.
τ^*	—	характерное время пребывания газа в тонких структурах
$\tau_{хим}$	—	характерный масштаб времени химических процессов
φ	—	коэффициент избытка топлива
ρ	—	плотность
$\omega = \varepsilon/k$	—	параметр турбулентности, пропорциональный характерной частоте турбулентных пульсаций
μ	—	динамический коэффициент молекулярной вязкости
μ_t	—	динамический коэффициент турбулентной вязкости
$\nu = \mu/\rho$	—	динамический коэффициент вязкости
v_{ki}	—	коэффициенты при k -й компонентов смеси в i -й уравнении реакций.

Верхние индексы

<i>f</i>	—	относящийся к прямой реакции
<i>b</i>	—	относящийся к обратной реакции
<i>0</i>	—	параметры газа в окружающем пространстве (в модели TCI)
<i>*</i>	—	параметры газа внутри тонких структур (в модели TCI)
<i>+</i>	—	безразмерные параметры газа на стенки

Нижние индексы

<i>0</i>	—	параметры торможения
<i>t</i>	—	параметры турбулентности
<i>w</i>	—	параметры газа на стенки

Введение

Горение в различных энергетических устройствах (двигателях внутреннего сгорания, газотурбинных установках, авиационных двигателях и др.) представляет собой сложный физико-химический процесс, включающий взаимодействие тепловыделения за счет химических реакций, молекулярного переноса тепла и массы с турбулентными пульсациями.

Наиболее надежным способом описания турбулентного течения с горением была бы процедура, при которой сначала по локальным параметрам течения вычислялись бы скорости образования веществ на основе механизма химической реакции, а потом с учетом полученных скоростей в малой области пространства и времени, где эти скорости применимы, решались бы напрямую мгновенные (не осредненные по времени) уравнения движения газа. В этом смысле механизм химических реакций горения, связывающий микроскопические и макроскопические явления горения, является основой для численного моделирования и понимания природы горения. К сожалению, одновременное протекание многочисленных химических процессов и турбулентные пульсации в каналах с пограничными слоями создают настолько широкий диапазон масштабов физических процессов, что непосредственная реализация указанного способа (прямое численное моделирование) остается недостижимой для сколько-нибудь реальных постановок задачи.

Поэтому для решения практических задач необходимо корректное упрощение задачи, сохраняющее важнейшие физические процессы, протекающие в потоке. Как правило, такие упрощения связаны с сокращением числа химических реакций и компонент реагирующей смеси, с осреднением уравнений движения газа по времени (уравнения Рейнольдса, RANS) или по пространству (моделирование крупных вихрей, LES). При этих упрощениях возникает необходимость в дополнительных математических моделях, замыкающих систему уравнений движения газа: 1) в модели химической кинетики, которая приближенно описывает вклад всех реакций и всех компонент, которые не

учитываются в расчете; 2) в модели турбулентности, которая приближенно описывает вклад тех турбулентных движений, которые не описываются расчетом; 3) модели турбулентного горения (TCI – Turbulence-Combustion Interaction), которая приближенно описывает влияние турбулентных пульсаций на средние скорости реакций и влияние тепловыделения при горении на турбулентный перенос.

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследования

В связи с большой размерностью и нелинейностью системы уравнений движения реагирующего газа возможности теоретического исследования турбулентных течений с горением крайне ограничены. Экспериментальные исследования таких течений сталкиваются с большими трудностями (прежде всего, из-за высоких температур, тепловых потоков, сильной неоднородности и турбулентности течений с горением в каналах) и крайне дороги. Поэтому вычислительная газовая динамика является одним из незаменимых инструментов при проектировании и тестировании энергетических устройств. Детальное описание процессов воспламенения, смешения и горения в камере сгорания с помощью численного моделирования имеет большое практическое значение.

В связи с большими вычислительными затратами при расчете трехмерных (и, вообще говоря, нестационарных) турбулентных течений с горением приходится использовать усечённые модели химической кинетики – скелетные, редуцированные или глобальные кинетические механизмы. В модели химической кинетики, модели турбулентности и модели TCI неизбежно введение некоторых упрощающих предположений и эмпирических констант. Последовательность химических процессов в турбулентном потоке определяет локализацию зон тепловыделения и играет существенную роль в формировании газодинамической структуры течения и практически значимых характеристик энергетических устройств. Поэтому исследование взаимодействия модели химической кинетики с другими математическими моделями имеет важную роль для правильного

воспроизведения физических процессов турбулентного горения при численном моделировании.

При использовании современных пакетов вычислительной аэродинамики пользователь должен представлять возможные последствия выбора того или иного кинетического механизма и уметь анализировать влияние кинетической модели на физические процессы, протекающие в потоке.

Степень разработанности темы исследования

К настоящему времени разработано множество кинетических механизмов горения водорода и углеводородов в воздухе. Для углеводородов есть детальные механизмы (сотни реакций), скелетные (десятки реакций), редуцированные (несколько реакций) и квазиглобальные (одна или несколько реакций).

Большие достижения имеются в описании турбулентности. Имеется множество моделей турбулентности, некоторые из которых позволяют получить неплохие (с инженерной точки зрения) результаты при описании достаточно широких классов течений (например, модель Спаларта-Альмараса, модель SST Ментера и др.). Для воспроизведения течений в сложных геометриях развиты модели, не основанные на гипотезе Буссинеска. Однако все модели, используемые в сочетании с уравнениями Рейнольдса (RANS), вообще говоря, требуют настройки на класс течений, особенно при наличии горения. Более универсальны вихреразрешающие подходы (LES, гибридные LES-RANS методы), но они требуют очень больших компьютерных ресурсов, а при моделировании турбулентного горения существенно зависят от выбора модели TCI.

Взаимодействие турбулентности с горением включает два основных канала - влияние турбулентности на средние скорости химических реакций и влияние горения на турбулентный перенос. Для описания первого канала разработаны много моделей - модели флеймлетов, Eddy Dissipation Model (EDM), Burning Velocity Model (BVM), Eddy Dissipation Concept (EDC), Partially Stirred Reactor (PaSR) и др. Однако эти модели, как правило, отличаются узкой областью применимости. Существуют и способы описания второго канала (например, модели для получения переменных турбулентных чисел Прандтля и Шмидта).

Большой проблемой для моделей TCI (особенно моделей 2-го канала) является нехватка экспериментальных данных, которые позволили бы провести надежную калибровку эмпирических констант модели. Это во многом связано с нелинейным взаимодействием множества физических процессов в турбулентном течении с горением и трудностью выделения вклада каждого процесса по отдельности.

Вопрос о возможном влиянии модели химической кинетики на результаты численного моделирования турбулентных течений с горением рассмотрен в научной литературе недостаточно. В частности, анализ возможного взаимодействия кинетического механизма с моделью турбулентного горения в литературе практически отсутствует.

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.

Основные задачи:

1. Изучить и реализовать в собственной программе различные методы определения скорости и структуры ламинарного пламени в предварительно перемешанной смеси. Исследовать 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. Проанализировать факторы, определяющие структуру течения с высокоскоростным неперемешанным турбулентным горением водорода в экспериментальной модели ONERA LAPCAT II. Обеспечить согласование с экспериментальными данными по распределениям давления. После этого сравнить и проанализировать результаты расчетов с различными моделями химической кинетики.
3. Проанализировать факторы, определяющие структуру течения с дозвуковым предварительно перемешанным турбулентным горением в

экспериментальной модели ONERA с обратным уступом. Обеспечить согласование с экспериментальными данными по профилям температуры и продольной скорости. После этого сравнить и проанализировать результаты расчетов с различными моделями химической кинетики.

Научая новизна 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 работы 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 заключается в том, что описан успешный опыт настройки расчета и модификации математической модели течения при использовании коммерческого пакета вычислительной аэродинамики 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 с использованием собственной программы и ANSYS FLUENT;
- обработка и анализ экспериментальных данных.

Методология и метод исследований.

Для получения структуры и скорости ламинарного пламени рассматривалась модифицированная система уравнений изобарического течения и итерационный метод коррекции граничных условий.

Основная часть исследования выполнена на основе численного решения системы осреднённых по времени уравнений Навье-Стокса (RANS) для многокомпонентного газа с неравновесными химическими реакциями. Использовался коммерческий пакет вычислительной аэродинамики ANSYS FLUENT. Аппроксимация уравнений выполнена на основе метода конечного объема с использованием схемы второго порядка по всем переменным.

Для каждой из рассмотренных задач сначала проводился поиск физических факторов (помимо химической кинетики), которые наиболее сильно влияют на структуру решения, и достигалось наилучшее согласование с экспериментальными данными и результатами расчетов других авторов. После этого сравнивались расчеты с различными моделями химической кинетики, и анализировались причины различия результатов.

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 диффузионное 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;

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.

Соответствие диссертации паспорту научной специальности 1.1.9 – «Механика жидкости, газа и плазмы» заключается в том, что «Механика жидкости, газа и плазмы – область естественных наук, изучающая на основе идей и подходов кинетической теории и механики сплошной среды процессы и явления, сопровождающие течения однородных и многофазных сред при механических, тепловых, электромагнитных и прочих воздействиях, а также происходящие при взаимодействии текучих сред с движущимися или неподвижными телами». Решённые в работе задачи лежат в следующих областях исследований:

4. Ламинарные и турбулентные течения.
5. Течения сжимаемых сред и ударные волны.
9. Физико-химическая гидромеханика (течения с химическими реакциями, горением, детонацией, фазовыми переходами, при наличии излучения 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 результатов и публикации

Результаты работы прошли апробацию на 4 международных и отраслевых конференциях.

- 1) The First International Aerospace Symposium «The Silk Road», December 06-08 2018, Moscow;
- 2) 13-я научная конференция по горению и взрыву, 12-14 февраля 2020 г. ФИЦ ХФ РАН, Москва;
- 3) The 21st International Conference on the Methods of Aerophysical Research (ICMAR 2022), August 8-14 2022, Novosibirsk;
- 4) 16-я научная конференция по горению и взрыву, 8-10 февраля 2023 г. ФИЦ ХФ РАН, Москва;
- 5) Научный семинар кафедры информатики МФТИ под председательством члена-корреспондента РАН И.Б.Петрова, 20 апреля 2023 г., МФТИ, г.Долгопрудный.

Список публикаций по теме диссертации

Основные результаты работы получены автором лично и опубликованы в 4 статьях. Две статьи опубликованы в журналах из “белого” перечня научных журналов (<https://journalrank.rcsi.science/ru/>), остальные – в журнале из РИНЦ и обычного перечня ВАК (https://www.elibrary.ru/title_about_new.asp?id=50733).

- 1) Власенко В.В., Лю В., 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 В. 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.
- 3) Лю В. 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.
- 4) Лю В. Влияние модели химической кинетики на результаты численного моделирования турбулентных течений с горением // Труды МФТИ. – 2023. – Т. 15, № 2. С. 133-152.

Структура и объём диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, выводов и приложения. Полный объем диссертации 154 страниц текста с 80 рисунками и 14 таблицами. Список литературы содержит 161 наименование.

Обзор литературы по теме диссертации

A. Классификация механизмов химической кинетики и их развитие

В наиболее универсальной формулировке для описания течения газа с горением к системе уравнений движения добавляются дифференциальные уравнения в частных производных для массовых или мольных долей каждого химического вещества в изучаемой системе. Эти связанные уравнения часто порождают широкий спектр сильно различающихся характерных временных масштабов, что приводит к «жесткости» (существенному влиянию быстро затухающих мод на устойчивость решения). Стандартные методы решения дифференциальных уравнений, как правило, неэффективны при решении жестких систем [158]. Первый численный метод решения жестких дифференциальных уравнений связанной химической кинетики был разработан в 1952 году Кертисом и Хиршфельдером [57].

Раннему развитию химических кинетических механизмов способствует разработка решателей жестких кинетических уравнений, при этом первыми моделируемыми химическими системами были системы, описывающие озон [78] в 1953 г. и разложение гидразина [141] в 1956 г., за которыми последовали модели, описывающие горение водорода [61], метана [102, 132] и метанола [44, 157] в конце 60-х и 70-х годах.

Одной из наиболее простых реакций горения является реакция горения водорода в воздухе [20]. Детальные механизмы этой реакции, не учитывающие окисление азота и реакции с участием атомов углерода, обычно содержат около 20 реакций между 9 компонентами [83, 93, 113]. Детальные механизмы для углеводородов включают сотни компонент и тысячи реакций. К настоящему времени была опубликована серия *детальных механизмов* химической кинетики горения для однокомпонентных видов топлива и смешанного топлива на основе нефти (см. таб. 1). Для численного моделирования течений в канале современных энергетических установок с воспроизведением реальной трехмерной геометрии необходимо достичь сотен миллионов вычислительных ячеек. Подробный механизм реакции горения отдельного топлива или смеси топлив часто содержит сотни химических веществ, и эта величина больше, если механизм включает низкотемпературные реакции. Описание каждого вещества требует решения дифференциального уравнения в частных производных. Следовательно, практически нереально вести трехмерное численное моделирование горения, связав детальный механизм реакции с уравнениями гидромеханики. Таким образом, упрощение механизма становится необходимым шагом при моделировании горения.

Таблица 1 – Детальные механизмы горения углеводородных топлив

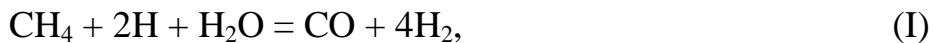
	Топливо	Кол. компонентов	Кол. Реакций
GRI-Mech 3.0 [137]	CH ₄ , натуральный газ	53	325
San Diego Mech [50]	CH ₄ , натуральный газ	56	235
USC Mech Версия II [153]	H ₂ /CO/C ₁ -C ₄	111	784

Скелетные механизмы получаются из детальных путем исключения несущественных для условий задачи веществ и реакций [23]. Для этого используются специальные математические алгоритмы: анализ матрицы чувствительности веществ к константам скоростей элементарных реакций, анализ скоростей производства веществ в реакциях; анализ характерных времен превращения веществ на основе анализа матрицы Якоби кинетической системы дифференциальных уравнений. Детальные механизмы позволяют предсказать все физические особенности процесса горения в выбранных условиях - скорость распространения ламинарного пламени, температуру адиабатического пламени, время задержки воспламенения и условия потухания. Скелетные механизмы для углеводородов могут включать десятки компонент и десятки или сотни реакций. Например, скелетный механизм окисления метана [139] содержит 35 реакций между 15 активными компонентами, а его уточненный аналог [90] - 42 реакций между 17 активными компонентами.

Дальнейшее упрощение механизма обеспечивают *редуцированные* кинетические схемы [75, 118], которые получаются из скелетных при помощи метода квазистационарного состояния или метода квазивесенных реакций.

Приближение квазистационарного состояния – это упрощение, которое применяется к описанию промежуточных веществ реакции, когда характерное время их химического производства (или расходования) намного меньше, чем характерное время их переноса (путем конвекции или диффузии). В этих условиях члены накопления, конвекции и диффузии в соответствующем уравнении сохранения намного меньше, чем химические члены, и ими можно пренебречь в первом приближении, тем самым сводя основное уравнение стационарного радикала к балансу между химическим производством и потребление. Это алгебраическое уравнение заменяет соответствующее дифференциальное уравнение в описании поля течения, тем самым снижая на единицу порядок интегрируемой системы дифференциальных уравнений. Во многих случаях химический баланс может быть решен явно для концентрации стационарных частиц.

К примеру, Петерс и Ки [117] разработали сокращенный механизм с четырьмя реакциями для расчета растянутого ламинарного диффузионного метан-воздух пламени, который имеет следующие реакции:



Здесь гипотеза квазистационарного состояния используется для промежуточных веществ: OH, O, HO₂, CH₃, CHO и CH₂O. Скорости глобальных реакций (I)~(IV) выражены через скорости 12 элементарных реакций.

Самыми компактными являются *глобальные кинетические схемы*, которые не выводятся напрямую их детальных, скелетных или редуцированных механизмов, а представляют собой небольшой набор брутто-реакций, заменяющих целые этапы реального кинетического процесса; скорости этих брутто-реакций могут аппроксимироваться абстрактными выражениями, отличающимися от аррениусовых зависимостей (см., например, [5, 68, 156]). Для углеводородов часто используют смешанные механизмы, в которых к глобальным брутто-реакциям, описывающим разложение исходного топлива на более простые вещества, добавляются элементарные реакции с участием этих веществ. Такие упрощенные кинетические механизмы в настоящей диссертации будут называться *квазиглобальными* [88].

На рис.1 приведены схемы пути реакции с отслеживанием элемента углерода в детальном, скелетном и глобальном механизме химической кинетики метана с воздухом. Детальные и скелетные кинетические схемы допускают разные пути реакции и разные сценарии применения. Редуцированные и глобальные, как правило, настроены на воспроизведение какого-либо одного сценария. Они могут точно предсказать либо время задержки воспламенения, либо скорость распространения пламени. Чем меньше реакций и компонент, тем модель менее универсальна и менее надёжна.

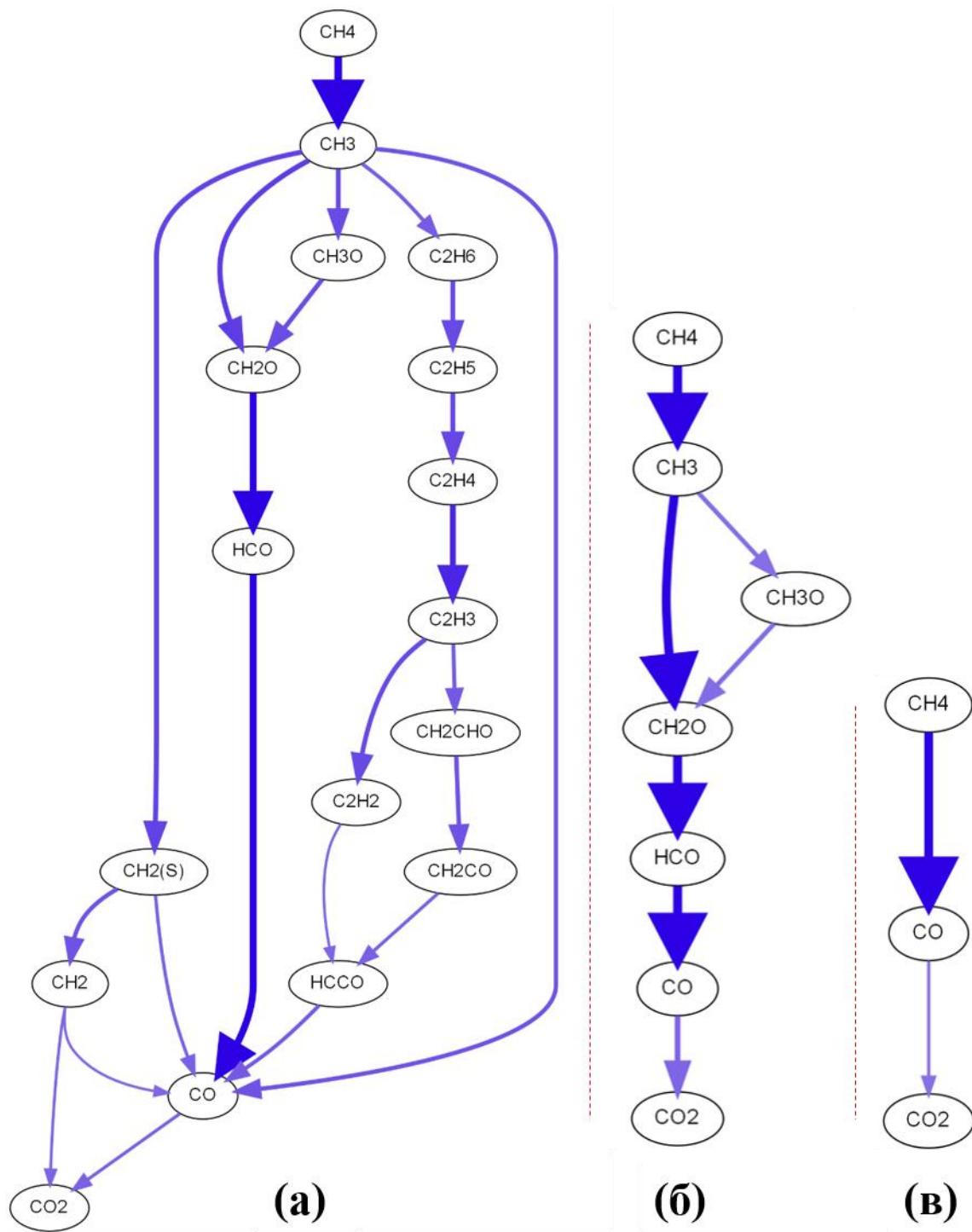


Рисунок 1. Схема пути реакции с отслеживанием элемента углерода в разном механизме химической кинетики метана с воздухом: (а) детальный, Gri-Mech 3.0 [137]; (б) скелетный Smooke et al. [139]; (в) глобальный, Басевич и др. [5]

В. Программы для анализа горения и моделирования реагирующих течений

Для анализа механизма химической кинетикой требуется численная модель для описания базовых реагирующих систем, таких, как калориметрическая бомба, реактор постоянного давления, ударные трубы, машины быстрого сжатия, проточные и струйные реакторы, стабилизированное пламя горелки и т.д. Существуют специальные программы, которые обычно используются при моделировании таких базовых реагирующих систем: пакет Ansys Chemkin-Pro [34], Cantera [74], OpenSMOKE++ [143], FlameMaster [120] и др.

В последнее время при решении задач аэродинамического проектирования, а также в научных исследованиях широко используются коммерческие пакеты вычислительной аэродинамики. Наиболее известным является пакет ANSYS CFD [33]. Другие примеры - CFD-FASTRAN [155], NUMECA FineTM [111], FlowVision [67]. Однако в профильных научных организациях, как правило, предпочитают применять программы собственной разработки. Например, в ONERA (Франция) имеются собственные (“in-house”) программы elsA [48] и CEDRE [122], в DLR (Германия) – FLOWer [87] и TAU [131], в FOI (Швеция) – EDGE [62], в ЦАГИ (Россия) – EWT-ЦАГИ [8, 9], в CARDC (Китай) – AHL3D [92].

Конечно, для физических исследований предпочтительны собственные расчетные программы, которые не являются “черным ящиком” и допускают возможность вторжения в расчет специалиста, понимающего физику решаемой задачи, что обеспечивает корректность получаемого решения. Тем не менее, в цикле аэродинамического проектирования неизбежно использование коммерческих пакетов вычислительной аэродинамики – по следующим причинам: 1) в них реализован широкий набор физических моделей; 2) такие программы обладают интерфейсом, понятным для специалистов с инженерным уровнем подготовки; 3) такие программы способны сохранять устойчивость в автоматическом режиме при возникновении нефизического поведения решения. Поэтому получение опыта физического анализа турбулентных течений с горением с использованием коммерческих программ является актуальным.

С. Исследования влияния кинетических механизмов на численное моделирование турбулентных течений с горением

Рассмотрим работы других авторов, в которых рассматривалось влияние модели химической кинетики на результаты расчета течений с горением.

В 1980 г. Evans & Schexnayder [65] исследовали влияние химической кинетики на моделирование сверхзвукового диффузионного горения водорода. Были сопоставлены две модели кинетики, одна из 7 компонентов (H_2 , O_2 , H , O , OH , H_2O и N_2) и 8 реакций, другая с 12 компонентами (с добавлением HO_2 , NO и NO_2) и 25 реакциями. Сопоставление двух моделей кинетики было выполнено для эксперимента Коэна и Гайла [53], в котором холодный водород ($T=276K$, $M=2.0$, $u=2432\text{м/c}$) инжектировался вдоль оси кругового сверхзвукового потока подогретого воздуха, загрязненного продуктами сгорания в огневом подогревателе ($T=1140K$, $M=1.9$, $u=1510\text{м/c}$). – см. рис.2. Давление в обоих потоках равно 1 атм.

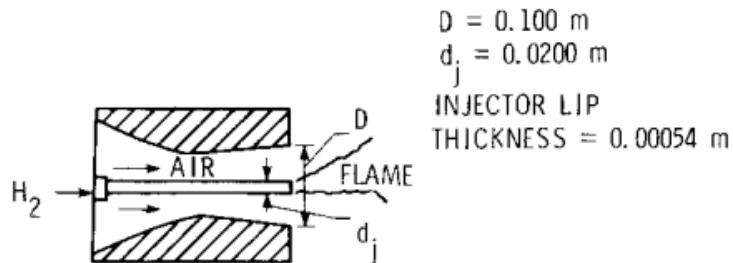


Рисунок 2 – Структура и геометрия экспериментальной модели Коэна и Гайла [53]

На рис. 3 показан профиль массовых долей N_2 , O_2 и H_2O , в четырех поперечных сечениях, полученный по моделям с 8 реакциями и 25 реакциями. В целом, детальная кинетика дала хорошее согласование с экспериментом по массовым долям N_2 , O_2 , а механизм с 8 реакциями, некорректно описывающий путь реакции и предсказывающий иную задержку воспламенения, дал заметные отклонения от эксперимента. Однако обе кинетики дали сильные ошибки по профилям паров воды. Следует отметить, что в этой работе для учета отличия средних скоростей реакции от “квазиламинарных” значений, посчитанных по средним массовым долям, вводилась поправка на “несмешанность” (unmixedness), которая является слишком грубым способом учета TCI.

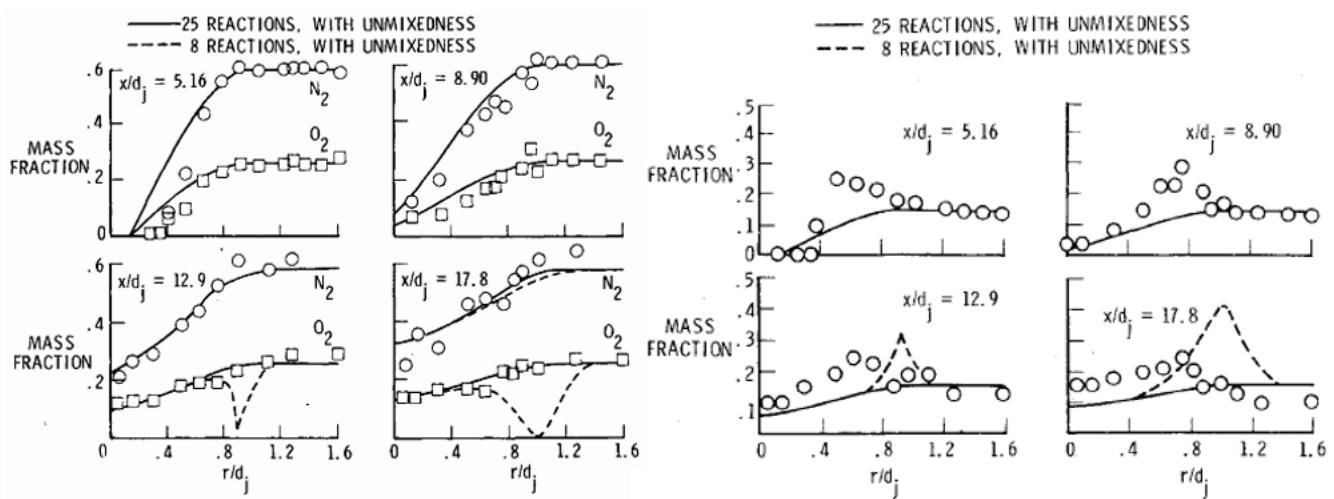


Рисунок 3 – Профили массовых долей N_2 , O_2 (слева) и H_2O (справа)

В статье Gerlinger et al. (2008 г.) [72] были сопоставлены шесть моделей горения водорода в воздухе: Jachimowski-1988 [83], Jachimowski-1992 [82] и Vajda et al. [148] – все три модели используют 19 реакций между 9 компонентами; укороченная версия механизма Jachimowski-1992 с 7 реакциями и 7 компонентами (“abridged Jachimowski”); механизм O’Conaire et al. [113] с 21 реакцией между 9 компонентами; механизм Gri-Mech 3.0 [137] с 29 реакциями между 9 компонентами; и одну глобальную кинетическую схему Marinov et al. [101] с одной реакцией между 4 компонентами. Перечисленные шесть моделей были применены к численному моделированию сверхзвукового приподнятого турбулентного диффузионного пламени, которое ранее было исследовано в эксперименте Cheng et al [51]. Экспериментальная установка показана в рис. 4,а. В эксперименте струя чистого водорода впрыскивается со скоростью звука в сверхзвуковой ($M=2.0$) окружающий поток воздуха, подогретый в огневом подогревателе и содержащий продукты сгорания водорода. Температура водорода 545К; подогретый поток воздуха имеет температуру 1250К и состав по массе $Y_{\text{O}_2} : Y_{\text{H}_2\text{O}} : Y_{\text{N}_2} = 0.245 : 0.175 : 0.58$. В расчетах использовалась модель турбулентности $q-\omega$ для низких чисел Рейнольдса. Для учета ТСИ применялся подход, основанный на предписанной совместной функции плотности вероятности реализации значений температуры и массовых долей всех компонент смеси из работы [73].

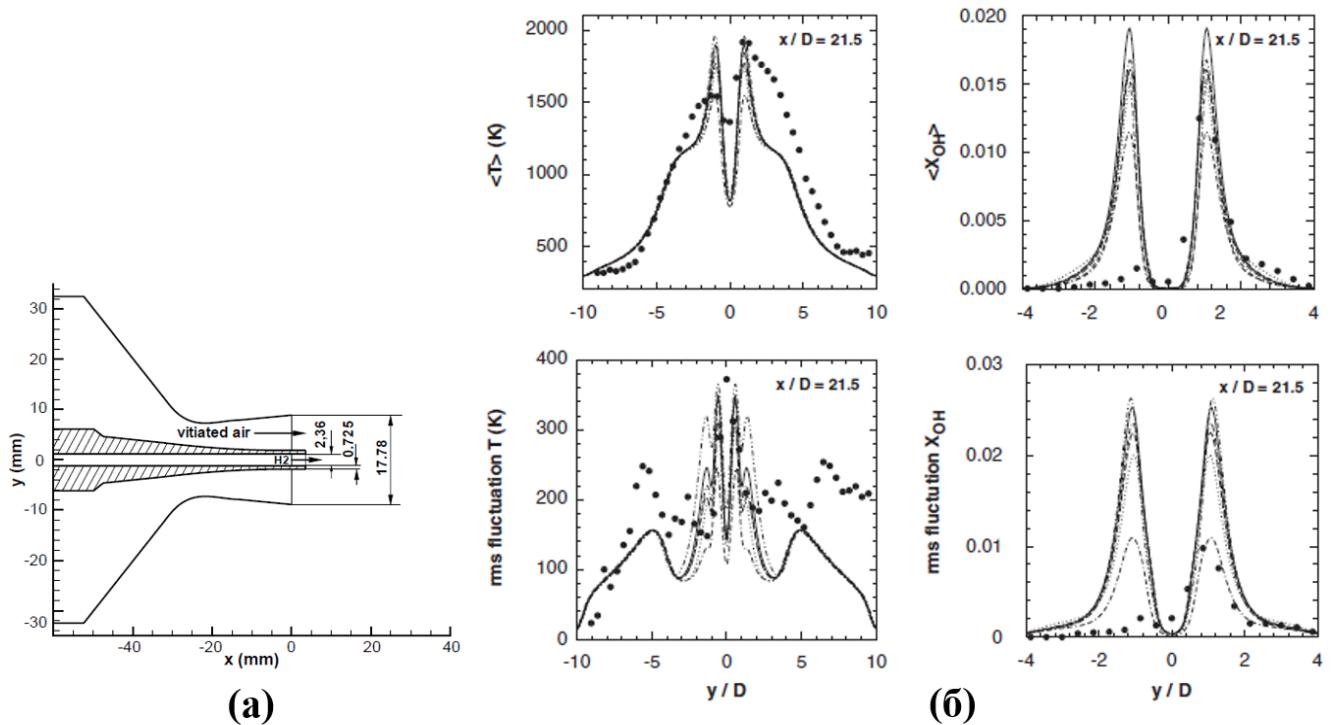


Рисунок 4 – (а) Установка эксперимента Cheng et al. [51](Размеры в миллиметрах)
(б) Сравнения профили средней температуры и среднеквадратичных колебаний температуры (сверху), и профили средней мольной доли OH и среднеквадратичных колебаний мольной доли OH (· · скелетный Jachimowski [82], — O'Conaire et al. [113], –· Gri-Mech 3.0 [137])

В работе изучено влияние кинетики на течение подогретого воздуха в подводящем канале (рис. 4,а), и установлено, что учет радикалов, образующихся в огневом подогревателе, обязательным. Вероятно, это относится и к большинству других экспериментов со сверхзвуковым горением, использующих предварительное сжигание. Полученные в расчетах поля средней температуры и средней мольной доли OH для эксперимента Cheng et al. приведены на рис. 5. Соответствующие профили указанных параметров в позиции $x/D = 21.5$ за инжектором показаны на рис. 4,б. Глобальная модель Marinov et al. [101] была признана непригодной для моделирования сверхзвукового горения, т.к. она дала неправильную задержку воспламенения и температуру пламени. Было установлено, что укороченная версия механизма Jachimowski-1992 пригодна при $T > 1050\text{K}$ при давлениях, близких к 1 атм. В остальных случаях предпочтительны детальные механизмы. При этом детальный механизм Vajda et al. [148] дал слишком маленькую задержку воспламенения, а механизм Gri-Mech 3.0 [137] –

слишком большую. Наилучшее согласование с экспериментом было достигнуто при использовании механизма O'Conaire et al. и Jachimowski 1992.

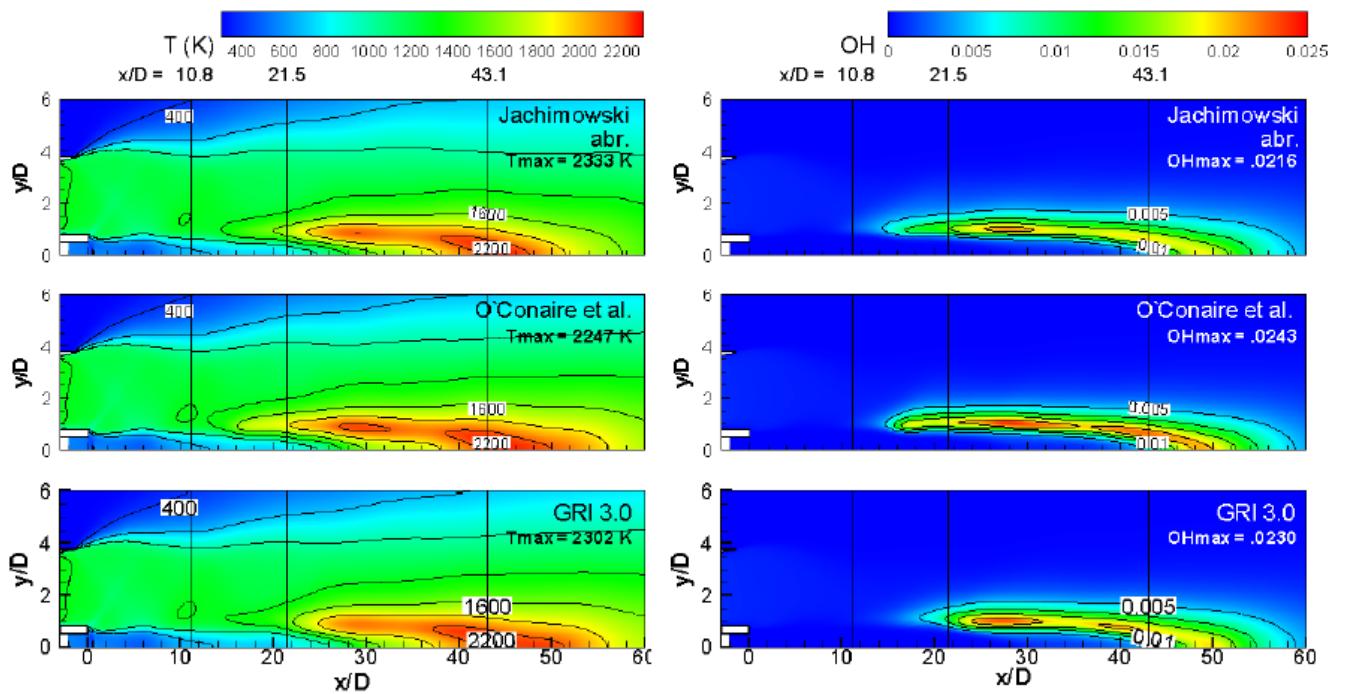


Рисунок 5 – Распределения средней температуры и средней мольной доли ОН для эксперимента Cheng et al. [44] с использованием различных механизмов реакции.

Berglund и др. в статье [41] исследовали влияние модели кинетики на вихреразрешающее численное моделирование (LES) высокоскоростного горения водорода с преимущественной ролью самовоспламенения в канале экспериментальной модели с пylonом, спроектированной NAL (National Aerospace Laboratory of Japan), которая была испытана экспериментально на стенде ONERA/LAERTE (см. рис. 6). В расчетах в качестве модели ТСИ была использована модель реактора частичного перемешивания (PaSR). Рассмотрены три кинетических механизма: глобальная модель Marinov et al. с одной реакцией [101], глобальная модель Роджерса и Чайнитца с 2 реакциями [123] и модель Давиденко и др. с 7 реакциями [59]. Время задержки воспламенения, предсказываемое этими моделями, было сопоставлено с предсказанием детального механизма с 19 реакциями из книги [118]. Было получено хорошее согласие для семистадийного механизма и разумное - для двухстадийного механизма.

Расчет с 7 реакциями лучше всего согласуется с экспериментом при сравнении мгновенных изображений самопроизвольного пламени (рис. 7,а), при сравнении осредненного по времени распределения давления вдоль нижней стенки канала (рис. 7,б) и при сравнении изображения OH-PLIF. Помимо более детальной кинетики, преимуществом расчета с 7 реакциями является моделирование конвективного и диффузионного переноса радикалов О, Н и OH.

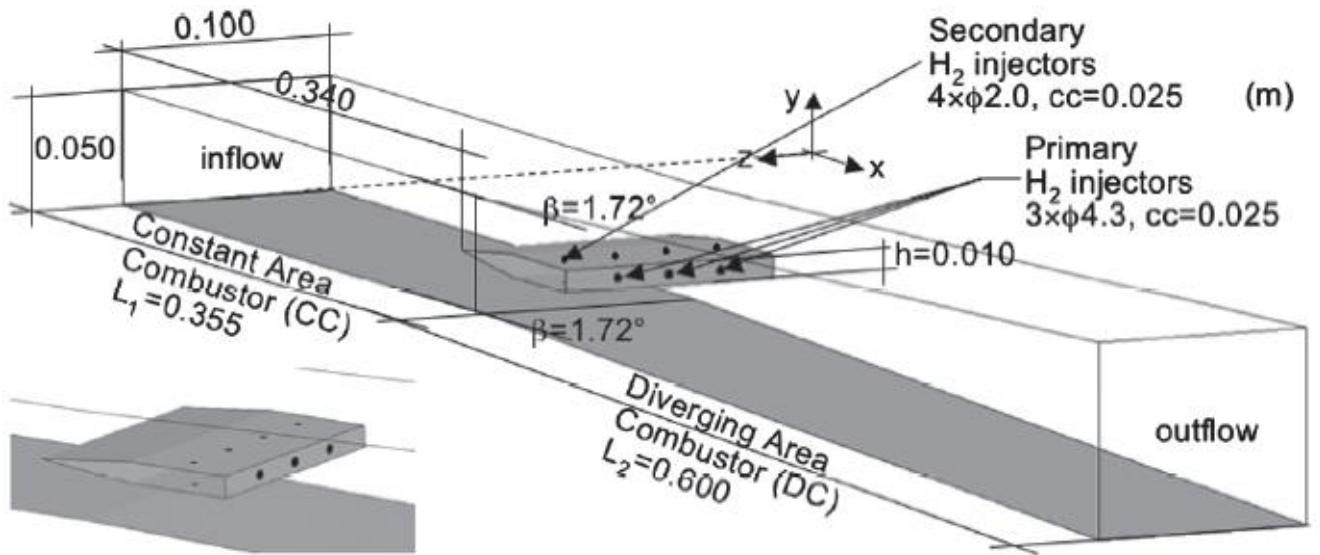


Рисунок 6 – Геометрия и размеры экспериментальной модели NAL

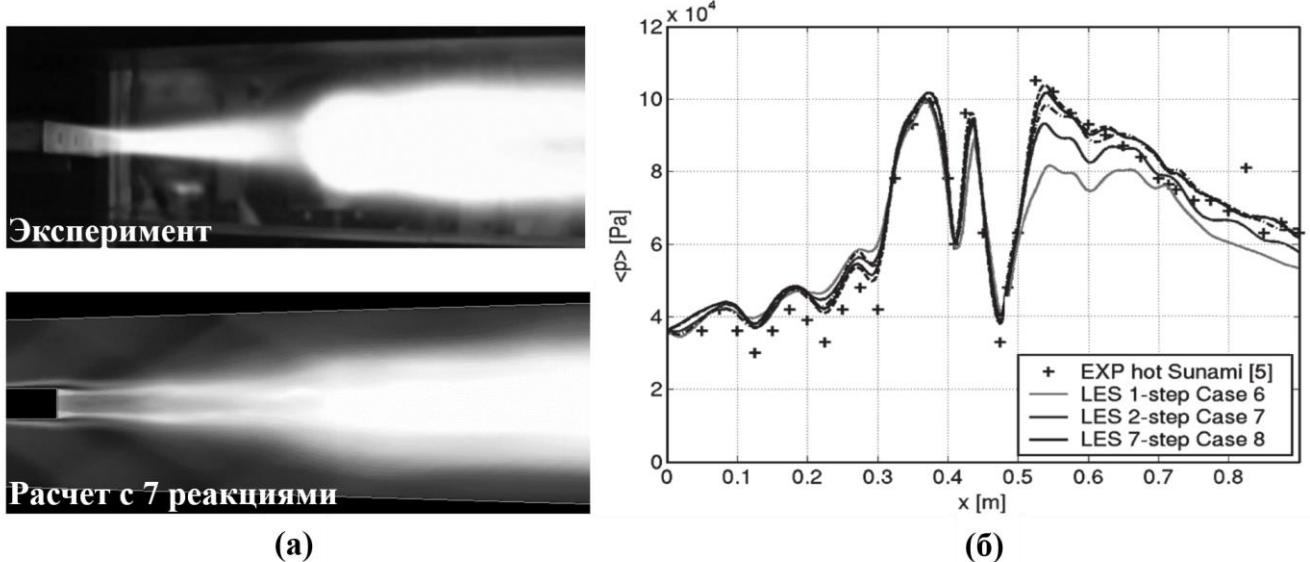


Рисунок 7 – Сравнение (а) мгновенных изображений самопроизвольного пламени и (б) осредненного по времени распределения давления вдоль нижней стенки канала

Экспериментальная модель Waidmann et al. [152] также представляет собой расширяющийся канал с пилоном-инжектором. Предварительно нагретый воздух расширяется через сопло Лаваля и поступает в канал со скоростью,

соответствующей числу Маха $M \approx 2$. Предварительный нагрев воздуха достигался с помощью сжигания водорода, что привело к загрязнению воздуха продуктами горения и радикалами. Геометрия экспериментальной модели и граничные условия расчета показаны на рис. 8.

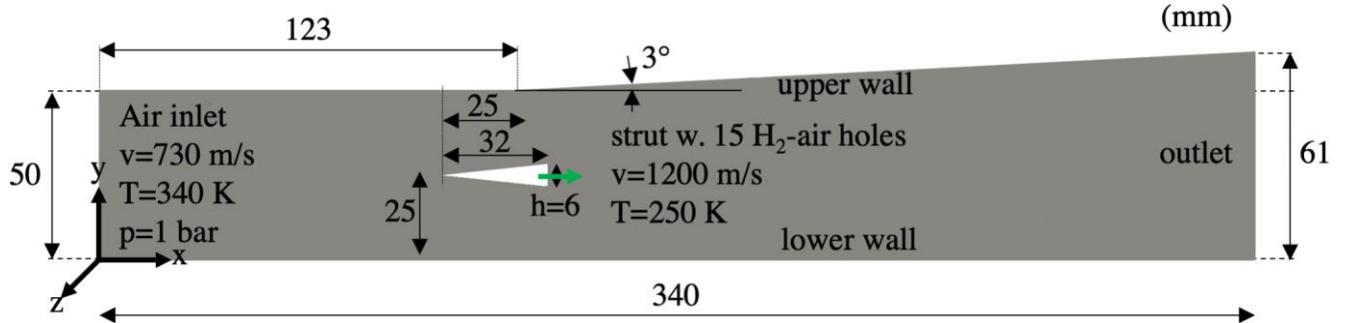


Рисунок 8 – Геометрия экспериментальной модели и граничные условия расчета [69]

Влияние химической кинетики на результаты численного расчета этого эксперимента было изучено Fureby и др. [69, 70], и Liu и др. [96]. Оба расчета проводились методом моделирования крупных вихрей (LES) с использованием модели горения PaSR. В исследовании Liu et al. [96] были рассмотрены пять детальных механизмов химической кинетики водорода с 9 компонентами (Burke19 [46], Li19 [93], Saxena21 [130], Marinov20 [101], и Zettervall22 [161]). Между тем, Fureby и др., кроме детальных механизмов (Jachimowski20 [83] и Zettervall22 [161]) рассматривали также упрощенные кинетические механизмы (Rogers2 [123], Davidenko7 [58]).

На рис. 9 показано сравнение осредненных по времени распределений (а) статического давления вдоль нижней стенки и (б) осевой скорости на осевой линии, полученных в обоих расчетах. Можно прийти к выводу, что глобальные модели кинетики не предсказывают разумные скорости тепловыделения. В обоих расчетах наилучшее предсказание дал механизм Zettervall22.

Изучая распределения температуры и компонентов, Liu и др. обнаружили, что распределения этих параметров в пространстве, полученные с помощью механизмов Saxena21, Marinov20 и Zettervall22, существенно отличаются от распределений, полученных на основе механизмов Burke19 и Li19. Это связано с различными скоростями реакций разложения H_2 ($H_2+OH=H_2O+H$, $H_2+O=OH+H$) и

реакции обмена с участием HO_2 ($\text{HO}_2 + \text{H} = \text{OH} + \text{OH}$). Таким образом, разные многостадийные механизмы могут давать различную трехмерную сверхзвукового пламени, - несмотря на то, что все они предсказывают близкие значения времени задержки воспламенения и скорости ламинарного пламени.

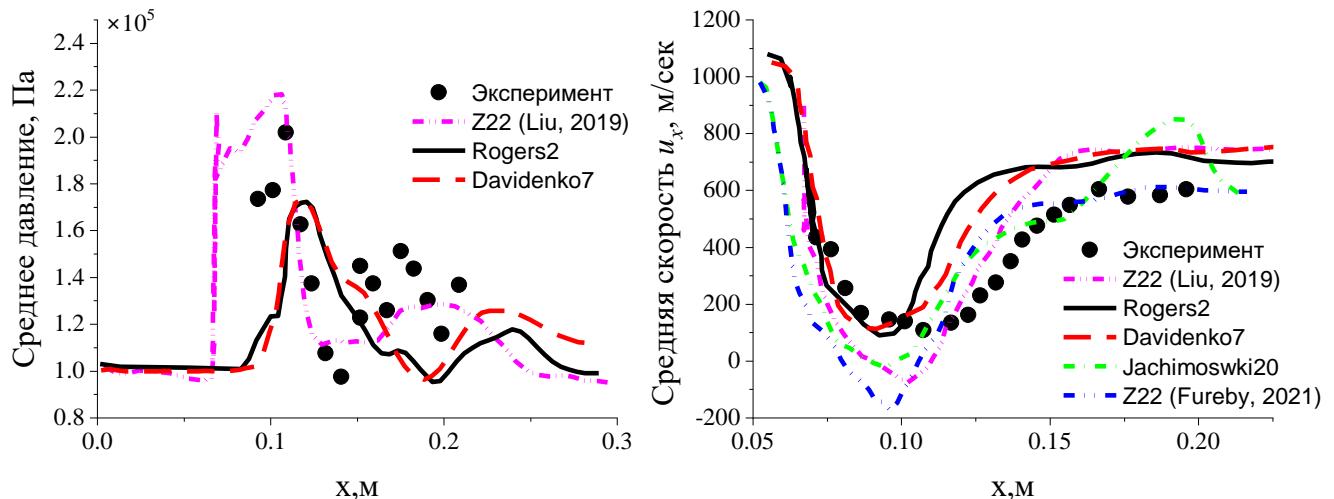


Рисунок 9 – Сравнение осредненных по времени (а) статического давления вдоль нижней стенки и (б) осевой скорости на осевой линии из статьи Liu. et al [96] с модели кинетики Zettervall22 (“Z22”) [161], и из статьи Fureby et al. [69, 70] с четыре модели кинетики по сравнению с экспериментальными результатами.

Также в работе Liu и др. [96] были проанализированы полноты сгорания и скорости тепловыделения. Механизм Zettervall22 предсказал полноту сгорания на 5% выше, чем самая низкая полнота сгорания, которую дал механизм Li et al.

На рис. 10 представлены численные шлирен-картины течения (поля градиента плотности $\nabla\rho$) с наложенным тепловыделением. Очень существенное влияние механизма реакции наблюдается в случае укороченной модели Davidenko7, которая предсказывает слишком раннее выделение тепла и довольно плохо согласуется с экспериментальными данными. Для механизмов реакции Jachimowski20 и Zettervall22 наблюдается хорошее совпадение с экспериментальными данными как в количественном, так и в качественном отношении; при этом предсказания, основанные на Zettervall22, находятся в наилучшем количественном согласии с экспериментальными данными.

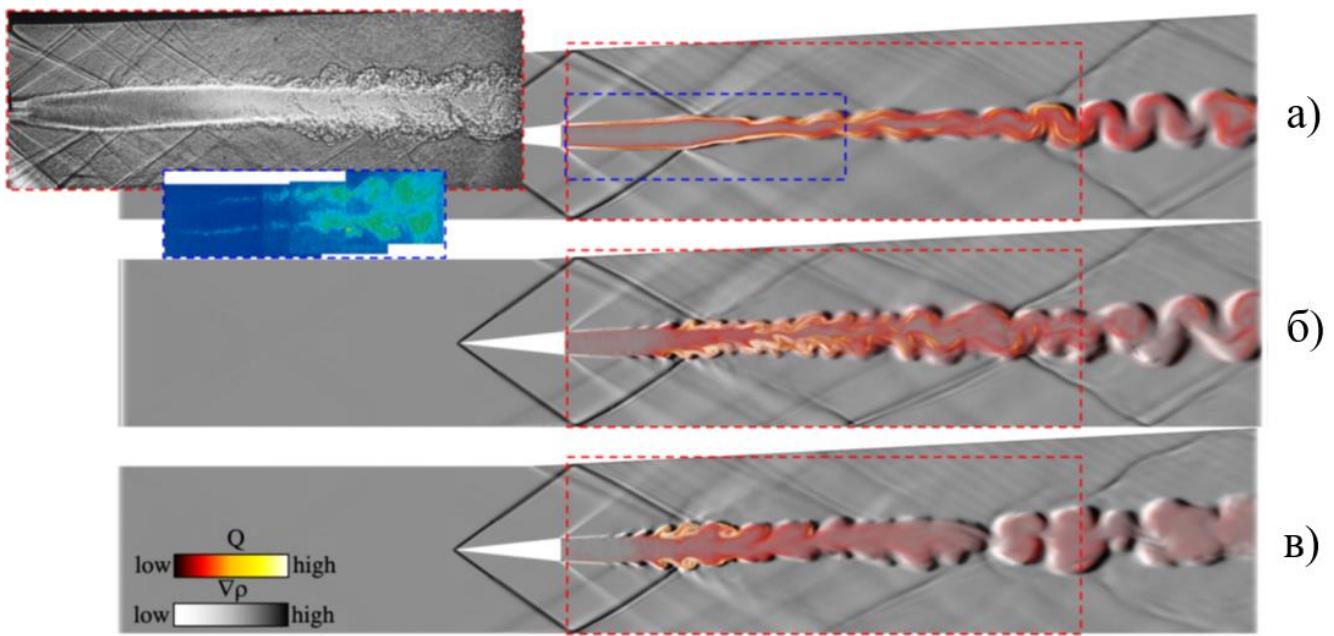


Рисунок 10 – объемные изображения со стороны градиента плотности $\nabla\rho$ с наложенным тепловыделением Q для модели кинетики а) Davidenko7, б) Jachimowski20, в) Zettervall22 вместе со вставками, показывающими экспериментальные изображения Шлирена (вверху) и OH-LIF (внизу) реагирующего случая [69]

Ширяева и др. [133] изучали возможное влияние модели химической кинетики на результаты расчета пристеночного турбулентного горения водорода в классическом эксперименте Бэрроуза и Куркова [47]. Водород впрыскивался параллельно воздушному потоку, подогретому огневым подогревателем. Измерения состава проводились в выходном сечении испытательного участка. Схема эксперимента и параметры струи топлива и воздуха приведены на рис. 11,а. Были рассмотрены кинетические схемы Moretti с 7 компонентами и 8 реакциями [108], механизм Старика и др. с 9 компонентами и 20 реакциями, разработанный в ЦИАМ [27], и механизм ONERA с 7 компонентами и 7 реакциями [58]. Расчеты проводились в квазиламинарном приближении. Полученные профили мольных долей H_2O в выходном сечении показаны на рис. 11,б. Был сделан вывод о несущественном влиянии кинетики на структуру течения. Следует, однако, заметить, что в этой работе сравнивались упрощенные кинетические схемы сопоставимого класса точности. В более поздней работе [26] показано, что переход к детальной кинетике при описании данного эксперимента существенно улучшает согласование расчета и эксперимента.

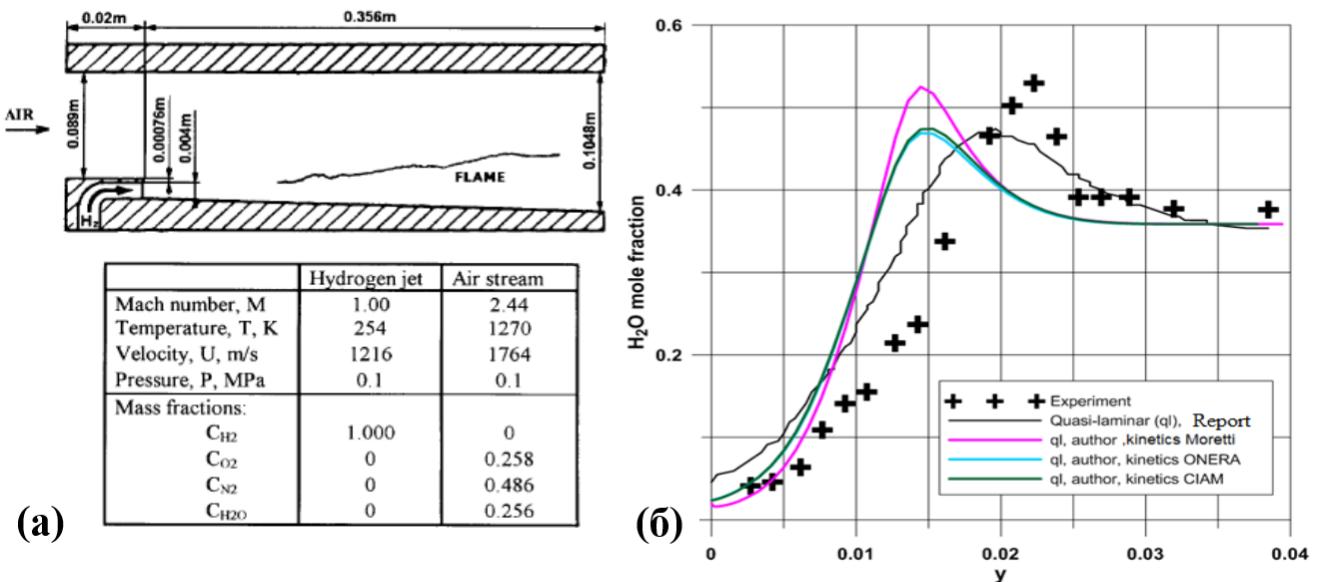


Рисунок 11 – (а) Схема эксперимента Burrows-Kurkov [47] и параметры струи топлива и воздуха
(б) Влияние модели химической кинетики на профили мольных долей H_2O
в выходном сечении [55]

В 2020 г. Salvador B.R. [128] исследовал глобальное влияние механизмов химических реакций на неперемешанное горение метана в воздухе в одноэлементном коаксиальном ракетном инжекторе. Геометрия инжектора основана на конструкции непрерывно регулируемой резонансной камеры (CVRC), разработанной в Университете Пердью [160], которая обеспечивает реакцию газообразного метана и кислорода в условиях переменного давления (рис. 12).

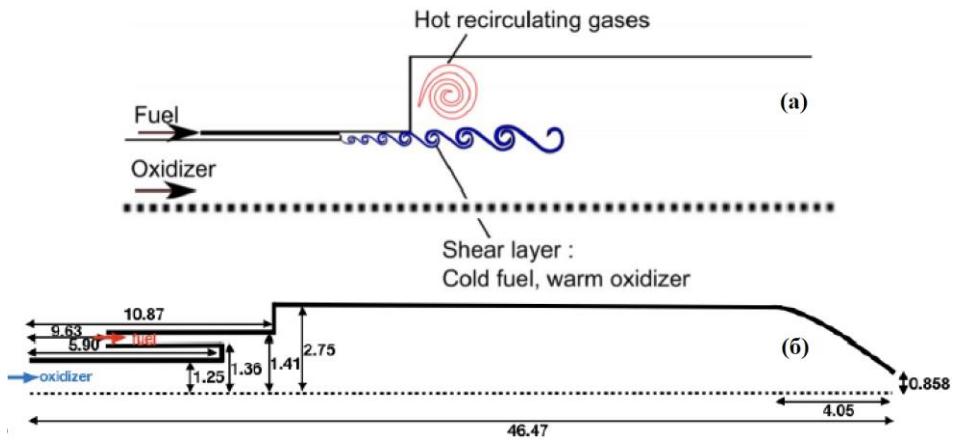


Рисунок 12 – (а) Схема инжектора и динамика потока (б) Схема полной камеры сгорания
(Размеры в миллиметрах).

Были сопоставлены три модели кинетики метана (редуцированная модель WestbrookDryer9 с 9 компонентами и 7 реакциями [93], скелетная механизм FFCM-1 с 38 компонентами и 291 реакциями [138], и детальный механизм Gri-

Mech 3.0 с 36 компонентами и 218 реакциями [137]). Исследовалось влияние химической кинетики на результаты расчета при значениях отношении потоков импульса (MFR, Momentum Flux Ratio) 0.29 и 18.56. Поля мгновенной и осредненной по времени температуры для MFR=0.29 представлены на рис. 13. Видно, что получены существенно различные картины течения. Автор пришел к выводу, что разные химические механизмы могут требовать различного сеточного разрешения для достижения одинаковых полей потока.

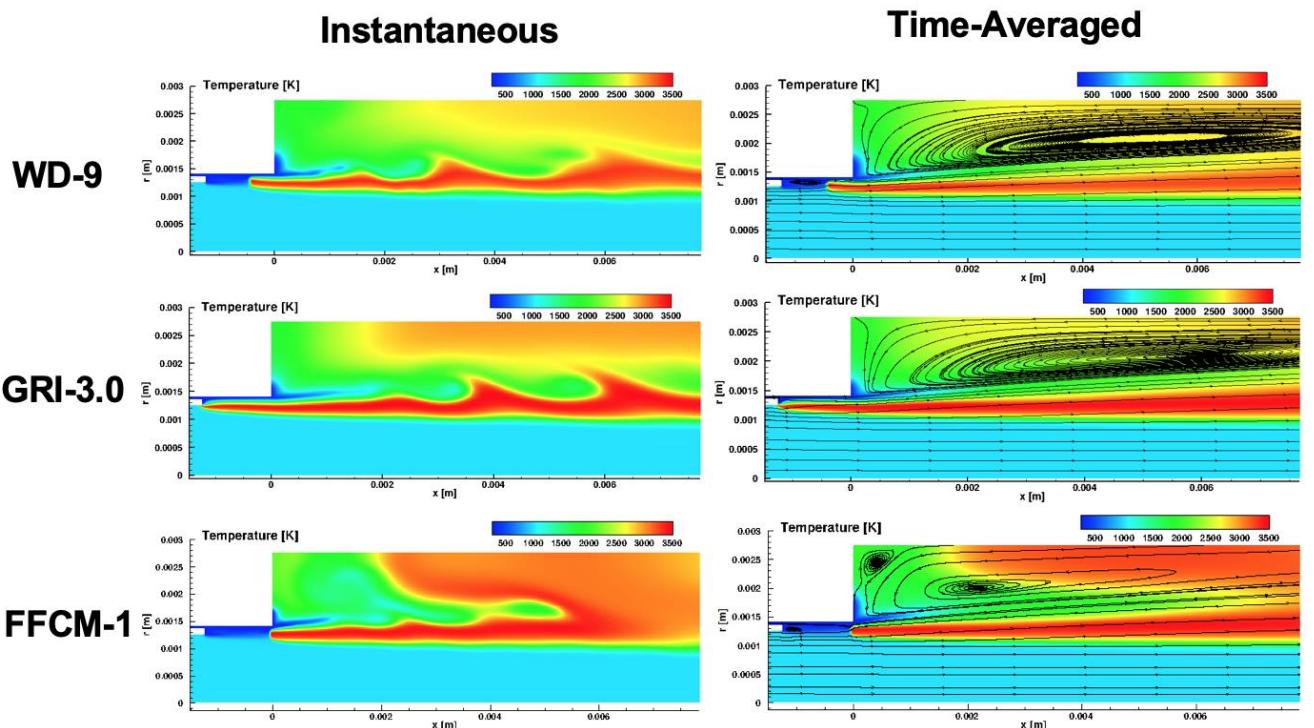


Рисунок 13 – Мгновенное и осредненное по времени температурное поле для всех трех химических механизмов при низком отношении потоков импульса, MFR = 0.29.

Канал с обратным уступом является классической конфигурацией для стабилизации горения. Для экспериментальной модели, которая исследовалась в ЦАГИ [107], были изучены влияние кинетики на процесс стабилизации горения углеводородного топлива [18] и на колебательные процессы [13]. В расчетах участвовали коллективы из ЦАГИ и институтов РАН.

Модель представляет собой канал прямоугольного сечения с уступом, состоящий из узкого участка с малым углом расширения («изолят») и широкого участка постоянного сечения (рис. 14). Слева в канал втекает сверхзвуковой поток воздуха с параметрами: $M \approx 2.5$, $T \approx 530$ К. В экспериментах модельная камера

исследовалась в системе присоединенного воздухопровода с огневым подогревателем и обогащением кислородом. В конце изолятора установлен пylon с четырьмя отверстиями, из которых в поток подается жидкое углеводородное топливо из ряда высших алканов. Для поджига используется пневмодроссель, установленный в конце канала. Кратковременная подача сжатого воздуха вызывает запирание и приводит к формированию псевдоскачка с развитыми отрывными зонами, условия течения в которых способствуют самовоспламенению.

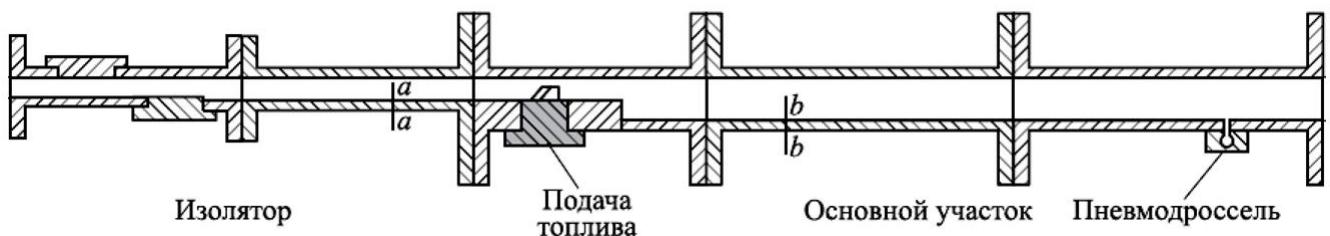


Рисунок 14 – Схема модельной камеры сгорания ЦАГИ [19, 24]. (Размеры в миллиметрах)

В работе [18] показано, что при использовании базового варианта модели химической кинетики (квазиглобальной модели, содержащей одну глобальную реакцию расщепления углеводородного топлива на CO и H₂O из работы [156] дросселирование канала не приводит к самовоспламенению. Для достижения горения в модель был введен учет низкотемпературной многостадийности самовоспламенения углеводородов на основе работы [6]. В результате получен режим течения с незатухающими продольными колебаниями пламени (рис. 15). Такой режим наблюдался ранее в расчетах течения с большей температурой входящего потока при использовании базовой модели кинетики [12]. Установлено, что в обоих случаях работает один и тот же механизм колебаний, хотя в новых расчетах есть эффекты многостадийного самовоспламенения. Показана независимость установившихся колебаний от переходного процесса развития горения.

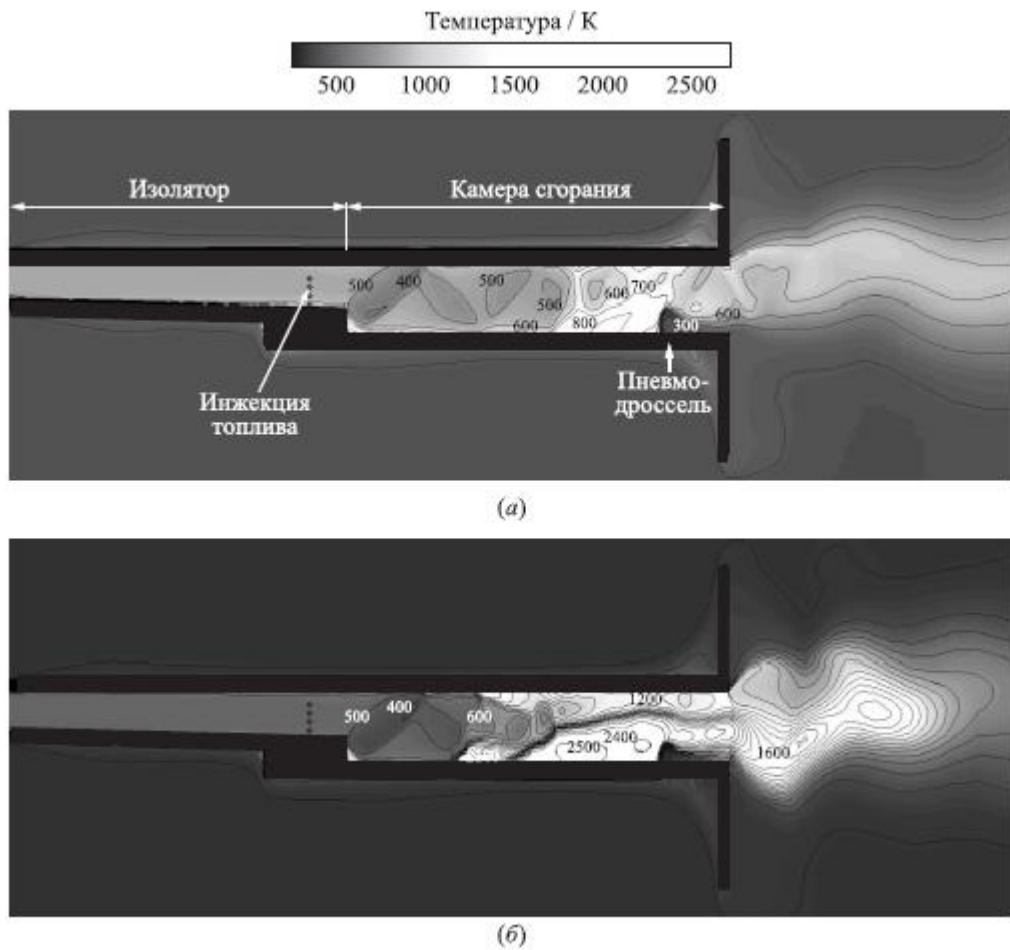


Рисунок 15 – Сравнение полей температуры в момент времени $t = 5$ мс:
 (а) базовая кинетическая схема; (б) модифицированная кинетическая схема.
 Масштаб по вертикали увеличен

В работе [13] в ходе расчетов углеводородное топливо из высших алканов было формально заменено на пропан (который имеет близкое отношение массы углерода и водорода и является по ряду свойств неплохим аналогом исходного топлива). Использовалась квазиглобальная кинетика самовоспламенения пропана из работы [6]. При этом в расчетах было получено стационарное горение в стоячей волне дефлаграции, распространяющейся за счет молекулярной и турбулентной диффузии тепла и массы. Однако, если формально заменить в используемой кинетической схеме пропан на исходное топливо из высших алканов (с большим молекулярным весом и другими термодинамическими свойствами), то в канале формируются незатухающие колебания. Следует отметить, что рассмотренная в [13] модель кинетики самовоспламенения пропана не предназначена для описания распространения волны горения за счет переноса тепла.

На основе сделанного обзора можно прийти к следующим выводам:

1. Выбор кинетической схемы может играть определяющую роль в результатах моделирования течений данного класса.
2. Механизмы кинетики водорода с 9 компонентами (радикалы: OH, H, O, HO₂ и H₂O₂) более предпочтительны для предсказания эффектов самовоспламенения, чем механизмы с 7 компонентами (без пероксидов).
3. Глобальные модели слишком чувствительны к режиму течения, обладают очень узкой областью применимости и, вообще говоря, неприменимы к описанию сложных течений.
4. Различные детальные механизмы могут порождать в расчетах различную структуру сверхзвукового пламени, даже если они предсказывают близкие значения задержки воспламенения и скорости ламинарного пламени.
5. Химические механизмы могут иметь разные требования к сеточному разрешению для достижения одинаковых полей течения.

В настоящей диссертации рассмотрены два классических эксперимента по горению в каналах, в которых возникают основные физические механизмы, характерные для реальных энергетических устройств. 1-й эксперимент касается высокоскоростного неперемешанного горения водорода со стабилизацией за счет самовоспламенения, а 2-й - медленного предварительно перемешанного горения метана со стабилизацией на ступеньке и возникновением волны диффузионного пламени. Такие противоположные постановки задачи выбраны для того, чтобы максимально расширить область применимости сделанных в диссертации выводов.

Содержание диссертации

В Главе 1 рассматриваются физико–математические модели и численный метод, применяемые далее для описания турбулентных течений реагирующего газа. Представлена полная система уравнений Рейнольдса для течений реагирующего газа и её замыкающие соотношения. Представлены методы вычисления источниковых членов в уравнениях компонентов смеси. Рассмотрена детальная теория для описания молекулярной диффузии газовых смесей. Дано описание используемых в работе моделей турбулентности SST и BSL $k - \omega$. Рассмотрена постановка граничных условий на стенках с шероховатостью и описана валидация реализованной модели шероховатости в Ansys Fluent применительно к турбулентному пограничному слою на пластине. Представлены подробные описания моделей турбулентного горения – класса моделей реактора частичного перемешивания (PaSR).

В Главе 2 решена задача о распространении ламинарного пламени в предварительно перемешанной смеси и исследованы кинетические механизмы, которые используются далее для решения основных задач диссертации. Написана одномерная система уравнений ламинарного пламени. Представлены численные методы для решения уравнений и для вычисления скорости потока, и результаты расчетов с глобальным механизмом горения метана в воздухе. Потом представлены результаты расчетов на основе метода функции тока. В конце сопоставлены расчеты ламинарного пламени водорода и метана на основе упрощённых и детальных кинетических схем, и анализируется влияние кинетического механизма на структуру и скорость распространения пламени.

В Главе 3 в рамках нестационарных уравнений Рейнольдса (URANS) выполнено численное моделирование классического эксперимента ONERA по высокоскоростному неперемешанному турбулентному горению водорода в расширяющемся канале, выполненному в рамках международного проекта LAPCAT II. Дано подробное описание этого эксперимента и использованных в них средств измерений. Представлены расчетная область и варианты расчетной сетки, численный метод и граничные условия для моделирования этого

эксперимента. Рассмотрено влияние модели кинетики на распределение массовой доли компонентов в подогревателе (с соплом Лаваля). Представлены результаты модерирования течения в гладком канале при различных условиях теплообмена с использованием различных кинетических схем. Проанализированы факторы, определяющие структуру течения в экспериментальной модели с шероховатостью. Представлены результаты влияния модели химической кинетики на распределение давления по стенкам канала, на трехмерную структуру течения, на распределение тепловых потоков по стенкам канала, и на полноту сгорания топлива.

В Главе 4 также в рамках нестационарных уравнений Рейнольдса (URANS) выполнено численное моделирование классического эксперимента ONERA по дозвуковому предварительно перемешанному турбулентному горению метана в канале с уступом. Дано подробное описание этого эксперимента и использованных в них средств измерений. Представлены расчетная область и варианты расчетной сетки, численный метод и граничные условия для моделирования этого эксперимента. Сначала рассмотрены результаты расчетов без горения с использованием двух моделей турбулентности. Далее выбрана модель турбулентности, которое дает более близкое к эксперименту описание течения без учета ТСI. Потом описана реализация в ANSYS FLUENT модели PaSR Хомяка и Карлссона на основе модели EDC представлены результаты расчетов с этой моделью при использовании базовой модели кинетики. Затем представлены результаты расчетов с использованием модели PaSR и скелетной модели химической кинетики. Даны детальный анализ и объяснение, полученные по модели PaSR результатов. Наконец, представлены результаты расчетов на основе модели турбулентного горения EPaSR и скелетной модели химической кинетики, которые подтверждает предложенное объяснение.

В Приложении А представлены использованные в диссертации механизмы химической кинетики метана в воздухе.

В Приложении Б представлены использованные в диссертации механизмы химической кинетики водорода в воздухе.

Глава 1. Модели и методы для описания турбулентных течений реагирующего газа

1.1 Система уравнений Рейнольдса для течений реагирующего газа

Основные уравнения для описания осредненного по времени турбулентного движения сжимаемого вязкого многокомпонентного газа с химическими реакциями в декартовой системе координат имеют вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0, \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tau_{ij} + \rho R_{ij}), \quad (1.2)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_j E)}{\partial x_j} = -\frac{\partial (p u_j)}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} [u_i (\tau_{ij} + \rho R_{ij}) + q_j + \rho \sigma_j + Q_j(Y_k) + J_j(k)], \quad (1.3)$$

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_j Y_k)}{\partial x_j} = \frac{\partial J_j(Y_k)}{\partial x_j} + S_k. \quad (1.4)$$

В случае, если для описания турбулентности используется гипотеза Буссинеска о подобии турбулентного и молекулярного переноса, данную систему уравнений замыкают следующие соотношения:

$$1) \text{ уравнение состояния } p = \rho R T, \text{ где } R = R_0 \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{Y_k}{m_k};$$

2) полная энергия единицы массы газа:

$$E = \frac{1}{2} u_i u_i + k + \sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_k h_k(T) - \frac{p}{\rho}, \quad (1.5)$$

где $k = u_m'' u_m'' / 2$ – кинетическая энергия турбулентности;

3) тензор вязких напряжений:

$$\tau_{ij} = -\frac{2}{3} \mu S_{kk} \delta_{ij} + 2 \mu S_{ij}, \quad (1.6)$$

где $S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$ – тензор скорости деформации;

4) молекулярные потоки тепла:

$$q_j = \lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} \approx \frac{\mu c_p}{Pr} \frac{\partial T}{\partial x_j}; \quad (1.7)$$

5) турбулентные потоки тепла:

$$\rho \sigma_j \approx \frac{\mu_t c_p}{Pr_t} \frac{\partial T}{\partial x_j}, \quad (1.8)$$

где турбулентное число Прандтля принимаются равными $Pr_t = 0.9$, c_p – удельная теплоемкость единицы массы газовой смеси при постоянном давлении,

вычисляется по формуле $c_p = \sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_k \frac{dh_k(T)}{dT}$;

6) суммарный (молекулярный + турбулентный) диффузионный поток тепла, обусловленный неоднородностью полей массы различных компонент смеси:

$$Q_j(Y_k) = \sum_{k=1}^{N_{sp}} h_k(T) J_j(Y_k); \quad (1.9)$$

7) выражения для суммарных диффузионных потоков массы компонент смеси:

$$J_j(Y_k) \approx \left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial Y_k}{\partial x_j}; \quad (1.10)$$

8) диффузионный поток кинетической энергии турбулентности:

$$J_j(k) = \overline{\tau_{ij} u_i'' u_j''} - \frac{1}{2} \overline{\rho u_i'' u_i'' u_j''} \approx \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j}; \quad (1.11)$$

9) тензор напряжений Рейнольдса:

$$\rho R_{ij} = -\rho \overline{u_i'' u_j''} \approx 2\mu_t \left(S_{ij} - \frac{1}{3} d \delta_{ij} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij}, \quad d = \frac{\partial u_k}{\partial x_k} = \operatorname{div} \vec{V}. \quad (1.12)$$

Таким образом, все параметры в уравнениях (1.1)~(1.4) определены, за исключением турбулентной вязкости μ_t и кинетической энергии турбулентности k .

1.2 Источниковые члены в уравнениях компонентов смеси

Источниковые члены k -й компонента в уравнениях (1.4) вычисляются как сумма вкладов от реакций, в которых участвует k -й компонент:

$$S_k = -m_k \sum_{i=1}^{N_{react}} v_{ki} W_i, \quad (1.13)$$

где m_k – молекулярная масса k -й компонента, $v_{ki} = v_{ki}^f - v_{ki}^b$ коэффициенты при этом веществе в уравнениях реакций. $W_i = \omega_i^f - \omega_i^b$ – скорость i -й реакции. Скорости прямой и обратной i -й реакции, ω_i^f и ω_i^b , обычно выражаются в формулами вида:

$$\omega_i^{f,b} = K_i^{f,b}(T) \cdot \rho^{\sum_k v_k^{f,b}} \prod_{k=1}^{N_{sp}} \left(\frac{Y_k}{m_k} \right)^{v_k^{f,b}}. \quad (1.14)$$

Здесь $K(T)$ – “константа” скорости реакции, которая аппроксимируется формулами вида:

$$K(T) = AT^n e^{-\frac{E_a}{RT}}. \quad (1.15)$$

Константы скорости обратных реакций могут быть выражены через константы равновесия по формуле

$$K_i^b(T) = \frac{K_i^f(T)}{K_i^{eq}(T)}, \quad (1.16)$$

где $K_i^{eq}(T)$ – константа равновесия i -й реакции, определяемая формулой:

$$K_i^{eq}(T) = \exp \left\{ \frac{\sum_{k=1}^{N_{sp}} G_k^*(T) \Delta v_{ki}}{R_0 T} \right\} \left(\frac{R_0 T}{p_0} \right)^{\Delta n_i}. \quad (1.17)$$

Здесь $\Delta n_i = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \Delta v_{ki}$, $G_k^*(T)$ – Потенциал Гиббса одного моля k -го компонента

при стандартном давлении p_0 :

$$G_k^*(T) = h_k(T) - T \left[s_k(T^*, p^*) + \int_{T^*}^T c_{pk}(T) \frac{dT}{T} \right], \quad (1.18)$$

где s_k – энтропия k -го компонента, c_{pk} – удельная теплоемкость при постоянном давлении для одного моля k -го компонента.

1.3 Теория физических свойств газовых смесей

1.3.1 Молекулярная вязкость

Молекулярная вязкость однокомпонентного газа может быть определена с использованием молекулярно-кинетической теории следующим образом [49]:

$$\mu = 2.67 \times 10^{-6} \frac{\sqrt{mT}}{\sigma^2 \Omega}, \quad (1.19)$$

где $\Omega = \Omega(T^*) = \Omega\left(\frac{T}{\epsilon/k_B}\right)$. σ – диаметр столкновения, (в ангстремах, где

1 ангстрем равен 1.0×10^{-10} метрам) и ϵ/k_B – потенциальный параметр, К [79].

Значения этих двух параметров для различных материалов приведены в таб 1.1.

Закон смешения идеальных газов [159] используется для расчета молекулярной вязкости смеси газов μ .

$$\mu = \sum_i \frac{X_i \mu_i}{\sum_j X_j \phi_{ij}}, \quad (1.20)$$

где X_i – мольная доля i -й компонентов смеси, а ϕ_{ij} – безразмерная константа, которая рассчитывается по формуле

$$\phi_{ij} = \left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{1/2} \left(\frac{m_j}{m_i} \right)^{1/4} \right]^2 \left/ \left[8 \left(1 + \frac{m_i}{m_j} \right) \right]^{1/2} \right.. \quad (1.21)$$

Таблица 1.1 – Характеристическая длина Леннарда-Джонса σ и энергетические параметры ϵ/k_B для разных компонентов

Компонент	H	H_2	H_2O	O	OH	O_2	HO_2	H_2O_2	H
σ , ангстрем	2.05	2.92	2.605	2.75	2.75	3.458	3.458	3.458	2.05
ϵ/k_B , К	145	38	572.4	80	80	107.4	107.4	107.4	145
Компонент	CH_4	CO	CO_2	CH_2O	CH_3	CH_3O	HCO	N_2	
σ , ангстрем	3.758	4	3.941	4	4	4	4	3.621	
ϵ/k_B , К	148.6	100	195.2	100	100	100	100	97.53	

1.3.2 Теплопроводность

Молекулярные диффузионные потоки тепла газовой смеси определяются законом Фурье:

$$q_j = \lambda \frac{\partial T}{\partial x_j}. \quad (1.22)$$

Коэффициент теплопроводности однокомпонентного одноатомного газа k_i в первом приближении равен [79]:

$$\lambda_i = 1.9891 \cdot 10^{-4} \frac{\sqrt{T/m_i}}{\sigma^2 \Omega(T^*)} = \frac{15}{4} \frac{R_0}{m_i} \mu_i. \quad (1.23)$$

Для многоатомных молекул уравнение (1.23) следует заменить следующим соотношением, впервые предложенным Эйкеном [64], учитывающим приближенно передачу энергии между поступательными и внутренними степенями свободы в молекулах:

$$\lambda_i = \frac{15}{4} \frac{R}{m_i} \mu_i \left[\frac{4}{15} \frac{c_{p,i} m_i}{R} + \frac{1}{3} \right]. \quad (1.24)$$

Для одноатомных газов, у которых теплоемкость на моль равна $C_{p,i} = \frac{5R_0}{2m_i}$,

это выражение упрощается до приведенного в (1.23).

Смеси газов рассматриваются как идеальные газы в данной диссертации, тогда теплопроводность смеси газов можно рассчитать на основе кинетической теории как:

$$\lambda = \sum_i \frac{X_i \lambda_i}{\sum_j X_j \phi_{ij}}, \quad (1.25)$$

где ϕ_{ij} вычисляется по формуле (1.21).

1.3.3 Коэффициент диффузии

Суммарный диффузионный поток массы i -го компонента смеси выражается так¹:

¹ Диффузионными потоками массы, связанными с градиентами температуры (термодиффузия) пренебрегаем.

$$\mathbf{J}_i = - \left(\rho D_{i,m} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \nabla Y_i. \quad (1.26)$$

Здесь $D_{i,m}$ – коэффициенты массовой диффузии i -й компонентов смеси:

$$D_{i,m} = \frac{1 - X_i}{\sum_{j,j \neq i} (X_j / D_{ij})}, \quad (1.27)$$

и Sc_t – эффективное число Шмидта для турбулентного течения $Sc_t = \mu_t / \rho D_t$, D_t – эффективный коэффициент диффузии массы из-за турбулентности.

Модификация формулы Чепмена – Энскога [103] используется для вычисления коэффициента диффузии D_{ij} :

$$D_{ij} = 0.00186 \frac{\left[T^3 (1/m_i + 1/m_j) \right]^{1/2}}{P_{abs} \sigma_{ij}^2 \Omega_D}, \quad (1.28)$$

где Ω_D – безразмерный диффузионный интеграл столкновений, являющийся мерой взаимодействия молекул в системе, а σ_{ij} – параметр σ i -го компонента в j -ом компоненте. Ω_D является функцией безразмерной температуры T_D^* , которая аппроксимируется следующей формулой [79]:

$$\Omega_D = \frac{1}{T_D^{*0.145}} + \frac{1}{(T_D^* + 0.5)^2}. \quad (1.29)$$

Здесь $T_D^* = T / (\varepsilon/k_B)_{ij}$ – безразмерной температуры. $k_B = R_0 / 6.02 \times 10^{23}$ – постоянная Больцмана. Потенциальный параметр $(\varepsilon/k_B)_{ij}$ для смеси i -го и j -го компонентов рассчитывается через среднее геометрическое индивидуальных потенциальных параметров $(\varepsilon/k_B)_{ij} = \sqrt{(\varepsilon/k_B)_i (\varepsilon/k_B)_j}$. Для бинарной смеси, диаметр столкновения σ_{ij} рассчитывается как среднее арифметическое индивидуальных диаметров $\sigma_{ij} = (\sigma_i + \sigma_j)/2$. Значения индивидуальных параметров σ и ε/k_B для компонентов, используемых в диссертации, перечислены в табл. 1.1.

Когда рассматривается горение в воздухе, массовая доля топлива, необходимая для горения, обычно мала по сравнению с массовой долей воздуха. Поэтому коэффициенты переноса для всех газов можно приблизенно принять равными коэффициентам переноса воздуха. Тогда можно упростить (1.26):

$$J_j \approx -\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t}\right) \nabla Y_i, \quad Sc \approx 0.9. \quad (1.30)$$

1.4 Модели турбулентности класса $k-\omega$

1) Модель турбулентности SST

Модель турбулентности SST (Shear Stress Transport) Ф.Р. Ментера [105] широко используется при численном моделировании турбулентных течений, содержащих области как пристеночной, так и свободной турбулентности. В модели SST к уравнениям движения газа добавляются уравнения переноса для кинетической энергии турбулентности k и удельной скорости диссипации ω :

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t} + \frac{\partial \rho k u_j}{\partial x_j} = G_k - \beta^* \rho k \omega + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right], \quad (1.31)$$

$$\frac{\partial \rho \omega}{\partial t} + \frac{\partial \rho \omega u_j}{\partial x_j} = \frac{\alpha}{\nu_t} G_k - \rho \beta \omega^2 + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + 2(1 - F_1) \frac{1}{\sigma_{\omega^2}} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \quad (1.32)$$

где $\beta^* = 0.09$. Переходная функция F_1 определяется выражением:

$$F_1 = \tanh \left\{ \left\{ \min \left[\max \left(\frac{\sqrt{k}}{0.09 \omega y}, \frac{500 \nu}{y^2 \omega} \right), \frac{4 \rho k}{\sigma_{\omega,2} C D_{k\omega} y^2} \right] \right\}^4 \right\}, \quad (1.33)$$

$$C D_{k\omega} = \max \left[2 \rho \frac{1}{\sigma_{\omega,2}} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}, 10^{-10} \right], \quad y - \text{расстояние до ближайшей стенки.}$$

В уравнениях производство турбулентности ограничивается:

$G_k = \min(G_k, 10 \cdot \beta^* \rho k \omega)$. G_k оценивается в соответствии с гипотезой Буссинеска в виде:

$$G_k = -\rho \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \rho R_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \mu_t \left[S^2 - \frac{2}{3} d^2 \right] - \frac{2}{3} \rho k d, \quad d = \frac{\partial u_k}{\partial x_k} = \operatorname{div} \vec{V},$$

где $S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}$ – модуль тензора средней скорости деформации.

Турбулентная вязкость определяется как:

$$\mu_t = \rho \frac{k}{\omega} \min \left[1; \frac{0.31\omega}{SF_2} \right], \quad (1.34)$$

где $F_2 = \tanh \left\{ \left[\max \left(\frac{2\sqrt{k}}{0.09\omega y}, \frac{500\nu}{y^2\omega} \right) \right]^2 \right\}$. Множитель $\min \left[1; \frac{a\omega}{SF_2} \right]$ включается

только в пристенной области течения и обеспечивает выполнение в этой области течения эмпирического соотношения Брэдшоу $\overline{u'v'} = -0.31k$.

Значения параметров $\alpha, \beta, \sigma_k, \sigma_\omega$ вычисляются интерполяцией соответствующих констант модели $k-\varepsilon$ и модели $k-\omega$.

$$\alpha = F_1 \alpha_1 + (1 - F_1) \alpha_2, \quad \beta = F_1 \beta_1 + (1 - F_1) \beta_2,$$

$$\sigma_k = \frac{1}{F_1/\sigma_{k,1} + (1 - F_1)/\sigma_{k,2}}, \quad \sigma_\omega = \frac{1}{F_1/\sigma_{\omega,1} + (1 - F_1)/\sigma_{\omega,2}}.$$

Константы модели:

$$\sigma_{k,1} = 1.176, \quad \sigma_{\omega,1} = 2.0, \quad \sigma_{k,2} = 1.0, \quad \sigma_{\omega,2} = 1.168, \quad \beta_1 = 0.075, \quad \beta_2 = 0.0828,$$

$$\alpha_1 = \frac{\beta_1}{\beta^*} - \frac{\kappa^2}{\sigma_{\omega,1}\sqrt{\beta^*}} \approx 0.5532, \quad \alpha_2 = \frac{\beta_2}{\beta^*} - \frac{\kappa^2}{\sigma_{\omega,2}\sqrt{\beta^*}} \approx 0.4403,$$

где $\kappa = 0.41$ - константа Кармана.

2) Модель турбулентности BSL $k-\omega$

В данной диссертации используется ещё одна модель класса $k-\omega$ – Baseline $k-\omega$ [104], которая отличается от модели SST тем, что турбулентная вязкость описывается формулой $\mu_t = \rho k / \omega$ и $\sigma_{k,1} = 2.0$.

1.5 Границные условия на стенках с шероховатостью

Основной задачей граничного условия на стенках является определение касательных напряжений τ_w и теплового потока q_w на основе известных из расчета параметров в центре пристенной ячейки. Безразмерный профиль касательной скорости в пристенной области можно представить в виде

$u^+ = f(y^+)$, где $u^+ = V_\tau/u_\tau$, $y^+ = y_w/l_\tau$ ($u_\tau = \sqrt{\tau_w/\rho_w}$ и $l_\tau = v_w/u_\tau$ - характерные масштабы скорости и длины в пристенной области пограничного слоя). При $y^+ \gtrsim 50$ функция $u^+ = f(y^+)$ близка к известному “логарифмическому закону”

$$u^+ = \frac{1}{k} \ln y^+ + C,$$

где для гладкой пластины $C \approx 5$.

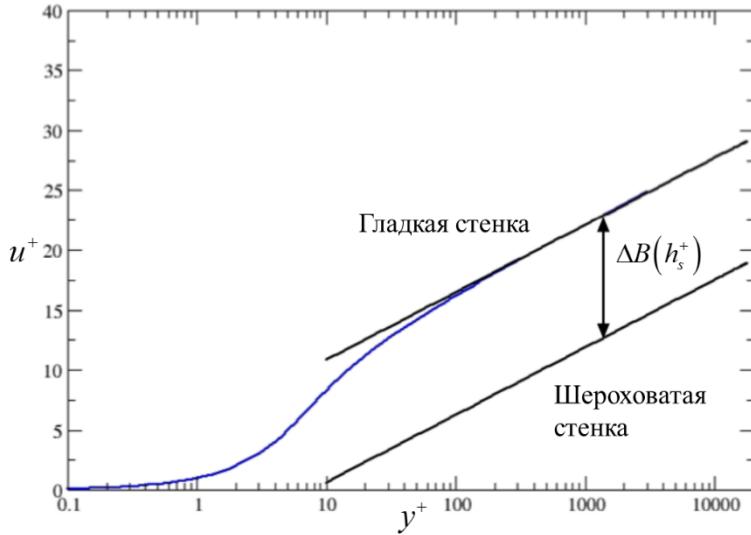


Рисунок 1.1 – Безразмерный профиль касательной скорости для гладкой и шероховатой стенки

Эксперименты на шероховатых трубах [54, 110] и каналах показывают, что над шероховатой стенкой логарифмический закон сохраняется, но смещается, как показано на рис. 1.1. Таким образом, логарифмический закон для шероховатой стенки имеет следующий вид:

$$u^+ = \frac{1}{k} \ln y^+ + C - \Delta B(h_s^+), \quad (1.35)$$

где $h_s^+ = \frac{h_s u_\tau}{v_w}$ – безразмерная высота шероховатости. На основе данных Коулброка

и др. [54], Григсон [77] предложил следующую формулу для ΔB :

$$\Delta B = \frac{1}{\kappa} \ln \left(1 + \frac{h_s^+}{\exp[\kappa(8.5 - C)]} \right) \quad \kappa=0.41 \quad C=5.25.$$

В диссертация использовались модель шероховатости, предложенная Aupoix [37]. Она основана на данные Коулброка и др. [54] и предназначена для использования в сочетания с моделями турбулентности класса $k-\omega$, включая SST. В модели Aupoix на стенке задаются значения $k_w \neq 0$ и ω_w , которые зависят от характерного значения безразмерной высоты шероховатости h_s^+ и обеспечивают правильное распределение параметров в логарифмической области турбулентного пограничного слоя (в частности, обеспечивают (1.35)):

$$\begin{cases} k_w^+ = \max \left\{ 0, \frac{1}{\sqrt{\beta^*}} \tanh \left[\left(\frac{\ln \frac{h_s^+}{30}}{\ln 10} + 1 - \tanh \frac{h_s^+}{125} \right) \tanh \frac{h_s^+}{125} \right] \right\}, \\ \omega_w^+ = \frac{300}{h_s^{+2}} \left(\tanh \frac{15}{4h_s^+} \right)^{-1} + \frac{191}{h_s^+} \left(1 - \exp \left(-\frac{h_s^+}{250} \right) \right). \end{cases} \quad (1.36)$$

Здесь $\beta^*=0.09$ – стандартная константа модели SST. Безразмерное расстояние от пристеночной ячейки до ближайшей стенки y^+ и безразмерная высота шероховатости h_s^+ определяются так:

$$y^+ = \frac{\rho_w u_\tau d_w}{\mu_w}, \quad h_s^+ = \frac{\rho_w u_\tau h_s}{\mu_w}, \quad u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho_w}},$$

где индексом “ w ” обозначены параметры на стенке, d_w – размерное расстояние до стенки, τ_w – касательное напряжение на стенке. Размерные значения k и ω на стенке вычисляются по формулам:

$$k_w = f_w(u_\tau, k_w^+) = k_w^+ u_\tau^2, \quad \omega_w = f_w(u_\tau, \omega_w^+) = \frac{\rho_w \omega_w^+ u_\tau^2}{\mu_w}.$$

Модель Aupoix в первую очередь разработаны и протестированы для моделирования обледенения, однако она также может быть полезна для других задач, в которых пограничный слой полностью разрешен сеткой, а высота шероховатости велика по сравнению с высотой первой пристеночной ячейки.

Следует отметить, что модель Aupoix требует еще коррекции теплового потока на стенке [36]. В ANSYS Fluent используется иная модель для теплообмена с шероховатой стенкой, основанная на работе [85].

Латин и Бауэрсокс [91] провели экспериментальные исследования влияния шероховатости поверхности на параметры среднего течения и турбулентности высокоскоростного турбулентного потока в пограничном слое на пластине. Для проверки работы реализации модели Airoix в программе ANSYS Fluent автор рассмотрел две высоты шероховатости: 1.42 мм и 1.98мм и следующий режим обтекания пластины: $p = 7080$ Па, $T = 111.325$ К, $u = 609.18$ м/сек, $k = 35$ м²/сек², $\omega = 10^6$ сек⁻¹.

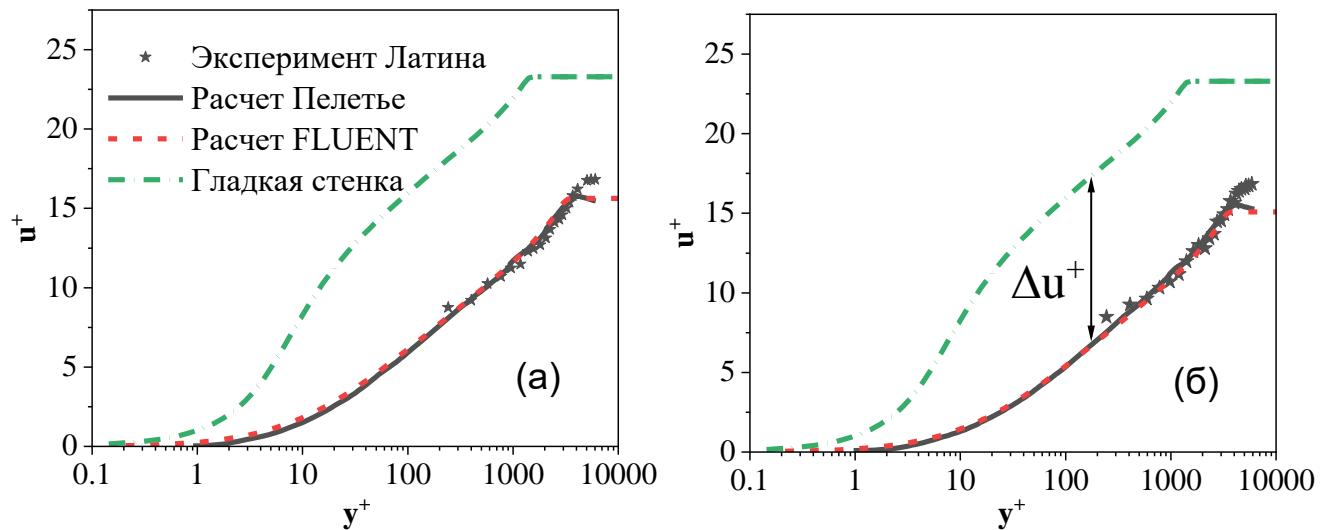


Рисунок 1.2 – Профили средней продольной скорости $u^+ = u/u_\tau$ при разной высоте шероховатости: (а) $h_s = 1.42$ мм; (б) $h_s = 1.98$ мм.

Профили скорости на двух высотах шероховатости представлены на рис. 1.2. Результаты расчетов автора по программе FLUENT [35] хорошо совпали с расчетами Пелетье [115] и с экспериментами [91]. В таб. 1.2 приведены значения коэффициента трения, полученные в расчетах и экспериментах при двух высотах шероховатости. Расхождения полученных значений коэффициента трения находятся в пределах точности численного метода.

Таблица 1.2 – Коэффициенты трения на шероховатой пластине в сечении $x=0.54$ м

Типы шероховатости	\bar{h} , мм	h_s , мм	h_s^+	Экспериментальные результаты	Численные данные
36 Grit	0.90	1.42	395	0.00393	0.003401
20 Grit	0.83	1.98	571	0.00399	0.003657

1.6 Модели реактора частичного перемешивания (PaSR)

Модель TCI (модель турбулентного горения) описывает два канала взаимодействия турбулентности с горением (TCI – Turbulence Combustion Interaction): 1-й канал - влияние турбулентных пульсаций на средние скорости химических реакций (т.е. способ вычисления среднего по времени химического источника k -го компонента смеси $S_k = \overline{S_k(\rho + \rho', T + T'', Y_1 + Y_1'', \dots, Y_N + Y_N'')}$) и 2-й канал - влияние тепловыделения на турбулентный перенос (в случае использования гипотезы Буссинеска этот канал можно описать путем введения турбулентных чисел Прандтля и Шмидта. Если рассматриваются течения, в которых горение протекает в преимущественно сверхзвуковом режиме, то в соответствии с выводами работы [29] можно сделать предположение о возможности пренебрежения TCI. Тогда можно использовать *квазиламинарное приближение*:

$$S_k \approx S_k(\rho, T, Y_1, \dots, Y_N). \quad (1.37)$$

К настоящему времени разработан ряд моделей для описания TCI. Общим недостатком всех моделей турбулентного горения является ограниченная область их применимости, определяемая в каждом случае соотношением характерных масштабов турбулентности, молекулярного смешения и горения, полным или частичным отсутствием учета предыстории течения.

Наиболее перспективными следует считать модели, которые учитывают мелкомасштабную структуру турбулентного пламени. К таким моделям относятся, например, (1) модель микроламинарных пламен (flamelets) [116, 121], которые предполагают, что горение предварительно перемешанных или неперемешанных реагентов происходит в тонких слоях, формируемых за счет молекулярного переноса; (2) модели реактора частичного перемешивания (PaSR [52]), которые предполагают, что горение происходит только в части турбулентной области течения – в т.н. “тонких структурах” (см. 1.3,a), которые рассматриваются как реакторы, обменивающиеся массой и теплом с окружающей средой за счет диффузии.

Наиболее известными моделями этого класса являются *Eddy Dissipation Concept* (EDC) Магнуссена [76, 98] и модель PaSR Хомяка и Карлссона [52].

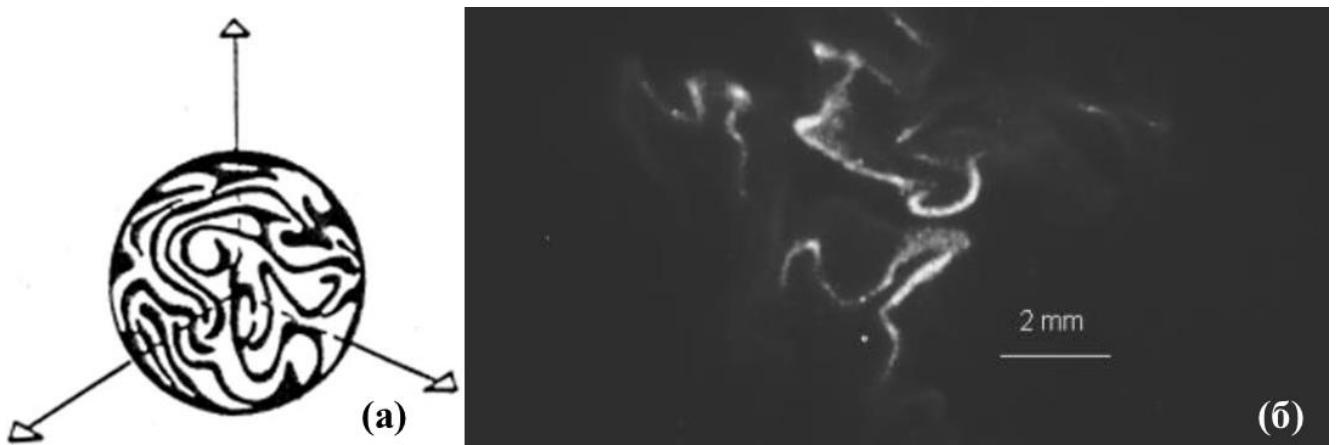


Рисунок 1.3 – (а) Схематическая диаграмма “тонких структурах” [98] и (б) их визуализация в эксперименте [99]

В моделях PaSR контрольные объёмы (например, ячейки сетки) разделены на реагирующие зоны (тонкие структуры) и нереагирующие зоны (окружающее пространство). Тонкие структуры имеют форму фрактальной поверхности, их толщина близка к микромасштабу Колмогорова в двух измерениях, но более крупному масштабу в двух других измерениях (см. рис. 1.3,б). Базовые модели класса PaSR (EDC Магнуссена и PaSR Хомяка и Карлссона) основаны на допущении, что время реакции в тонких структурах гораздо меньше, чем характерное время среднего течения. Поэтому состояние в тонких структурах является квазистационарным и описывается алгебраической системой уравнений:

$$\begin{cases} \rho^* \frac{Y_k^* - Y_k^0}{\tau^*} = S_k(\rho^*, T^*, Y_1^*, \dots, Y_N^*), \\ \sum_{k=1}^N Y_k^* h_k(T^*) = \sum_{k=1}^N Y_k^0 h_k(T^0). \end{cases} \quad (1.38)$$

где звездочкой обозначены параметры газа в “тонких структурах”, а индексом “0” – параметры газа в окружающем пространстве, где горения нет. Величина ρ^* / τ^* представляет собой расход массы через единицу объема “тонких структур”, а τ^* можно интерпретировать как характерное время пребывания газа в “тонких структурах”. Физически обмен массой и энергией между “тонкими структурами”

и окружающим пространством осуществляется за счет диффузии. Средние по времени параметры в данной области пространства, содержащей “тонкие структуры” с горением и окружающее пространство без горения, определяются соотношениями:

$$\begin{aligned}\rho &= \gamma^* \rho^* + (1 - \gamma^*) \rho^0, \\ \rho Y_k &= \gamma^* \rho^* Y_k^* + (1 - \gamma^*) \rho^0 Y_k^0, \\ \rho \sum_{k=1}^N Y_k h_k(T) &= \gamma^* \rho^* \sum_{k=1}^N Y_k^* h_k(T^*) + (1 - \gamma^*) \rho^0 \sum_{k=1}^N Y_k^0 h_k(T^0),\end{aligned}\quad (1.39)$$

где γ^* – объемная доля тонких структур. Для замыкания системы уравнений (1.37)-(1.38) требуется еще дополнительное предположение относительно давления или плотности газа в тонких структурах. Поскольку скорость газа и в “тонких структурах”, и в окружающем пространстве принимается в моделях PaSR равной средней скорости потока, естественным является допущение:

$$p^* = p^0 = p. \quad (1.40)$$

Однако в ANSYS Fluent вместо (1.40) используется условие $\rho^* = \rho^0 = \rho$.

Система уравнений (1.38)-(1.40) является замкнутой системой алгебраических уравнений, которая при заданных параметрах τ^* и γ^* позволяет выразить параметры газа в “тонких структурах” и в окружающем пространстве через параметры среднего течения (ρ, T, Y_1, \dots, Y_N). Как только параметры в “тонких структурах” найдены, средние скорости химических реакций определяются по формуле

$$S_r \approx \gamma^* S_r(\rho^*, T^*, Y_1^*, \dots, Y_N^*) = \gamma^* \rho^* \frac{Y_k^* - Y_k^0}{\tau^*} = \gamma^* \rho \frac{Y_k^* - Y_k^0}{(1 - \gamma^*) \tau^*}.$$

В модели EDC Магнуссена:

$$\gamma^* = 9.7 \left(\frac{\mu \varepsilon}{\rho k^2} \right)^{3/4}, \quad \tau^* = 0.41 \sqrt{\frac{\mu}{\rho \varepsilon}},$$

где ε – средняя скорость диссипации кинетической энергии турбулентности. В моделях турбулентности класса $k - \omega$ скорость диссипации рассчитывается по

формуле $\varepsilon = 0.09k\omega$. В модели EDC для среднего по временем источникового члена используется модифицированное выражение:

$$S_k \approx (\gamma^*)^{2/3} \rho \frac{Y_k^* - Y_k}{(1 - \gamma^*)\tau^*} \quad (1.41)$$

Система уравнений (1.38) представляет собой систему нелинейных алгебраических уравнений, решать которую нужно итерационным методом, что приводит к проблемам со сходимостью итераций и сильно увеличивает вычислительные затраты. В ANSYS Fluent используется модификация модели PaSR – т.н. “модель проточного реактора” (PFR, Plug Flow reactor [42]), в которой (1.38) с учетом $\rho^* = \rho$ заменяется на систему дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \rho \frac{dY_k^*}{dt'} = S_k(\rho, T^*, Y_1^*, \dots, Y_N^*), \\ \sum_{k=1}^N Y_k^* h_k(T^*) = \sum_{k=1}^N Y_k^0 h_k(T^0). \end{cases} \quad (1.42)$$

Здесь t' – псевдовремя, не связанное с физическим временем. В начальный момент псевдовремени $t' = 0$ принимается $Y_k^* = Y_k^0$, $T^* = T^0$, и далее (1.42) интегрируется численно до момента $t' = \tau^*$. Значения $Y_k^*(t' = \tau^*)$ и $T^*(t' = \tau^*)$ используются в расчете глобального течения вместо решения системы нелинейных алгебраических уравнений (1.38). Такой подход основан на том, что первое уравнение (1.38) можно переписать в виде

$$\tau^* \cdot S_k(\rho, T^*(t' = \tau^*), Y_1^*(t' = \tau^*), \dots, Y_N^*(t' = \tau^*)) = \int_0^{\tau^*} \rho \frac{dY_k^*(t')}{dt'} dt', \quad Y_k^*(t') = Y_k^0.$$

Отсюда уже легко прийти к идеи модификации (1.42). Однако PFR дает иное решение, отличное от (1.38). В самом деле, в модели PFR

$$\int_0^{\tau^*} \rho \frac{dY_k^*(t')}{dt'} dt' = \int_0^{\tau^*} S_k(\rho, T^*(t'), Y_1^*(t'), \dots, Y_N^*(t')) dt',$$

$$\text{а } \int_0^{\tau^*} S_k(\rho, T^*(t'), Y_1^*(t'), \dots, Y_N^*(t')) dt' \neq \tau^* \cdot S_k(\rho, T^*(t' = \tau^*), Y_1^*(t' = \tau^*), \dots, Y_N^*(t' = \tau^*)).$$

Глава 2. Моделирование распространения ламинарного пламени

2.1 Одномерная система уравнений ламинарного пламени

Двумя наиболее важными характеристиками модели химической кинетики являются время задержки воспламенения при локальном горении $\tau_{\text{ущд}}$ и скорость ламинарного пламени S_f относительно исходной, предварительно перемешанной горючей смеси при одномерном распространении пламени за счет переноса тепла. Скорость ламинарного пламени является одним из параметров, определяющих турбулентное горение перемешанной смеси, т.к. сильно искривленное за счет турбулентности ламинарное пламя в первом приближении локально распространяется по ламинарному механизму. Поэтому при расчете перемешанного турбулентного горения по модели PaSR можно принять в (1.44) $\tau_{\text{хим}} \sim \delta_f / S_f$, где δ_f - толщина фронта одномерного ламинарного пламени. Поэтому в данной Главе с использованием собственной программы решена вспомогательная задача об одномерном распространении ламинарного пламени в перемешанной смеси. При этом исследованы кинетические механизмы, которые далее применяются для решения основных задач диссертации.

Ламинарное пламя – волна горения, которая распространяется по перемешанной смеси топлива с окислителем с малой дозвуковой скоростью $\tilde{M} = S_f / a_{\text{нач}} \ll 1$ (S_f – скорость пламени относительно исходной смеси). Такая волна относится к волнам слабой дефлаграции [30]. Из закона сохранения импульса легко показать, что давление хотя и должно понижаться в такой волне, но его изменение должно быть крайне малым ($\Delta p / p_{\text{нач}} = O(M^2)$), хотя температура и плотность меняются в волне существенно. Если попытаться провести расчет распространения ламинарного пламени на базе полной системы уравнений Навье-Стокса в лабораторной системе координат, относительно которой пламя движется, в расчете в процессе развития ламинарного пламени

возникают акустические волны (слабые волны давления), которые движутся гораздо быстрее, чем ламинарное пламя, многократно отражаются от границ расчетной области и формируют “шум”, который искажает картину распространения пламени. Поэтому имеет смысл модифицировать систему уравнений, чтобы исключить этот акустический “шум”.

Чтобы устранить акустические волны, полагаем давление постоянным ($p = const$). Рассмотрим смесь газа как калориметрический идеальный газ (т.е. удельная теплоемкость зависит только от температуры и массовой доли смеси). Также пренебрегаем кинетической энергией газа по сравнению с тепловой и работой вязких напряжений по сравнению с потоками тепла за счет теплопроводности. Тогда, в частности, нестационарный член в уравнении энергии упростится следующим образом:

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(\frac{u^2}{2} + e \right) \right] \approx \frac{\partial \rho e}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} [\rho h - p] \approx \frac{\partial \rho h}{\partial t}.$$

Одномерная система уравнений Навье-Стокса сводится к трем уравнениям:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0 \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [\rho u h] = \frac{\partial}{\partial x} \left[\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\sum_{k=1}^{N_{sp}} h_k \cdot \rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x} \right] \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [\rho u Y_k] = \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x} \right] + S_k \quad (2.3)$$

Здесь h выражается в формулой вида:

$$h = \sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_k h_k(T). \quad (2.4)$$

Система уравнений замыкается уравнением состояния:

$$\rho = \frac{P}{R_0 T \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{Y_k}{m_k}} = \rho(T, Y_k). \quad (2.5)$$

Формула Сазерленда [144] с тремя коэффициентами имеет вид:

$$\mu = \mu_0 \cdot \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2} \frac{T_0 + S}{T + S}, \quad (2.6)$$

где для воздуха при умеренных температурах и давлениях $\mu_0 = 1.716 \times 10^{-5}$ кг/(м с), $T_0 = 273.11$ К, $S = 110.56$ К.

Молекулярный тепловой поток может быть выражен как:

$$q = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \approx -\frac{\mu c_p}{Pr} \frac{\partial T}{\partial x}. \quad (2.7)$$

В первом предположении массовая диффузия считается одинаковой для всех компонентов смеси, коэффициент массовой диффузии k -й компонент описывается $D_k = \mu / \rho Sc$. В данном случае для всех k принимается $Pr = 0.72$, $Sc = 0.90$.

Уравнения (2.1) – (2.3) переписываются в виде:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} = -\rho \frac{\partial u}{\partial x}, \\ \rho \frac{\partial h}{\partial t} + \rho u \frac{\partial h}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\mu C_p}{Pr} \frac{\partial T}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\sum_{k=1}^{N_{sp}} h_k \frac{\mu}{Sc} \frac{\partial Y_k}{\partial x} \right], \\ \rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho u \frac{\partial Y_k}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\mu}{Sc} \frac{\partial Y_k}{\partial x} \right] + S_k. \end{cases} \quad (2.8)$$

Следует отметить, что в левой части системы уравнений (2.8) стоит гарантированно гиперболический оператор $\frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x}$, описывающий перенос всех параметров вдоль траекторий объемов газа $dx/dt = u$. Это позволяет использовать для аппроксимации левой части системы (2.8) противопоточные схемы.

Поскольку мы ищем стационарное решение в системе покоя ламинарного пламени, то скорость втекания газа в расчетную область (через левую границу этой области) будет равна $u = S_f$, где S_f – скорость ламинарного пламени относительно исходной смеси. Трудность заключается в том, что скорость пламени относительно смеси не известна априори, а является собственным значением, при котором система уравнений (2.8) имеет стационарное решение.

2.2 Решение уравнений пламени в случае механизмов химической кинетики

2.2.1 Численный метод для решения уравнений

При расчете в качестве граничных условий на холодной стороне используются заданное давление, начальная температура смеси и массовая концентрация компонентов. Для обработки граничных условий на горячей стороне можно использовать два подхода. В первом подходе параметры горячей стороны могут быть получены путем решения уравнений изобарического адиабатического реактора с начальным состоянием, соответствующим параметрам холодной стороны. Затем при одномерном расчете пламени давление температура и состав с обеих сторон фиксируются.

При втором подходе на горячей стороне можно задать любое граничное условие, которое соответствует воспламенению. Затем при расчете фиксируются только параметры холодной стороны, а параметры горячей стороны получаются путем решения основного уравнения (2.8), которые непрерывно изменяются до тех пор, пока пламя станет устойчивым. В настоящей диссертации в основном используется второй подход.

Начальное распределение температур и массовых долей компонентов смеси представлено функцией косинуса как:

$$f = \begin{cases} f_L, & x < 0, \\ \frac{f_L + f_R}{2} - \frac{f_R - f_L}{2} \cos\left(\pi \frac{x}{\delta}\right), & 0 \leq x \leq \delta, \\ f_R, & x > \delta. \end{cases}$$

К конвективным членам применяется явная противоточная схема второго порядка, к диффузионным членам - явная центрально-разностная аппроксимация второго порядка, и к источниковым членам - локально-неявная аппроксимация с итерациями Ньютона [10].

2.2.2 Методы определения скорости пламени и распределения скорости потока

Скорость ламинарного пламени относительно исходной смеси топлива с окислителем S_f является собственным значением задачи о распространении ламинарного пламени. Это единственное значение скорости потока, втекающего слева в расчетную область, при котором можно получить стационарное решение с волной горения. Следовательно, правильное определение S_f имеет решающее значение в решении задачи о распространении ламинарного пламени.

При достижении стационарного состояния, уравнения компонентов смеси можно представить в виде:

$$\rho u \frac{\partial Y_k}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\mu}{Sc} \frac{\partial Y_k}{\partial x} \right] + S_k. \quad (2.9)$$

Проинтегрировав по всей расчетной зоне в обе стороны уравнения, получим:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left(\rho u \frac{\partial Y_k}{\partial x} \right) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\mu}{Sc} \frac{\partial Y_k}{\partial x} \right] + S_k \right) dx. \quad (2.10)$$

Если расчетная область достаточно длинная, компоненты смеси с обеих сторон должны быть постоянными при достижении стационарного состояния. Это означает, что градиент массовой доли будет равен нулю. Учтя, что в стационарном состоянии $\rho u = \rho_L u_L = const$, найдем из (2.10), что скорость потока на холодной стороне имеет вид:

$$u_L = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} S_k dx}{\rho_L \left[(Y_k)_R - (Y_k)_L \right]}. \quad (2.11)$$

Скорость потока на холодной стороне u_L рассматривается как скорость распространения ламинарного пламени S_f . Это означает, что формула (2.11) представляет собой способ определения скорости пламени ($S_f = u_L$).

Нас интересует только стационарное решение задачи, поэтому переходный нестационарный процесс может описываться неточно. Потребуем, чтобы стационарное уравнение сохранения массы $\rho u = \rho_L u_L = const$ выполнялось

поперек всего пламени на каждом временном шаге. В этом случае формула для распределения скорости потока имеет вид:

$$u(x) = \frac{\rho_L S_f}{\rho(x)}. \quad (2.12)$$

Недостаток формулы (2.12) – использование стационарной формулировки закона сохранения массы. Рассмотрим поэтому еще один способ вычисления распределения скорости потока.

Подставив (2.4) в уравнение энергии из системы (2.8), получим:

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \sum_k h_k \left(\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho u \frac{\partial Y_k}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\mu C_p}{Pr} \frac{\partial T}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\sum_{k=1}^{N_{sp}} h_k \frac{\mu}{Sc} \frac{\partial Y_k}{\partial x} \right]. \quad (2.13)$$

Представим уравнение для компонентов смеси из системы (2.8) в виде:

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} + u \frac{\partial Y_k}{\partial x} = \frac{1}{\rho} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\mu}{Sc} \frac{\partial Y_k}{\partial x} \right] + S_k \right\}. \quad (2.14)$$

При помощью (2.14) уравнение (2.13) можно переписать в виде:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{1}{\rho C_p} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\mu C_p}{Pr} \frac{\partial T}{\partial x} \right] + \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{\mu}{Sc} \frac{\partial Y_k}{\partial x} C_{p_k} \frac{\partial T}{\partial x} - \sum_k h_k S_k \right\} \quad (2.15)$$

Применив операцию взятия натурального логарифма к обеим частям уравнения состояния, мы можем получить:

$$\ln \rho = const - \ln T - \ln A, \quad A = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{Y_k}{m_k} = \frac{1}{m},$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial T} = \frac{\rho}{T} \frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln T} = -\frac{\rho}{T}, \quad (2.16)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial Y_k} = \rho \frac{\partial \ln \rho}{\partial Y_k} = \rho \frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln A} \cdot \frac{\partial \ln A}{\partial Y_k} = \frac{\rho}{A} \frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln A} \cdot \frac{\partial A}{\partial Y_k} = -\rho \frac{m}{m_k}. \quad (2.17)$$

Кроме того, уравнение сохранения массы из системы (2.8) можно преобразовать следующим образом:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{1}{\rho} \left\{ \frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} \right\} = -\frac{1}{\rho} \left\{ \frac{\partial \rho}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} + \sum_k \frac{\partial \rho}{\partial Y_k} \frac{\partial Y_k}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial x} + u \cdot \sum_k \frac{\partial \rho}{\partial Y_k} \frac{\partial Y_k}{\partial x} \right\}. \quad (2.18)$$

Подставляя (2.16) и (2.17), можно переписать (2.18) в виде:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{1}{T} \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \sum_k \frac{m}{m_k} \left(\frac{\partial Y_k}{\partial t} + u \frac{\partial Y_k}{\partial x} \right). \quad (2.19)$$

После подстановки (2.15) и (2.14) в (2.19), производная скорости потока по пространственной координате выражается следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial x} = & \frac{1}{\rho T C_p} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\mu C_p}{Pr} \frac{\partial T}{\partial x} \right] + \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{\mu}{Sc} \frac{\partial Y_k}{\partial x} C_{p_k} \frac{\partial T}{\partial x} - \sum_k h_k S_k \right\} \\ & + \frac{1}{\rho} \sum_k \frac{m}{m_k} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\mu}{Sc} \frac{\partial Y_k}{\partial x} \right] + S_k \right\}. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Распределение скорости потока в каждый момент времени легко получить,

интегрируя уравнение (2.20): $u(x) = u_L + \int_0^x \frac{\partial u}{\partial x} dx$, где u_L дается формулой (2.11).

Описанные методы моделирования ламинарного пламени были реализован автором в собственной программе (далее – LFsolver).

2.2.3 Результаты расчетов глобального механизма горения метана в воздухе

В данной Главе обсуждаются несколько различных механизмов реакции горения метана в воздухе. Сначала был рассмотрен глобальный механизм горения метана в воздухе, разработанном Б. Францелли и Э. Рибером (далее – BFER2) [68]. Этот механизм включает пять компонентов, одну необратимую реакцию и одну обратимую реакцию (см. Приложение Б).

По формуле (2.11), скорость пламени можно рассчитать по любым компонентам смеси (для разных значений индекса k). Рис. 2.1 показывает процесс сходимости скорости пламени, рассчитанной по различным компонентам во условие $T_L=300\text{K}$, $p_L=1\text{атм}$, $\varphi=1.0$. Легко видеть, что примерно через 0.4 мс скорость пламени достигает стабильного значения 38.23 м/с. По сравнению со скоростью, рассчитанной по формуле (2.11) с использованием массовых долей промежуточных веществ, скорость пламени, рассчитанная по (2.11) с использованием массовых долей исходных веществ или продуктов реакции, раньше достигает стабильного состояния.

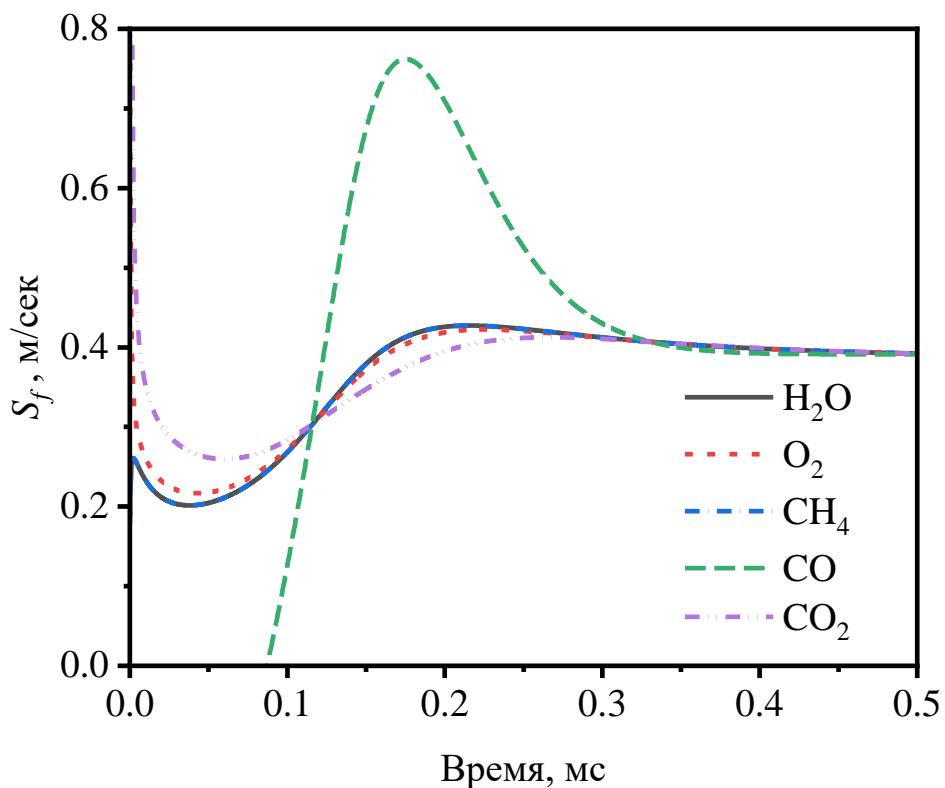


Рисунок 2.1 – Процесс сходимости скорости пламени, представленный различными компонентами, $T_0=300\text{K}$, $p=1$ атм., $\phi=1.0$, механизм BFER2.

На рис. 2.2 представлена одномерная структура метано-воздушного ламинарного пламени, рассчитанная по механизму BFER2. В данном случае, толщина пламени около 0.8мм, а температура пламени 2224К. Рис. 2.2,б показывает распределение скорости потока, рассчитанное разными методами – по формуле (2.11) и путем интегрирования формулы (2.20). Очевидно, что эти два метода дают почти одинаковое распределение скорости потока при достижении установившегося состояния, за исключением небольшой разницы в зоне реакции пламени. Причина в том, что метод, основанный на формуле (2.20), более чувствителен к распределению параметров, т.к. формула для скорости (2.20) представляет собой комбинацию конвективных, диффузионных и источниковых членов, вычисляемых с некоторыми погрешностями.

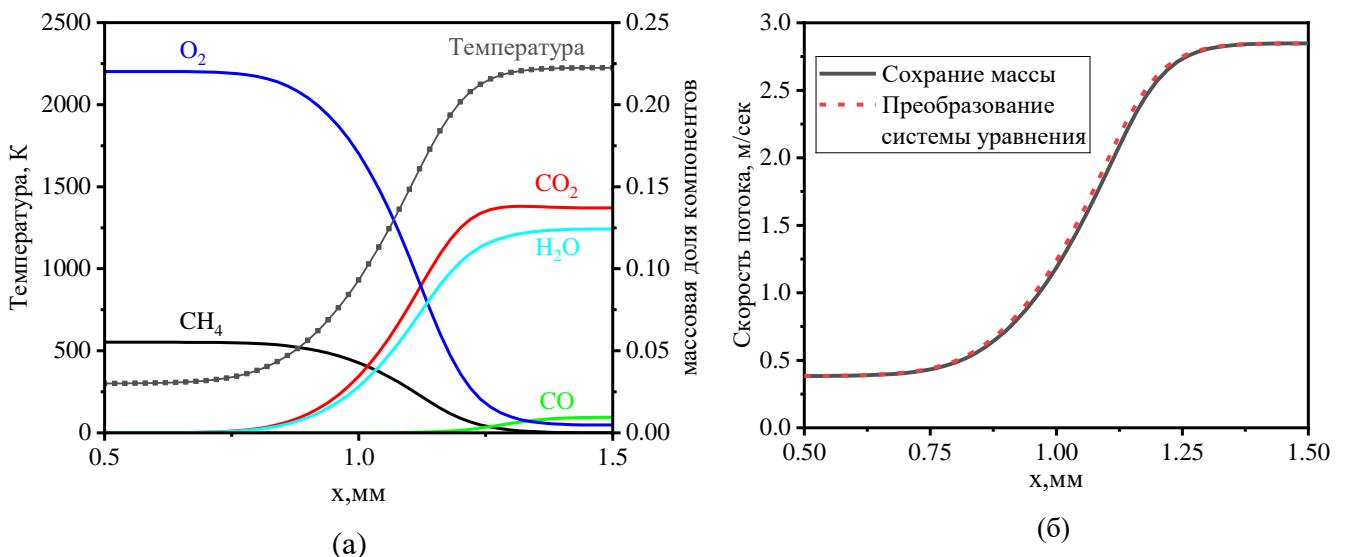


Рисунок 2.2 – Одномерная структура метан-воздушного ламинарного пламени, (а) – температура и компоненты смеси; (б) – скорость потока рассчитывается разными методами

Для более точной проверки текущего солвера автор использовал такие же установки, как в статье Францелли: $\text{Pr} = \text{Sc} = 1.0$, а также степенное выражение для молекулярной вязкости $\mu(T) = \mu_0 (T/T_0)^\alpha$, $\mu_0 = 1.8405 \times 10^{-5}$ кг/(м·с), $\alpha = 0.6759$, $T_0 = 300\text{K}$. Полученные при этом скорости ламинарного пламени при различном коэффициенте избытка топлива показаны в рис. 2.3. Результаты, рассчитанная автором, хорошо согласуются с расчётыми данными из статьи [68].

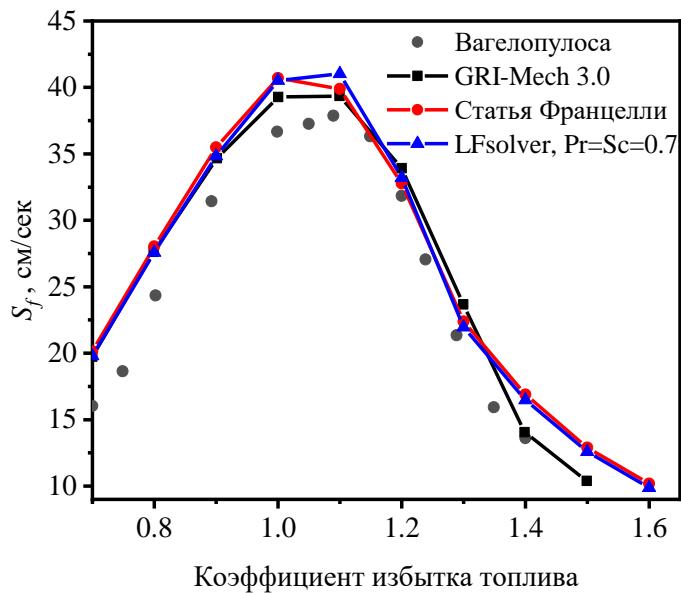


Рисунок 2.3 – Скорости ламинарного пламени при различном коэффициенте избытка топлива, полученные Cantera [74] с механизмом Gri-Mech 3.0 [137], LFsolver с механизмом BFER2, расчёты из статьи [68] и экспериментальных данных из [147]

Таким образом, механизм BFER2 может хорошо отражать процесс распространения пламени по предварительно перемешанной смеси метана с воздухом при различных коэффициентах избытка топлива.

2.3 Решение уравнений редуцированных механизмов химической кинетики

2.3.1 Трудность в нахождении правильного решения

Для исследования влияния химической кинетики на решение задачи, в тех же условиях ($T_L=300\text{K}$, $p_L=1\text{атм.}$) был испытан квазиглобальный механизм горения метана в воздухе с 6 компонентами и 4 обратимыми реакциями, предложенный В. Я. Басевичем, А. А. Беляевым и С. М. Фроловым (далее – Фролов4) [5]. Процесс сходимости скорости распространения пламени в ходе расчета представлен на рис. 2.4. Видно, что скорости распространения пламени, полученные по реагентам и по продуктам, не соответствуют эксперименту, а промежуточные вещества H_2 и CO дают ещё худшие результаты.

На рис. 2.5 одномерная структура метано-воздушного ламинарного пламени, полученная по механизму Фролов4. В данном случае, параметры горячей стороны получены путем решения уравнений адиабатического реактора $p=const$ с начальными параметрами, взятыми с холодной стороны пламени. Строго говоря, параметры в окрестности правой границы пламени параметры должны асимптотически стремиться к правому граничному условию. Поэтому резкое изменение параметров в правом конце на рис. 2.5 является физически неправдоподобным. Кроме того, скорость пламени, рассчитанная по разным компонентам, перестает изменяться через 10 мс. Таким образом, расхождение скоростей пламени, полученное при вычислении скорости по массовым долям реагентов, продуктов и промежуточных веществ, не связано с неполной сходимостью решения к стационарному состоянию.

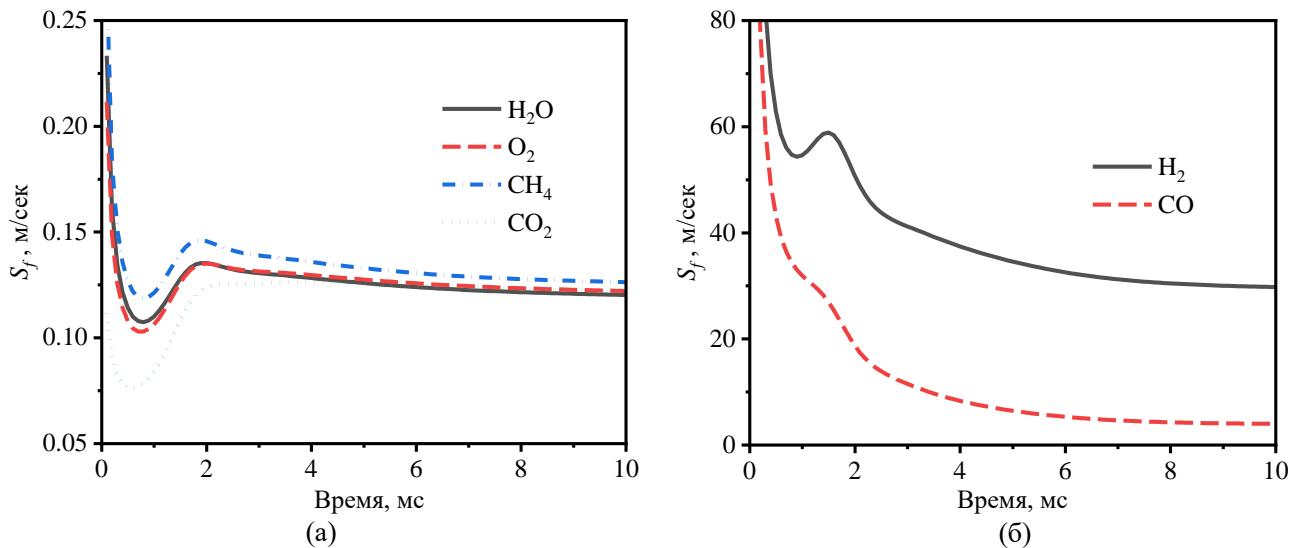


Рисунок 2.4 – Процесс сходимости скорости пламени, представленный различными компонентами, $\varphi=1.0$, Фролов4. (а) реагенты и продукты, (б) промежуточные продукты.

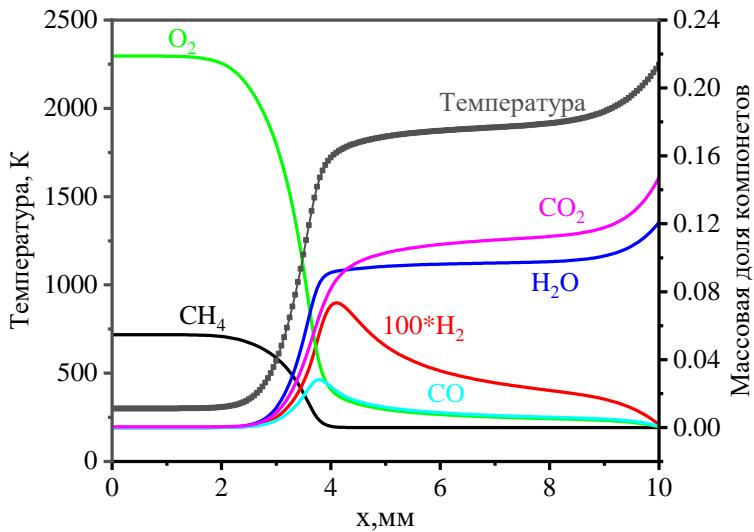


Рисунок 2.5 – Одномерная структура метан-воздушного ламинарного пламени, полученная по механизму Фролов4

Результаты, показанные на рис. 2.4 и 2.5, были получены с использованием способа нахождения распределения скорости потока, основанного на формуле (2.11). В §2.2.2 описан еще один способ, основанный на интегрировании формулы (2.20). Одномерная структура метано-воздушного ламинарного пламени, полученная при использовании формулы (2.20), показана на рис. 2.6. Из этого рисунка видно, что способ (2.20) также не позволяет получить типичную структуру фронта пламени. Это означает не то, что точность метода вызывает сомнения, а что громоздкая формула (2.20) очень чувствительна к распределению различных параметров в уравнении. И погрешности вычисления распределения

скорости потока постепенно усиливаются по мере итерационного процесса. При использовании многостадийного кинетического механизма это приводит к постепенному накоплению ошибок в описании состава смеси и в конце концов приводит к нефизическому решению.

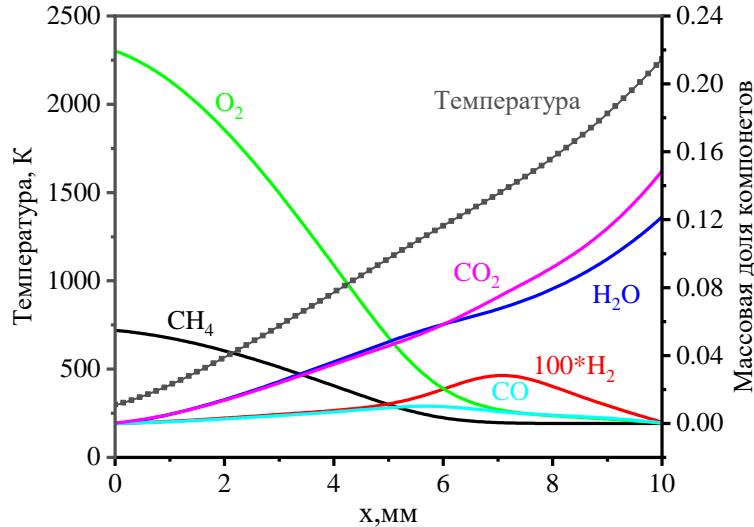


Рисунок 2.6 – Одномерная структура метан-воздушного ламинарного пламени, полученная с теми же условиями и химическим механизмом как рис. 2.5. Распространение скорости в процессе расчета вычисляется по формуле (2.26)

Поэтому для работы с многостадийными кинетическими механизмами был использован другой численный подход, описанный в следующем разделе.

2.3.2 Описание пламени, основанное на введении функции тока

По аналогии с методом, который был введен Ховартом [80] в теорию пограничного слоя, Д.Б. Сполдинг предложил способ для исключения конвективных членов из уравнений (2.14). Рассмотрим функцию тока $\psi(x, t)$, которая определяется соотношениями:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_x = \rho, \quad \frac{\partial \psi}{\partial t} \Big|_x = -\rho u, \quad (2.21)$$

из (2.27) в частности, следует, что

$$\psi(x, t) = \psi(x_0, t) + \int_{x_0}^x \rho(x', t) dx'. \quad (2.22)$$

Определение функции тока таково, что равные массы газа содержатся между плоскостями, значения ψ которых различаются на равные величины. Однако при изменении плотности газа расстояния, разделяющие эти плоскости, меняются. Преимущество метода состоит в том, что введение функции тока позволяет гарантировать выполнение закона сохранения массы в ходе расчета и за счет этого избежать математических трудностей, присущих традиционному подходу [141]. Комбинируя (2.22) и (2.14) и переходя от переменной x к переменной ψ , можно получить следующие уравнения для структуры пламени:

$$\begin{cases} \frac{\partial h}{\partial t} = \rho \frac{\partial}{\partial \psi} \left[\frac{\mu C_p}{Pr} \frac{\partial T}{\partial \psi} \right] + \rho \frac{\partial}{\partial \psi} \left[\sum_{k=1}^{N_{sp}} h_k \frac{\mu}{Sc} \frac{\partial Y_k}{\partial \psi} \right], \\ \frac{\partial Y_k}{\partial t} = \rho \frac{\partial}{\partial \psi} \left[\frac{\mu}{Sc} \frac{\partial Y_k}{\partial \psi} \right] + \frac{S_k}{\rho}. \end{cases} \quad (2.23)$$

Начальное распределение $\psi(x, t^0)$ вычисляется через начальное распределение плотности газа $\rho(x, t^0)$ по формуле (2.22). На каждом шаге по времени функция тока обновляется по формуле:

$$\frac{\psi^{n+1} - \psi^n}{\tau} = -\rho_L^n S_f^n. \quad (2.24)$$

Здесь скорость распространения пламени S_f выражается формулой

$$S_f = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} S_k d\psi}{\rho_L \left[(Y_k)_R - (Y_k)_L \right]}. \quad (2.25)$$

Обратное преобразование, которое на каждом шаге по времени позволяет найти значение координаты x в физическом пространстве, соответствующее текущему значению функции тока ψ , основано на формуле $dx = d\psi / \rho$, которую можно аппроксимировать соотношением:

$$x_0 = 0, \quad x_{j+1} = x_j + 2 \frac{\psi_{j+1}^n - \psi_j^n}{\rho_{j+1}^n + \rho_j^n}. \quad (2.26)$$

2.3.3 Результаты расчетов с применением функции тока

Сначала для проверки метода функции тока, описанного выше, было рассчитано ламинарное пламя с использованием глобального механизма BFER2 при $T_L=300\text{K}$, $p_L=1\text{атм}$, коэффициенте избытка топлива $\varphi = 1.0$. Процесс сходимости скорости распространения пламени показан на рис. 2.7. Результаты показывают, что на основе метода функции тока получено решение, аналогичное решению, показанному на рис. 2.1. Пламя достигло устойчивого состояния через 2 мс, и при использовании массовых долей различных компонент смеси были получены одинаковые скорости распространения пламени.

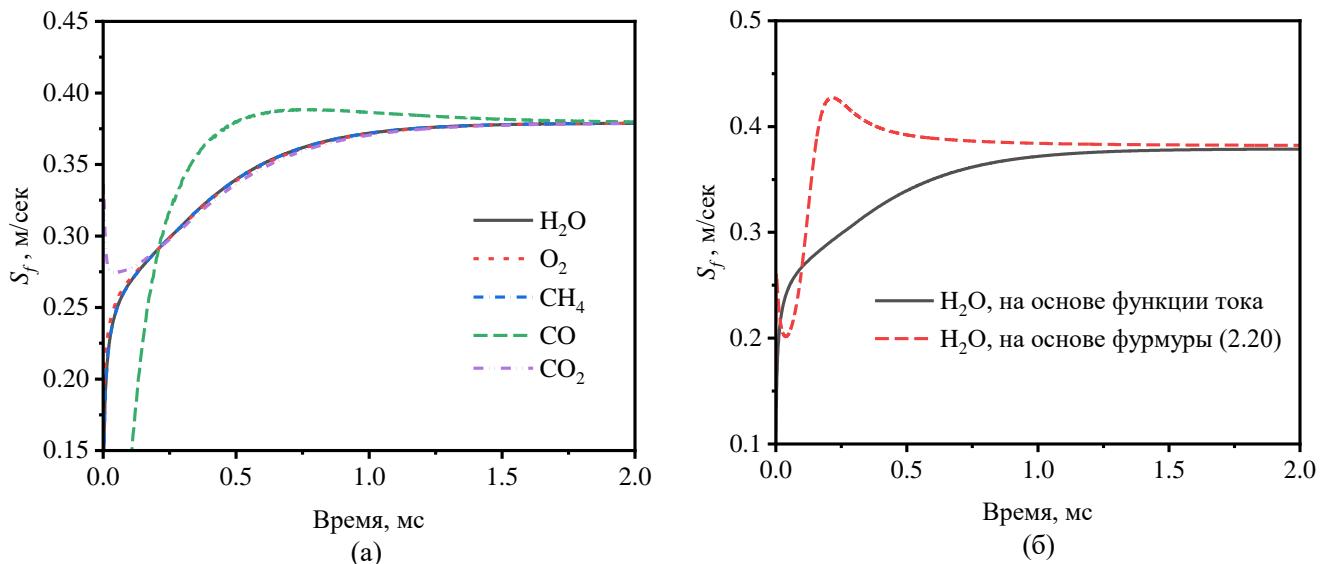


Рисунок 2.7 – Процессы сходимости скорости пламени в системе уравнений, (а) – основанной на функции тока, (б) – сравнение с методом (2.26), полученные с механизмом BFER2 при условиях $T = 300 \text{ K}$, $p = 1 \text{ атм.}$, $\varphi = 1.0$

На рис. 2.8 сравниваются распределения температур и массовых концентраций различных компонентов при $T_L=300\text{K}$, $p_L=1\text{атм}$, коэффициенте избытка топлива $\varphi = 1.0$, посчитанные с использованием формулы (1.61) и помощью введения функции тока. На рис. 2.9 представлена зависимость скорости пламени от коэффициента избытка топлива при тех же температуре и давлении. Результаты показывают, что структуры пламени и скорости пламени, полученные с использованием обоих методов, полностью совпадают. То есть, как решатель на основе (2.20), так и решатель на основе функции тока могут дать точные результаты – например, при использовании глобального механизма BFER2.

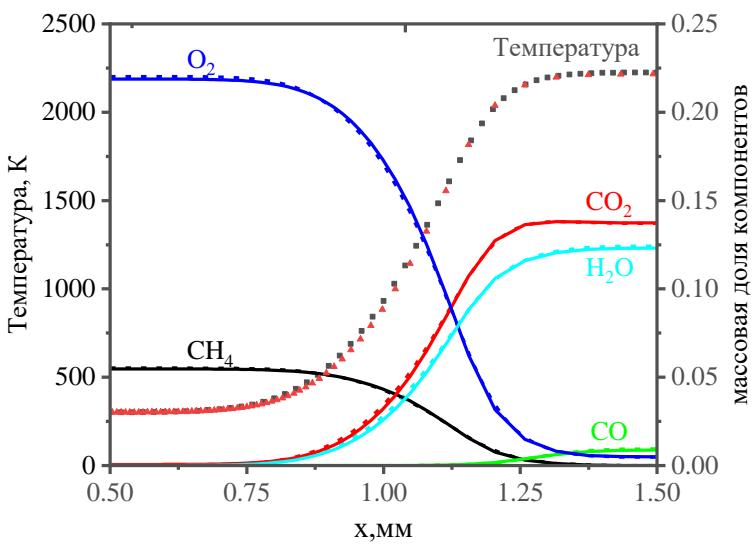


Рисунок 2.8 – Одномерная структура метан-воздушного ламинарного пламени для глобальной кинетики BFER2: треугольник и пунктирные линии - метод на основе функции тока; квадрат и сплошные линии - метод на основе (2.20)

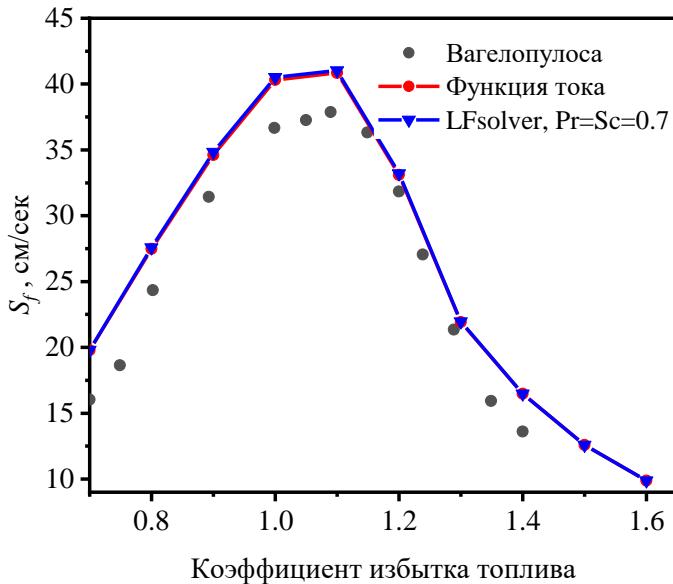


Рисунок 2.9 – Скорости ламинарного пламени при различном коэффициенте избытка топлива, точка – экспериментальные данные Вагелопулоса, красная линия – метод на основе функции тока, синяя линия – метод на основе (2.20).

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. Структура пламени представлена на рис. 2.10,а. Сравнение с рис. 2.5 и 2.6 показывает, что метод на основе функции тока позволил получить нормальную структуру пламени. Скорости распространения ламинарного пламени, рассчитанные по различным компонентам, также оказались близки: по H_2O - 42.11cm/c , по O_2 - 43.13cm/c , по CH_4 - 43.39cm/c , по CO_2 - 45.15cm/c .

В многостадийных кинетических механизмах, содержащих несколько промежуточных продуктов, обычно требуется более длинная расчетная область для стабилизации массовой доли промежуточных компонентов на горячей стороне (рис. 2.10,б). Медленное изменение массовых долей H_2 и CO в механизме Фролова4 также незначительно влияет на значения массовых долей продуктов CO_2 и H_2O на горячей стороне. Именно поэтому значения скорости распространения пламени, полученные по O_2 и CH_4 , ближе друг к другу, а скорости пламени, полученная по CO_2 и H_2O , расходятся сильнее. Рекомендуется при использовании многостадийных механизмов использовать расчетную область большей длины.

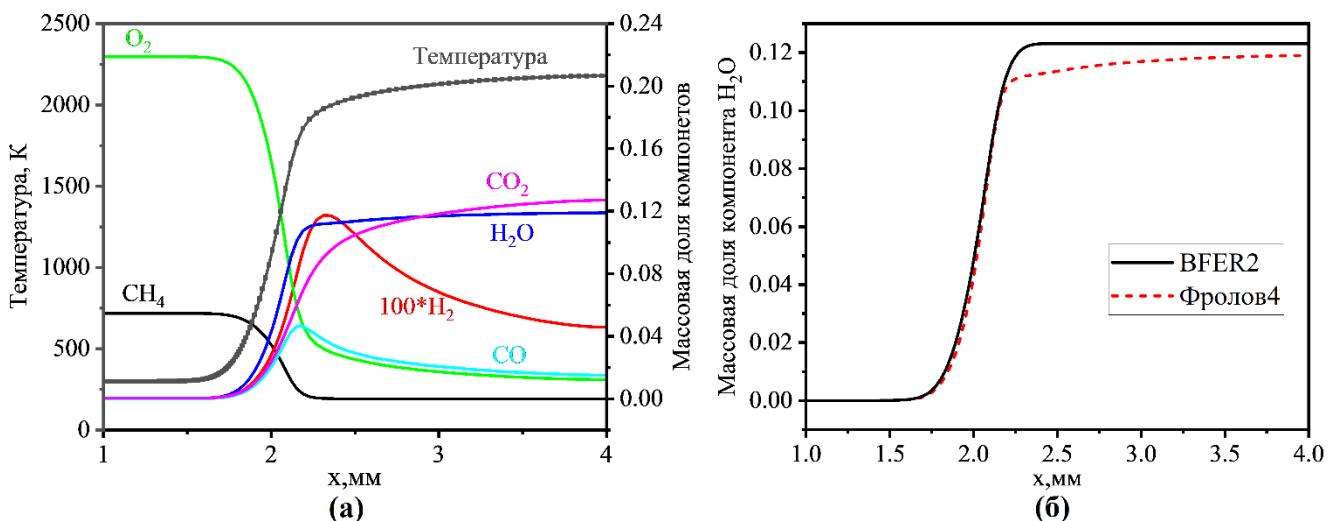


Рисунок 2.10 – (а) Одномерная структура метан-воздушного ламинарного пламени, полученная по механизму Фролов4, (б) – сравнения структуры пламени по механизму Фролов4 и BFER2, солвер с функцией тока.

Чтобы проверить точность солвера на основе функции тока при различных значениях массовых долей топлива и окислителя в исходной смеси, скорости распространения ламинарного пламени были рассчитаны в диапазоне значений коэффициента избытка топлива от 0.7 до 1.6 с использованием программы Cantera и программы автором LFsolver, в которой реализованы методы, описанные данной диссертации (см. рис. 2.11). При коэффициенте избытка топлива меньше 1.0, Cantera и LFsolver дают результаты, которые также аналогичны экспериментальным результатам Вагелопулоса. А при коэффициенте избытка топлива больше 1.0, оба солвера дают значения скорости пламени, намного

превосходящие экспериментальные данные. Это естественный результат, поскольку кинетика Фролов4 рассчитана на $\varphi \leq 1.0$. Кроме того, скорости пламени, полученные по программе Cantera, немного меньше, чем значения, полученные LFsolver. Возможная причина этого отличия состоит в том, что для транспортных коэффициентов в Cantera пользуется детальная теория, описанная в §1.3, а в описанных выше методах предполагается, что числа Прандтля и Шмидта постоянны. В следующем разделе будет обсуждаться влияние молекулярной диффузии на распространение ламинарного пламени.

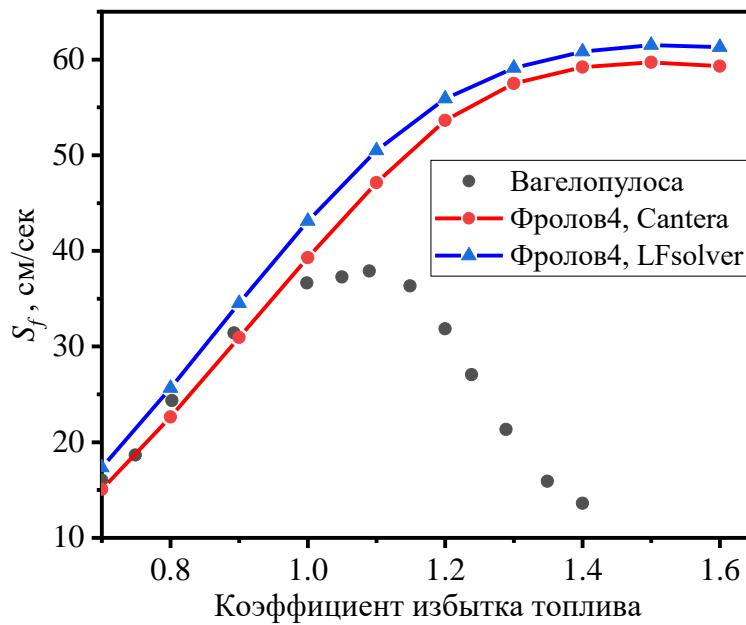


Рисунок 2.11 – Сравнения скорости ламинарного пламени при различном коэффициенте избытка топлива для механизма Фролов4 (LFsolver, Cantera) с экспериментальными данными

2.4 Влияние модели молекулярной диффузии

В координатном пространстве времени t и функции тока ψ , уравнение одномерного ламинарного пламени (2.23), могут быть записаны с использованием коэффициентов теплопроводности и диффузии следующим образом:

$$\begin{cases} \frac{\partial h}{\partial t} = \rho \frac{\partial}{\partial \psi} \left[\lambda \frac{\partial T}{\partial \psi} \right] + \rho^2 \frac{\partial}{\partial \psi} \left[\sum_{k=1}^{N_{sp}} h_k D_k \frac{\partial Y_k}{\partial \psi} \right] \\ \frac{\partial Y_k}{\partial t} = \rho^2 \frac{\partial}{\partial \psi} \left[D_k \frac{\partial Y_k}{\partial \psi} \right] + \frac{S_k}{\rho} \end{cases} \quad (2.27)$$

Как отмечено в статье [142], полное уравнение Стефана-Максвелла для многокомпонентных смесей обычно считается слишком сложным для

использования в расчетах распространения пламени. В настоящей диссертации для вычисления коэффициента многокомпонентной диффузии D_k используется формула (1.27). Теплопроводность смеси газов рассчитывается по формуле (1.25).

На рис. 2.12 показана структура ламинарного пламени в предварительно-смешанной смеси метана и воздуха при $T_L=300\text{K}$, $p_L=1\text{атм}$, коэффициенте избытка топлива $\varphi = 1.0$. Видно, что переход к детальной теории молекулярной диффузии оказывает большее влияние на распределения CO_2 и H_2O , чем на распределения других компонент. В то время как диффузационная способность H_2O увеличивается, диффузационная способность CO_2 ослабляется.

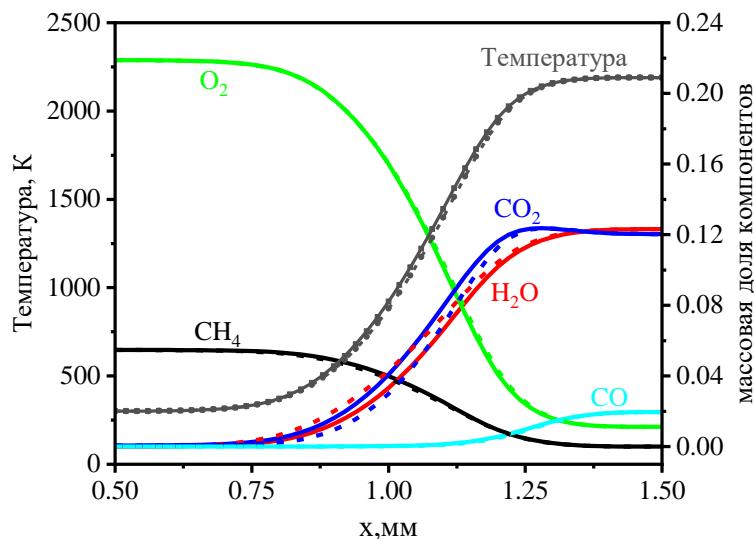


Рисунок 2.12 – Структура ламинарного пламени метана в воздухе (сплошная линия – упрощенный подход с $\text{Pr}=0.7$, $\text{Sc}=0.7$, пунктирные линии – детальная теория).

На рис. 2.13 показаны зависимости скорости ламинарного метано-воздушного пламени от коэффициента избытка топлива с использованием BFER2 при детальной теории диффузии (линия 2) и упрощенной (линия 3). Видно, что теория молекулярной диффузии компонентов оказывает заметное влияние на скорость распространения ламинарного пламени. Теория с постоянным числом Прандтля $\text{Pr}=0.7$ и Шмидта $\text{Sc}=0.7$ завышает скорость ламинарного пламени почти на всех состояниях смеси с максимальной погрешностью 8.2%.

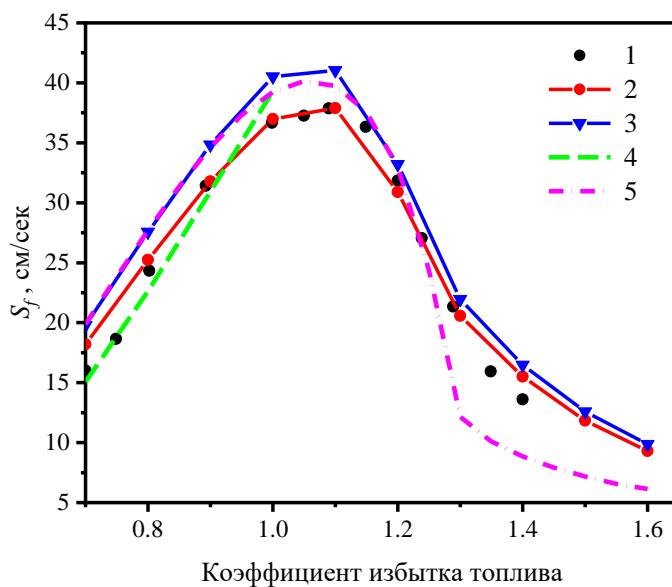


Рисунок 2.13 – Скорости ламинарного пламени метана в воздухе при различных коэффициентах избытка топлива: 1 – Эксперимент Вагелопулоса; 2 – детальная теория, кинетика “BFER2”; 3 – упрощенный подход с $Pr=0.7$, $Sc=0.7$, кинетика “BFER2”; 4 – детальная теория, кинетика “Фролов4”; 5 – детальная теория, кинетика “Smooke25”

Также зависимость скорости ламинарного метано-воздушного пламени от коэффициента избытка топлива была рассчитана для квазиглобальной кинетики Фролов4 и для скелетного механизма [139] с 25 реакциями между 16 компонентами (далее – Smooke25). Скорости ламинарного пламени метана в воздухе при детальной теории с механизмом Фролов4 и Smooke25 обозначены на рис. 2.13 линиями 4 и 5. Все три механизма кинетики правильно предсказывают скорость ламинарного пламени в диапазоне $\varphi = 0.7 – 1.0$ (механизм Фролов4 разработан для $\varphi \leq 1$). Стоит подчеркнуть, что в глобальной кинетике BFER2 введена эмпирическая коррекция скорости реакции, которая обеспечивает правильное поведение скорости пламени при $\varphi > 1$, а скелетный механизм Smooke25 дает качественно правильное поведение без эмпирических коррекций.

В настоящей диссертации ещё будет рассмотрено горение водорода в воздухе, поэтому автор также исследовал влияние модели молекулярной диффузии на ламинарное распространение пламени водорода. Были рассмотрены три модели кинетики горения водорода в воздухе: детальная модель Яхимовского с 19 реакциями и 9 компонентами (H , O , OH , H_2O , H_2 , O_2 , пероксиды HO_2 и H_2O_2 и инертный N_2) [83], детальная модель Зеттервала и Фюрби [161] с 22 реакциями

между теми же 9 компонентами, и упрощенная модель Яхимовского с 7 реакциями и 7 веществами (без пероксидов), выделенная из детальной модели Яхимовского 19 реакциями. Упрощенная модель Яхимовского основана на работе [135]. В этой работе предложена модель горения этилена, состоящая из квазиглобальной реакции разложения этилена на CO и H₂O, двух реакций с участием CO и CO₂ и 7 реакций с участием водорода и кислорода. Последние 7 реакций совпадают с первыми 7 реакциями детального механизма горения водорода в воздухе [83], за исключением одной исправленной константы и с уточненными коэффициентами влияния третьих частиц («Third-body efficiencies»). Эти 7 реакций между 7 веществами и использовались в расчетах. Уравнения реакций и константы упрощенной модели Яхимовского приведены в Таблице Б.1 (Приложение Б.1).

На рис. 2.14 проведены распределения температуры и массовых долей компонентов ламинарного пламени водорода в воздухе с использованием механизма Яхимовского7. Детальная теория молекулярной диффузии даёт большую толщину пламени, чем упрощенный подход. Хотя распределения параметров по разным моделям молекулярной диффузии отличаются слабо, упрощенный подход существенно снижает скорость пламени при коэффициенте избытка топлива $1 < \varphi < 5$ с ошибкой до 70% (см. рис. 2.15).

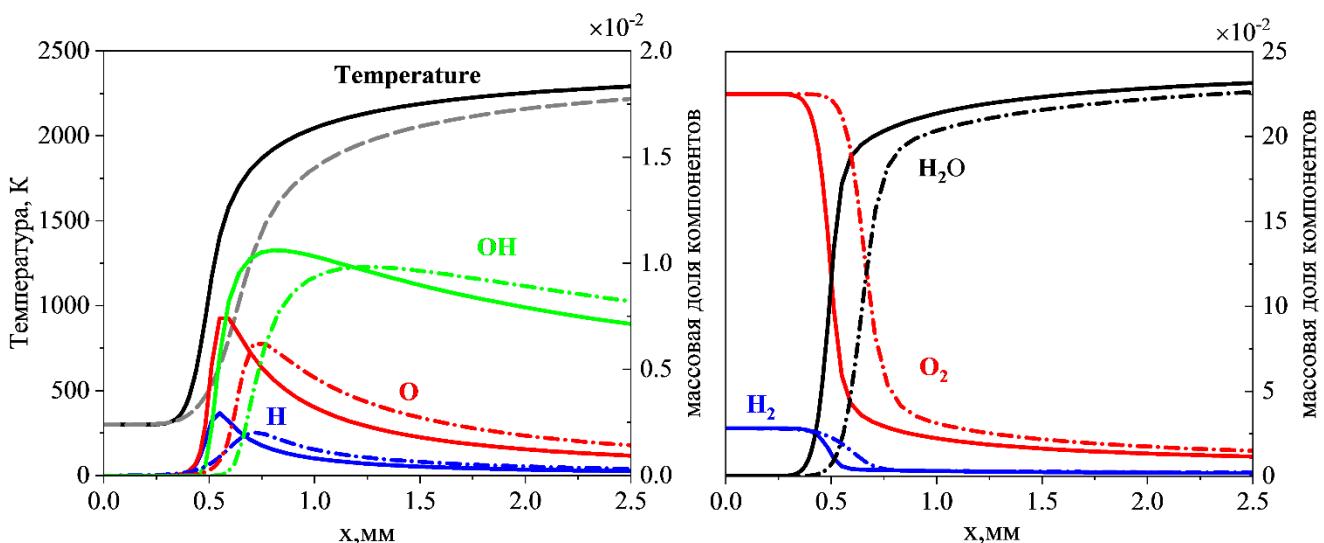


Рисунок 2.14 – Структура ламинарного пламени водорода в воздухе с использованием механизма Яхимовского с 7 реакциями при $\varphi = 1.0$ (сплошная линия – упрощенный подход с $\text{Pr}=0.72$, $\text{Sc}=0.9$, пунктирные линии – детальная теория).

Также на рис.2.15 показаны результаты расчетов с детальной телрией диффузии, но с использованием других кинетических моделей. По сравнению с экспериментами, кинетический механизм Яхимовский7 предсказывает занижение скорости ламинарного пламени во всех коэффициентах избытка топлива с ошибкой до 41%. Детальные механизмы Яхимовский19 и Фюрбиги22 правильно предсказывают скорости пламени при $0.5 < \varphi < 0.8$. При $\varphi > 0.8$, эти два механизма завышают скорости пламени до 21%.

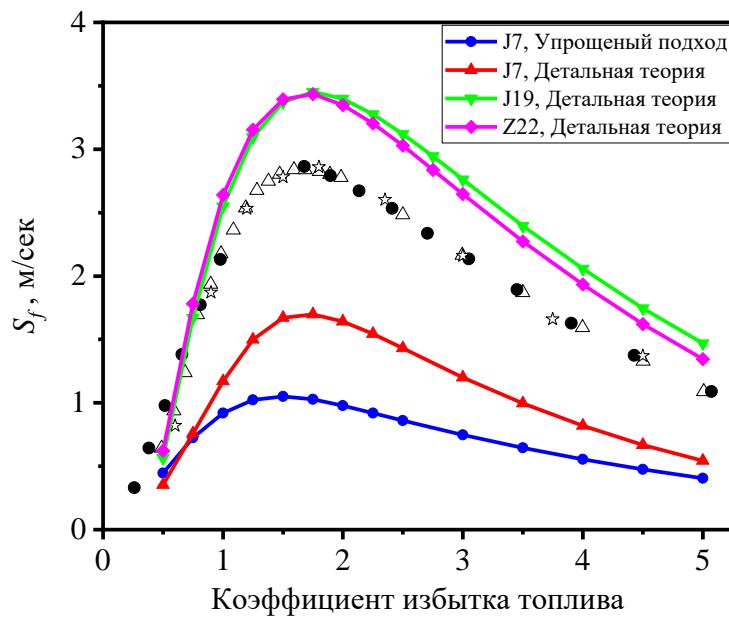


Рисунок 2.15 – Сравнение скорости ламинарного пламени водорода в воздухе с экспериментами (● Taylor, 1991 [145], ⋆ Kwon&Faeth, 2001 [89], Δ Krejci et al, 2013 [86]) при разных коэффициентах избытка топлива.

Выводы к Главе 2

- 2.1 Предложен численный метод для моделирования ламинарного пламени в случае использования глобального химического механизма (без цепных реакций). Показано, что при использовании закона сохранения массы для определения скорости потока можно получить точное описание ламинарного пламени. Кроме того, предложена более точная формула расчета скорости потока.
- 2.2 Предложен численный метод для моделирования распространения одномерного ламинарного пламени на основе метода функции тока Спэлдинга. Этот метод можно использовать для произвольного кинетического механизма.
- 2.3 Реализованы различные теории для описания переноса тепла и диффузии массы. Модели молекулярной диффузии оказывают большее влияние на распределения продуктов сгорания (CO_2 , H_2O) в пламени метана в воздухе и большее влияние на распределения радикалов (H , O , OH) и H_2 в ламинарном пламени водорода. Однаковые коэффициенты диффузии и теплопроводности для всех компонентов могут завышать скорости распространения ламинарного пламени метана в воздухе до 8.69% и занижать скорости ламинарного пламени водорода в воздухе до 70%.
- 2.4 Скорости распространения ламинарного пламени метана и водорода в воздухе рассчитаны с использованием различных кинетических механизмов. Все три механизма кинетики метана (BFER2, Фролов4 и Smooke25) правильно предсказывают скорость ламинарного пламени в диапазоне $\varphi = 0.7 - 1.0$ (механизм Фролов4 разработан для $\varphi \leq 1$). Механизм кинетики водорода Яхимовский-7 предсказывает занижение скорости ламинарного пламени водорода во всех коэффициентах избытка топлива с ошибкой до 41%. Механизм Яхимовский19 и Фюрби22 правильно предсказывают скорость пламени при $0.5 < \varphi < 0.8$, но при $\varphi > 0.8$ они завышают скорость скорости пламени с ошибкой до 21%.

Глава 3. Моделирование высокоскоростного горения в экспериментальной модели ONERA LAPCAT-II

Организация устойчивого и эффективного сжигания топлива в канале со сверхзвуковым потоком воздуха на входе представляет собой чрезвычайно сложную проблему, для решения которой требуется глубокое понимание физических процессов, протекающих в таких потоках. Начиная с середины XX века, во всем мире ведутся теоретические и экспериментальные исследования таких течений.

Объем данных по горению в высокоскоростном потоке в открытых источниках весьма ограничен. Анализ классических экспериментов с предельно упрощенной постановкой задачи [47, 51, 66] показал значительные недостатки и нехватку информации в опубликованных данных [134]. Значительно больше экспериментальных работ посвящено исследованиям течения в модельных высокоскоростных энергетических устройствах (см., например, [1, 3, 71, 84, 106, 112, 124, 126]). Несмотря на высокое качество многих работ, сложная геометрия экспериментальной модели, использование устройств для инжекции топлива и стабилизации горения (пилоны, ступеньки, каверны и пр.) приводят к взаимодействию многих разномасштабных эффектов, затрудняющих валидацию математических моделей горения.

Расширяющийся канал с поперечным впрыском топлива представляет собой простейшую конструкцию экспериментальных моделей со сверхзвуковым горением [40, 45, 125]. Впрыскиваемое топливо создает сложную вихревую структуру, включающую такие физические процессы, как отрыв потока, взаимодействие пограничного слоя и ударных волн, а также взаимодействие ударной волны. Высота проникновения струи сильно зависит от проникающей способности струй, которая сильно коррелирует с отношением импульса струи к набегающему потоку. Для такого типа конструкций температура торможения

набегающего потока обычно выше температуры самовоспламенения топлива, поэтому дополнительное оборудование для розжига не требуется.

Серия физических экспериментов с детальным исследованием таких течений была проведена в Французской аэрокосмической лабораторией (ONERA) в рамках проекта LAPCAT-II на установке ONERA-LAERTE [60, 149]. В этих экспериментах был рассмотрен модельный канал предельно простого устройства, без специальных механических устройств для стабилизации горения. Анализ экспериментальных данных показал наличие целого ряда принципиально различных по структуре течения режимов работы камеры [10]. Был выполнен ряд работ по численному моделированию этих экспериментов как в рамках уравнений Рейнольдса (RANS) [15, 115, 149], так и на базе гибридного метода RANS/LES [25, 114, 150].

Вначале в данной главе исследуется зависимость получаемых в расчете характеристик течения от таких физических факторов, как форма канала инжектора топлива, эффективная высота шероховатости, различные способы описания молекулярной диффузии. Выбирается такая физико-математическая модель течения, которая обеспечивает распределение давления вдоль канала, близкое к экспериментальному. После того, как такое распределение давления достигается, рассматривается вопрос о влиянии используемого в расчете механизма химической кинетики на результаты численного моделирования течения. Поскольку процесс горения в основном контролируется выделением тепла, химическая кинетика может играть важную роль в формировании структуры течения в канале экспериментальной модели.

3.1 Постановка эксперимента и организация расчетов

3.1.1 Постановка эксперимента

Эксперименты на стенде ONERA LAERTE [149] (см. рис. 3.1) проводились в режиме присоединенного воздуховода. Экспериментальная модель длиной 1.192 м была установлена на выходе из сопла Лаваля длиной 0.111 м, разгоняющего поток до числа Маха 2.0. Входное сечение сопла Лаваля 2 (см.

рис. 3.1 и рис. 3.2, а) пристыковано к огневому подогревателю 1 длиной 0.254 м, в котором для достижения высокой температуры торможения потока воздуха осуществляется сжигание водорода с последующим обогащением потока кислородом. Экспериментальная модель (см. рис. 3.1 и рис. 3.2, б) состоит из четырех секций постоянной ширины: секции постоянного сечения 5 длиной 0.215 м, секции 6 длиной 0.3179 м с углом наклона стенок 1° , секции 7 длиной 0.3545 м с углом наклона стенок 3° и секции 8 длиной 0.3046 м с углом наклона стенок 1° .

Экспериментальная модель был снабжена оптическими окнами, расположенными по всей длине канала, что позволило визуализировать структуру течения методами высокоскоростной шлирен-видеосъемки (частота кадров 12 кГц при времени экспозиции 1 мкс) и зарегистрировать хемиллюминесценцию возбужденных радикалов OH^* с помощью системы лазерно-индукционной флуоресценции (частота кадров 4 кГц при времени экспозиции 4 мкс).

Давление торможения P_0 и температура торможения T_0 в входном потоке были измерены на расстоянии 220 мм вверх по потоку от горловины сопла Лаваля, в трубе с внутренним диаметром 105 мм. Предполагалось, что статическое давление на стенке равно P_0 (локальное число Маха 0.054, $P/P_0 = 0.998$). Использовались 3 термопары для оценки профиля T_0 [149]. Также были измерены распределения среднего по времени статического давления и температура стенок экспериментальной модели.

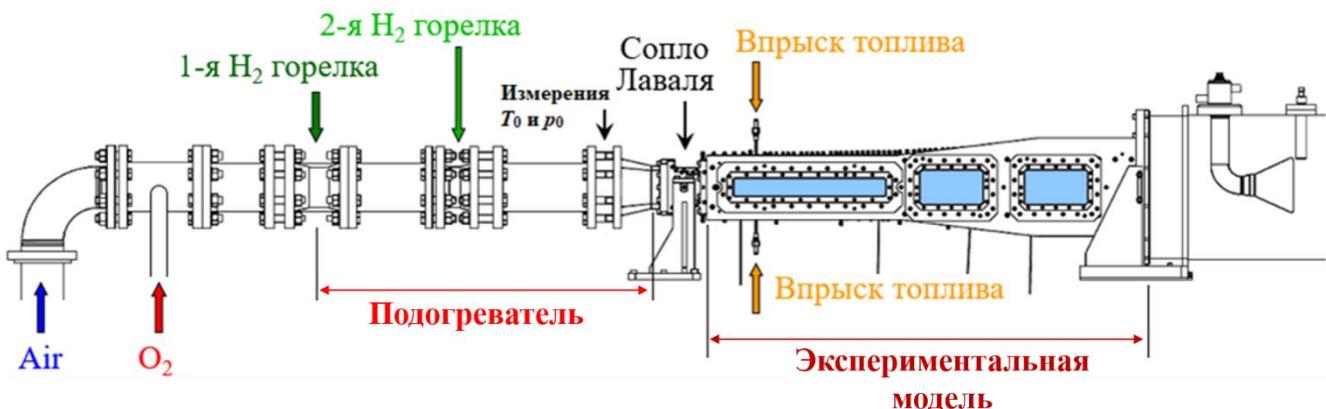


Рисунок 3.1 – Общий вид установки LAERTE (ONERA – Palaiseau Center)

Экспериментальная модель ONERA LAPCAT-II изготовлена из бронзы, охлаждения стенок не производилось, но на внутреннюю поверхность канала было нанесено теплозащитное покрытие из оксидов циркония и иттрия (YSZ, Yttria Stabilized Zirconia). Температура стенок со стороны горячего потока измерялась термопарами, установленными внутри углублений в стенках канала. Изначально выходы из углублений были отделены от горячего потока теплозащитным покрытием; но в ходе экспериментов покрытие над термопарами разрушилось. Поэтому в работе [149] высказано мнение, что показания термопар могут рассматриваться лишь как качественный индикатор изменения температуры стенок в процессе эксперимента.

3.1.2 Расчетная область, сетка и граничные условия

Течение в подогревателе (вместе с соплом Лаваля) и течение в канале экспериментальной модели рассчитываются отдельно. Результаты расчетов течения в подогревателе и сопле Лаваля используются для задания граничных условий на входе в канал экспериментальной модели. Используется многоблочная регулярная сетка с шестиугольными ячейками. Геометрии подогревателя и экспериментального канала симметричны относительно плоскостей $y = 0$ и $z = 0$ (начало координат помещено в центре симметрии звукового сечения сопла Лаваля). В расчетах рассматривается половина канала $z \geq 0$, но не четверть, т.к. в экспериментах наблюдались нестационарные режимы течения в модельном канале, асимметричные по отношению к плоскости $y = 0$.

Геометрия и блочная структура расчетной сетки для обоих расчетов показаны на рис. 3.2. Расчетная сетка для подогревателя и сопла Лаваля (рис. 3.2,а) состоит из 97 блоков и содержит 1 191 680 ячеек. Входное сечение подогревателя 1 – круг радиусом 0.0525 м; на полуокружности расположено 180 ячеек сетки, по радиусу – 48 ячеек. Вдоль подогревателя форма поперечных сечений плавно изменяется от круга к прямоугольнику; сетка содержит 192 ячейки в продольном направлении. На границе между подогревателем 1 и соплом Лаваля 2 сеточные линии терпят разрыв, и параметры для расчета потоков через грани ячеек сетки

пересчитываются от подогревателя 1 к соплу Лаваля 2 при помощи интерполяции. Далее поперечные сечения имеют форму прямоугольника; ширина канала постоянна и равна 0.04 м. В поперечных сечениях сетка почти всюду равномерна и содержит 52 ячейки по высоте и 32 ячейки по боковой ширине. Кроме подогревателя 1, область для расчетов подогревателя и сопла включает сопло Лаваля 2 и два буферных участка 3 и 4.

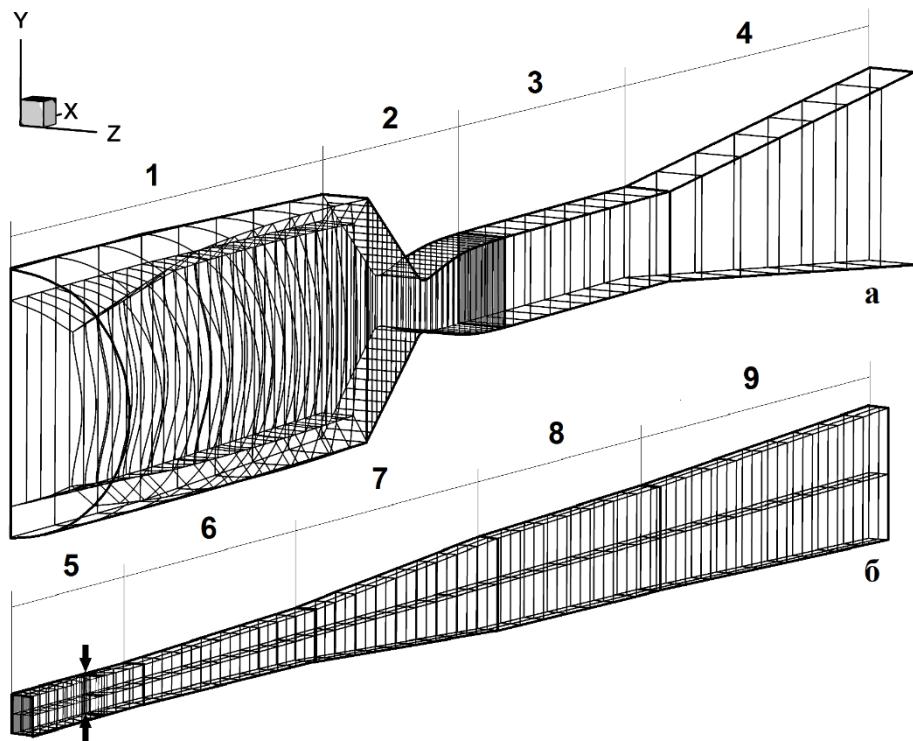


Рисунок 3.2 – Геометрия канала и блочная структура расчетной сетки для расчетов подогревателя и сопла Лаваля (а) и экспериментальной модели (б). Показана половина канала (справа от продольной вертикальной плоскости симметрии). Стрелки – подача топлива. Серый цвет - сечение стыковки сопла Лаваля с экспериментальной моделью ($x=0.065$ м).

1 – подогреватель; 2 – сопло Лаваля; 3 – буферный участок постоянного сечения с прилипанием на стенках; 4 – расширяющийся буферный участок со скольжением на стенках; 5 – участок постоянного сечения; 6 – участок с расширением 2° ; 7 – участок с расширением 6° ; 8 – участок с расширением 2° ; 9 - расширяющийся буферный участок со скольжением

Геометрия сверхзвуковой части сопла Лаваля приведена в [149]. На длине сопла Лаваля размещено 194 ячейки сетки, на буферных участках – 64 и 52 ячейки. Буферные участки 3 и 4 призваны устраниć влияние выходных граничных условий на течение в выходном сечении сопла Лаваля. Это сечение закрашено серым цветом на рис. 3.2 и имеет координату $x=0.065$ м; высота канала в этом сечении равна 0.0177 м. Параметры потока в этом сечении используются как граничное условие на входе в экспериментальную модель. Первый буферный

участок 3 – с постоянной площадью поперечного сечения и имеет длину 0.135 м, а второй (4) расширяется по высоте и имеет длину 0.2 м. На стенках участков 1-3 ставится граничное условие “закон стенки” из класса пристеночных функций [16], а на стенках участка 4 – условие скольжения. На выходе параметры определяются экстраполяцией изнутри расчетной области. На входе в подогреватель задается постоянное по сечению полное давление $p_0=4.07$ бар и параболический профиль температуры торможения, аппроксимирующий данные эксперимента [10]. На оси симметрии температура торможения максимальна и равна $T_0=1705$ К, а у стенок $T_0=1490$ К (стенки подогревателя охлаждались водой). Состав газа во входном сечении принимался постоянным и соответствовал равновесному составу смеси водорода, кислорода и азота в пропорции 0.019:0.396:0.585 по массе. Температура стенок принималась равной $T_w=1490$ К по всей длине подогревателя и сопла Лаваля.

Расчетная сетка для экспериментальной модели (рис. 3.2,б) состоит из 192 блоков и содержит 1 727 232 ячейки. Сетка во входном сечении канала ($x=0.065$ м) совпадает с сеткой в выходном сечении сопла Лаваля. В расчетной области после секции 8 добавлен еще буферный участок 9 длиной 0.443 м с расширением по высоте. На стенках экспериментальной модели ставится граничное условие “закон стенки” с заданной температурой стенок T_w , на стенках буферного участка – условие скольжения. На выходе из буферного участка параметры определяются экстраполяцией изнутри расчетной области. По длине расчетной области расположено 692 ячейки.

Таблица 3.1 – Выбранный для расчетов режим эксперимента

p_0 ,бар	T_0 ,К	Y_{N_2}	Y_{O_2}	Y_{H_2O}	q ,г/сек	$p_{0,j}$,бар	$T_{0,j}$,К	PR	J	φ
4.07	1706	0.5852	0.2476	0.1672	291.7	4.78	300	9.19	1.2	0.145

Топливо (водород) вдувалось перпендикулярно потоку через два отверстия диаметром 2 мм в верхней и нижней стенках, на вертикальной плоскости симметрии канала, в сечении $x=0.2$ м (места инжекции показаны стрелками на рис. 3.2). В настоящей работе рассматриваются следующие параметры подачи топлива:

$p_0 = 4.78$ бар, $T_0 = 300$ К, $M=1.0$, что соответствует интегральному коэффициенту избытка топлива $\varphi = 0.145$ (Case B из расчетной работы [12], см. таб. 3.1). В трех последних колонках Таблицы справа приведены значения отношения давления торможения в струе топлива к давлению торможения в набегающем потоке $PR = P_{0,j}/P_0$, отношение скоростного напора струи к скоростному напору набегающего потока $J = (\gamma_j P_j M_j^2) / (\gamma P M^2)$ и коэффициент избытка топлива φ .

В расчетах решались стационарные осреднённые по Рейнольдсу уравнения Навье-Стокса (RANS) для реагирующего газа с шероховатостью стенок, которые замыкались моделью SST [105] и различными моделями горения водорода в воздухе. Взаимодействие турбулентности с горением не учитывалось, поскольку горение протекает в преимущественно сверхзвуковом режиме, а в таких случаях, согласно выводам работы [29], вклад эффектов TCI незначителен. Расчеты, описанные в разделе 3.2, были выполнены Лабораторией JetSim ЦАГИ при помощи собственной программы **zFlare** [16]. Автор готовил блок расчета химической кинетики для этих расчетов и анализировал результаты. Остальные расчеты выполнены автором при помощи коммерческого пакета вычислительной аэродинамики ANSYS FLUENT [35]. Использовался конечно-объемный численный метод 2-го порядка аппроксимации по всем переменным [43], включающий противопоточную схему для конвективных потоков [95], явную центрально-разностную аппроксимацию диффузационных потоков и локально-неявную аппроксимацию источниковых членов. Все представленные в Главе численные решения являются стационарными.

В расчетах этой Главы в качестве базового механизма использовалась наиболее простая модель кинетики Яхимовского с 7 реакциями, основанная на работе [135]. В этой работе описана модель горения этилена, состоящая из квазиглобальной реакции разложения этилена на CO и H₂O, двух реакций с участием CO и CO₂, и 7 реакций с участием водорода и кислорода. Последние 7 реакций совпадают с первыми 7 реакциями детального механизма горения водорода в воздухе [83], за исключением одной исправленной константы и с

уточненными коэффициентами влияния третьих частиц («*Third-body efficiencies*»). Эти семь реакций между 7 веществами (H , O , OH , H_2O , H_2 , O_2 и интерным N_2) и использовались в расчетах. Кроме того, результаты применения данной модели будут сопоставлены с моделью Яхимовского с 19 реакциями и с моделью Зеттервала и Фюрби [161] с 22 реакциями. В этих двух моделях к перечисленным 7 веществам добавлены еще два – пероксины HO_2 и H_2O_2 . Модель Яхимовского с 19 реакциями выделена из детального механизма [83] (оставлены все реакции с перечисленными 9 веществами); удалены реакции с веществами, которые не играют роли при температуре ниже 3500 К, и этом температурном диапазоне такая модель является детальным механизмом). Уравнения реакций и константы всех трех моделей приведены в приложение Б.

3.2 Течение в подогревателе (с соплом Лаваля) и в гладком канале

На рис. 3.3 показаны полученные в расчетах поля статической температуры (а,б) и массовой доли радикала OH (в,г) в подогревателе. Профили температуры торможения в поперечных сечениях остаются почти неизменными по длине канала. Охлаждение стенок канала приводит лишь к тому, что температура торможения на оси канала падает от 1705 К на входе до 1696.5 К в сечении $x=0.065$ м (которое совпадает со входом в модельный канал).

Расчеты подогревателя выполнены с двумя моделями химической кинетики (7 и 19 реакций). Оба расчета дали почти одинаковые поля давления, температуры, числа Маха и массовых концентраций молекул. Но поля массовых долей радикалов существенно отличаются – см. поля массовой доли радикала OH (Y_{OH}) на рис. 3.3,в (7 реакций) и рис. 3.3,г (19 реакций). Полученные в этих расчетах продольные распределения Y_{OH} вдоль оси симметрии и вдоль стенок подогревателя изображены на рис. 3.4. Состав газа у стенок подогревателя стремится к равновесному составу, соответствующему $p \approx 4.07$ бар, $T_w = 1495$ К. Расчеты показывают, что равновесные составы, предсказываемые моделями Яхимовского с 7 и 19 реакциями, очень близки. Но в модели с 19 реакциями

переход к равновесию происходит быстро, а в модели с 7 реакциями – очень медленно, так что равновесное состояние так и не достигается.

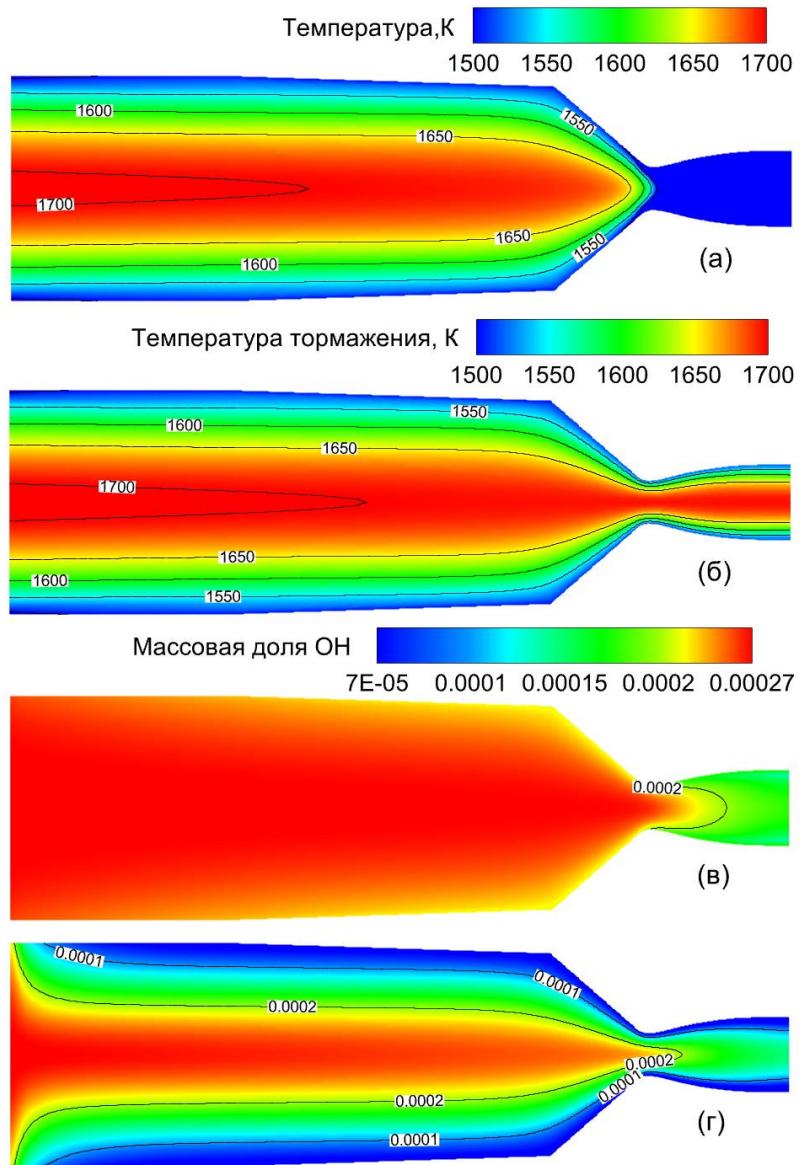


Рисунок 3.3 – Полученные в расчетах поля течения в подогревателе: (а) статической температуры, (б) температуры торможения; (в) массовой доли OH в расчете с 7 реакциями; (г) массовой доли OH в расчете с 19 реакциями; показаны изолинии параметров.

Расчеты течения в подогревателе существенны для правильного моделирования течения в экспериментальной модели. Например, если обнулить скорости реакций в подогревателе, то расчеты экспериментальной модели по модели кинетики с 19 реакциями дают поле течения, в котором горение начинается на 0.2 м ниже по течению и попадает в секцию 7 с быстрым расширением канала, что существенно сокращает эффективность тепловыделения.

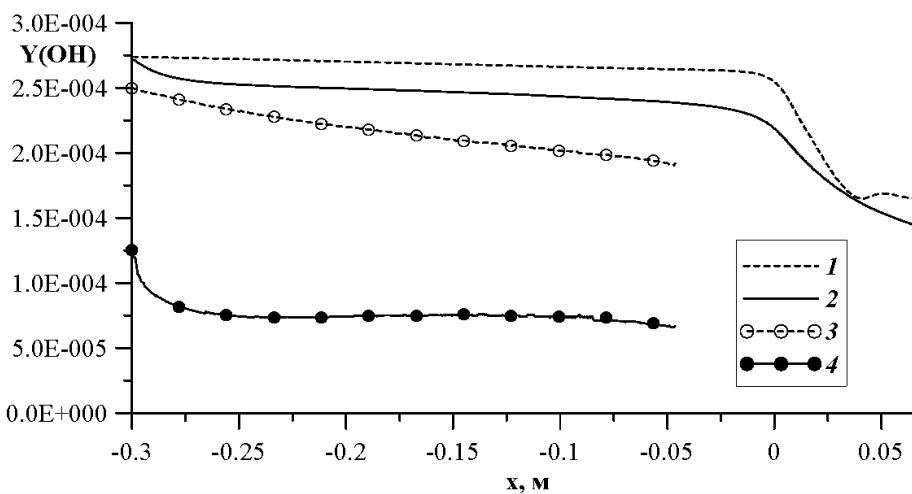


Рисунок 3.4 – Продольные распределения массовой доли ОН, в расчетах подогревателя:

- 1 – 7 реакций, ось симметрии канала; 2 – 19 реакций, ось симметрии канала;
- 3 – 7 реакций, стенка подогревателя; 4 – 19 реакций, стенка подогревателя

Сначала расчеты течения в канале экспериментальной модели проводились с использованием кинетической схемы с 7 реакциями, и исследовалось влияние температуры стенок канала на структуру течения. Затем были сопоставлены расчеты по схемам с 7 и 19 реакциями. В качестве граничного условия на входе в экспериментальной модели использовались результаты расчета подогревателя с такой же моделью химической кинетики. Толщина турбулентных пограничных слоев в поле скорости на входе в канал – около 4% от высоты канала на входе в канал $H=0.0354$ м. Толщина температурных пограничных слоев гораздо больше – около 38% от H (рис. 3.5,а). На оси канала на входе в экспериментальную модель реализуются следующие значения параметров газа: давление $p \approx 0.5457$ бар, температура $T \approx 1077$ К, продольная скорость $u \approx 1320$ м/сек, число Маха $M \approx 1.984$. Число Рейнольдса по высоте входа в канал $\text{Re}_H \sim 1.8 \cdot 10^5$. Стенки модели в этой серии расчетов считались гладкими стенками с прилипанием потока, однако сильного сгущения сетки к стенкам не было, и использовались пристеночные функции.

На рис. 3.5 и рис. 3.6 представлены трехмерные поля и изолинии температуры и числа Маха на участке $0.18 \leq x \leq 0.58$ м (от выдува струй и почти до конца секции 6), полученные в двух расчетах на основе кинетической схемы с 7 реакциями – с теплоизолированными стенками (а) и с температурой стенок T_w

$=716 \text{ K}$ (б), а также в расчете на основе кинетики с 19 реакциями с $T_w=716 \text{ K}$ (в). Также показаны стехиометрические изоповерхности, на которых массовая доля водорода равна 0.028. В случае теплоизолированных стенок горение протекает быстрее: стехиометрические изоповерхности исчезают уже при $x \approx 0.54 \text{ м}$.

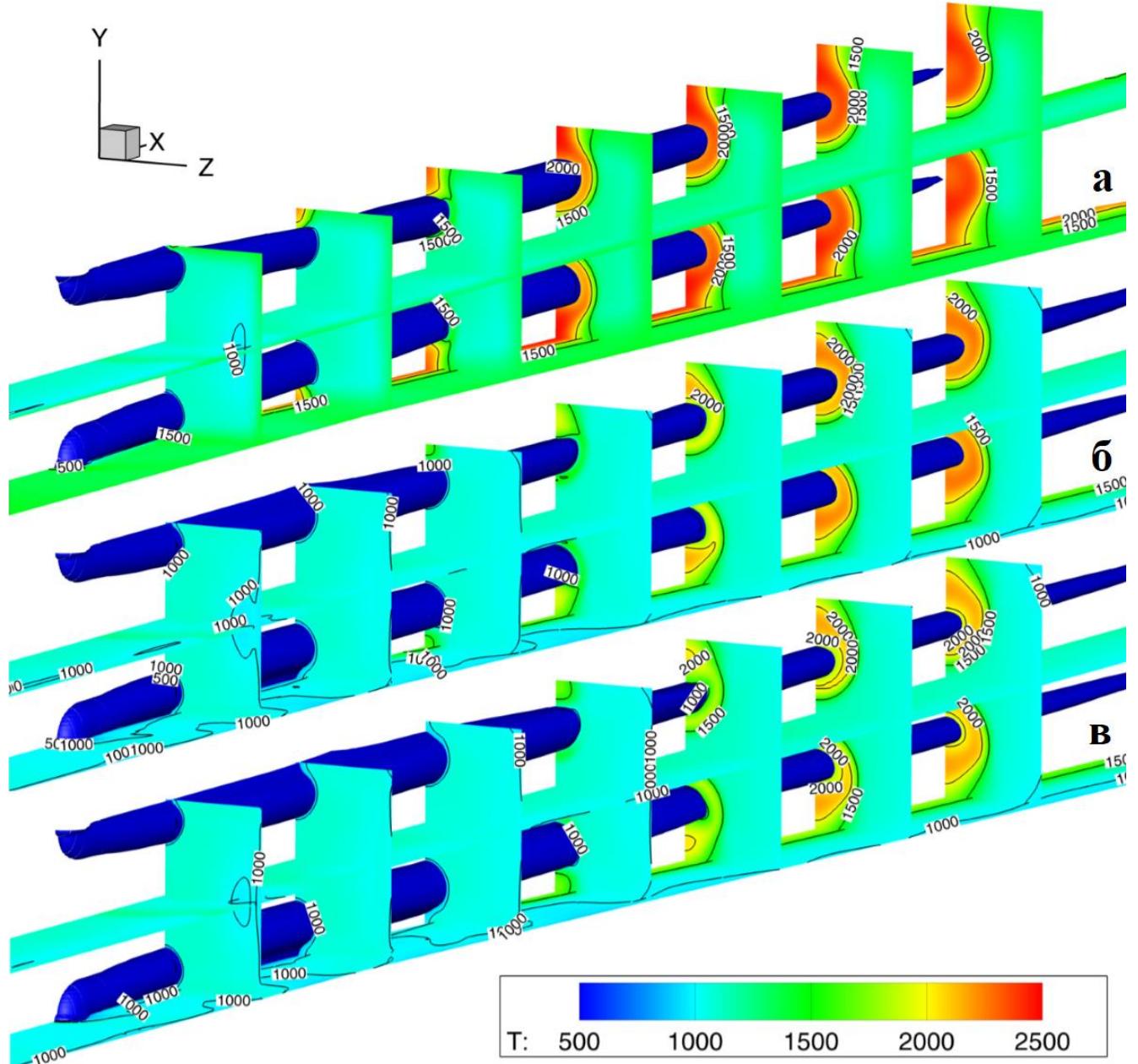


Рисунок 3.5 – Поля и изолинии температуры [К] на участке экспериментальной модели $0.18 \leq x \leq 0.58 \text{ м}$: а – 7 реакций, теплоизолированные стенки; б – 7 реакций, $T_w = 716 \text{ K}$; в – 19 реакций, $T_w = 716 \text{ K}$. Показаны нижняя стенка канала, продольная горизонтальная плоскость симметрии и поперечные сечения $x = 0.24 \text{ м}, 0.29 \text{ м}, 0.34 \text{ м}, 0.39 \text{ м}, 0.44 \text{ м}, 0.49 \text{ м}, 0.54 \text{ м}$. Черным цветом показаны изоповерхности, на которых массовая доля H_2 равна 0.028.

Области возвратного течения реализуются в расчетах только в районе выдува струй водорода – перед струями и непосредственно за ними. Перед струями

возникают небольшие отрывы длиной около 1 см, которые не приводят к стабилизации горения. Скачки уплотнения, образующиеся перед струями водорода, пересекаются на оси симметрии канала регулярно, без образования дозвуковых зон. За исключением окрестности инжекции и тонких пристеночных слоев, течение в следе за каждой струей сверхзвуковое (число Maxa $M \sim 1.4$).

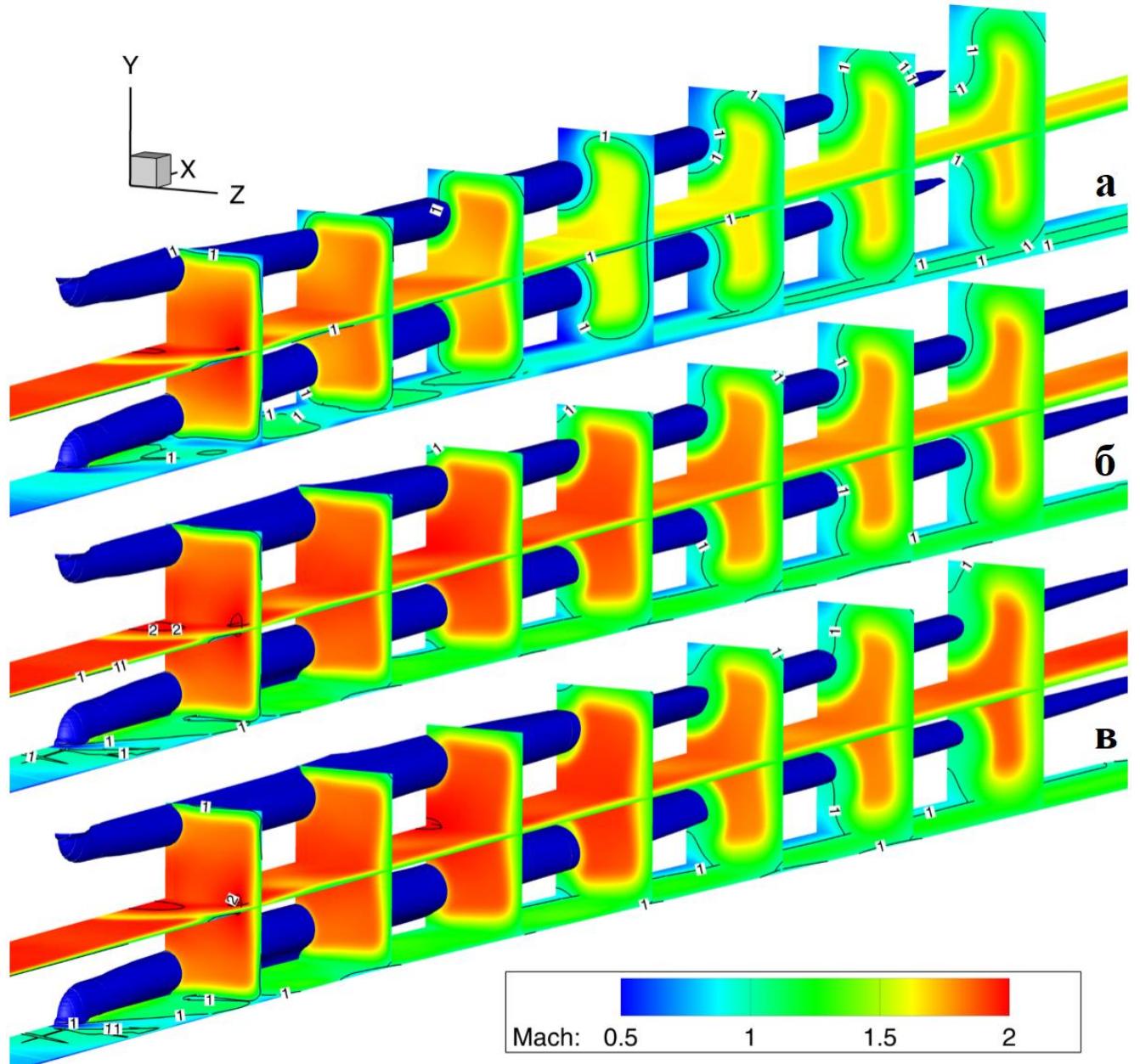


Рисунок 3.6 – Поля и изолинии числа Маха на участке экспериментальной модели $0.18 \leq x \leq 0.58$ м: а – 7 реакций, теплоизолированные стенки; б – 7 реакций, $T_w = 716$ К; в – 19 реакций, $T_w = 716$ К. Показаны нижняя стенка канала, продольная горизонтальная плоскость симметрии и поперечные сечения $x = 0.24$ м, 0.29 м, 0.34 м, 0.39 м, 0.44 м, 0.49 м, 0.54 м. Черным цветом показаны изоповерхности, на которых массовая доля H_2 равна 0.028.

Вниз по потоку от сечения инжекции можно выделить две зоны заметного развития реакции. Во-первых, это область, примыкающая к стехиометрической

поверхности струи водорода, где реализуется оптимальный состав для развития диффузионного горения. Во-вторых, это области пограничных слоев у стенок канала под струями водорода, где малая скорость потока компенсирует неоптимальность состава смеси для развития реакции. В случае теплоизолированных стенок признаки горения проявляются около стенок канала раньше, чем в окрестности стехиометрической поверхности. В расчетах с охлаждаемыми стенками горение начинается в области сверхзвукового течения у стехиометрической поверхности струи, а затем доходит до стенок.

Тепловыделение приводит к падению скорости, и в канале возникают заметные области дозвукового течения. Они вторичны по отношению к тепловыделению и образуются там, где за счет горения достигается высокая температура. Только в случае с теплоизолированными стенками возникают заметные дозвуковые области у боковых стенок канала (особенно в углах). Разгон потока за счет расширения канала приводит к сокращению дозвуковых областей, и в секции 7 они быстро исчезают. У стехиометрической поверхности струи горение начинается в сверхзвуковом потоке, и во всех расчетах вокруг струи есть области с температурой $T > 2000$ К, где $M > 1$.

Переход к модели с 19 реакциями (с добавлением реакций с HO_2 и H_2O_2) приводит к замедлению развития реакции в следе за струей. Расчет показывает, что там образуется заметное количество HO_2 . Это активирует дополнительные цепочки реакций и удлиняет задержку воспламенения. Над струей HO_2 почти не образуется, и реакция идет по сценарию, близкому к случаю с 7 реакциями.

На рис. 3.7 сравниваются распределения давления по верхней стенке экспериментальной модели в плоскости симметрии канала, полученные в разных расчетах. На рис. 3.7,а показано влияние температуры стенок: сопоставлены расчеты с теплоизолированными стенками, с $T_w = 1000$ К и $T_w = 716$ К. Охлаждение стенок замедляет развитие горения и уменьшает количество тепла, которое идет на нагрев потока. Поэтому максимальный уровень давления сильно снижается.

На рис. 3.7,б сопоставлены расчеты по моделям с 7 и с 19 реакциями ($T_w = 716$ К). Видно замедление тепловыделения, связанное с образованием HO_2 в

следе за струей. Но максимальный уровень давления одинаков, поскольку в медленном потоке у стенки в обоих расчетах тепловыделение успевает завершиться до начала секции 7 с быстрым расширением канала. Также на рис. 3.7,б показано распределение давления, полученное в расчете ONERA по модели с 19 реакциями. Это распределение вначале напоминает расчет ЦАГИ с 7 реакциями, но достигает меньшего уровня давления. Расхождение свидетельствует о некоторых (второстепенных) отличиях в расчетных технологиях ЦАГИ и ONERA.

В описанных расчетах, так же, как и в аналогичных расчетах ONERA, стенки канала считались гладкими. Однако в эксперименте эти стенки были покрыты теплозащитным покрытием из оксидов циркония и иттрия (YSZ, Yttria Stabilized Zirconia), и это привело к тому, что внутренняя поверхность канала была шероховатой. В работе [115] сказано, что экспериментаторы выполнили сканирование внутренней поверхности модели электронным микроскопом и установили, что шероховатость близка по характеру к песчинкам и ее характерная высота близка к 65 мкм. Учет шероховатости в расчетах ONERA [115] позволил получить распределение давления, существенно более близкое к эксперименту - см. кривую 8 на рис. 3.7,б. Поэтому во второй серии расчетов, которую автор выполнил уже самостоятельно с использованием коммерческого пакета вычислительной аэродинамики ANSYS FLUENT [35], учитывалась шероховатость стенок. Эта серия расчетов будет описана в последующих разделах настоящей Главы.

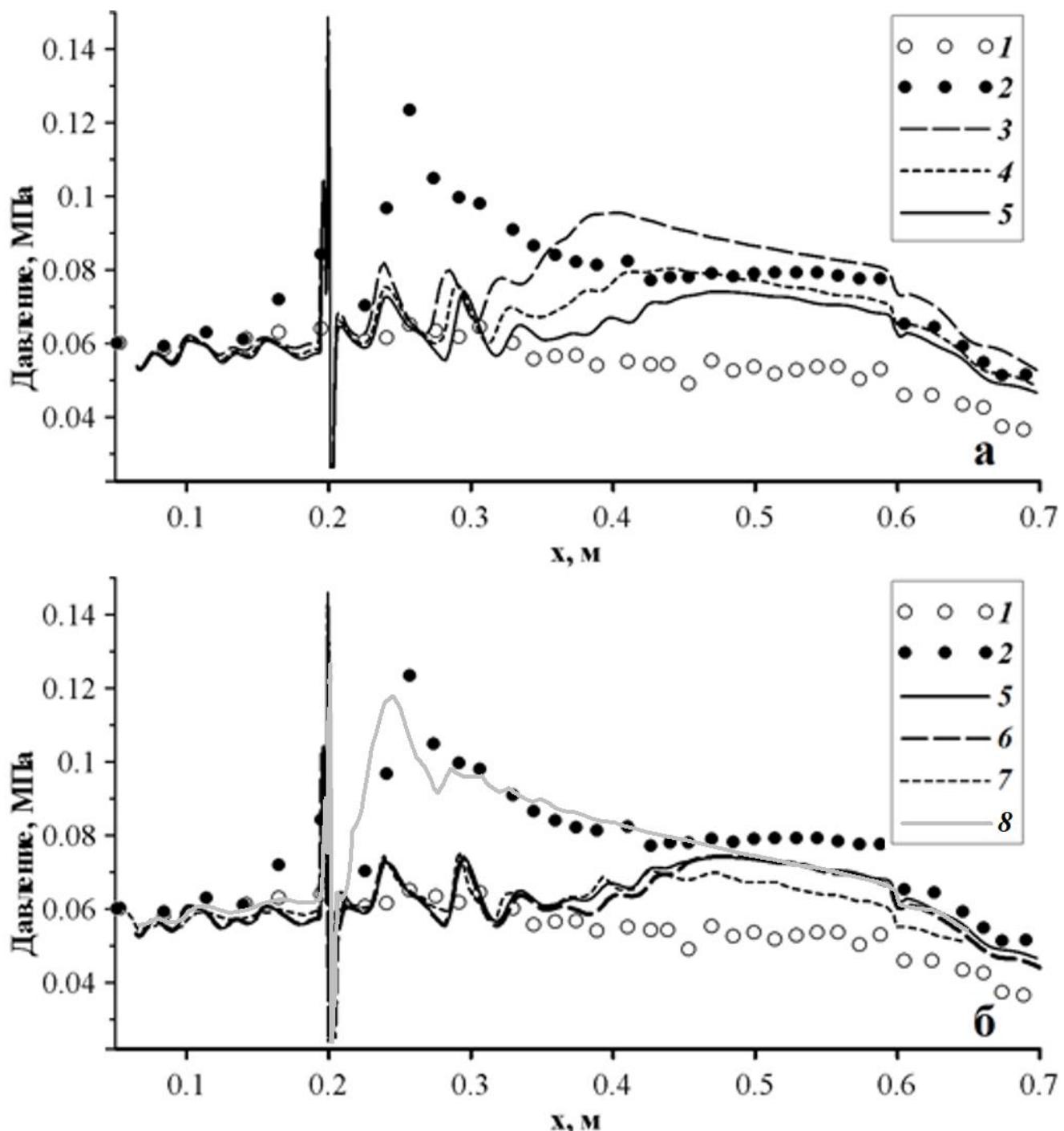


Рисунок 3.7 – Распределения статического давления по верхней стенке канала:
 а – влияние условий теплообмена на стенках канала, б – влияние кинетической схемы.
 1- эксперимент ONERA, без подачи топлива; 2 – эксперимент ONERA, с подачей топлива;
 3-6 – расчеты ЦАГИ: 3 – 7 реакций, теплоизолированные стенки; 4 – 7 реакций, $T_w = 1000$ K;
 5 – 7 реакций, $T_w = 716$ K; 6 – 19 реакций, $T_w = 716$ K;
 7 – расчет ONERA, 19 реакций, $T_w = 716$ K.

3.3 Анализ факторов, определяющих структуру течения

3.3.1 Выбор сетки и условий инжекции топлива

Хотя сетка для моделирования экспериментальной модели была создана ранее, но модель шероховатости стенки, используемая в данном разделе, требует полного разрешения пограничного слоя, поэтому для моделирования канала с шероховатостью стенки были перестроены новые сетки. Расчетная сетка для описания течения в канале экспериментальной модели состоит из 128 блоков (рис. 3.8). В расчетах к концу канала был добавлен дополнительный расширяющийся буферный участок, чтобы исключить влияние выходных граничных условий на поле течения. Топливо (водород) вдувалось перпендикулярно потоку через два отверстия диаметром 2 мм в верхней и нижней стенках, на вертикальной плоскости симметрии канала, в сечении $x=0.2\text{м}$. Места инжекции показаны стрелками на рис. 3.8.

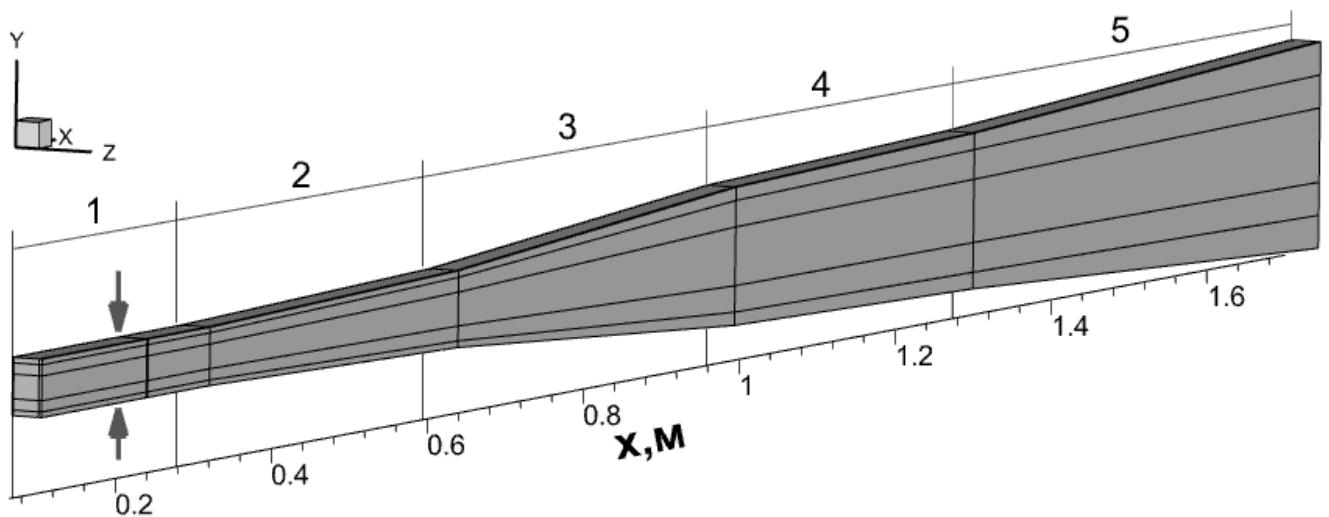


Рисунок 3.8 – Геометрия канала и блочная структура расчетной сетки для расчетов экспериментальной модели с шероховатостью: Стрелки — подача топлива. 1 – участок постоянного сечения; 2 – участок с расширением 2° ; 3 – участок с расширением 6° ; 4 - участок с расширением 2° ; 5 – расширяющийся буферный участок со скольжением.

Полученные в расчетах подогревателя поля течения на входе в экспериментальную модель ONERA использовались в качестве входного граничного условия во всех описанных ниже расчетах, независимо от выбранной модели химической кинетики. Статическое давление, статическая температура, массовые доли компонентов смеси и число Маха на оси симметрии канала

перечислены в таб. 3.2. Этим параметрам соответствует число Рейнольдса $Re_H \approx 165\,620$ (посчитанное по высоте канала). Характерная толщина пограничных слоев во входном сечении канала $\delta/H=0.054$. Так же, как в расчетах, описанных в Разделе 3.2, массовый расход воздуха, загрязненного продуктами горения в подогревателе, на входе в канал экспериментальной модели был равен 303.34 г/с. Инжекция топлива в этом режиме эксперимента соответствовала коэффициенту избытка топлива 0.153 [25]. Поэтому массовый расход инжектируемого со стенок водорода был равен 0.7194 г/с.

Таблица 3.2 – Параметры на входе в канал и параметры инжекции водорода

	Вход в канал (ось симметрии канала)	Инжектор водорода
P , Па	53979.36	204439.68
T , К	1070.83	250.81
Y_{H_2}	4.25e-07	1
Y_{O_2}	0.248	0
Y_{H_2O}	0.167	0
Y_H	1.24e-07	0
Y_{OH}	0.00014	0
Y_O	2.22e-05	0
Y_{N_2}	0.5848	0
M	1.97695	0.98286

Высота пристеночных ячеек принята равной 2×10^{-5} м, как в статье [25], что соответствует $\Delta y^+ \approx 1.0$ в расчете без горения. Поскольку горение происходит в зоне от впрыска топлива до сечения $x = 0.7$ м, то независимость от сетки анализируется в этой части расчетной области. Для расчетов были построены две сетки (рис. 3.9). Сетка M1 содержит 5 117 486 ячеек. Сетка M2 построена на основе сетки M1 с удвоением количества ячеек по оси x на участке $0.199 \leq x \leq 0.28$ м и со сгущением у стенок канала направлении в оси y . В ядре потока сетка имеет почти квадратные ячейки со стороной около 4×10^{-4} м. Всего сетка M2 содержит 7 276 886 ячеек.

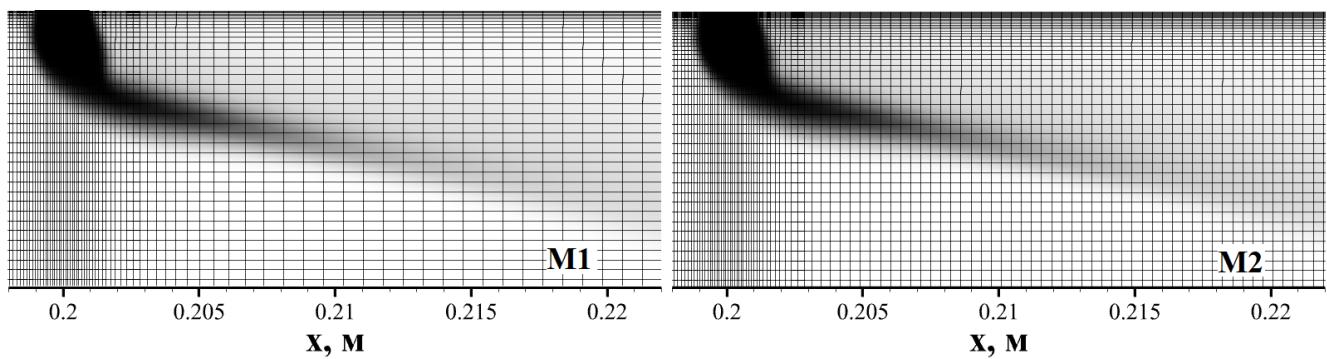


Рисунок 3.9 – Структура расчетных сеток в области инжекции струй водорода, на фоне - поле массовой доли водорода.

На рис. 3.10,а сопоставлены распределение давления по нижней стенке в плоскости симметрии канала, полученные на сетках M1 и M2 при оптимальных параметрах расчета, выбор которых будет описан ниже. Видно, что переход к сетке M2 приводит лишь к очень малым изменениям распределения давления и не меняет расположение главного максимума. На рис. 3.10,б сравниваются поля давления и числа Маха в плоскости симметрии канала, полученные на этих двух сетках. Несмотря на небольшое расхождение давления в окрестности сечения $x=0.25$ м, эти поля очень близки. Поэтому в последующих расчетах для экономии компьютерных ресурсов использовалась сетка M1. Шаг по физическому времени был установлен постоянным и равным 10^{-6} сек.

В случае газа с переменной теплоемкостью ANSYS FLUENT не позволяет гарантировать истечение водорода из отверстия инжекции со скоростью звука. Поэтому в расчете задавалось течение в подводящем канале инжектора с заданным расходом и параметрами торможения (с граничным условием «*mass-flow inlet*» на входе в подводящий канал). Так как геометрия подводящего канала не была известна автору, были сопоставлены три разные геометрии подводящего канала. Поля числа Маха в плоскости симметрии канала, полученные для этих геометрий, показаны на рис. 3.11. Все три формы канала инжекции позволяют разогнать поток топлива до скорости звука в отверстии инжекции. Структуры течения, возникающего при взаимодействии топливной струи с набегающим потоком, оказались похожими. Поэтому была выбрана простейшая (первая) модель геометрии подводящего канала. Параметры потока водорода, которые получаются при этом в сечении инжекции, перечислены в Таблице 3.2.

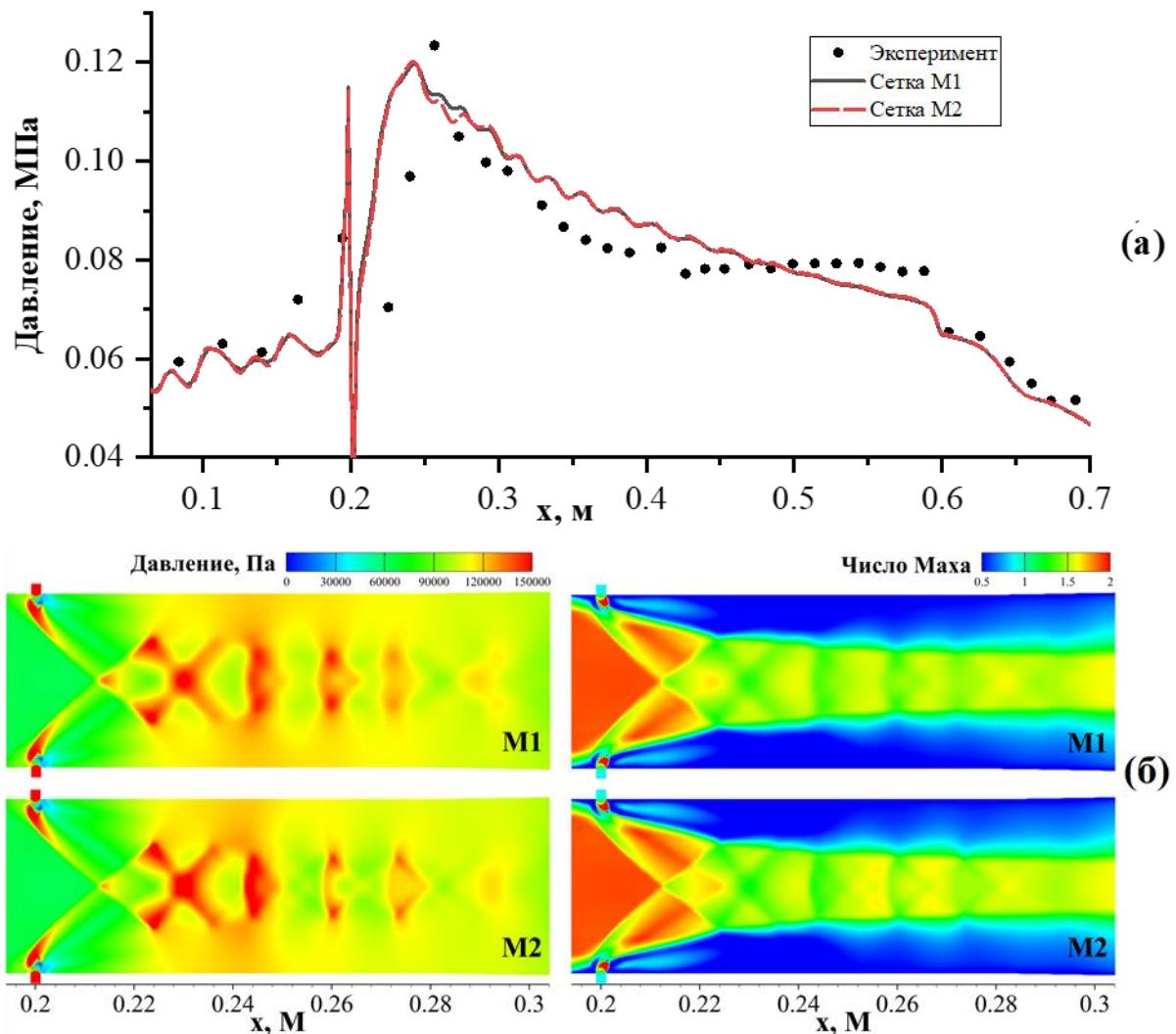


Рисунок 3.10 – Влияние сетки. (а) Распределение давления по нижней стенке канала. (б) Поля давления (слева) и поля температуры (справа) в плоскости симметрии канала

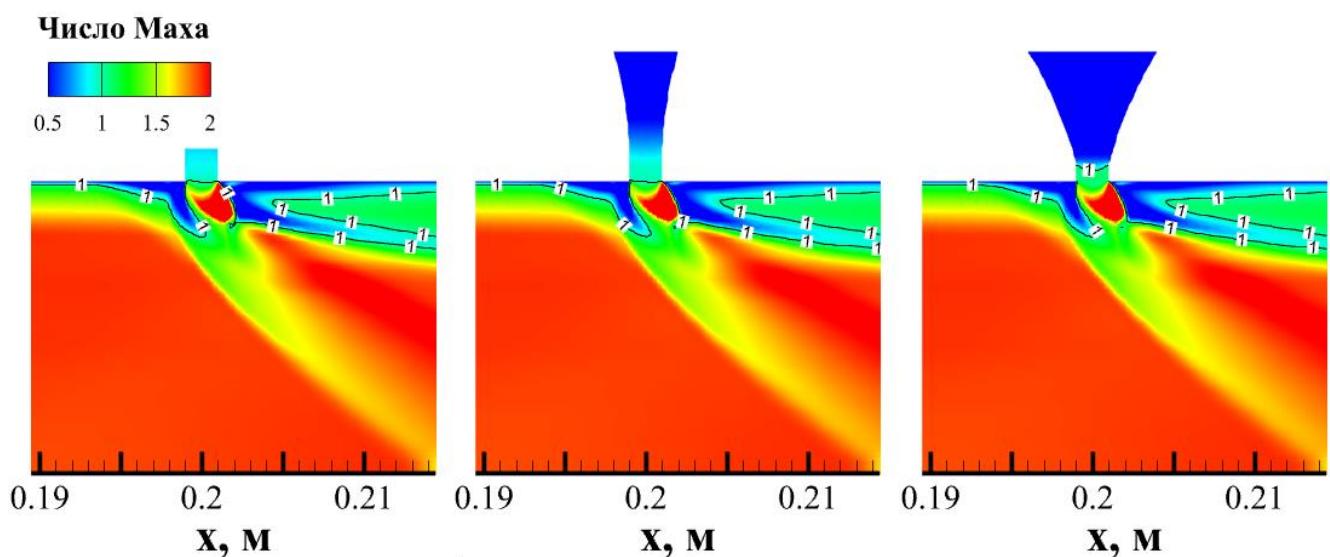


Рисунок 3.11 – Поле числа Maxa в плоскости симметрии канала для различных форм канала инжекции. Показаны изолинии числа Maxa $M = 1.0$.

3.3.2 Влияние точности описания молекулярной диффузии

При решении RANS-уравнений с химическими реакциями, несмотря на турбулентность течения, эффекты молекулярной диффузии могут быть важны в тонких пристенных областях течения, где молекулярная вязкость сопоставима с турбулентной. В том числе – могут влиять на отрыв пограничного слоя.

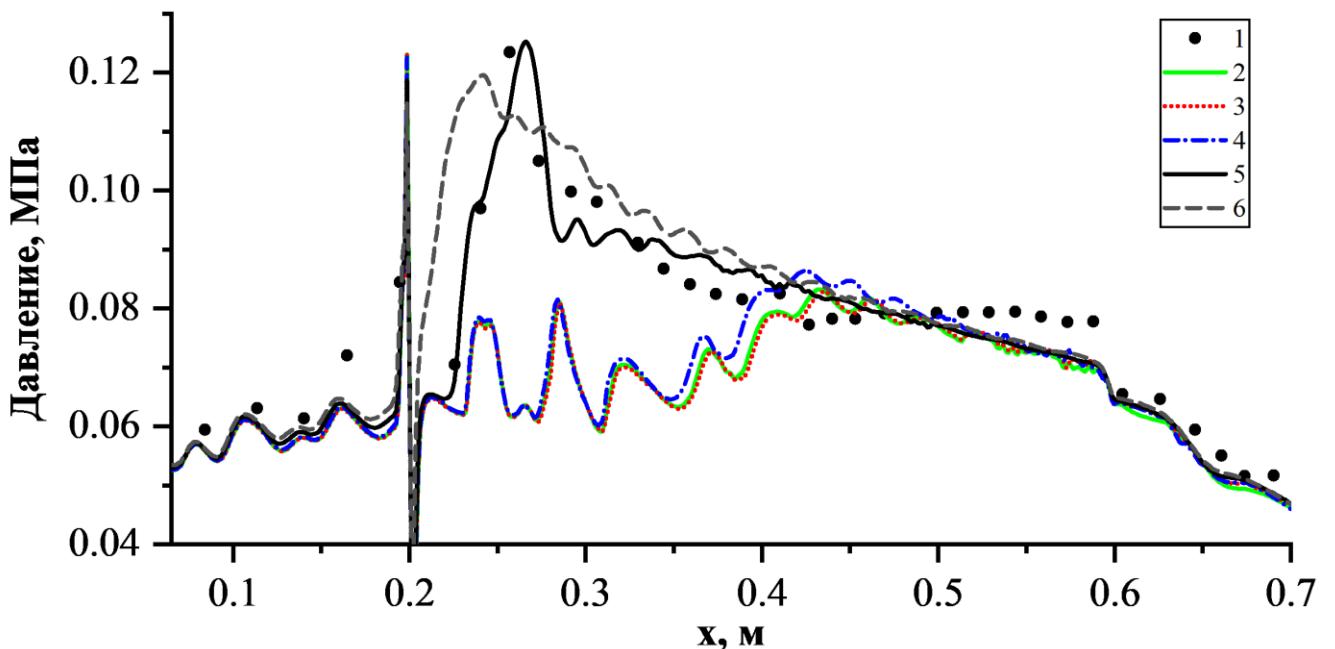
При горении обычных топлив в воздухе массовая доля топлива, необходимая для максимального тепловыделения, обычно мала по сравнению с массовой долей воздуха, поэтому часто используется *упрощенный подход к описанию молекулярной диффузии*, при котором коэффициенты диффузии для всех компонентов смеси принимаются такими же, как для воздуха. В этом случае молекулярные диффузационные потоки тепла вдоль оси x_j , связанные с неоднородностью поля температуры в газовой смеси определяются формулой (1.7), а суммарные диффузационные потоки массы компонент смеси – формулой (1.10) (см. раздел 1.1). Молекулярные числа Прандтля и Шмидта в данной работе принимаются равными $\text{Pr}=0.9$, $\text{Sc}=1.0$.

Для количественной оценки влияния точности описания молекулярной диффузии на структуру течения были сопоставлены расчеты течения с горением в экспериментальной модели ONERA с использованием *детальной теории диффузии*, описанной в разделе 1.3, и упрощенного подхода. Оба способа вычисления коэффициентов молекулярной диффузии кратко представлены в таб. 3.3.

Моделирование с использованием упрощенного подхода и детальной теории было выполнено при температуре стенки 716 К и эквивалентной высоте песчинки 65 мкм. Полученные распределения давления по нижней стенке канала показаны в рис. 3.12 (см. линии 2 и 3). Видно, что влияние способа описания молекулярной диффузии оказалось незначительным.

Таблица 3.3 – Детальная теория описания молекулярной диффузии и упрощенный подход

	Детальная теория ¹	Упрощенный подход ²
Молекулярная вязкость	$\mu = \sum_i \frac{X_i \mu_i}{\sum_j X_j \phi_{ij}}, \mu_i = 2.67 \times 10^{-6} \frac{\sqrt{M_{w,i} T}}{\sigma_i^2 \Omega_i}$	$\mu = \mu_0 \cdot \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2} \frac{T_0 + S}{T + S}$
Тепло-проводность	$\lambda = \sum_i \frac{X_i \lambda_i}{\sum_j X_j \phi_{ij}}, \lambda_i = \frac{15}{4} \frac{R}{M_{w,i}} \mu_i \left[\frac{4}{15} \frac{c_{p,i} M_{w,i}}{R} + \frac{1}{3} \right]$	$\lambda \approx -\frac{\mu c_p}{Pr}$
Массовая диффузия	$D_i = \frac{1 - X_i}{\sum_{j,j \neq i} (X_j / D_{ij})}, D_{ij} = \frac{0.00186 \left[T^3 \left(\frac{1}{M_{w,i}} + \frac{1}{M_{w,j}} \right) \right]^{1/2}}{P_{abs} \sigma_{ij}^2 \Omega_D}$	$D_i \approx \frac{\mu}{\rho Sc}$

Рисунок 3.12 – Распределение давления по нижней стенке канала, $T_w=716\text{K}$.

1 – эксперимент ONERA; 2 – $h_s=65$ мкм, упрощенный подход к описанию молекулярной диффузии; 3,4,5,6 – $h_s=65$ мкм, 100 мкм, 200 мкм, 300 мкм, детальная теория для описания молекулярной диффузии.

¹ Коэффициент $\phi_{ij} = \left[1 + (\mu_i / \mu_j)^{1/2} (M_{w,j} / M_{w,i})^{1/4} \right]^2 / \left[8 (1 + M_{w,i} / M_{w,j}) \right]^{1/2}$; σ и ε / k_B – Параметры Леннарда-Джонса [33], $\Omega = \Omega(T^*) = \Omega[T / (\varepsilon / k_B)]$.

² Для воздуха при умеренных температурах и давлениях: $\mu_0 = 1.716 \times 10^{-5} \text{ кг/(м·сек)}$, $T_0=273.11\text{K}$, $S=110.56\text{K}$; $Pr=0.72$, $Sc=0.9$.

3.3.3 Проблема выбора эквивалентного диаметра песчинки

Характеристики шероховатых стенок зависят от формы рельефа шероховатости. В модели шероховатости Airoix в качестве характерного размера шероховатости h_s рекомендуется выбирать так называемый эквивалентный диаметр песчинки [110]. Авторы эксперимента ONERA [149] при помощи сканирующего электронного микроскопа выполнили измерения характерной высоты шероховатости и установили, что она имеет порядок 100 мкм [38]. Авторы работы [115] при использовании модели Airoix рекомендуют использовать значение эквивалентного диаметра песчинки 65 мкм. Однако методика пересчета измеренных характеристик рельефа шероховатости в эквивалентный диаметр песчинки не была опубликована. В расчетах Pelletier [115] при такой высоте шероховатости и температуре стенок 716 К с помощью программы CEDRE (ONERA) получено правильное положение пика давления. Однако в аналогичных расчетах [25], проведенных лабораторией JetSim ЦАГИ по программе **zFlare**, максимум давления получился гораздо ниже по течению, чем в эксперименте.

В работе [25] выполнен поиск физических параметров, которые могли бы изменить положение пика давления, и установлено, что сильнее всего влияют температура стенок и их шероховатость. В [25] для достижения правильного положения максимума давления при использовании эквивалентного диаметра песчинки 65 мкм температура стенок была увеличена до 1413 К. Однако проведённые позднее теоретические оценки прогрева стенок в лаборатории JetSim показали, что за время эксперимента температура стенок не могла стать больше 850 К. При такой температуре стенок высота шероховатости является единственным параметром, существенно влияющим на положение пика давления. Как показано в [32], в зависимости от формы рельефа шероховатости эквивалентный диаметр песчинки h_s может меняться от \bar{h} до $6\bar{h}$, где \bar{h} – осредненная тем или иным способом высота шероховатости. При этом в работе [151] приводятся аргументы в пользу того, что при использовании граничного

условия Aupoix h_s следует рассматривать как настроочный параметр, который должен обеспечить правильное трение на стенке.

Поэтому были рассмотрены четыре разных эквивалентных диаметра песчинки: 65 мкм, 100 мкм, 200 мкм и 300 мкм. Полученные распределения давления по нижней стенке канала представлены на рис.3.12. Наиболее близкое к эксперименту распределение давления было получено при $h_s = 200$ мкм.

На рис. 3.13 поля десятичного логарифма локальной скорости тепловыделения ψ наложены на поля числа Маха в плоскости симметрии канала при $h_s = 65, 200$ и 300 мкм.

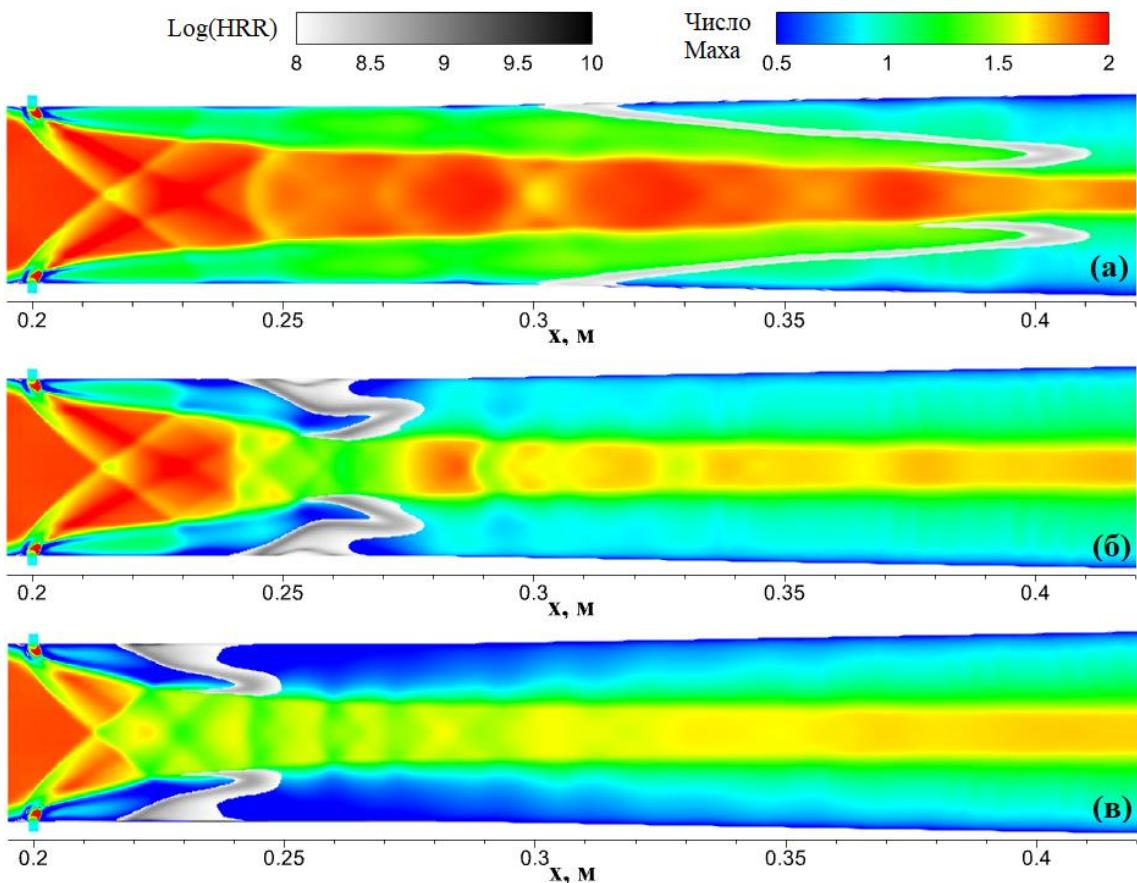


Рисунок 3.13 – Поле десятичного логарифма локальной скорости тепловыделения вдоль линий тока, наложенное на поле числа Маха в плоскости симметрии канала:
(а) $h_s=65$ мкм, (б) $h_s=200$ мкм, (в) $h_s=300$ мкм.

Скорость тепловыделения на единицу длины линий тока рассчитывается по формуле [11]:

$$\psi = \frac{\sum W_k Q_k}{\rho |\vec{V}|} \quad (3.1)$$

где W_k – скорость k -й химической реакции [моль / (м³ · сек)], Q_k – тепловой эффект этой реакции [Дж/моль], ρ – плотность, а $|\vec{V}|$ – скорость газа. Можно видеть, что процесс тепловыделения в основном происходит в струе топлива и в пристеночной дозвуковой области за этой струей. Увеличение эквивалентного диаметра песчинки повышает касательное напряжение на стенке. Это приводит к понижению скорости в области следа за струей водорода и к сокращению длины задержки воспламенения горючей смеси. Поэтому по мере увеличения эквивалентного диаметра песчинки область основного тепловыделения и пик давления смещаются вверх по потоку.

Как уже упоминалось, экспериментальная модель был снабжена оптическими окнами, расположенными по всей длине канала, что позволило визуализировать структуру течения. Зарегистрированное поле хемилюминесценции возбужденных радикалов OH*, наложенное на шлирен-изображение, в изучаемом условии показаны на рис. 3.14,(а). Также в рис. 3.14,(б) представлено полученное в расчете с 7 реакциями поле OH, наложенное на численное шлирен-изображение, осредненные по боковой ширине канала.

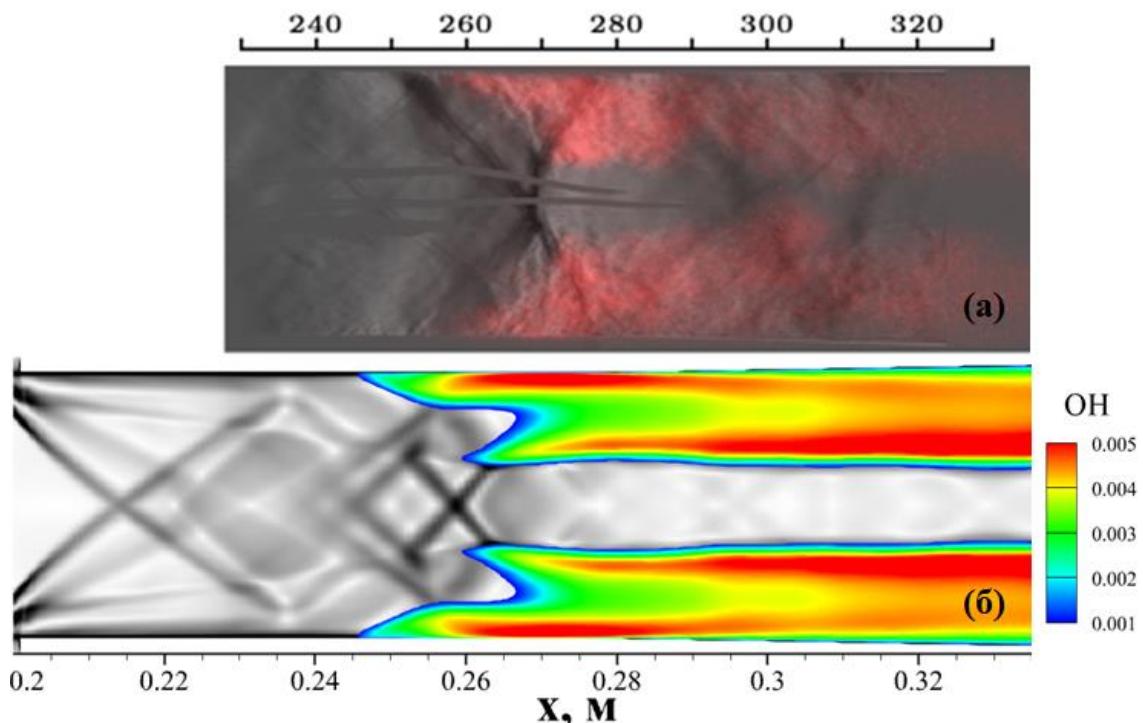


Рисунок 3.14 – Поля OH, наложенная на шлирен-изображение
(а) эксперимент ONERA (б) расчет с 7 реакций, осредненные по боковой ширине канала

В расчете наблюдалось S-образное распределение радикала OH, которое несколько отличается от эксперимента. Впрочем, стоит подчеркнуть, что в эксперименте фиксируется излучение только возбужденных радикалов OH*, распределение которых может отличаться от поля массовой доли OH, показанной на рисунке. Можно сказать о качественном подобии эксперимента и расчета.

3.4 Течение в канале с шероховатыми стенками при разных механизмах химической кинетики

В экспериментальном канале LAPCAT-II горение инициируется самовоспламенением, поэтому правильное воспроизведение времени задержки воспламенения является основным критерием выбора механизмов химических реакций. На рис. 3.15 приведены сравнения времени задержки воспламенения водорода в воздухе полученные по разным моделям кинетики, с экспериментальными данными [39, 56, 81, 129, 136, 140] при давлении 1 атм и 4 атм. В дополнение к двум вариантам механизма Яхимовского [19] (с 7 реакциями и 19 реакциями), был также рассмотрен механизм с 22 реакциями, предложенный Зеттервалом и Фюрби [28], который лучше предсказывает время задержки воспламенения водорода в воздухе при $T_{\text{нач}} < 1000\text{K}$. При $T_{\text{нач}} > 1000\text{K}$ (что соответствует условиям втекающего в канал потока) все три выбранные механизмы дают одинаковые времена задержки воспламенения.

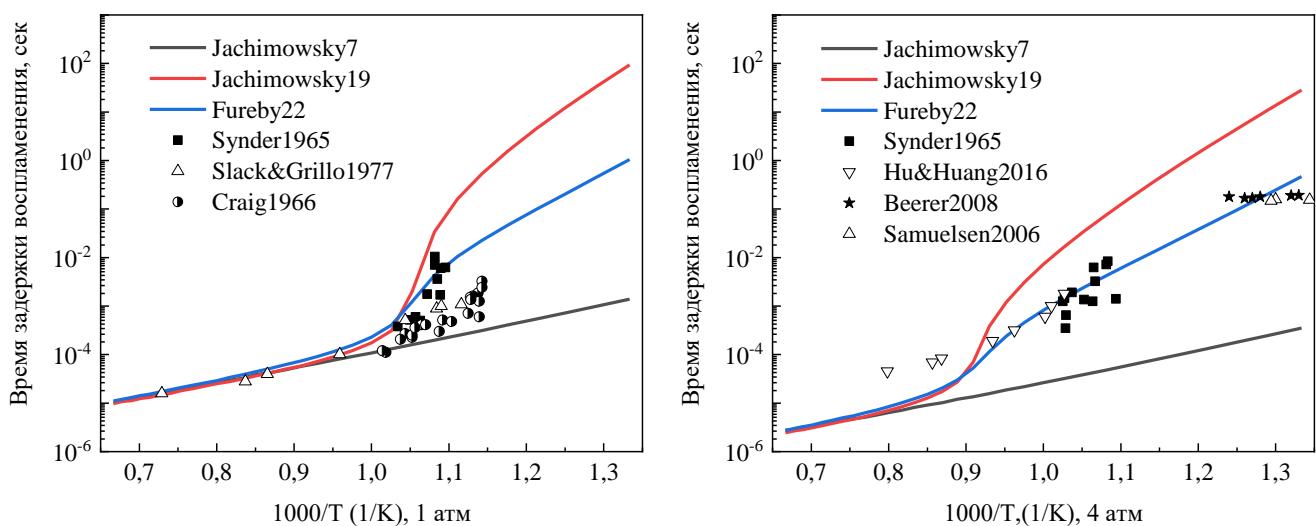


Рисунок 3.15 – Сравнение зависимости времени задержки воспламенения от начальной температуры для разных моделей кинетики с экспериментальными данными

На рис. 3.16 представлены распределения статического давления по нижней стенке канала при разных механизмах химической кинетики. Видно, что распределения статического давления отличаются слабо. В расчете течения с 7 реакциями максимум давления составляет примерно 1.25 атм., что немного больше значения 1.2 атм., которое получается в расчетах с 19 реакциями и 22 реакциями.

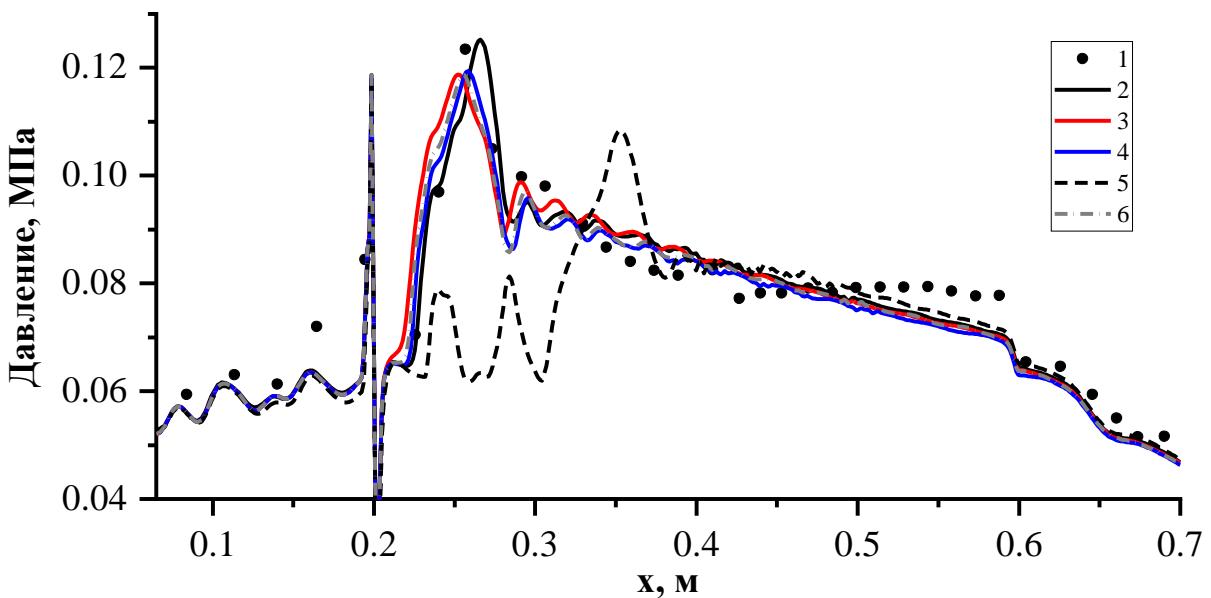


Рисунок 3.16 – Распределения статического давления по нижней стенке канала, $T_w=716\text{K}$, $h_s=200 \text{ мкм}$: 1- Эксперимент ONERA; 2 – 7 реакций; 3 – 19 реакций; 4 – 22 реакции; 5 – 7 реакций с отключением кинетики перед струей водорода; 6 – 19 реакций с отключением реакции $\text{H}+\text{OH}+\text{M}=\text{H}_2\text{O}+\text{M}$.

Из поля десятичного логарифма локальной скорости тепловыделения и поля числа Маха (рис. 3.17) видно, что тепловыделение в основном происходит в дозвуковой зоне следа за струей, где водород хорошо смешивается с окислителем. В зоне $x > 0.28$ м за счет расширения канала скорость потока увеличивается, высота дозвуковой зоны быстро уменьшается, давление резко падает, и реакции прекращаются. Сильное тепловыделение наблюдалось у стенки как в расчете с 7 реакциями и с 19 реакциями. Но вдали от стенки тепловыделение в расчете с 7 реакциями в основном сосредоточено в задней части дозвуковой зоны, а тепловыделение в расчете с 19 реакциями сосредоточено в передней части.

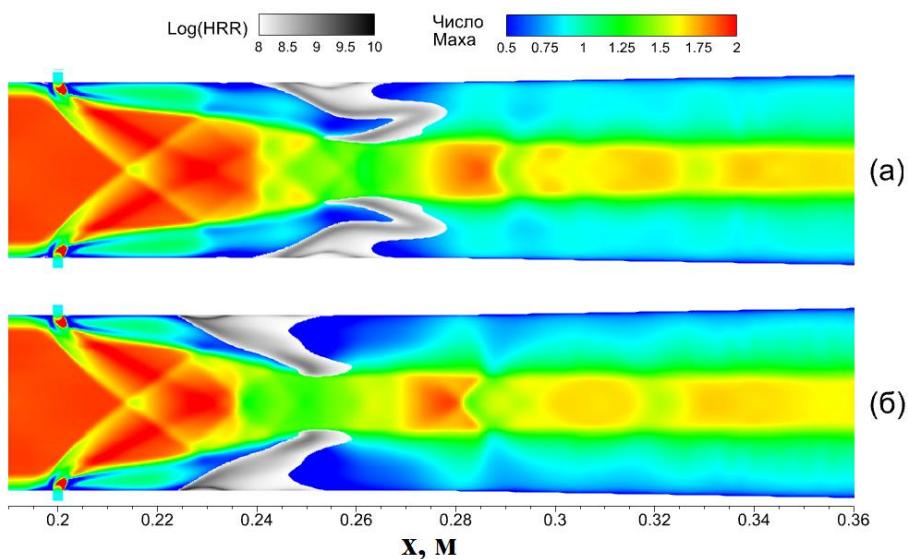


Рисунок 3.17 – Поле десятичного логарифма локальной скорости тепловыделения наложено на поле числа Маха в плоскости симметрии канала, $T_w=716\text{K}$, $h_s=200\mu\text{м}$: (а) – 7 реакций; (б) – 19 реакций;

На рис. 3.18 показаны поля статического давления в плоскости симметрии канала и температура вблизи нижней стенки при разных механизмах химической кинетики. Температура стенки была равна 716 К. Поля температуры показывают, что воспламенение водорода происходит в зоне отрыва потока, создаваемой взаимодействием пограничного слоя с ударной волной.

Сравнивая трехмерную структуру отрыва потока, можно обнаружить, что выбор механизма химической кинетики приводит к различной структуре течения в отрыве, где течение менее устойчиво и более чувствительно к различным возмущениям. В расчете с 19 реакциями отрыв и горение происходят в области падения отраженной от плоскости симметрии волны (см. рис. 3.18,б). В расчете с 22 реакциями, горение начинается в том же месте, но в области максимального сужения ядра потока возникает ещё вторая зона отрыва, где воспламенение не происходит (см. рис. 3.18,в). А в расчете с 7 реакциями отрыв и воспламенение происходят только в области максимального сужения ядра потока. Чтобы понять причины возникновения разной структуры отрывной зоны, проанализируем поведение различных компонент смеси.

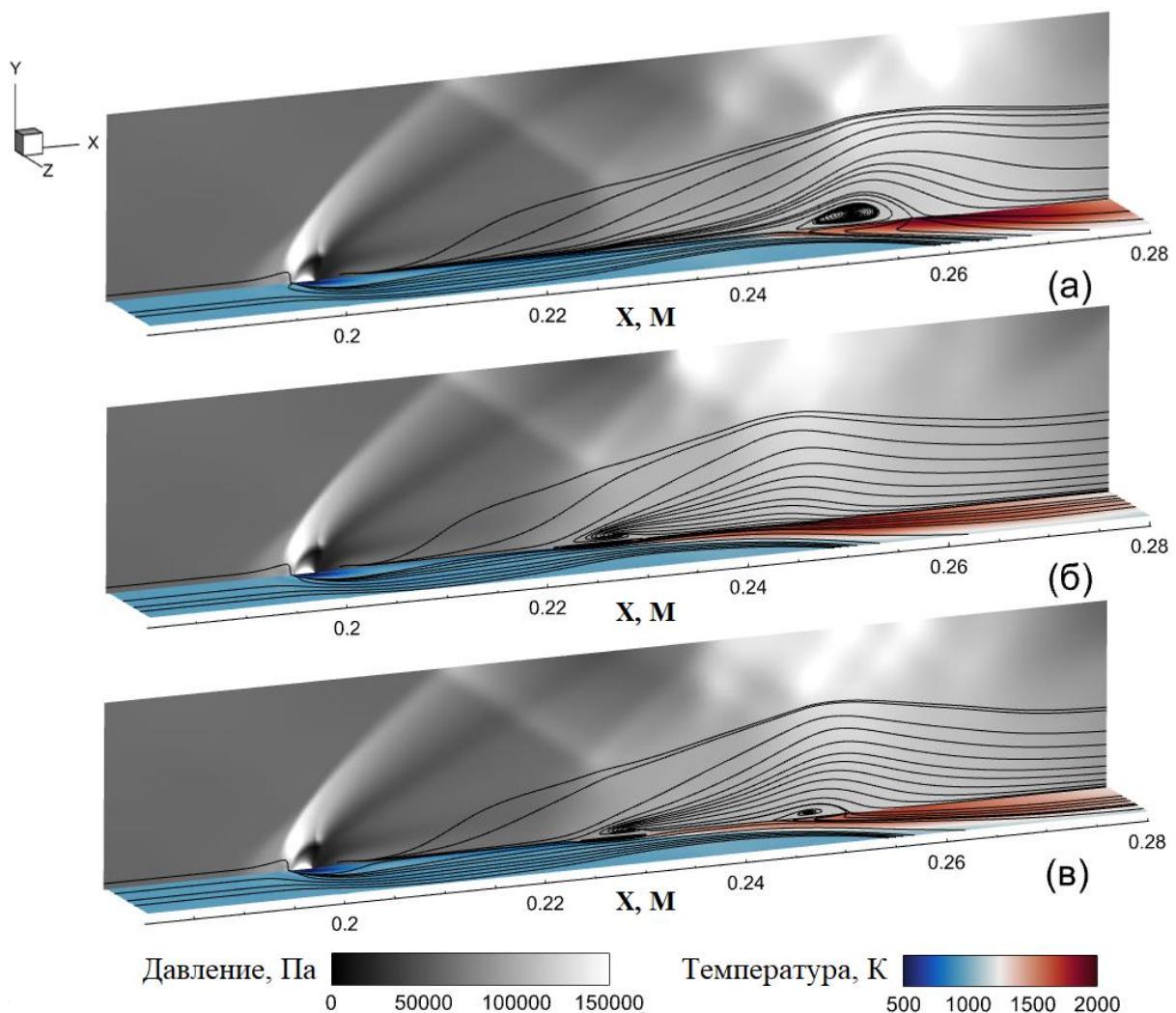


Рисунок 3.18 – Поле статического давления в плоскости симметрии канала и температура в плоскости 0,1 мм над нижней стенкой, с наложением линий тока:
 (а) – 7 реакций; (б) – 19 реакций; (в) – 22 реакции.

На рис. 3.19,(а) приведены распределения массовой доли радикала Н вдоль линии $y = -0.0165$ м в плоскости симметрии канала. В расчете с 7 реакциями начальная концентрация радикала Н больше и наблюдается её монотонный рост по длине с достижением максимума в области горения. Это похоже на процесс самовоспламенения. В расчетах с 19 реакциями и 22 реакциями концентрация радикалов Н падает, пока не увеличивается резко в зоне горения. Так же ведут себя радикалы О и OH. Значит, тепловыделение в этих расчетах не связано с размножением этих радикалов.

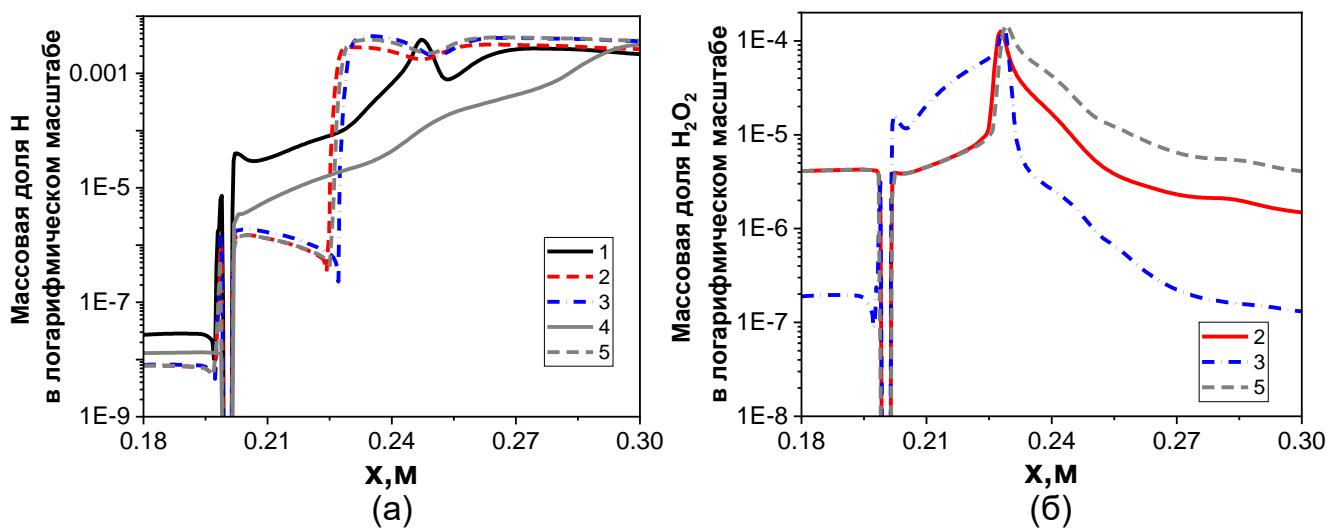


Рисунок 3.19 – Распределение десятичного логарифма массовой доли радикалов Н (а) и H_2O_2 (б) вдоль линии $y=-0.0165$ м в плоскости симметрии канала: 1 – 7 реакций; 2 – 19 реакций; 3 – 22 реакции; 4 – 7 реакций с отключением кинетики перед струей водорода; 5 – 19 реакций с отключением реакции $\text{H}+\text{OH}+\text{M}=\text{H}_2\text{O}+\text{M}$.

Почему начальная концентрация радикалов Н в следе за струей водорода в расчете с 7 реакциями на порядок больше? Сопоставим поля Сопоставим поля массовой доли Н в плоскости симметрии канала (рис. 3.21).

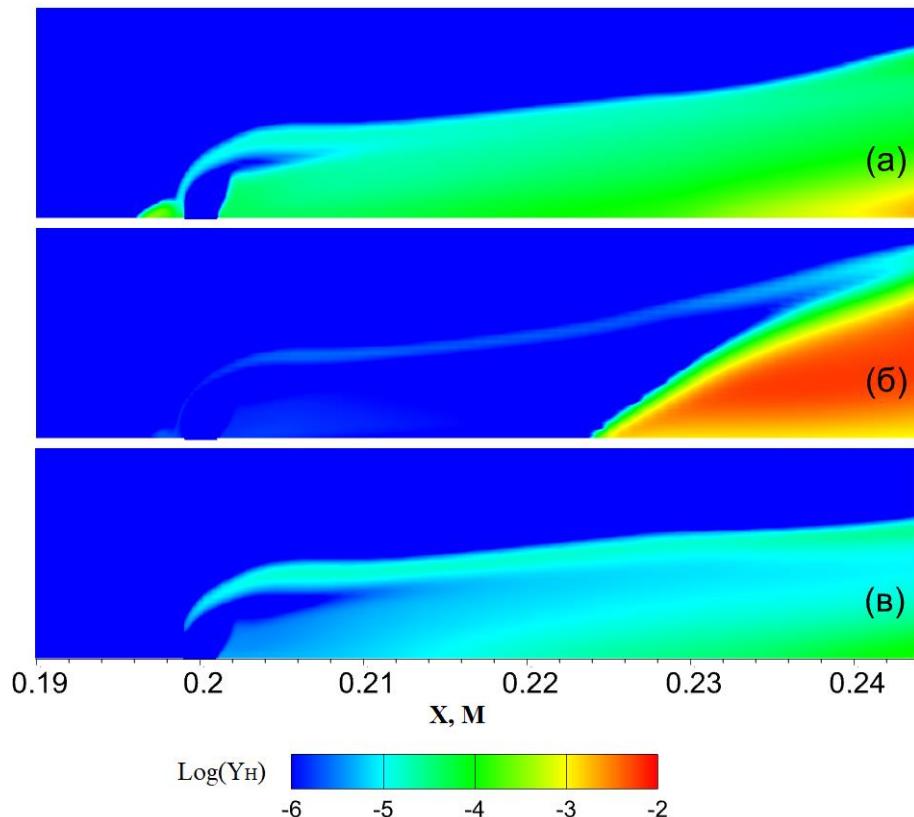


Рисунок 3.20 – Поле десятичного логарифма массовой доли радикала Н за струей в плоскости симметрии канала: (а) – 7 реакций; (б) – 19 реакций; (в) – 7 реакций с отключением кинетики перед струей водорода.

В отличие от расчета с 19 реакциями, в случае 7 реакций радикал Н производится в зоне отрыва перед струей, истекающей из инжектора. Из этой области он попадает внутрь следа за струей.

Напомним, что при начальной температуре меньше 1000 К времени задержки воспламенения при кинетике с 7 реакциями на порядок меньше, чем при кинетике с 19 и с 22 реакции (рис. 3.15). Накопление радикалов Н в расчете с 7 реакциями в зоне отрыва перед струей возможно, если характерное время увеличения массовой доли Н меньше характерного времени пребывания газа внутри отрыва. Поэтому были проведены оценки этих характерных времен.

На рис. 3.21 на фоне поля массовой доли Н в плоскости симметрии канала в расчете с 7 реакциями показаны зона отрыва, зона рециркуляции перед струей и изолинии $Y_{H_2} = 0.1$. Видно, что водород попадает в зону рециркуляции за счет эжекции из инжектируемой струи водорода и участвует в химической реакции внутри отрыва. Поэтому для оценки времени задержки воспламенения использовались состав, температура и давление в центре зоны отрыва, полученные в расчете с отключенным химическими реакциями (см. таб. 3.4).

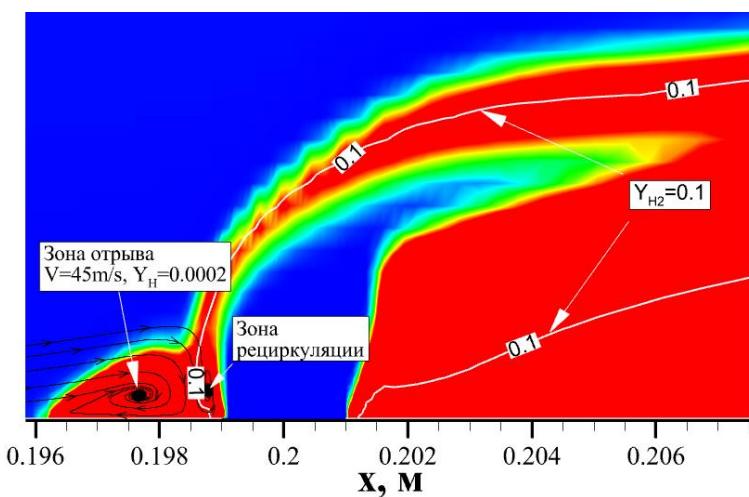


Рисунок 3.21 – Поля массовой доли Н в плоскости симметрии канала в расчете с 7 реакциями. Показаны зона рециркуляции перед струей и изолинии $Y_{H_2} = 0.1$.

Таблица 3.4 – Параметры в центре зоны рециркуляции перед струей в расчете без горения (с инжекцией водорода)

	Y_{H_2}	Y_{O_2}	Y_H	Y_O	Y_{OH}	Y_{H_2O}	p, Pa	T, K
Центр зоны отрыва	7.127e-3	0.2463	3.255e-7	3.054e-5	1.52e-4	0.1658	79387.02	1091.6

Оценки показывают, что характерное время, необходимое для увеличения массовой доли радикалов Н до величины 0.0002, составляет в случае кинетики с 7 реакциями примерно $2 \cdot 10^{-5}$ сек, а в случае кинетики с 19 реакциями – $8 \cdot 10^{-5}$ сек. Характерное же время пребывания газа внутри отрывной зоны (время одного оборота вихря в этой зоне) составляет $\tau = L/V = 0.003/45 \approx 6.7 \times 10^{-5}$ сек. С учетом неидеальности процесса в отрывной зоне, этого времени достаточно для достижения $Y_H = 0.0002$ в случае кинетики с 7 реакциями и недостаточно в случае 19 реакций. Вот почему в случае кинетики с 7 реакциями в отрыве достигается гораздо большая концентрация радикалов.

Если отключить реакции перед струей, то концентрация Н за струей падает, и длина задержки воспламенение увеличивается (см. рис. 3.20,в и линия 4 на рис. 3.19,а). Таким образом, более высокая концентрация радикала Н в следе за струей непосредственно обусловлена химическими реакциями в зоне отрыва и рециркуляции перед струей водорода.

В таком случае, за счёт чего происходит стабилизация горения в расчетах течения с 19 реакциями и 22 реакциями? Рассмотрим распределения массовой доли H_2O_2 вдоль линии $y = -0.0165$ м в плоскости симметрии канала (рис. 3.19,б). В расчете течения с 19 реакциями, в следе за струей наблюдается рост массовой доли H_2O_2 , который заканчивается взрывным увеличением в зоне падения скачка сверху. В расчете течения с 22 реакциями, массовая доля H_2O_2 изначально выше, но также нарастает в следе за струей, а в области падения скачка сверху достигает того же значения, что и в расчете с 19 реакциями.

Реакция образования H_2O_2 производит тепло, поэтому она может стать источником взрывного тепловыделения. Если отключить основную реакцию, которая производит 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. кривые 2 и 5 на рис. 3.19,б). Значит, самовоспламенение в следе за струей в расчетах с участием HO_2 и H_2O_2 связано не с ростом Н, О и OH, как в расчетах с 7 реакциями, а с ростом доли H_2O_2 .

Хотя все кинетические механизмы, рассмотренные в работе, дали близкие распределения давления по стенкам модели (кривые 2, 3 и 4 на рис. 3.19), наблюдаемые на рис. 3.18 значительные отличия в структуре отрывных зон могут иметь практическое значение. Достаточно указать на то, что в областях пониженной скорости может проходить тепловыделение, а зоны возвратного течения нередко оказываются заполненными горячими продуктами сгорания. Поэтому другая структура отрывных зон должна приводить к другому распределению тепловых потоков по стенкам канала. Это подтверждает рис. 3.22. Распределение тепловых потоков, в свою очередь, необходимо учитывать при расчете конструкции для обеспечения ее прочности.

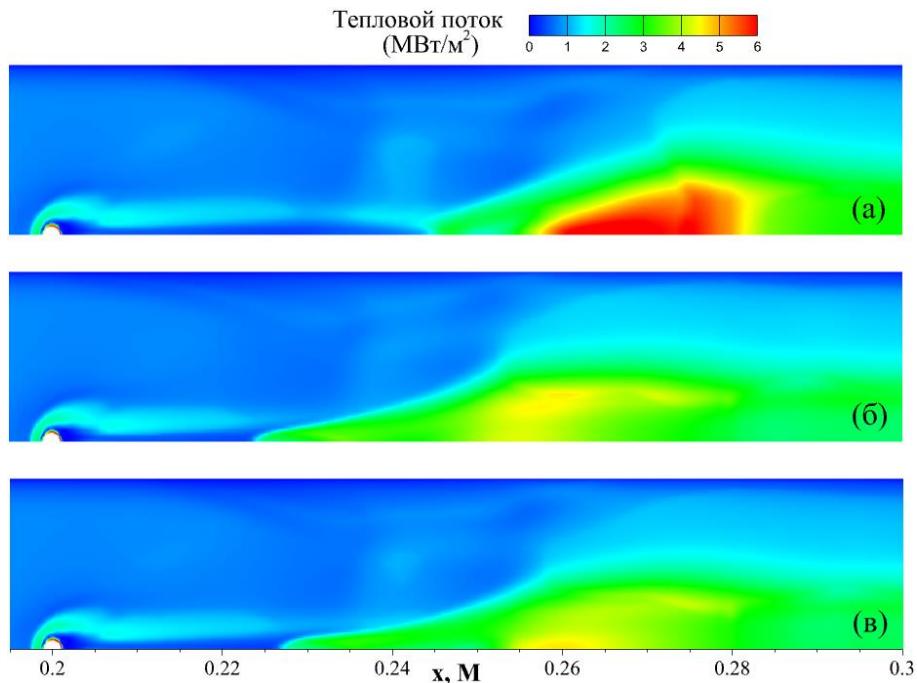


Рисунок 3.22 –Распределения тепловых потоков по нижней стенке канала (вид сверху):

(а) – 7 реакций; (б) – 19 реакций; (в) – 22 реакции.

Изменение структуры течения и тепловых потоков должно приводить к изменению тепловой полноты сгорания топлива, которая является одной из важнейших характеристик процесса горения и может быть охарактеризована коэффициентом тепловой полноты сгорания η [38], который выражена как:

$$\eta = \frac{Q(x)}{G_F H_u}. \quad (3.2)$$

Здесь, G_F – полный расход топлива, втекающего в расчетную область, H_u – теплотворная способность топлива, $Q(x)$ – полное количество теплоты, подведенной к потоку, которое может быть определено так:

$$Q(x) = - \left\{ \int_2 \left(\sum_k Y_k h_k \right) \cdot \rho u dF - \int_1 \left(\sum_k Y_k h_k \right) \cdot \rho u dF - G_F h_F \right\} \quad (3.3)$$

где 1 – входное сечение канала ($x=0.065$ м), 2 – рассмотренное сечение канала, u – проекция скорости газа на ось x .

Для реакции $2H_2 + O_2 \rightarrow 2H_2O$ теплотворную способность топлива можно рассчитать при температуре $T = 293$ К (она слабо зависит от температуры) по следующей формуле:

$$H_u = \frac{2m_{H_2}h_{H_2} + m_{O_2}h_{O_2} - 2m_{H_2O}h_{H_2O}}{2m_{H_2}}. \quad (3.4)$$

Результат оценки показан в рис. 3.23. В расчетах с использованием кинетики Яхимовского с 7 реакциями полнота сгорания (с учетом потерь тепла в стенки канала) примерно на 5% ниже, чем в расчетах с использованием двух других кинетических механизмов. Это объясняется тем, что в расчете с 7 реакциями больше тепла теряется за счет тепловых потоков в стенки канала (рис. 3.22, а).

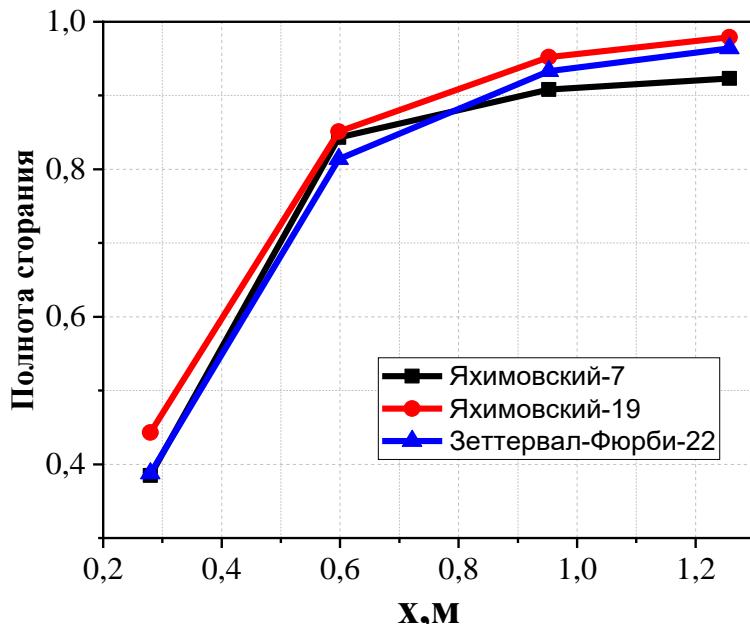


Рисунок 3.23 – Продольные распределения тепловой полноты сгорания в канале

Выводы к Главе 3

- 3.1 Расчет горения в подогревателе и сопле Лаваля (для определения граничного условия на входе в экспериментальную модель) необходимо проводить с использованием многостадийных, а не редуцированные кинетических механизмов. Последние в ядре потока дают ошибку до 2.44 раз в массовых долях радикалов.
- 3.2 При численном моделировании поперечного вдува водорода в сверхзвуковой поток в канале для обеспечения звуковой скорости потока топлива достаточно использовать цилиндрическую конструкцию инжектора и граничное условие «*mass-flow inlet*».
- 3.3 При описании высокоскоростного горения водорода в воздухе в канале коэффициент молекулярной диффузии газовой смеси может быть принят равным коэффициенту для воздуха.
- 3.4 При температуре стенок не больше 850К высота шероховатости является единственным параметром, существенно влияющим на продольное распределение давления по стенкам канала и на структуру поля течения в экспериментальной модели ONERA. Наиболее близкие к эксперименту ONERA результаты получены автором при эквивалентном диаметре песчинки $h_s = 200$ мкм.
- 3.5 Выбор модели 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 в 70%, полнота сгорания - на 5%. При переходе от 7 реакций к 19 и 22 реакциям меняется механизм самовоспламенения – оно вызывается уже не ростом радикалов Н, О и OH, а реакциями пероксидов HO₂ и H₂O₂.

Глава 4. Моделирование дозвукового горения в экспериментальной модели ONERA с обратным уступом

В настоящей Главе в качестве объекта исследования выбрано течение с горением предварительно перемешанной метано-воздушной смеси в канале с обратным уступом. Обратный уступ является широко распространенным средством для стабилизации горения в канале как при малых, так и при высоких скоростях потока [55, 146] и обычно используется для оценки характеристик моделей турбулентности при прогнозировании отрывных течений. Экспериментальные исследования дозвукового горения в таком канале были выполнены в ONERA P. Magre et al. [100]. Были получены режимы как устойчивого, так и неустойчивого горения. К настоящему времени имеется достаточно успешный опыт численного моделирования режимов устойчивого горения на базе уравнений Рейнольдса в ONERA [119] и в ЦАГИ [7, 17, 28] с использованием собственных программ (в ONERA – CEDRE и в ЦАГИ – программа zFlare [28] из собственного пакета программ EWT-ЦАГИ). Моделирование экспериментов [100] на базе подхода LES (Large Eddy Simulation – прямое моделирование крупных вихрей), включая неустойчивые режимы, проводилось в ЦИАМ [22, 31].

Автор сначала попытался при помощи коммерческого пакета FLUENT, лицензионная версия которого установлена в МФТИ, воспроизвести результаты, полученные в ONERA и ЦАГИ в рамках уравнений Рейнольдса с использованием собственных программ. При этом также была обоснованно выбрана модель турбулентности, модифицирована модель турбулентного горения EDC, реализованная в программе FLUENT. Потом было исследовано влияние выбора модели химической кинетики на результаты численного моделирования эксперимента P. Magre et al.

4.1 Постановка эксперимента и организация расчетов

Экспериментальная модель, исследованная P. Magre et al. [100], представляет собой канал постоянной ширины (0.1 м) с обратным уступом (рис. 4.1). Вверх по течению от уступа канал имеет длину 1.5 м и высоту 0.065 м, а вниз по течению от ступеньки – длину 1.4 м и высоту 0.1 м. На входе и выходе из канала модели расположены сопла Лаваля со звуковыми сечениями, чтобы лучше контролировать массовый расход и акустику. Уровень турбулентности контролируется хонейкомбом, расположенным в канале вверх по течению. 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); также с помощью когерентной антистоксовой Рамановской спектроскопии (CARS) измерялись температура и ее пульсации.

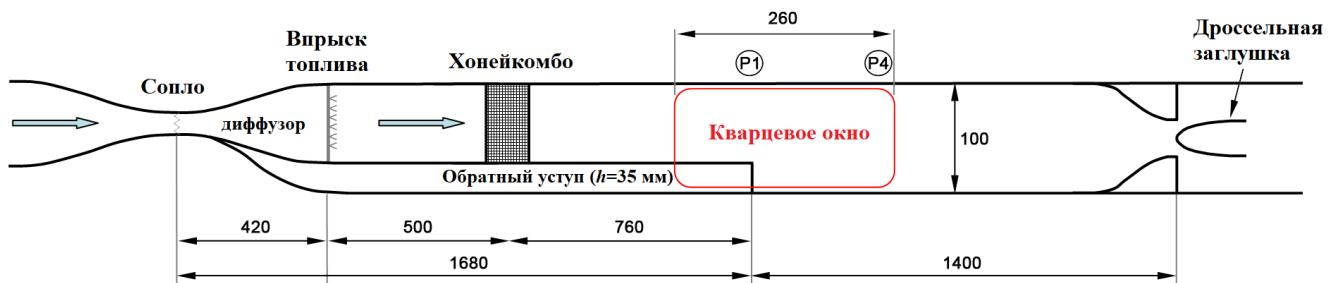


Рисунок 4.1 – Схема экспериментальной модели ONERA/LAERTE с уступом

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 на входе близка к 50 м/сек. Уровень турбулентных пульсаций, измеренный на расстоянии 0.15 м вверх по потоку от уступа, составлял в эксперименте 11 % от средней скорости течения.

Численное моделирование проводилось в двумерной (плоской) постановке на базе нестационарных осреднённых по Рейнольдсу уравнений Навье-Стокса (URANS), замкнутых моделью турбулентности семейства $k-\omega$, какой-либо моделью для вычисления средних скоростей химических реакций и различными

механизмами химической кинетики. Расчет начинался от сечения, расположенного на 0.1 м вверх по потоку от уступа канала (рис. 4.2,а). Начало координат ($x = 0$; $y = 0$) было помещено в угол уступа. Профили скорости и параметров турбулентности на входе (рис. 4.3) были предоставлены автору Лабораторией JetSim ЦАГИ [21]; они были получены путем расчета течения с пограничными слоями вверх по потоку от входа в расчетную область. Точно такие же профили использовались в статье [17]. Были заданы однородный состав газа ($Y_{CH_4} = 0.0446557$, $Y_{O_2} = 0.22269$, $Y_{N_2} = 0.7326543$) и постоянная температура $T = 525K$ (число Маха потока близко к 0.1).

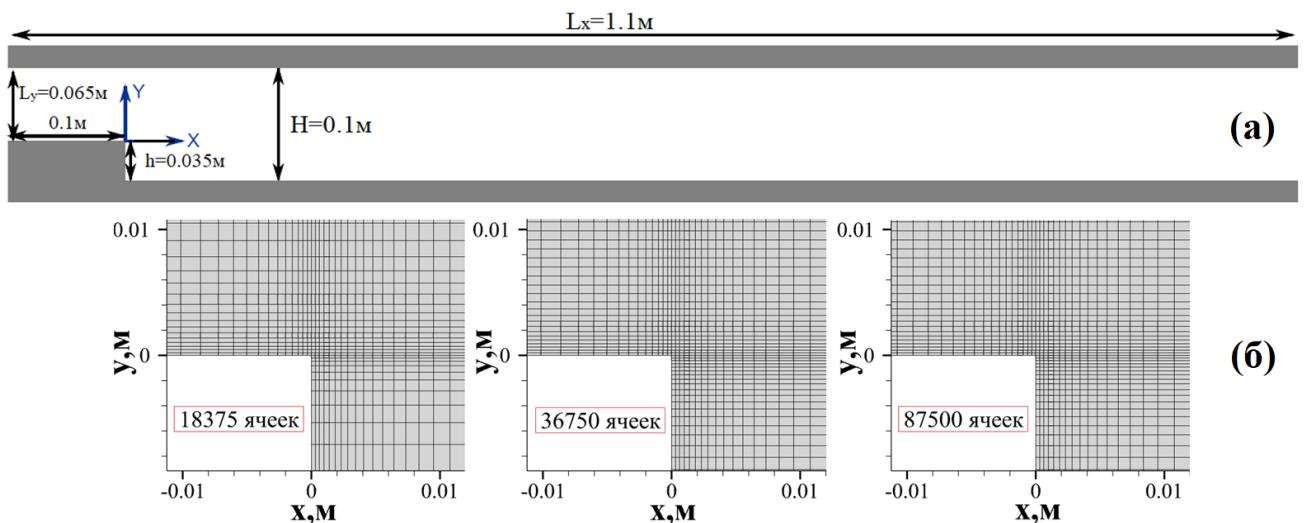


Рисунок 4.2 – Геометрия расчетной области (а) и сетка в окрестности уступа (б)

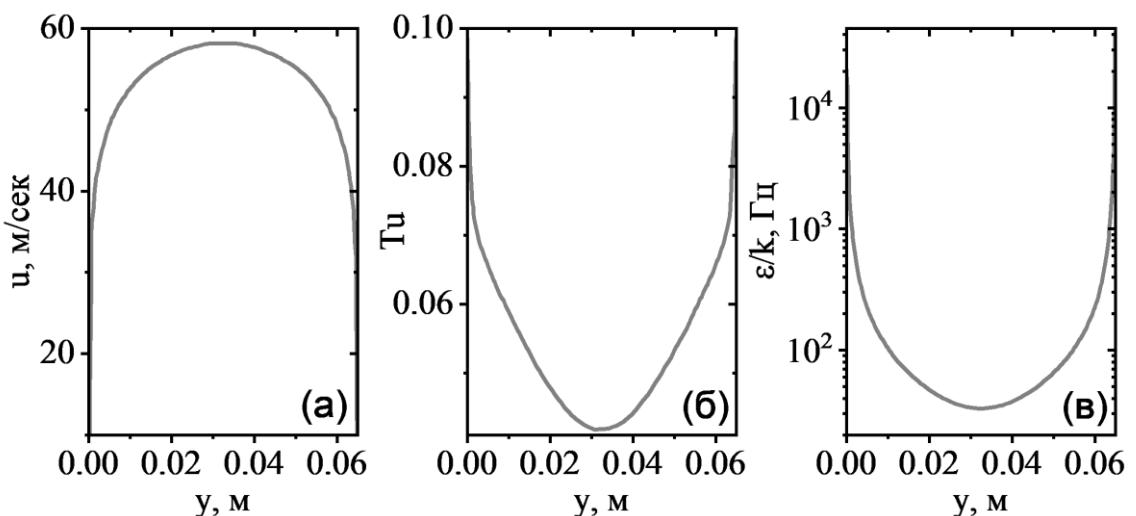


Рисунок 4.3 – Вертикальные профили параметров на входе в расчетную область: (а) продольная скорость u , (б) интенсивность турбулентности $Tu = \sqrt{2k/3}/u_{\max}$, (в) характерная частота крупномасштабной турбулентности $\varepsilon/k = 0.09\omega$.

В выходном сечении применялись мягкие граничные условия “*Pressure-outlet*”* с заданным давлением $P=1$ бар. В эксперименте стенки канала охлаждались водой, но температура стенок не измерялась. Согласно результатам расчетов ЦАГИ [7], при температуре стенки 800К получаются наиболее близкие к эксперименту результаты. Но такая температура стенок должна достигаться только в областях горячего потока. Поэтому температура стенок задавалась с помощью UDF (*User-Defined Functions*) по формуле $T_w = \min(800, T_1)$, где T_1 – температура в центре пристеночной ячейки сетки. Было задано условие прилипания с пристеночными функциями, обеспечивающее корректность решения при любых значениях y^+ (“ y^+ - *In insensitive Wall Treatment*”).

Использовался конечно-объемный численный метод 2-го порядка аппроксимации по всем переменным, включающий противопоточную схему для конвективных потоков на основе метода Роу, с линейной реконструкцией на базе метода наименьших квадратов (“*Second Order Upwind scheme*”, “*Roe Flux-Difference Splitting Scheme*”, “*Least Square Cell Based*”), центрально-разностную для диффузионных потоков (“*Second Order Central-difference scheme*”) и устойчивую локально-неявную аппроксимацию жестких химических источников (“*Stiff Chemistry Solver*”). Для интегрирования по времени использовалась неявная схема 1-го порядка точности по физическому времени с дуальным шагом (“*First Order Unsteady-Implicit Time Stepping (dual-time formulation)*”, “*Density-Based Solver*”). Шаг по физическому времени был постоянным и равным 10^{-5} сек.

Для проверки влияния сетки были построены три сетки (рис. 4.2,б). Сетка с 87500 ячейками уже не давала заметных отличий в решении, поэтому основные расчеты проводились на сетке с 36750 ячейками. Высота пристенных ячеек сетки – 2×10^{-4} м, в ядре потока высота ячеек – около 7×10^{-4} м, а продольный размер – 5×10^{-3} м). В качестве базовой использовалась кинетическая схема Басевича, Беляева и Фролова, разработанная в ИХФ РАН [5] (далее – Фролов4).

* Здесь и далее в кавычках наклонным шрифтом на английском языке указаны свойства, которые указываются в интерфейсе FLUENT при подготовке расчета. Детальное описание см. <https://www.afs.enea.it/project/neptunius/docs/fluent/html/th/node1.htm>.

Как и в расчетах ЦАГИ [7, 17, 28], при наличии горения нестационарный процесс развития течения в канале экспериментальной модели ONERA завершается выходом на квазипериодический колебательный режим. Поэтому представленные ниже данные получены осреднением по времени.

4.2 Расчеты течения без горения

Первые расчеты данной задачи были выполнены в постановке, максимально приближенной к расчетам ЦАГИ в квазиламинарном приближении [17], когда влияние турбулентных пульсаций на средние скорости реакций не учитывается. Как и в расчетах ЦАГИ, применялась модель кинетики “Фролов4” [5]. Поскольку модель турбулентности q - ω , использовавшаяся в [7, 17, 28], в пакете FLUENT не реализована, автор обратился к модели турбулентности SST. (Shear Stress Transport) Ф.Р. Ментера (см. раздел 1.4), которая широко используется при численном моделировании течений со стенками. Отметим, что версия модели q - ω , которую применяет ЦАГИ [14], устроена аналогично модели SST и представляет собой комбинацию “пристенного” и “свободнотурбу-лентного” вариантов этой модели с использованием переходной функции.

На рис. 4.4 и рис. 4.5 представлены вертикальные профили средней продольной x -компоненты скорости u и y -компоненты скорости v в расчете течения в модели ONERA без горения с моделью SST. Также показаны данные расчетов ONERA [119], полученные по модели турбулентности k - l , и данные расчетов ЦАГИ [28] по модели турбулентности q - ω . Результаты автора хорошо совпали с расчетами других авторов и с экспериментами. Стоит заметить, что модель SST даже лучше (ближе к эксперименту) описывает течение в зоне рециркуляции (1-е сечение). Если рассмотрим профили среднеквадратичного отклонения компонент скорости $\sqrt{u'^2}$ и $\sqrt{v'^2}$ ¹ (рис. 4.7 и 4.7), то увидим, что пульсации средней скорости описаны моделью SST не хуже, чем моделью q - ω .

¹ В рамках гипотезы Буссинеска предполагается изотропность пульсаций скорости. Поэтому на рис.4.6 и на рис.4.7 $\sqrt{u'^2} = \sqrt{v'^2} = \sqrt{2k/3}$.

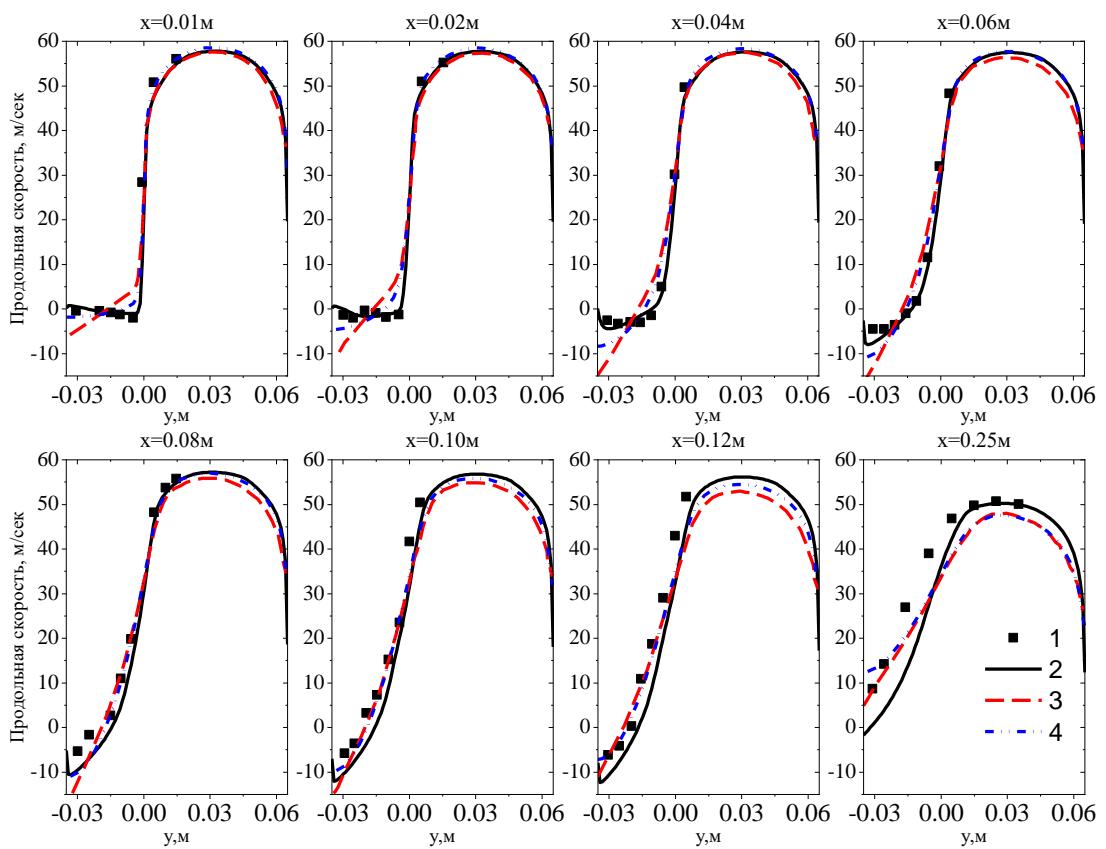


Рисунок 4.4 – Вертикальные профили средней x -компоненты скорости u в расчете течения без горения: 1 – Эксперимент P. Magre et al.; 2 – FLUENT с моделью SST; 3 – CEDRE с моделью $k-l$; 4 – zFlare с моделью $q-\omega$

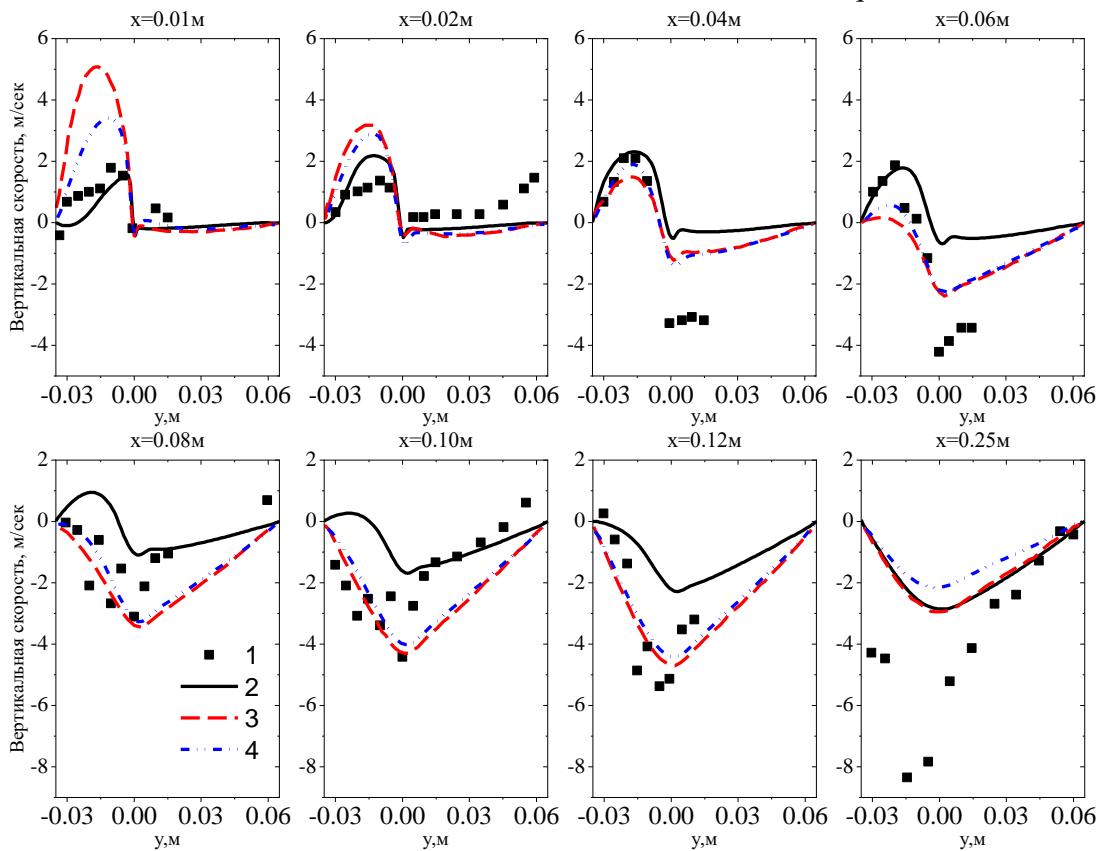


Рисунок 4.5 – Вертикальные профили средней y -компоненты скорости v в расчете течения без горения: Обозначения как на рис. 4.4

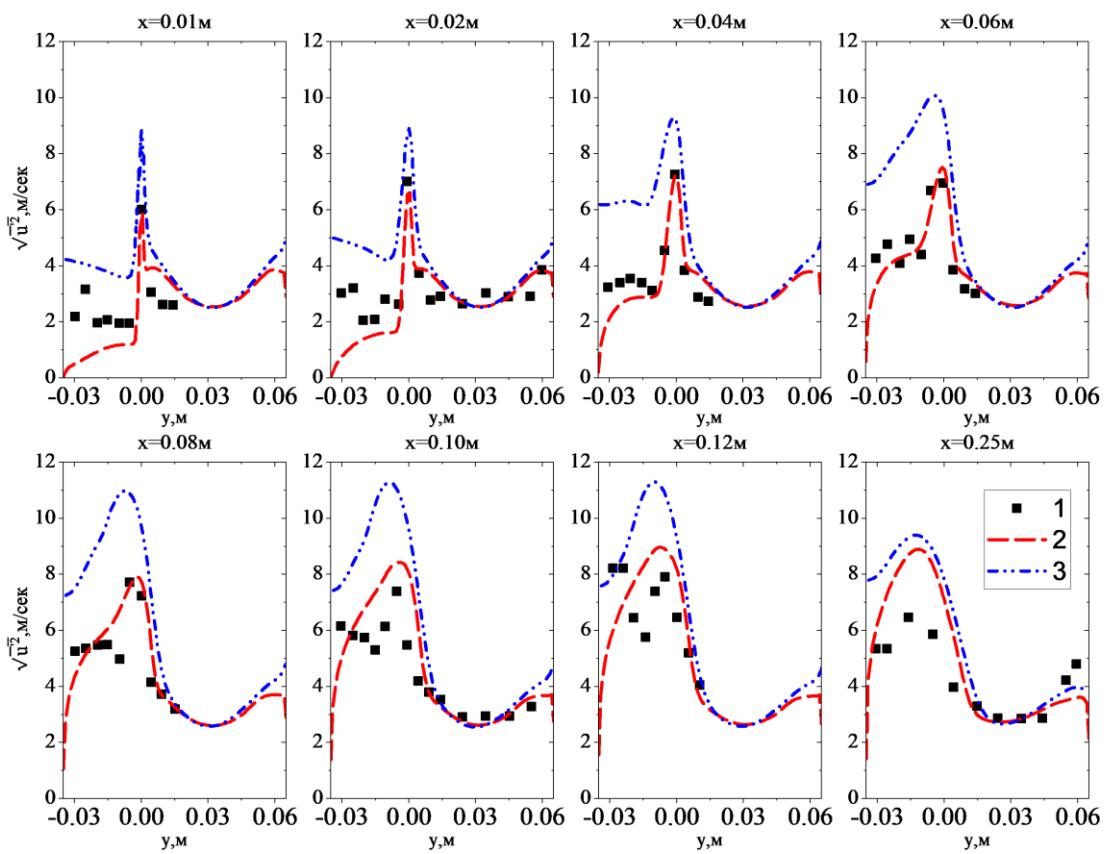


Рисунок 4.6 – Вертикальные профили среднеквадратичного отклонения x -компонент скорости $\sqrt{u'^2}$: 1 – Эксперимент P. Magre et al.; 2 – FLUENT с моделью SST; 4 – zFlare с моделью

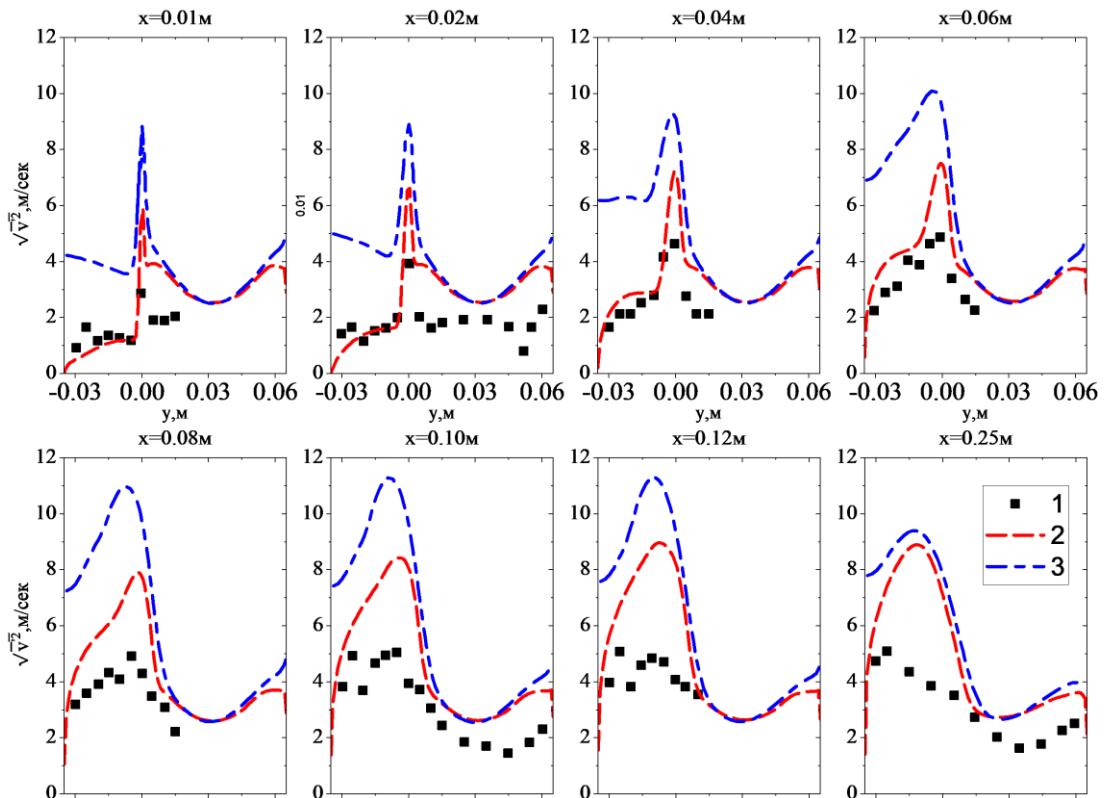


Рисунок 4.7 – Вертикальные профили среднеквадратичного отклонения y -компонент скорости $\sqrt{v'^2}$: Обозначения как на рис. 4.6

4.3 Расчеты с глобальными механизмами химической кинетики

4.3.1 Расчеты течения с горением в квазиламинарном приближении

Предварительные расчеты с горением проводились без учета ТСИ – в квазиламинарном приближении (см. (1.37)). Однако в расчетах на базе SST с кинетикой “Фролов4” угол наклона пламени к направлению потока оказался существенно меньшим, чем в эксперименте (рис. 4.8,а). Поэтому автор рассмотрел другую модель класса $k-\omega$, реализованную в программе FLUENT, – BSL $k-\omega$ [104] (см. раздел 1.4). Угол наклона пламени в расчёте по модели BSL $k-\omega$ стал больше (см. рис. 4.8,б) и, как будет показано далее, приблизился к эксперименту.

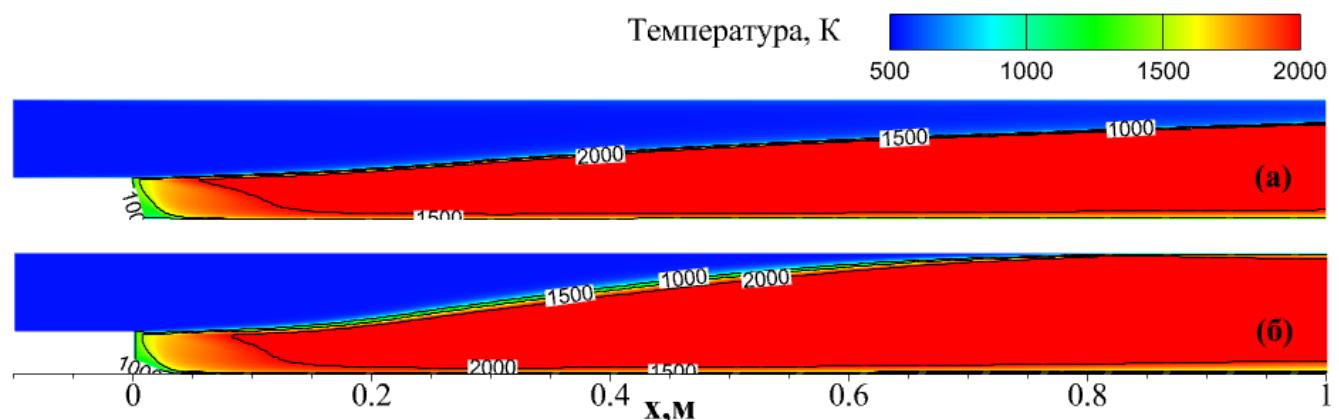


Рисунок 4.8 – Поля средней температуры, полученные в расчетах без учета ТСИ:
(а) модель SST, кинетика “Фролов4”; (б) модель BSL $k-\omega$, кинетика “Фролов4”;

Угол наклона пламени определяется отношением средней скорости пламени относительно газа к скорости исходной смеси. Напомним, что в классической теории Зельдовича и Франк-Каменецкого для случая односторонней одностадийной брутто-реакции в газе с постоянной теплоемкостью и числом Льюиса $Le=1$ получена простая формула для скорости ламинарного пламени относительно исходной (предварительно перемешанной) смеси:

$$S_f \approx \frac{\sqrt{2\lambda q \int_{T_{\text{нач}}}^{T_{\text{кон}}} \dot{\omega}(T) dT}}{\rho_{\text{нач}} c_p (T_{\text{кон}} - T_{\text{нач}})}. \quad (4.1)$$

Здесь λ – коэффициент теплопередачи, q – тепловыделение на единицу массы, c_p – удельная теплоемкость при постоянном давлении. Для ламинарного пламени $\lambda \approx \mu c_p / Pr$. В турбулентном случае в первом приближении оценка (4.1) должна

быть применима, если заменить молекулярную вязкость на турбулентную. Следовательно, в турбулентном случае средняя скорость пламени относительно газа $\overline{S_f} \sim \sqrt{\mu_t}$. Расчеты показывают, что при использовании модели SST множитель $\min\left[1; \frac{0.31\omega}{SF_2}\right]$ в формуле для турбулентной вязкости (1.34) на фронте пламени становится много меньше единицы. А в BSL $k-\omega$ этого понижающего множителя нет. Это приводит к значительному увеличению производства кинетической энергии турбулентности в во фронте пламени – см. рис. 4.9. В результате турбулентная вязкость на фронте пламени в расчете на базе модели SST оказалась в 4 раза ниже, чем в расчете по BSL $k-\omega$ – см. рис. 4.10. Поэтому в SST скорость пламени ниже, и угол наклона меньше.

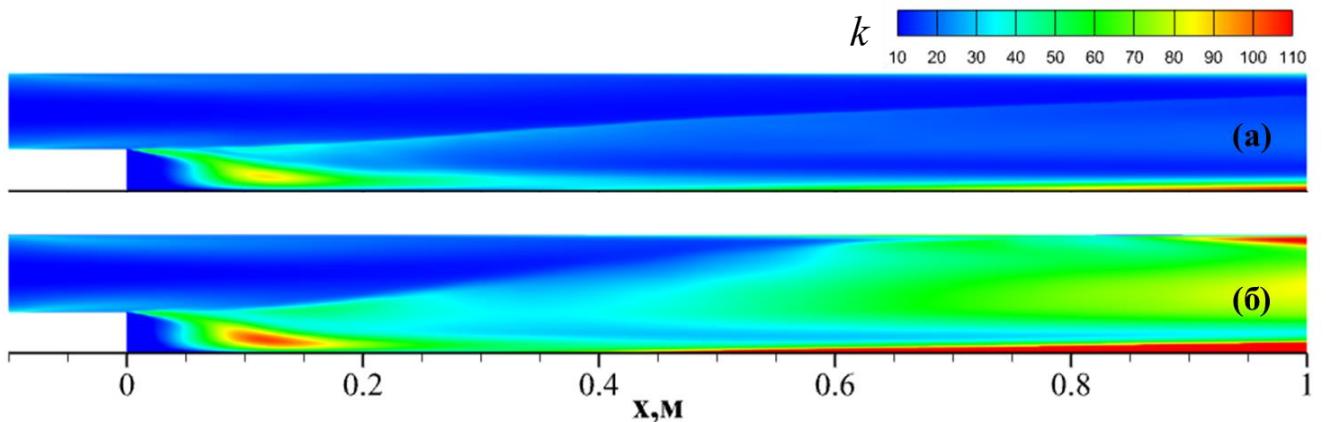


Рисунок 4.9 – Поля кинетической энергии турбулентности, полученные в расчетах без учета ТСИ с кинетикой Фролов4: (а) модель SST; (б) модель BSL $k-\omega$

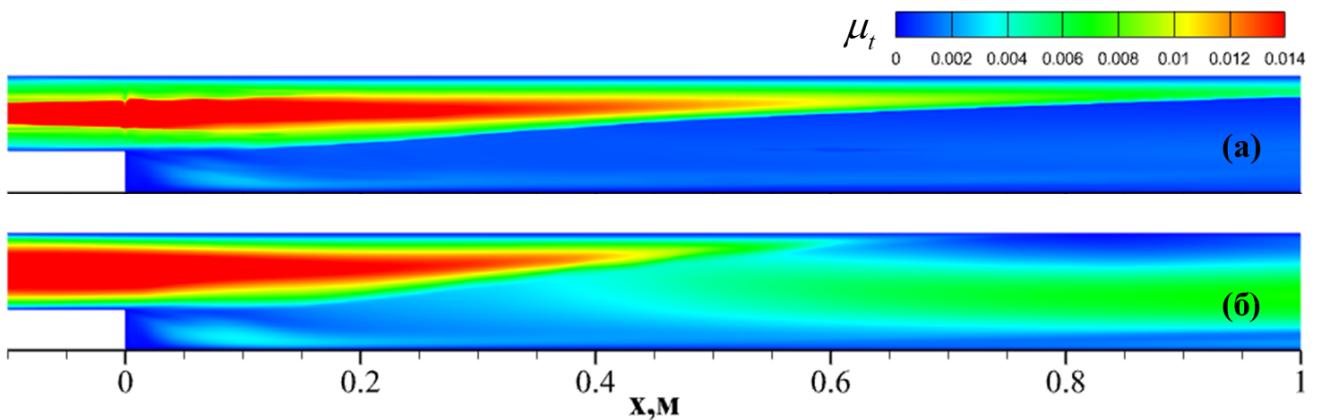


Рисунок 4.10 – Поля турбулентного вязкости, полученные в расчетах без учета ТСИ с кинетикой Фролов4: (а) модель SST; (б) модель BSL $k-\omega$

4.3.2 Расчеты течения с горением с учетом TCI

Квазиламинарное приближение приводит к тому, что фронт пламени оказывается слишком тонким (рис. 4.8). Для получения правильной ширины фронта пламени необходимо учитывать TCI. Как показано в [119], в данной задаче реализуется режим утолщенного пламени, при котором мелкие турбулентные вихри возмущают внутреннюю структуру пламени. По данным ONERA и ЦАГИ, хорошие результаты дают модели класса PaSR, особенно модель, предложенная В.А. Сабельниковым и К. Фюрби – EPaSR [17, 127]. К сожалению, последняя модель недоступна в программе Fluent, а из моделей класса PaSR реализованы только различные варианты модели EDC [97]. Поэтому автор реализовал во Fluent модель PaSR Хомяка и Карлссона [52], наиболее близкую к модели EPaSR. Эта модель описана в разделе 1.6.

Для реализации в программе FLUENT автор разработал плагин (UDF), который подменяет значения γ^* и τ^* из модели EDC (1.42) на формулы (1.44). FLUENT не позволяет использовать в UDF значения параметров в тонких структурах, поэтому в (1.41) было принято $\rho^* = \bar{\rho}$, как и в работе [119].

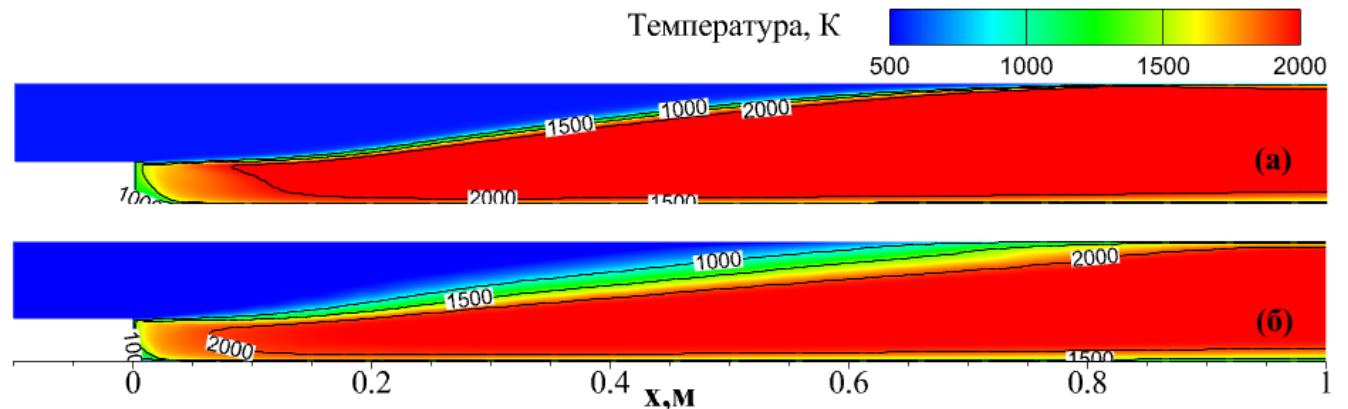


Рисунок 4.11 – Поля средней температуры, полученные в расчетах с модели BSL $k-\omega$, кинетикой Фролов4: (а) квазиламинарный расчет; (б); PaSR с $C_\tau = 0.11$.

В данной задаче при турбулентном горении на микроскопических масштабах реализуется примерно такой же путь реакции, как и внутри ламинарного пламени. Характерное время химической реакции при прохождении объема газа через фронт пламени можно оценить по формуле $\tau_{хим} = \delta_L / S_L$, где δ_L – ширина фронта ламинарного пламени, а S_L – его скорость относительно газа. В работе [25] была

выполнена оценка величины $\tau_L = \delta_L / S_L$ при параметрах эксперимента ONERA, и было получено значение 6.09×10^{-4} сек. В расчетах ЦАГИ [7, 17, 28] ради повышения устойчивости счета в формуле для γ^* (1.44) во всем поле течения принималось $\tau_{x_{\text{им}}^*} = 6.09 \times 10^{-4}$ сек. Поэтому в предварительных расчетах автора по модели PaSR по кинетике “Фролов4” использовалось это же значение.

Значение коэффициента C_τ в оригинальной работе [52] равно единице, но на самом деле он может рассматриваться как эмпирическая константа, которая зависит от изучаемой физической задачи и от используемой модели турбулентности. В самом деле, формула для τ^* имеет смысл значения, среднего по порядку величины между характерным временем крупномасштабной турбулентности $\tau_T = k/\varepsilon$ и характерным временем мельчайших вихрей $\tau_K = \sqrt{\mu/(\rho\varepsilon)}$. Учитывая, что оба характерных времени определены с точностью до констант ~ 1 , введение эмпирической константы C_τ представляется вполне оправданным. В расчетах ЦАГИ [7, 17, 28] с моделью турбулентности $q\text{-}\omega$ использовалось значение $C_\tau = 0.2$. На рис. 4.12,а представлены вертикальные профили средней температуры, полученные в расчетах автора с моделью турбулентности BSL $k\text{-}\omega$ при разных значениях коэффициента C_τ . Самый близкий к эксперименту результат получен при $C_\tau = 0.11$. По продольной скорости (рис. 4.12,б) в ядре потока лучшие результаты дает $C_\tau = 0.12$, но вблизи нижней стенки – $C_\tau = 0.11$. Было решено остановиться на $C_\tau = 0.11$. Соответствующее поле средней температуры изображено на рис. 4.11,б.

На рис. 4.13 приведено сравнение с экспериментом формы изолиний $T = 1500\text{K}$, полученных в расчетах автора по модели PaSR и в расчетах ЦАГИ по модели EPaSR. Расчеты автора близки к расчету ЦАГИ в зоне за ступенькой при $x < 0.05\text{ м}$ и в пристенной зоне на верхней стенке при $x > 0.7\text{ м}$. При $0.05 < x < 0.5\text{ м}$, расчет по модели EPaSR имеет ту же тенденцию, что и в эксперименте, а в расчете автора по модели PaSR изолиния $T = 1500K$ почти прямолинейна. Далее при $0.5 < x < 0.7\text{ м}$ оба результата расчётов далеки от эксперимента.

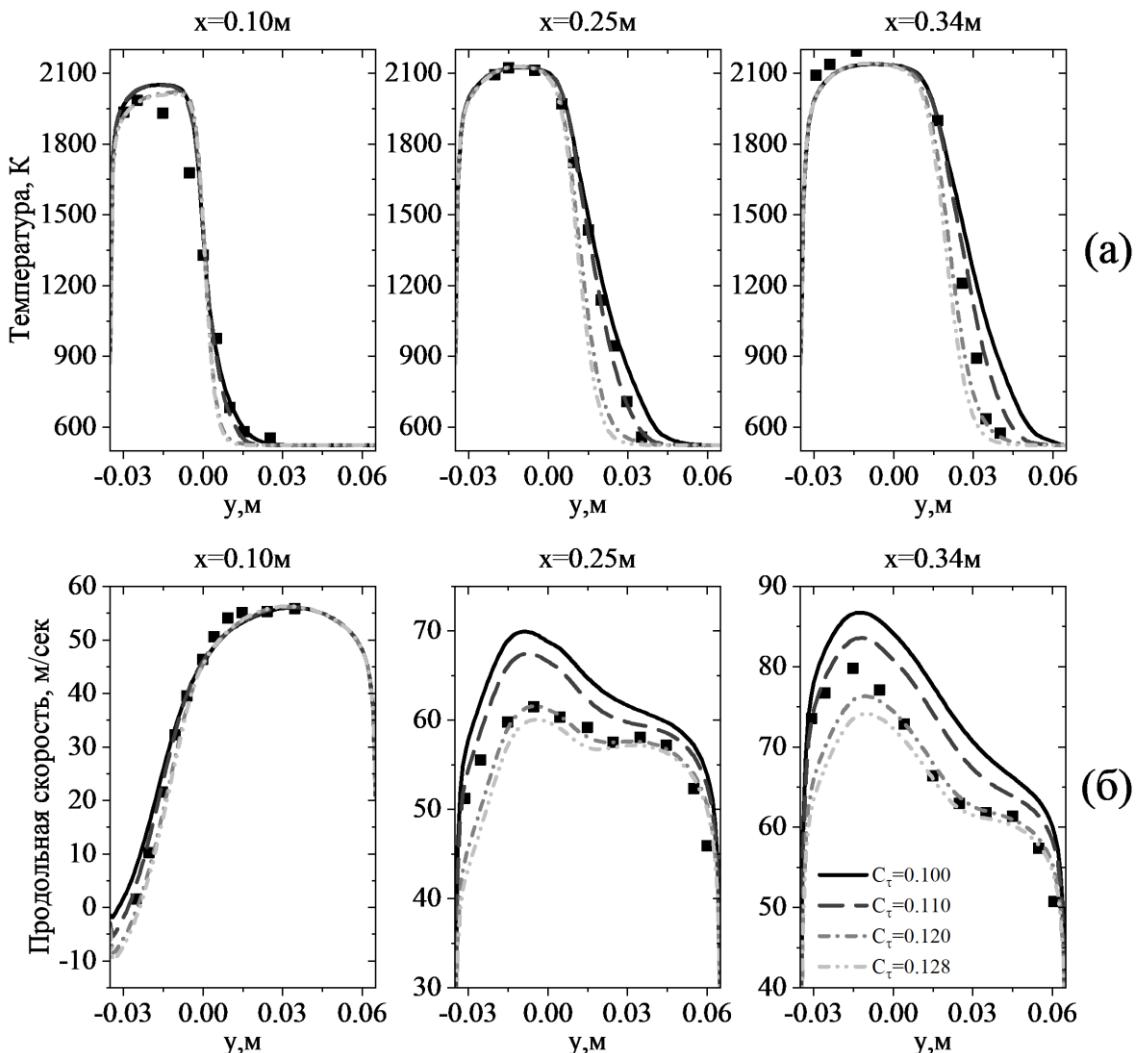


Рисунок 4.12 – Сравнение вертикальных профилей средней температуры (а) и продольной скорости (б) для разных значений C_τ с экспериментом

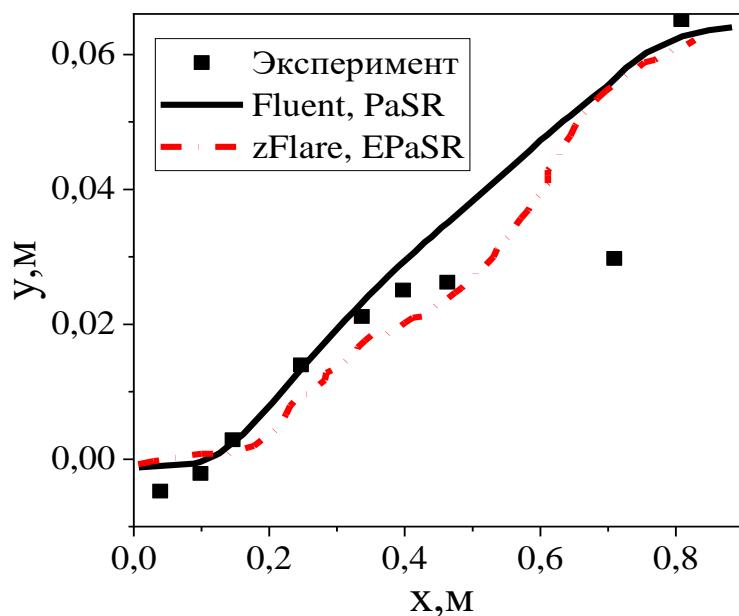


Рисунок 4.13 – Сравнение изотермы $T=1500\text{K}$ в расчетах Fluent с моделью PaSR (черная сплошная линия) и zFlare с моделью EPaSR (красная пунктирная линия) с экспериментом

На рис. 4.14 вертикальные профили средней температуры (а) и средней продольной скорости (б), полученные автором по модели PaSR при $C_\tau = 0.11$, сравниваются с его квазиламинарными расчетами, с экспериментом и с расчетами, полученными в ЦАГИ с использованием собственной программы **zFlare** по модели EPaSR с моделью турбулентности $q - \omega$ [30]. Как и в расчетах ЦАГИ, наблюдается ухудшение согласования с экспериментом в окрестности отрыва за уступом ($x \leq 0.15$ м) и в области взаимодействия фронта пламени и продуктов сгорания с пограничным слоем на верхней стенке (сечение $x = 0.46$ м и далее). В работе [4] приводятся аргументы в пользу того, что можно приблизиться к эксперименту путем введения переменных турбулентных чисел Прандтля и Шмидта; однако в программе ANSYS FLUENT нет возможности проверить данную гипотезу. В любом случае, из рис. 4.14 можно заключить, что для данной задачи с простой геометрией течения результаты, полученные автором при помощи программы Fluent, не уступают по точности результатам расчетов ЦАГИ с использованием модели EPaSR [28].

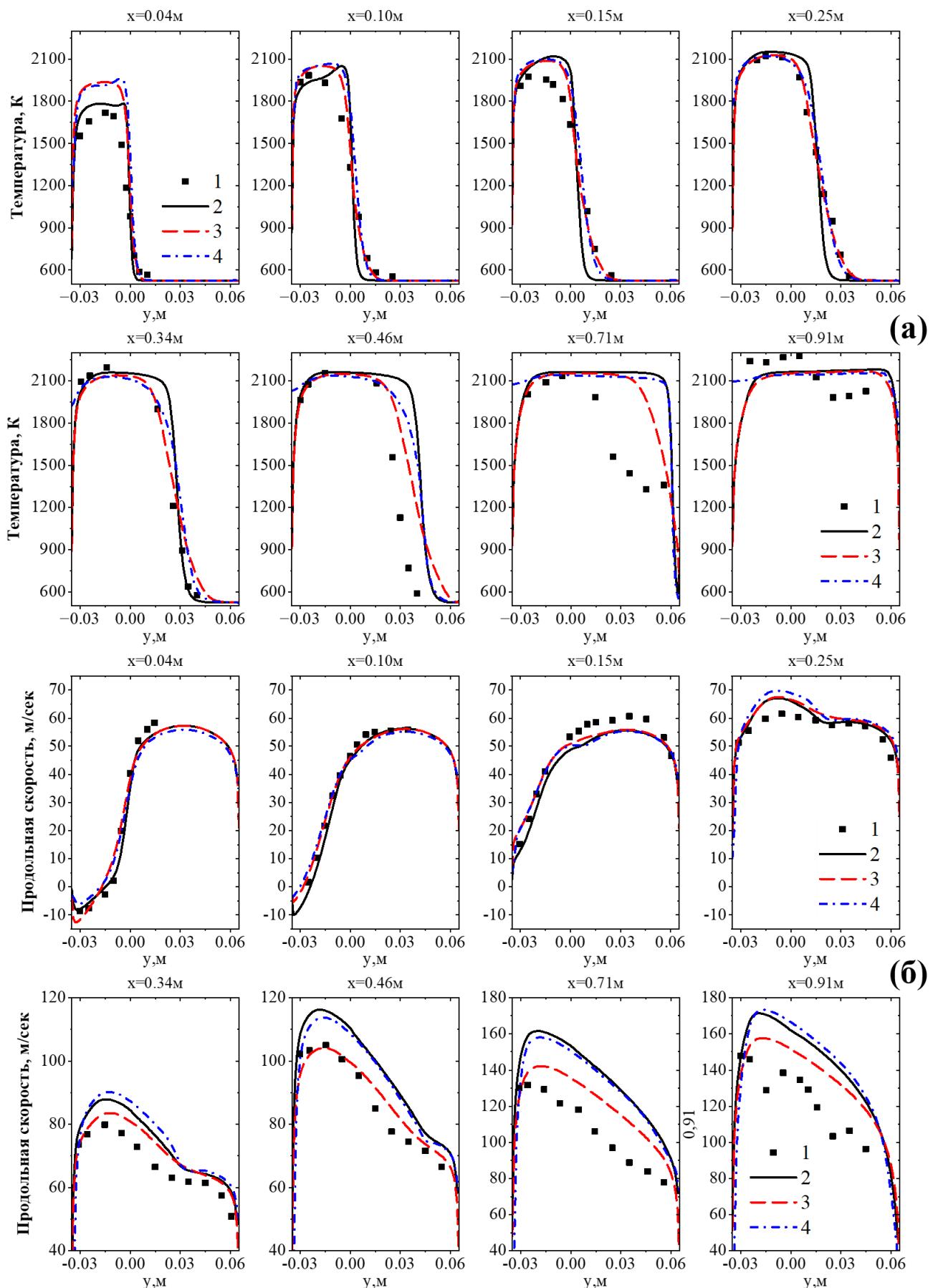


Рисунок 4.14 – Сравнение вертикальных профилей средней температуры (а) и средней продольной скорости (б): 1 – Эксперимент; 2 – квазиламинарный расчет; 3 – модели PaSR с $C_\tau = 0.11$; 4 – модели EPaSR с $C_\tau = 0.2$

4.4 Расчеты со скелетным механизмом химической кинетики

4.4.1 Расчеты течения с горением на базе классической модели PaSR

Для изучения вопроса о влиянии механизма химической кинетики на результаты расчета были рассмотрены три механизма горения метана в воздухе: два квазиглобальных механизма – использовавшийся в описанных выше расчетах механизм Фролов4[5] (7 компонентов, 4 реакции), более новый механизм BFER2 [68](6 компонентов, 2 реакции), и один скелетный механизм – Smooke25 [139] (16 компонентов, 25 реакций). Как показано в [17, 28], в данной задаче важную роль играет волновой механизм распространения пламени за счет диффузии тепла. Рисунок 2.13 показывает, что все три механизма правильно предсказывают скорость ламинарного пламени при интересующем нас значении коэффициента избытка топлива $\varphi=0.8$.

На рис. 4.15 сопоставлены поля скорости тепловыделения за счет химических реакций Q (“*Energy Sources Due to Reaction*”) и изолинии продольной скорости, полученные в расчетах с этими механизмами кинетики. Применялись модель турбулентности BSL $k\text{-}\omega$ [104] и модель PaSR [12] с $C_\tau = 0.11$. В расчете с механизмом BFER2 (рис. 4.15,а) и Фролов4 (рис. 4.15,б) получены подобные распределения скорости тепловыделения и продольной скорости. В этих расчетах длина зоны рециркуляции за ступенькой – около 0.15 м. Но в расчете по скелетному механизму Smooke25 угол наклона пламени намного меньше, и фронт пламени уже, а зона рециркуляции за ступенькой длиннее.

Также на рис. 4.16 сопоставлены поля средней температуры, полученные в этих расчетах, а на рис. 4.17 – профили средней температуры и продольной скорости. Модель BFER2 дает чуть большее тепловыделения чем Фролов4, что приводит к небольшому повышению средней температуры и продольной скорости в разных сечениях в ядре потока (ср. линии 2 и 3 на рис. 4.17). В расчете по модели кинетики Smooke25, пламя почти плоское, поэтому полученные профили средней температуры и продольной скорости (линия 4 на рис. 4.17) сильно отличаются от эксперимента.

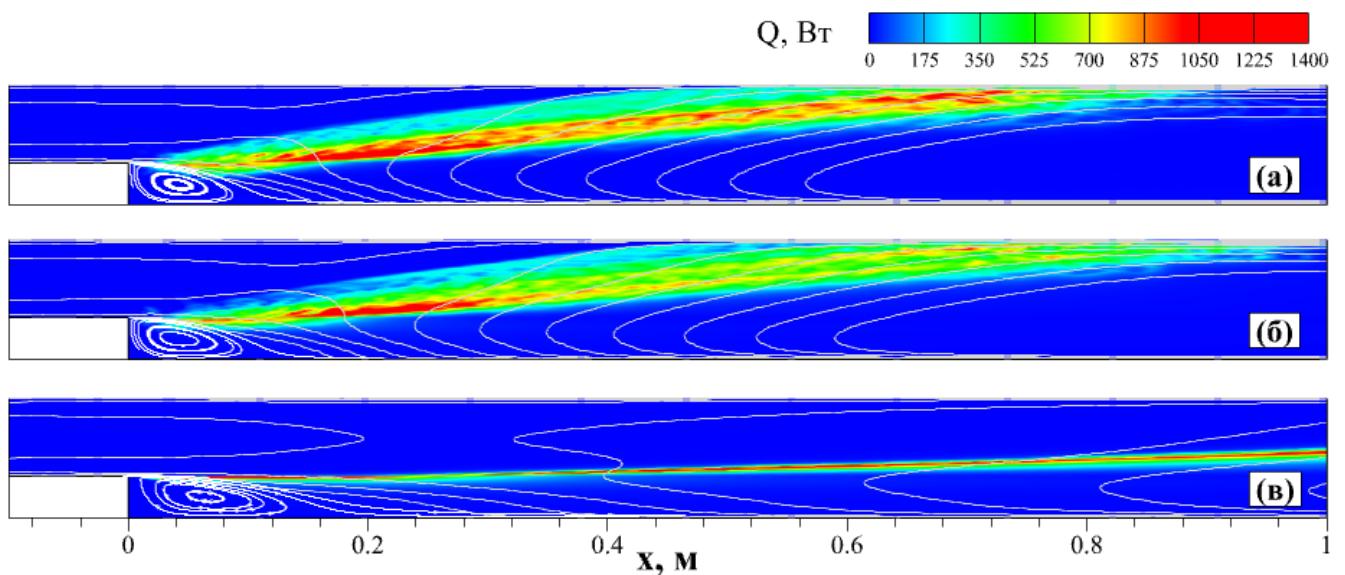


Рисунок 4.15 – Поля скорости тепловыделения и изолинии продольной скорости, полученные в расчетах на базе модели PaSR с использованием различных кинетических схем:

(а) BFER2, (б) Фролов4, (в) Smooke25. Показаны зоны рециркуляции

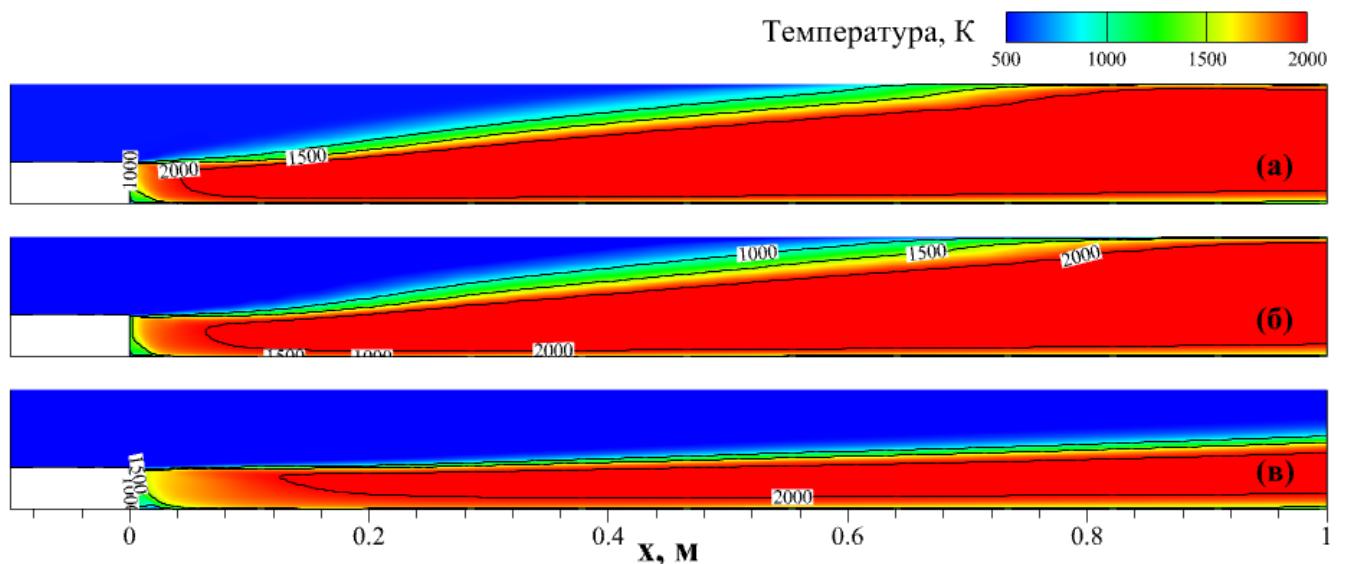


Рисунок 4.16 – Поля температуры, полученные в расчетах на базе модели PaSR с использованием различных кинетических схем: (а) BFER2, (б) Фролов4, (в) Smooke25

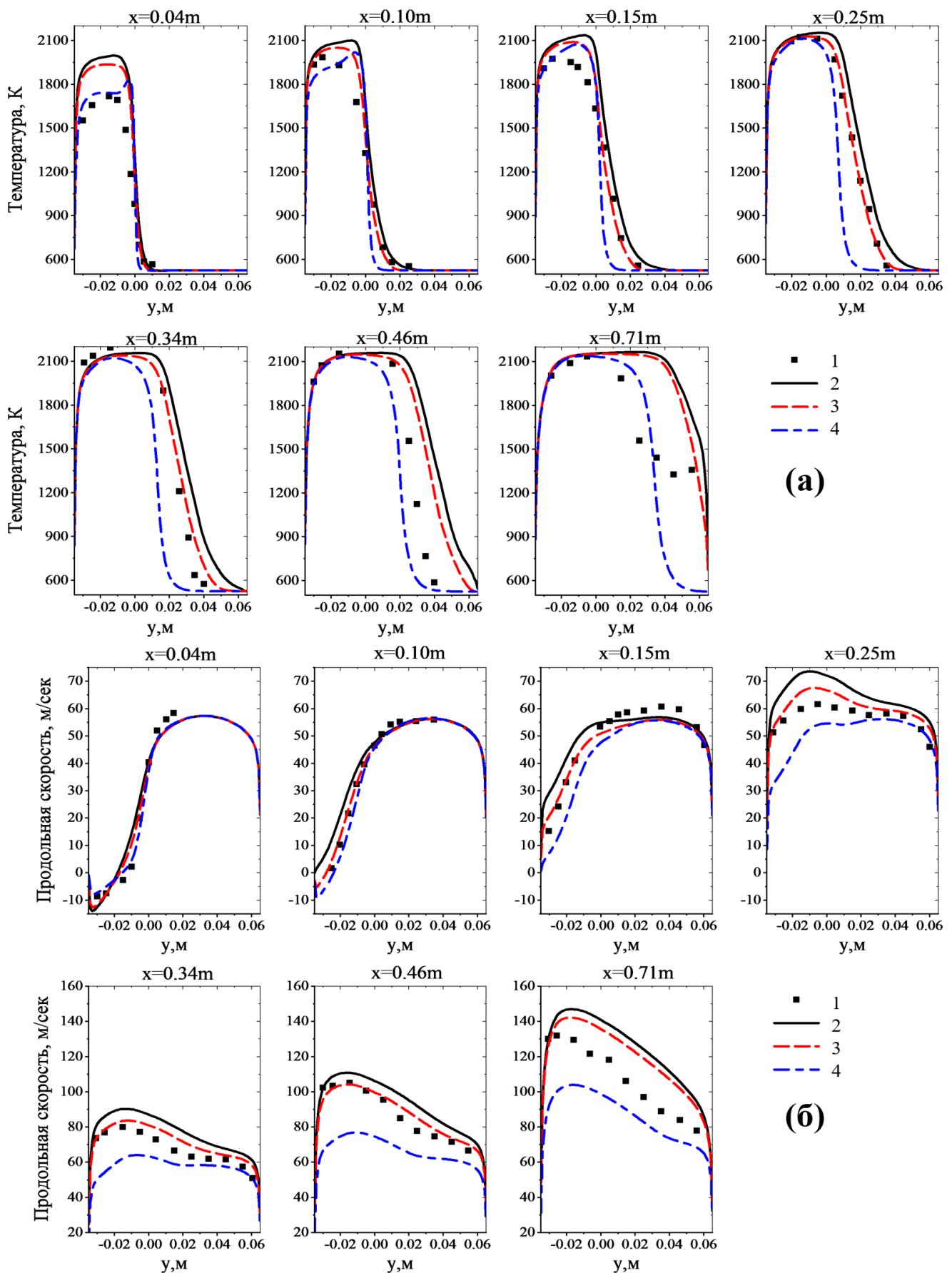


Рисунок 4.17 – Сравнение вертикальных профилей (а) средней температуры и (б) средней продольной скорости, полученные в расчетах на базе модели PaSR с различными моделями кинетики: 1 – эксперимент; 2 – BFER2; 3 – Фролов4; 4 – Smooke25

Из поля скорости тепловыделения (рис. 4.15,в) полученного в расчёте с механизмом Smooke25, можно заключить, что в расчете по механизму Smooke25 выделяется существенно меньше тепла, чем в расчетах по глобальным моделям BFER2 и Фролов4. Согласно формуле Зельдовича (4.1) (в которой количество тепла, выделяющееся в пламени, равно $q \cdot \int_{T_{\text{нач}}}^{T_{\text{кон}}} \dot{\omega}(T) dT$), это должно уменьшить скорость пламени относительно газа. Вот почему волна горения наклоняется к потоку гораздо более полого. В то же время, скорость газа в расчете с механизмом Smooke25 меньше увеличивается по модулю внутри волны горения, и ее вектор меньше поворачивается в волне. Оба этих фактора способствуют увеличению размера зоны рециркуляции. В самом деле, меньшая скорость потока над зоной рециркуляции приводит к сокращению эжекции газа из этой зоны в слое смешения, ограничивающем зону снаружи. Как показано в статье [2], снижение эжекции вызывает увеличение массы газа, постоянно находящегося внутри зоны рециркуляции.

4.4.2 Объяснение расхождения расчетов по разным моделям кинетики

Почему скелетный механизм (самый точный из рассмотренных) дает такое слабое горение?

Были рассмотрены три возможные причины неправильного поведения скелетного механизма.

Вначале было сделано предположение, что для скелетного механизма “Smooke25”, который способен корректно описывать промежуточные этапы развития реакции, приближение $\tau_{xim} = const$ является слишком грубым. Чтобы оценить возможный эффект от перехода к переменным значениям τ_{xim} , зависящим от локальных условий течения, была реализована простая модель, в которой характерное время химических процессов τ_{xim} оценивается на основе теории, описанной в работе [109], по формуле

$$\tau_{xim} = \frac{\rho(Y_k^b - Y_k^u)^2}{C_{xim} \int_{Y_k^u}^{Y_k^b} S_k(\vec{Y}, T) dY_k} \quad (4.2)$$

где Y_k^u – массовая доля k -го вещества до горения, Y_k^b – массовая доля k -го вещества после горения, S_k – локальное значение химического источникового члена в уравнении для массовой доли k -го вещества (автор расписывал (4.2) для массовой доли паров воды).

Поскольку в данной задаче при турбулентном горении на микроскопических масштабах реализуется примерно такой же путь реакции, как и внутри ламинарного пламени, то эмпирическую константу C_{xim} можно оценить из расчета ламинарного пламени. Рассмотрим одномерное распространение ламинарного пламени при параметрах эксперимента Magre et al: $P=1$ атм., $T = 525$ К, $\varphi = 0.8$. На рис. 4.18,а показана полученная автором структура ламинарного пламени для данного режима течения в случае использования модели кинетики Фролов4. Ширина фронта ламинарного пламени $\delta_L \approx 0.4$ мм, а скорость пламени относительно газа $S_L = 0.84147$ м/сек. Тогда время химических процессов внутри ламинарного пламени $\tau_L = \delta_L / S_L \approx 4.75 \times 10^{-4}$ сек. Величина $\int_{Y_{H_2O}^u}^{Y_{H_2O}^b} S_{H_2O}(\vec{Y}, T) dY_{H_2O}$ примерно равна 10.80575 кг/(м³·сек) (см. рис. 4.18,б), плотность в данном условии $\rho = 0.6463$ кг/м³, тогда

$$C_{xim} = \frac{\rho (Y_{H_2O}^b - Y_{H_2O}^u)^2}{\tau_{xim} \int_{Y_{H_2O}^u}^{Y_{H_2O}^b} S_{H_2O}(\vec{Y}, T) dY_{H_2O}} = \frac{0.6463 \times 0.1^2}{4.75 \times 10^{-4} \cdot 10.80575} \approx 1.259$$

С учетом неопределенности, величину C_{xim} можно принять равной 1.0. А т.к. массовая доля H_2O до горения $Y_{H_2O}^u = 0$, то, оценив интеграл по формуле для площади треугольника, формулу (4.2) можно переписать в виде:

$$\tau_{xim} \approx \left| \frac{\rho Y_{H_2O}^u}{2 \max(S_{H_2O})} \right| \quad (4.3)$$

Модели аналогичные (4.3) используется во многих работах, напр. [63].

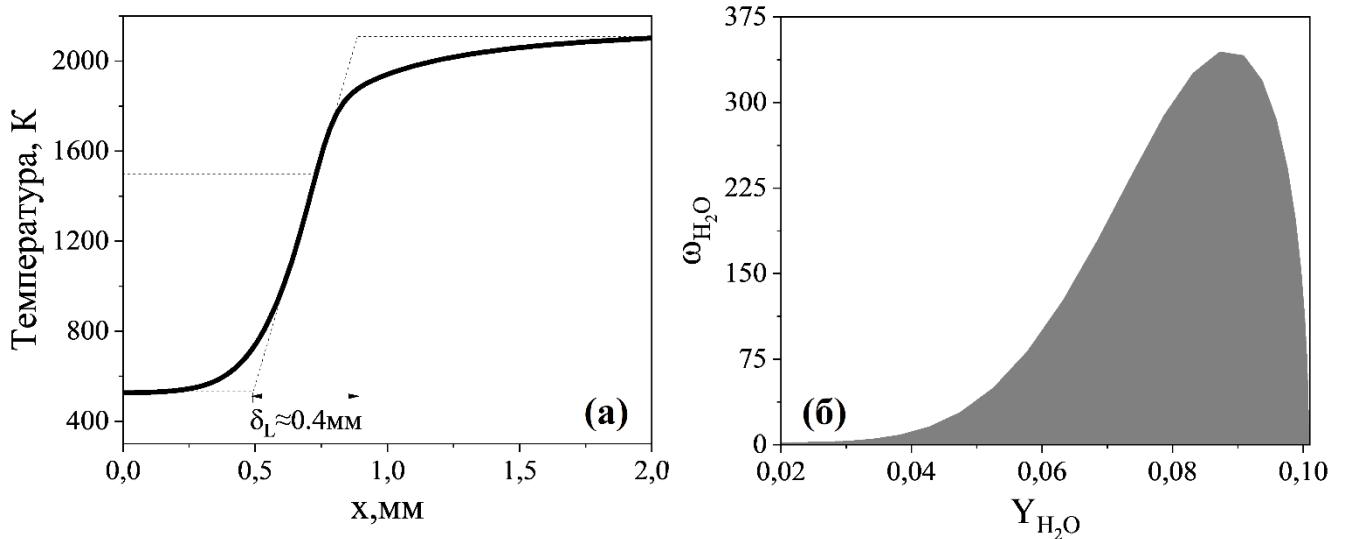


Рисунок 4.18 – (а) Структура одномерного ламинарного пламени и
(б) зависимость источникового члена ω_{H_2O} от массовой доли Y_{H_2O} для данного течения

Чтобы убедиться в адекватности работы этой модели, сначала был выполнен расчет не по механизму Smooke25, а по кинетике “Фролов4” с переменным значением τ_{xum} , рассчитанным по формуле (4.2). Поля средней температуры показаны на рис. 4.19,а. Сравнив с рис. 4.16,б и с рис. 4.15,б, увидим, что результаты похожи на расчет с $\tau_{xum} = 6.09 \times 10^{-4}$ сек = const . Следовательно, формула (4.2) предсказывает разумные значения τ_{xum} , ей можно пользоваться.

Из-за переда к формуле (4.2) толщина пламени стала уже и зона рециркуляции стала больше. Если рассмотрим поля массовой доли Y(CO) на рис. 4.20, то увидим, что диффузия промежуточных веществ усиливается, но существенного изменения решения не произошло.

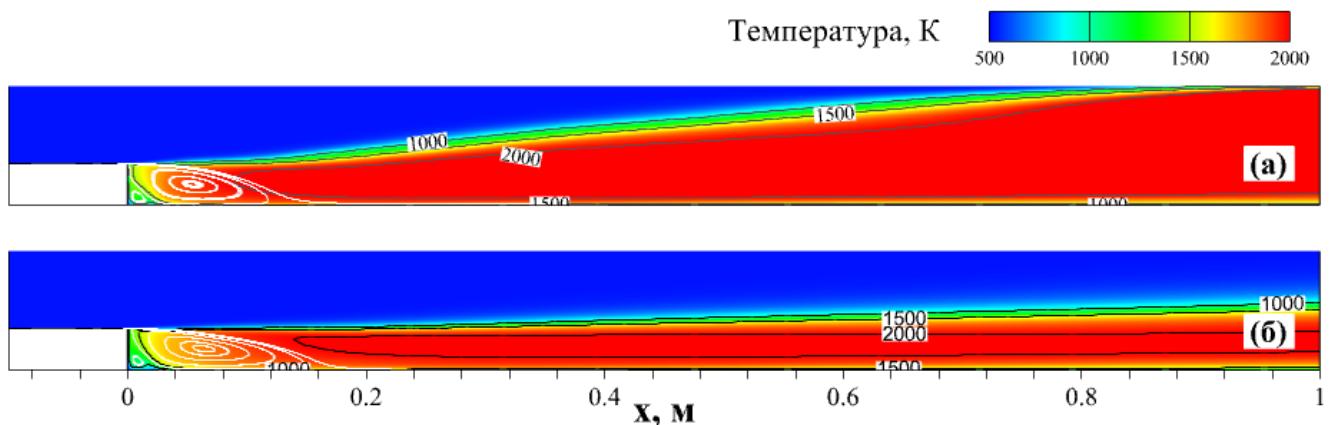


Рисунок 4.19 – Поля температуры, полученные в расчетах на базе модели PaSR с переменным
значением τ_{xum} : (а) кинетика Фролов4; (б) кинетика Smooke25

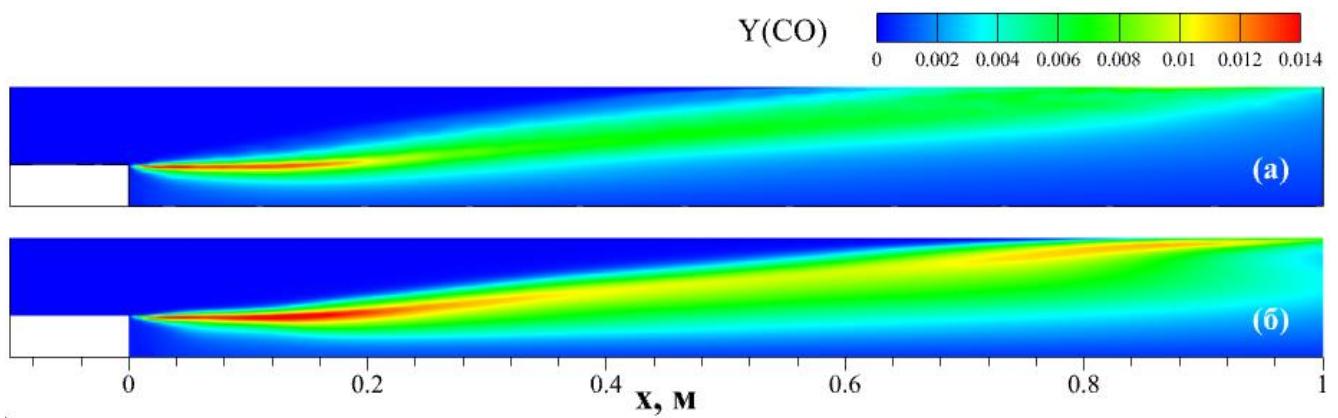


Рисунок 4.20 – Поля массовой доли Y(CO), полученные в расчетах на базе модели PaSR с кинетикой Фролов4: (а) $\tau_{xim} = 6.09 \times 10^{-4}$ сек; (б) $\tau_{xim} = \text{variable}$

После этого был выполнен расчет по кинетике “Smooke25” с использованием формулы (4.2). Получилось поле температуры, показанное на рис. 4.19,б. Как и в случае кинетики “Фролов4”, переход на формулу (4.2) не привел к существенному изменению результатов. Таким образом, гипотеза о необходимости уточнения τ_{xim} при работе со скелетным механизмом не подтвердилась.

2-й возможной причиной неправильного поведения скелетного механизма может быть занижение диффузионных потоков тепла и массы из зоны горения из-за погрешностей аппроксимации градиентов параметров на недостаточно подробной расчетной сетке. Для проверки этой возможности были проведены расчеты, где на участке канала $0.3 < x < 0.4$ м сетка была измельчена более чем в 100 раз в каждом пространственном направлении.

Сравнив поля температуры, полученные по модели PaSR на сгущённой сетке (рис. 4.21,а и 4.21,в) и результаты на базовой сетке (рис. 4.16,б и 4.16,в), можно видеть, что максимумы Q увеличились из-за повышенного сеточного разрешения. Тем не менее, угол наклона пламени на этом участке канала в случае применения модели PaSR остался примерно таким же, как и на базовой сетке. Следовательно, сеточное разрешение на базовой сетке является достаточным для описания диффузии.

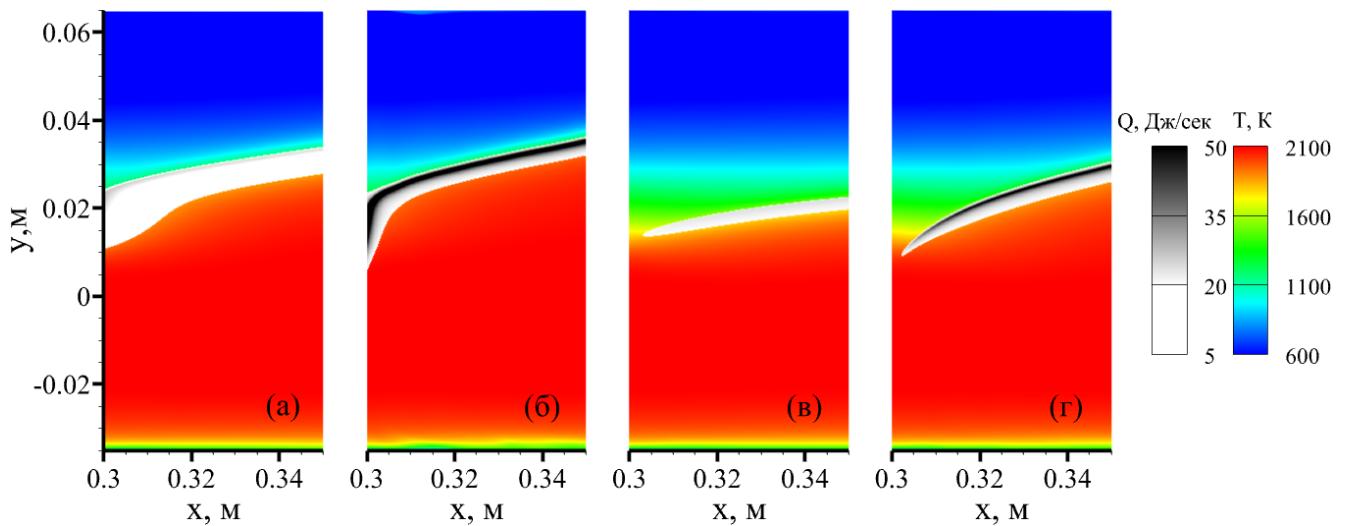


Рисунок 4.21 – Поля скорости тепловыделения и температуры в расчетах участка канала $0.3 < x < 0.4$ м: (а) PaSR, Фролов4; (б) квазиламинарное приближение, Фролов4; (в) PaSR, Smooke25; (г) квазиламинарное приближение, Smooke25

Еще можно заметить, что в расчетах по модели Фролов4 квазиламинарное приближение и модель PaSR дали примерно одинаковый наклон пламени (ср. рис. 4.21,а и рис. 4.21,в), а в расчетах по модели кинетики Smooke25 квазиламинарное приближение дало существенно больший наклон пламени, который близок к расчетам по Фролов4 (ср. рис. 4.21,в и рис. 4.21,г). Это подсказывает, что проблемы в расчетах с использованием модели Smooke25 могут быть связаны с применением модели турбулентного горения PaSR.

3-я возможная причина заключается в том, что в модели PaSR нет процессов диффузии и нет пространственной структуры пламени. Поэтому решение алгебраического уравнений модели PaSR (1.38) может соответствовать пути реакции, отличающемуся от пути реакции в реальном пламени.

Напомним, что в данной задаче реализуется волна горения, распространяющаяся по газу 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 (в том числе – радикалы), и существенно ускоряет протекание реакций. Все три рассмотренные модели кинетики (Фролов4, BFER2, Smooke25) дают очень близкие результаты при описании ламинарного пламени (рис. 4.22,а).

Известно, что изменение пути реакции может существенно изменить характеристики процесса – в частности, изменить величину тепловыделения. Например, рассмотрим горение в замкнутом объеме при $p=const$. В этом случае развитие реакции определяется механизмом самовоспламенения, и путь реакции оказывается совершенно иным, чем в ламинарном пламени. На рис. 4.22, б показаны зависимости температуры от времени в таком процессе при следующих начальных условиях: $T = 1200\text{K}$, $p = 1 \text{ атм.}$, стехиометрическая смесь. Видно, что, несмотря на хорошее согласие моделей в задаче о ламинарном пламени, в задаче о локальном горении при $p=const$ задержка воспламенения, предсказанная скелетным механизмом Smooke25, на три порядка больше, чем по моделям Фролов4 и BFER2.

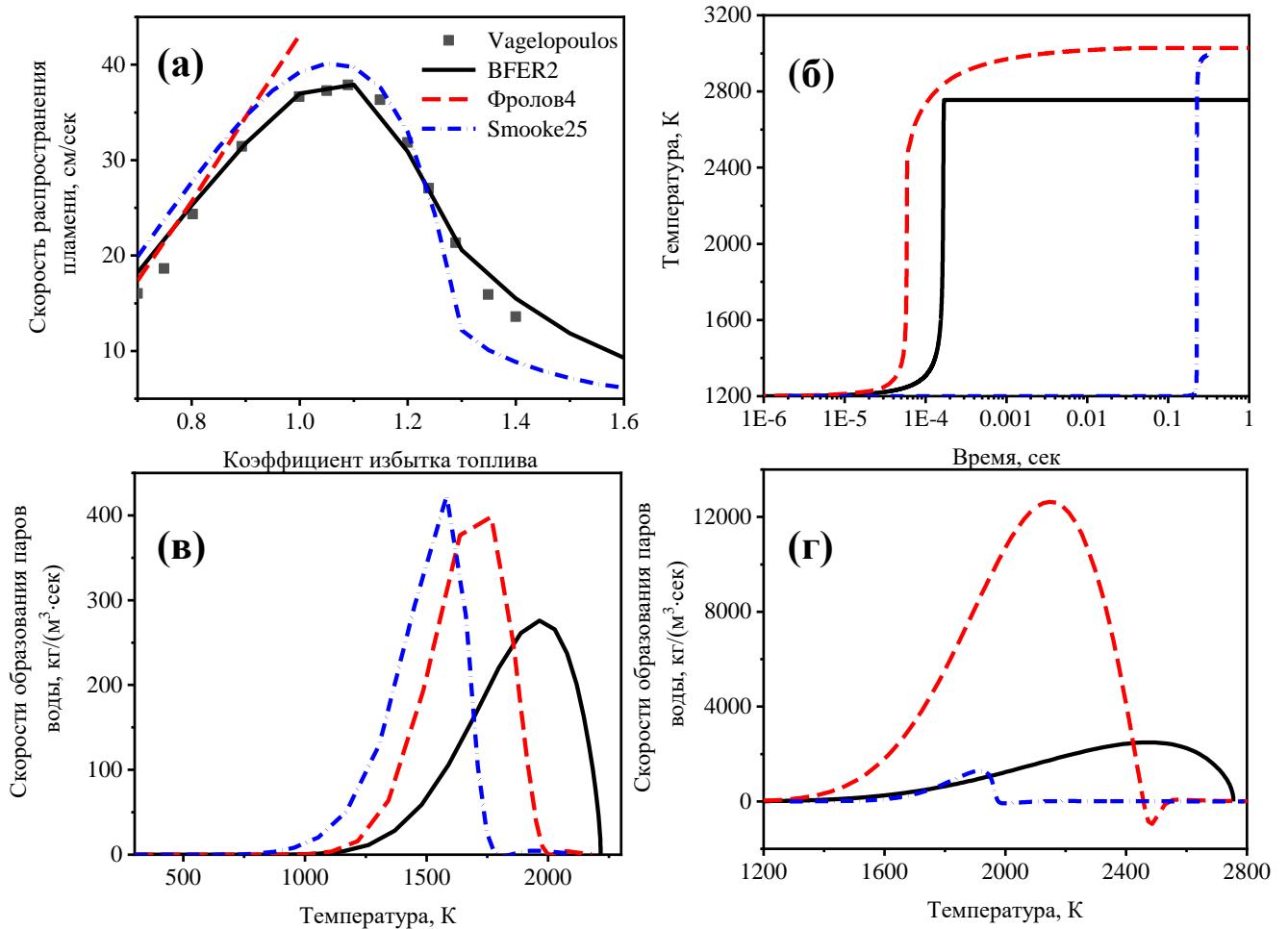


Рисунок 4.22 – Сравнение трех механизмов химической кинетики: (а) скорости распространения ламинарного пламени при разных значениях коэффициента избытка топлива в сравнении с экспериментальными данными [147]; (б) зависимости температуры от времени при горении в реакторе $p=const$; (в) зависимости скорости образования паров воды от температуры, соответствующие график (а) при $\varphi=1.0$; (г) аналогичные зависимости, соответствующие (б).

Сильно упрощенные кинетические схемы Фролов4 и BFER2, которые рассчитаны на корректное описание распространения ламинарного пламени, вообще не описывают реальный путь реакции. На рис. 4.22,в приведены зависимости $\dot{\omega}(T)$ в ламинарном пламени, посчитанные по всем трем механизмам (согласно рис.4.22, а, все три механизма хорошо предсказывают скорость ламинарного пламени). Видно, что модели Фролов4 и BFER2 дают зависимости $\dot{\omega}(T)$, отличающиеся и друг от друга, и от детального механизма Smoke25. Тем не менее, площади под этими тремя кривыми примерно одинаковы¹. Таким образом, Фролов4 и BFER2 неплохо предсказывают значение интеграла $\int_{T_{\text{нач}}}^{T_{\text{кон}}} \dot{\omega}(T) dT$. (Отметим, что $q \cdot \int_{T_{\text{нач}}}^{T_{\text{кон}}} \dot{\omega}(T) dT$ – это полное количество теплоты, которое выделяется в единичном объеме газа, прошедшем через волну горения.) Поэтому, в соответствии с формулой (4.1), эти модели неплохо предсказывают и скорость ламинарного пламени. На этих принципах и основаны упрощенные схемы Фролов4 и BFER2.

На рис. 4.22,г приведены зависимости $\dot{\omega}(T)$ для самовоспламенения в замкнутом объеме ($p=const$). Все три зависимости опять отличаются друг от друга. Однако в этой локальной задаче, где нет диффузии тепла и массы, влияющих на развитие процесса, интеграл тепловыделения для скелетного механизма гораздо меньше, чем для механизмов Фролов4 и BFER2.

Но в модели PaSR состав смеси в “тонких структурах” находится из решения системы алгебраических уравнений (1.38), 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.

¹ Интеграл тепловыделения для кинетики Фролов4 на рис. 4.22,в отличается от интеграла для скелетного механизма примерно на 17%, интеграл для кинетики BFER2 – на 5%. Согласно формуле (2), отличие интеграла тепловыделения на 17% приводит к отличию в скорости ламинарного пламени примерно на 8%, что находится в пределах точности приближенной формулы (2). Следует добавить, что кривые на рис. 4.22,в соответствуют стехиометрической смеси при начальных условиях $T = 300\text{K}$, $p = 1 \text{ atm}$. При меньших значениях коэффициента избытка топлива, как показывает рис. 4.22,а, отличие кинетики Фролов4 от Smoke25 и от эксперимента сокращается.

4.4.3 Расчеты течения по скелетному механизму с учетом диффузии

Если вести расчет без модели PaSR (квазиламинарное приближение, см. (1.37)), то в уравнениях движения газа появится диффузия тепла и массы, и скелетный механизм Smooke25 будет описывать правильный путь реакции и даст значение интеграла тепловыделения, близкое к BFER2 и PaSR. Поэтому в случае квазиламинарного расчета все три рассмотренные кинетические схемы должны дать близкие результаты. И действительно, в случае расчетов в квазиламинарном приближении модели Фролов4 и Smooke25 дали близкие углы наклона турбулентного пламени – сп. поля температуры, представленные на рис. 4.11,а (Фролов4) и на рис. 4.23,а. Но при этом, естественно, в квазиламинарном приближении фронт пламени получается слишком узким. Для правильного предсказания ширины пламени необходим учет ТСИ.

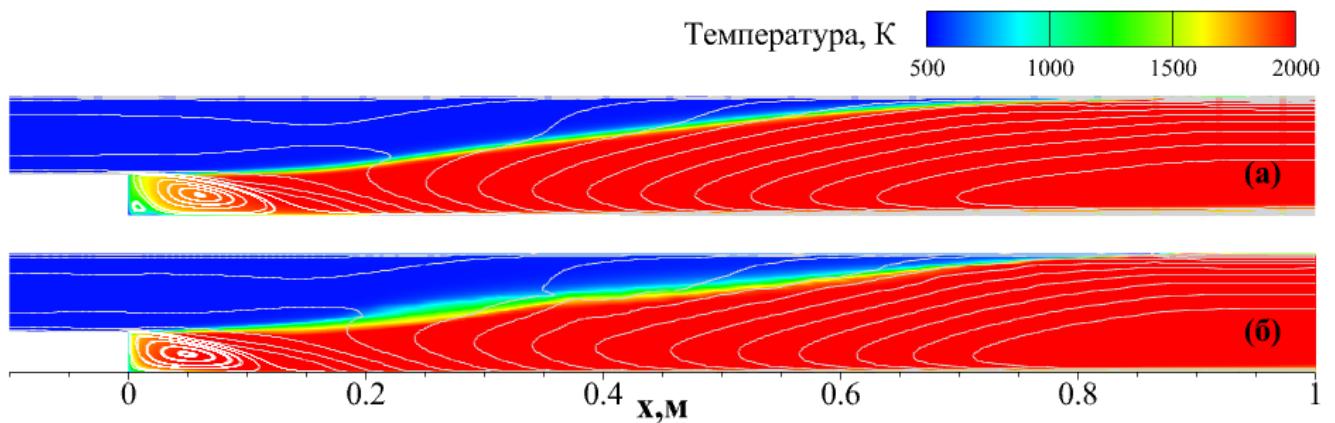


Рисунок 4.23 – Поля температуры, полученные в расчетах с кинетикой Smooke25: (а) Fluent, без учета ТСИ; (б) zFlare, с учетом ТСИ по модели EPaSR. Показаны зоны рециркуляции

Чтобы повысить ширину фронта пламени, нужно применить Smooke25 в сочетании с моделью ТСИ, которая учитывает диффузию тепла и массы. Такой моделью ТСИ является, например, модель EPaSR Сабельникова и Фюрби [127]. В этой модели было 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. На рис. 4.23,б показан результат расчета по модели EPaSR, выполненного по просьбе автора Лабораторией JetSim ЦАГИ (автор расчета –

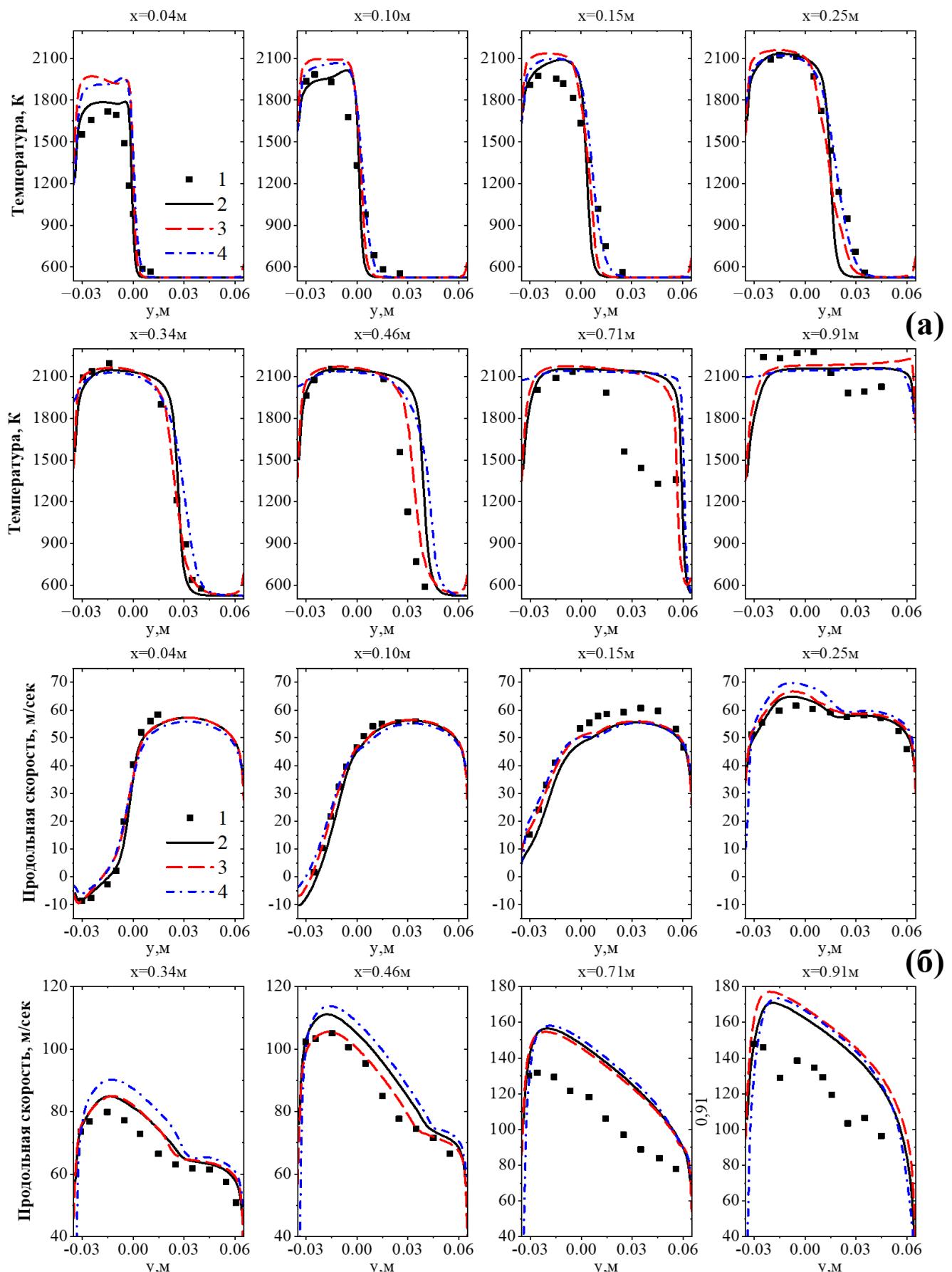


Рисунок 4.24 – Сравнение вертикальных профилей (а) средней температуры и (б) средней продольной скорости, полученные в расчетах: 1 – эксперимент; 2 – Fluent, no TCI-Smooke25; 3 – zFlare, EPaSR-Smooke25; 4 – zFlare, EPaSR-Фролов4

Р.А.Балабанов). Расчет был проведен с помощью программы zFlare с моделью турбулентности BSL $k-\omega$ и моделью кинетики Smooke25.

В расчете по модели EPaSR получены ожидаемый наклон пламени и утолщенный фронт пламени (рис. 4.23,б). Сравнение профилей средней температуры и средней продольной скорости, полученных в расчетах с модели EPaSR и Фролов4 (рис. 4.24) показывает, что модель кинетики Smooke25 дает хорошее качество решения данной задачи и даже ближе к эксперименту при описании фронта пламени в ядре потока ($x=0.46$ м).

Выводы к Главе 4

- 4.1 Автору удалось при помощи коммерческого пакета Fluent достичь качества решения, сопоставимого с наилучшими из результатов, полученных в ЦАГИ с использованием собственной программы zFlare [16] (модель турбулентности $q-\omega$, модель TCI EPaSR). Для этого потребовалось выбрать подходящую модель турбулентности (вместо $q-\omega$ выбрана модель турбулентности BSL $k-\omega$ [104]), модифицировать реализованную в программе Fluent модель TCI – EDC, превратив ее в модель PaSR [52], и настроить эмпирический коэффициент C_τ в этой модели.
- 4.2 При использовании в расчете моделей TCI (в данном случае модели PaSR) переход к более детальной кинетической схеме не гарантирует улучшения результатов численного моделирования. В данной задаче при турбулентном горении на микроскопических масштабах реализуется примерно такой же путь реакции, как и внутри ламинарного пламени. Модель PaSR, в уравнениях которой нет молекулярной диффузии и других пространственных процессов, при использовании детального кинетического механизма пытается выйти на путь самовоспламенения – с другим интегралом тепловыделения. А квазиглобальные схемы, настроенные на описание ламинарного пламени, дают правильный интеграл тепловыделения. Поэтому модель PaSR более правильно описывает течение при использовании квазиглобальных механизмов.

- 4.3 Были получены близко к эксперименту результаты с модели кинетики Smooke25 по квазиламинарной модели и модели TCI – EPaSR. Значит, при учете пространственной диффузия тепла и массы в модели TCI скелетный механизм дает хорошее решение данной задачи, не уступающее глобальным механизмам. В расчетах по модели EPaSR с помощью zFlare скелетный механизм Smooke25 лучше описывает фронт пламени в ядре потока ($x=0.46$ м), чем глобальный механизм Фролов4.
- 4.4 Стоит отметить, что применение URANS является вполне обоснованным, если характерная частота упорядоченных колебательных процессов много меньше характерной частоты крупномасштабных турбулентных пульсаций ε/k . В расчетах автора частота колебаний близка к 40 Гц, а частота крупномасштабной турбулентности в ядре потока около фронта пламени $\varepsilon/k = 70 - 200$ Гц. Следовательно, нет смысла анализировать спектральные характеристики полученных в расчете колебаний. И лишь осредненный по времени URANS-расчет можно рассматривать как первое приближение к реальной осредненной по времени картине течения. Для корректного описания данного класса задач следует рекомендовать использование вихреразрешающих методов.

Заключение

В диссертации на основе численных исследований получено решение задачи о влиянии модели химической кинетики на результаты 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).

По мнению автора, дальнейшие исследования по тематике, разработанной в данной диссертации, должны проводиться уже с учетом вихреразрешающих подходов (гибридные RANS-LES методы). Во-первых, это позволит более адекватно описать физику течения, учтя локальные условия горения, зависящие от нестационарных турбулентных пульсаций. Во-вторых, при моделировании дозвукового горения (рассмотренного в Главе 4) необходимо учитывать нестационарные процессы, связанные с распространением акустических волн.

Приложение А. Механизмы горения метана в воздухе¹

A.1. Глобальный механизм BFER2

Таблица А.1 – Уравнения и коэффициенты реакций механизма горения метана в воздухе с двумя реакциями [68]

№	Реакции	<i>A</i>	<i>n</i>	<i>E_a</i>
1	$\text{CH}_4 + 1.5\text{O}_2 \Rightarrow \text{CO} + 2\text{H}_2\text{O}$	4.90E+09	0.0	35500.
2	$\text{CO} + 0.5\text{O}_2 = \text{CO}_2$	2.00E+08	0.8	12000.

Здесь скорости прямой реакции для реакций № 1 и № 2 записываются как:

$$k_{f,1} = A_1 f_1(\phi) T^{\beta_1} e^{(-E_{a1}/RT)} [\text{CH}_4]^{0.5} [\text{O}_2]^{0.65}, \quad (\text{A.1})$$

$$k_{f,2} = A_2 f_2(\phi) T^{\beta_2} e^{(-E_{a2}/RT)} [\text{CO}]^{1.0} [\text{O}_2]^{0.5}. \quad (\text{A.2})$$

Два пред-экспоненциальных фактора регулируются двумя поправочными функциями f_1 и f_2 в зависимости от локального коэффициента эквивалентности: f_1 позволяет уменьшить ламинарную скорость пламени для богатых пламени, приводя скорость пламени к значениям механизма GRI-3.0 [137], тогда как f_2 калибруется для регулировки толщины зоны после пламени и для быстрого достижения равновесного состояния. f_1 и f_2 задаются следующим образом:

$$f_1(\phi) = \frac{2}{\left[1 + \tanh\left(\frac{\phi_{0,1} - \phi}{\sigma_{0,1}} \right) \right] + B_1 \left[1 + \tanh\left(\frac{\phi - \phi_{1,1}}{\sigma_{1,1}} \right) \right] + C_1 \left[1 + \tanh\left(\frac{\phi - \phi_{2,1}}{\sigma_{2,1}} \right) \right]},$$

$$f_2(\phi) = \frac{1}{2} \left[1 + \tanh\left(\frac{\phi_{0,2} - \phi}{\sigma_{0,2}} \right) \right] + \frac{B_2}{2} \left[1 + \tanh\left(\frac{\phi - \phi_{1,2}}{\sigma_{1,2}} \right) \right] + \frac{C_2}{2} \left[1 + \tanh\left(\frac{\phi - \phi_{2,2}}{\sigma_{2,2}} \right) \right] \times \left[1 + \tanh\left(\frac{\phi_{3,2} - \phi}{\sigma_{3,2}} \right) \right],$$

где все коэффициенты приведены в таблице А.2.

¹ “Константы” скоростей реакций описываются формулой: $k = AT^n \exp(-E_a/RT)$.

Единицы измерения - секунды, моли, кубические сантиметры, калории и градусы Кельвина. Скорость обратной реакции рассчитывается через потенциал Гиббса.

Таблица А.2 – Коэффициенты для функций f_1 и f_2 в механизме BFER2

	$\phi_{0,j}$	$\sigma_{0,j}$	B_j	$\phi_{1,j}$	$\sigma_{1,j}$	C_j	$\phi_{2,j}$	$\sigma_{2,j}$	$\phi_{3,j}$	$\sigma_{3,j}$
$j=1$	1.1	0.09	0.37	1.13	0.03	6.7	1.6	0.22	-	-
$j=2$	0.95	0.08	2.5×10^{-5}	1.3	0.04	0.0087	1.2	0.04	1.2	0.05

A.2. Квазиглобальный механизм Фролов4

Таблица А.3 – Уравнения и коэффициенты реакций механизма горения метана в воздухе с 4 реакциями [5]

№.	Реакции	A	n	E_a
1 ^a	$\text{CH}_4 + 1.5\text{O}_2 \Rightarrow \text{CO} + 2\text{H}_2\text{O}$	7.0E+17	0.0	50000.
2	$2\text{H}_2 + \text{O}_2 \Rightarrow 2\text{H}_2\text{O}$	7.0E+19	0.0	21000.
3	$2\text{CO} + \text{O}_2 \Rightarrow 2\text{CO}_2$	8.5E+18	0.0	21000.
4	$\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \Rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$	1.0E+15	0.0	41500.
4b	$\text{CO}_2 + \text{H}_2 \Rightarrow \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$	3.1E+16	0.0	49100.

^a Параметр реакции (1) равен $\nu_{\text{CH}_4} = \nu_{\text{O}_2} = 1.0$

A.3. Скелетный механизм Smooke25

Таблица А.4 – Уравнения реакций и коэффициенты скелетного механизма горения метана в воздухе с 25 реакциями [139]

№.	Реакции	A	n	E_a
1f	$\text{H} + \text{O}_2 \Rightarrow \text{OH} + \text{O}$	2.000E+14	0.0	16800.
1b	$\text{OH} + \text{O} \Rightarrow \text{H} + \text{O}_2$	1.575E+13	0.0	690.
2f	$\text{O} + \text{H}_2 \Rightarrow \text{OH} + \text{H}$	1.800E+10	1.0	8826.
2b	$\text{OH} + \text{H} \Rightarrow \text{O} + \text{H}_2$	8.000E+09	1.0	6760.
3f	$\text{H}_2 + \text{OH} \Rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	1.170E+09	1.3	3626.
3b	$\text{H}_2\text{O} + \text{H} \Rightarrow \text{H}_2 + \text{OH}$	5.090E+09	1.3	18588.
4f	$\text{OH} + \text{OH} \Rightarrow \text{O} + \text{H}_2\text{O}$	6.000E+08	1.3	0.
4b	$\text{O} + \text{H}_2\text{O} \Rightarrow \text{OH} + \text{OH}$	5.900E+09	1.3	17029.
5	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} \Rightarrow \text{HO}_2 + \text{M}^a$	2.300E+18	-0.8	0.
6	$\text{H} + \text{HO}_2 \Rightarrow \text{OH} + \text{OH}$	2.000E+14	0.0	1004.
7	$\text{H} + \text{HO}_2 \Rightarrow \text{H}_2 + \text{O}_2$	1.575E+13	0.0	700.

8	$\text{OH} + \text{HO}_2 \Rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$	1.800E+10	0.0	1000.
9f	$\text{CO} + \text{OH} \Rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}$	8.000E+09	1.3	-758.
9b	$\text{CO}_2 + \text{H} \Rightarrow \text{CO} + \text{OH}$	1.170E+09	1.3	22337.
10f	$\text{CH}_4 + (\text{M}) \Rightarrow \text{CH}_3 + \text{H} + (\text{M})^b$	5.090E+09	0.0	104000.
10b	$\text{CH}_3 + \text{H} + (\text{M}) \Rightarrow \text{CH}_4 + (\text{M})^b$	5.200E+12	0.0	-1310.
11f	$\text{CH}_4 + \text{H} \Rightarrow \text{CH}_3 + \text{H}_2$	2.200E+04	3.0	8750.
11b	$\text{CH}_3 + \text{H}_2 \Rightarrow \text{CH}_4 + \text{H}$	9.570E+02	3.0	8750.
12f	$\text{CH}_4 + \text{OH} \Rightarrow \text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$	1.600E+06	2.1	2460.
12b	$\text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O} \Rightarrow \text{CH}_4 + \text{OH}$	3.020E+05	2.1	17422.
13	$\text{CH}_3 + \text{O} \Rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H}$	6.800E+13	0.0	0.
14	$\text{CH}_2\text{O} + \text{H} \Rightarrow \text{HCO} + \text{H}_2$	2.500E+13	0.0	3991.
15	$\text{CH}_2\text{O} + \text{OH} \Rightarrow \text{HCO} + \text{H}_2\text{O}$	3.000E+13	0.0	1195.
16	$\text{HCO} + \text{H} \Rightarrow \text{CO} + \text{H}_2$	4.000E+13	0.0	0.
17	$\text{HCO} + \text{M} \Rightarrow \text{CO} + \text{H} + \text{M}$	1.600E+14	0.0	14700.
18	$\text{CH}_3 + \text{O}_2 \Rightarrow \text{CH}_3\text{O} + \text{O}$	7.000E+12	0.0	25652.
19	$\text{CH}_3\text{O} + \text{H} \Rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H}_2$	2.000E+13	0.0	0.
20	$\text{CH}_3\text{O} + \text{M} \Rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H} + \text{M}$	2.400E+13	0.0	28812.
21	$\text{HO}_2 + \text{HO}_2 \Rightarrow \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2$	2.000E+12	0.0	0.
22f	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{M} \Rightarrow \text{OH} + \text{OH} + \text{M}$	1.300E+17	0.0	45500.
22b	$\text{OH} + \text{OH} + \text{M} \Rightarrow \text{H}_2\text{O}_2 + \text{M}$	9.860E+14	0.0	-5070.
23f	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{OH} \Rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2$	1.000E+13	0.0	1800.
23b	$\text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2 \Rightarrow \text{H}_2\text{O}_2 + \text{OH}$	2.860E+13	0.0	32790.
24	$\text{OH} + \text{H} + \text{M} \Rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{M}^a$	2.200E+22	-2.0	0.
25	$\text{H} + \text{H} + \text{M} \Rightarrow \text{H}_2 + \text{M}^a$	1.800E+18	-1.0	0.

^a Коэффициенты влияния третьих частиц следующие: $\text{CH}_4:6.5$, $\text{H}_2\text{O}:6.5$, $\text{CO}_2:1.5$, $\text{H}_2:1.0$, $\text{CO}:0.75$, $\text{O}_2:0.4$, $\text{N}_2:0.4$ для всех других 1.0;

^b Форма Линдермана [94], $k = k_\infty / (1 + k_{fall} / [M])$ где $k_{fall} = .0063 \exp(-18000/RT)$.

Известно, что реакция $\text{CH}_4 + (\text{M}) \Rightarrow \text{CH}_3 + \text{H} + (\text{M})$ зависит от давления. Для учета функциональной зависимости от давления использовались приближение Линдеманна для констант скорости прямой и обратной реакций. В частности, ставки задаются соотношением:

$$k = \frac{k_{\infty}}{1 + k_{fall}/[M]}, \quad (\text{A.3})$$

где k_{∞} – соответствующая постоянная в высокой давлении. k_{fall} – коэффициент падения и $[M]$ – концентрация третьих частиц равна p/RT .

Чтобы включить предпочтительную скорость Варнаца в форму Линдеманна, М.Д. Смук и др. [139] включили поправочный коэффициент α такой, чтобы при одной атмосфере (P_{atm}) скорость Варнатца [154] (k_w) была равна значению, определенному в (A.3) как функция температуры.

$$k_w = \frac{\alpha k_{\infty}}{1 + k_{fall}/[M]}, \quad (\text{A.4})$$

для α можно получить формулу в виде:

$$\alpha = \left(1 + k_{fall} \frac{RT}{p_{atm}} \right) \left(\frac{k_w}{k_{\infty}} \right). \quad (\text{A.5})$$

Включение этого параметра имеет решающее значение для получения хорошего согласия с экспериментами по предварительно смешанному и предварительно не перемешанному пламенам.

Для прямой реакции (10f) используется выражение:

$$k_{W_f} = 2.3 \times 10^{38} (T^{-7}) \exp(-114360/RT), \quad (\text{A.6})$$

а для обратной реакции:

$$k_{W_b} = 1.9 \times 10^{36} (T^{-7}) \exp(-9050/RT). \quad (\text{A.7})$$

Приложение Б. Механизмы горения водорода в воздухе¹

Б.1. Усеченный механизм Jachimowski7

Таблица Б.1 – Уравнения реакций и коэффициенты прямых реакций для механизма горения водорода в воздухе с 7 реакциями [135]

№.	Реакции	A	n	E_a
1	$H_2+O_2 = OH+OH$	1.70E+13	0.	48000.
2	$H+O_2 = OH+O$	2.60E+14	0.	16800.
3	$OH+H_2 = H_2O+H$	2.20E+13	0.	5150.
4	$O+H_2 = OH+H$	1.80E+10	1.	8900.
5	$OH+OH = H_2O+O$	6.30E+13	0.	1090.
6	$H+H+M = H_2+M^a$	6.40E+17	-1.	0.
7	$H+OH+M = H_2O+M^a$	2.20E+22	-2.	0.

^a Коэффициенты влияния третьих частиц: 2.5 для H_2 , 16.0 для H_2O и 1.0 для всех других M.

Б.2. Детальный механизм Jachimowski19

Таблица Б.2 – Уравнения реакций и коэффициенты прямых реакций для механизма горения водорода в воздухе с 19 реакциями* [83]

№.	Реакции	A	n	E
1	$H_2+O_2 = OH+OH$	1.70E+13	0.	48000.
2	$H+O_2 = OH+O$	2.60E+14	0.	16800.
3	$O+H_2 = OH+H$	1.80E+10	1.	8900.
4	$OH+H_2 = H_2O+H$	2.20E+13	0.	5150.
5	$OH+OH = H_2O+O$	6.30E+12	0.	1090.
6	$H+OH+M = H_2O+M$	2.20E+22	-2.	0.
7	$H+H+M = H_2+M$	6.40E+17	-1.	0.
8	$H+O+M = OH+M$	6.00E+16	-0.6	0.
9	$H+O_2+M = HO_2+M$	2.10E+15	0.	-1000.
10	$HO_2+H = H_2+O_2$	1.30E+13	0.	0.

¹ “Константы” скоростей реакций описываются формулой: $k = AT^n \exp(-E_a/RT)$.

Единицы измерения - секунды, моли, кубические сантиметры, калории и градусы Кельвина. Скорость обратной реакции рассчитывается через потенциал Гиббса.

11	$\text{HO}_2 + \text{H} = \text{OH} + \text{OH}$	1.40E+14	0.	1080.
12	$\text{HO}_2 + \text{H} = \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	1.00E+13	0.	1080.
13	$\text{HO}_2 + \text{O} = \text{O}_2 + \text{OH}$	1.50E+13	0.	950.
14	$\text{HO}_2 + \text{OH} = \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$	8.00E+12	0.	0.
15	$\text{HO}_2 + \text{HO}_2 = \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2$	2.00E+12	0.	0.
16	$\text{H} + \text{H}_2\text{O}_2 = \text{H}_2 + \text{HO}_2$	1.40E+12	0.	3600.
17	$\text{O} + \text{H}_2\text{O}_2 = \text{OH} + \text{HO}_2$	1.40E+13	0.	6400.
18	$\text{OH} + \text{H}_2\text{O}_2 = \text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2$	6.10E+12	0.	1430.
19	$\text{M} + \text{H}_2\text{O}_2 = \text{OH} + \text{OH} + \text{M}$	1.20E+17	0.	45500.

* Коэффициенты влияния третьих частиц относительно $\text{N}_2:1.0$ следующие: для реакции (6), $\text{H}_2\text{O}:6.0$; для реакции (7), $\text{H}_2:2.0$ и $\text{H}_2\text{O}:6.0$; для реакции (8), $\text{H}_2\text{O}:5.0$; для реакции (9), $\text{H}_2:2.0$ и $\text{H}_2\text{O}:16.0$; для реакции (19), $\text{H}_2\text{O}:15.0$.

Б.3. Детальный механизм Zettervall22

Таблица Б.3 – Уравнения реакций и коэффициенты прямых реакций для механизма горения водорода в воздухе с 22 реакциями [161]

№.	Реакции	A	n	E_a
1	$\text{H}_2 + \text{O}_2 \Rightarrow \text{H} + \text{HO}_2$	7.40E+05	2.43	53500.
2	$\text{H}_2 + \text{M} \Rightarrow \text{H} + \text{H} + \text{M}^{\text{a}}$	4.57E+19	-1.4	105100.
3	$\text{HO}_2 + \text{H}_2 \Rightarrow \text{H}_2\text{O}_2 + \text{H}$	3.00E+06	2.	21000.
4	$\text{H} + \text{O}_2 \Rightarrow \text{OH} + \text{O}$	2.45E+14	0.	16800.
5	$\text{OH} + \text{O} \Rightarrow \text{H} + \text{O}_2$	1.20E+13	0.	690.
6	$\text{O} + \text{H}_2 \Rightarrow \text{OH} + \text{H}$	1.80E+10	1.	8826.
7	$\text{OH} + \text{H} \Rightarrow \text{O} + \text{H}_2$	8.00E+09	1.	6760.
8	$\text{H}_2 + \text{OH} \Rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	1.17E+09	1.3	3626.
9	$\text{H}_2\text{O} + \text{H} \Rightarrow \text{H}_2 + \text{OH}$	5.09E+09	1.3	18588.
10	$\text{OH} + \text{OH} \Rightarrow \text{O} + \text{H}_2\text{O}$	6.00E+08	1.3	0.
11	$\text{O} + \text{H}_2\text{O} \Rightarrow \text{OH} + \text{OH}$	5.90E+09	1.3	17029.
12	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} \Rightarrow \text{HO}_2 + \text{M}^{\text{b}}$	1.80E+18	-0.8	0.
13	$\text{H} + \text{HO}_2 \Rightarrow \text{OH} + \text{OH}$	1.50E+14	0.	1004.
14	$\text{H} + \text{HO}_2 \Rightarrow \text{H}_2 + \text{O}_2$	2.50E+13	0.	700.
15	$\text{OH} + \text{HO}_2 \Rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$	2.00E+13	0.	1000.
16	$\text{HO}_2 + \text{HO}_2 \Rightarrow \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2$	8.00E+13	0.	0.
17	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{M} \Rightarrow \text{OH} + \text{OH} + \text{M}$	1.30E+17	0.	34500.

18	$\text{OH}+\text{OH}+\text{M} \Rightarrow \text{H}_2\text{O}_2+\text{M}$	9.86E+14	0.	-5070.
19	$\text{H}_2\text{O}_2+\text{OH} \Rightarrow \text{H}_2\text{O}+\text{HO}_2$	1.00E+13	0.	1800.
20	$\text{H}_2\text{O}+\text{HO}_2 \Rightarrow \text{H}_2\text{O}_2+\text{OH}$	2.86E+13	0.	32790.
21	$\text{OH}+\text{H}+\text{M} \Rightarrow \text{H}_2\text{O}+\text{M}$	2.20E+22	-2.	0.
22	$\text{H}+\text{H}+\text{M} \Rightarrow \text{H}_2+\text{M}$	1.80E+18	-1.	0.

^a Коэффициенты влияния третьих частиц: H₂:2.5, H₂O:12.0, N₂:1.0, O₂:1.0;

^b Коэффициенты влияния третьих частиц: H₂:1.0, H₂O:6.5, N₂:0.4, O₂:0.4.

Список использованных источников

1. Аврашков В. Н., Метёлкина Е. С., Мещеряков Д. В. Исследование высокоскоростных ПВРД // Физика горения и взрыва. – 2010. – Т. 46, № 4. – С. 36-44.
2. Бабулин А. А., Босняков С. М., Власенко В. В., Енгулатова М. Ф., Матяш С. В., Михайлов С. В. Опыт валидации и настройки моделей турбулентности применительно к задаче об отрыве пограничного слоя на клине конечной ширины // вычислительной математики и математической физики. – 2016. – Т. 56, № 6. – С. 1034-1048.
3. Баев В. К., Третьяков П. К., Забайкин В. А. Термогазодинамический анализ процесса в камере сгорания с внезапным расширением при сверхзвуковой скорости на входе и существенном проявлении нестационарности процесса // Препринт ИТПМ СО РАН –2000. – Т. 3-2000.
4. Балабанов Р. А., Власенко В. В., Ширяева А. А. Опыт валидации моделей турбулентного горения класса PaSR и планы развития этих моделей применительно к камерам сгорания газотурбинных установок // 10-й Международный симпозиум по неравновесным процессам, плазме, горению и атмосферным явлениям: Сочи, Россия. – 2022. – С. 94-99.
5. Басевич В. Я., Беляев А. А., Фролов С. М. "Глобальные" кинетические механизмы для расчета турбулентных реагирующих течений // Химическая физика. – 1998. – Т. 17, № 9. – С. 117-129.
6. Басевич В. Я., Фролов С. М. Глобальные кинетические механизмы, использующиеся при моделировании многостадийного самовоспламенения углеводородов в реагирующих течениях // Химическая физика. – 2006. – Т. 25, № 6. – С. 54-62.
7. Бахнэ С., Власенко В. В., Волощенко О. В., Зосимов С. А., Иванькин М. А., Курсаков И. А., Матяш С. В., Михайлов С. В., Молев С. С., Морозов А. Н., Николаев А. А., Ноздрачев А. Ю., Сабельников В. А., Сысоев А. В., Трошин А. И., Ширяева А. А. Опыт тестирования и применения программы zFlare для численного моделирования течений с горением в каналах // Труды ЦАГИ. – 2022. – Выпуск 2810. – С. 34-98.
8. Босняков С. М. Практические аспекты решения задач внешней и внутренней аэrodинамики с применением технологии ZEUS в рамках пакета EWT-ЦАГИ // Труды ЦАГИ. – 2015. – Т. 2735.
9. Босняков С. М., Власенко В. В., Зленко Н. А., Лысенков А. В., Матяш С. В., Михайлов С. В., Курсаков И. А., Кажан Е. В., Морозов А. В. Практические аспекты решения задач внешней аэrodинамики двигателей летательных аппаратов в рамках осредненных по времени уравнений Навье-Стокса // Труды ЦАГИ. – 2007. № 2671. – 212 с.
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. О различных способах определения теплового эффекта и полноты сгорания в потоке реагирующего газа // Ученые записки ЦАГИ. – 2014. – Т. XLV, № 1. – С. 1-25.
12. Власенко В. В. Численное исследование нестационарного распространения горения по каналу со сверхзвуковым течением вязкого газа // Химическая физика. – 2011. – Т. 30, № 9. – С. 42-54.
13. Власенко В. В., Волощенко О. В., Фролов С. М., Зангиев А. Э., Семенов И. В., Фролов Ф. С. Влияние теплообмена, турбулентности и кинетики на колебательный процесс в модельной высокоско-ростной камере сгорания с уступом // Горение и взрыв. – 2018. – Т. 11, № 2. – С. 40-50.
14. Власенко В. В., Кажан Е. В., Матяш Е. С., Михайлов С. В., Трошин А. И. Численная реализация неявной схемы и различных моделей турбулентности в расчетном модуле ZEUS. // Труды ЦАГИ. – 2015. В сборнике "Практические аспекты решения задач внешней и внутренней аэродинамики с применением технологии ZEUS в рамках пакета EWT-ЦАГИ". – Выпуск 2735. – С. 5-49.
15. Власенко В. В., Лю В., 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.
16. Власенко В. В., Михайлов С. В., Молев С. С., Трошин А. И., Ширяева А. А. Программа для численного моделирования трехмерных течений с горением в каналах прямоточных воздушно-реактивных двигателей в рамках подходов URANS и DES с применением моделей взаимодействия турбулентности с горением, технологии дробного шага по времени и метода пристеночных функций (zFlare) // Свидетельство № 2019610822 о государственной регистрации программы для ЭВМ. – 2019.
17. Власенко В. В., Ноздрачев А. Ю., Сабельников В. А., Ширяева А. А. Анализ механизмов стабилизации турбулентного горения по данным расчетов с применением модели реактора частичного перемешивания // Горение и взрыв. – 2019. – Т. 12, № 1. – С. 43-57.
18. Власенко В. В., Ширяева А. А. Расчеты течения в модельной высокоскоростной камере сгорания с использование различных моделей химической кинетики // Горение и взрыв. – 2015. – Т. 8, № 1. – С. 116-125.
19. Волощенко О. В., Зосимов С. А., Николаев А. А. Экспериментальное исследование процесса горения жидкого углеводородного топлива в плоском канале при сверхзвуковой скорости потока на входе // Материалы I и II Международных школ-семинаров. В сб. "Модели и методы аэродинамики". – 2002. – 75 с.
20. Димитров В. И. Простая кинетика. Наука. – Сиб. отд-ние, 1982. – 386 с.
21. Лаборатория физического и численного моделирования течений с турбулентностью и горением (JetSim) Центрального аэрогидродинамического института имени профессора Н. Е. Жуковского (ЦАГИ). [Электронный ресурс]. URL: <https://www.tsagi.ru/institute/lab220/> (дата обращения: 29.09.2022).

22. Лебедев А. Б., Токталиев П. Д., Якубовский К. Я. Расчетное исследование турбулентного гомогенного горения смеси метан/воздух методами RANS и LES в малоэмиссионной камере сгорания // Горение и взрыв. – 2017. – Т. 10, № 4. – С. 8-16.
23. Лебедев А. В., Окунь М. В., Баранов А. Е., Деминский М. А., Потапкин Б. В. Систематическая процедура упрощения кинетических механизмов химических процессов // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. – 2010. – Т. 10, № 2. – С. 444-464.
24. Пиотрович Е. В., Серманов В. Н., Острась В. Н., Волощенко О. В., Зосимов С. А., Чевагин А. Ф., Власенко В. В., Мещеряков Е. А. Исследование проблем горения жидкого углеводородного топлива в каналах // Модели и методы аэродинамики. – 2002. – С. 102-102.
25. Сабельников В. А., Трошин А. И., Бахнэ С., Молев С. С., Власенко В. В. Поиск определяющих физических факторов в валидационных расчетах экспериментальной модели ONERA LAPCAT II с учетом шероховатости стенок канала // Горение и взрыв. – 2021. – Т. 14. – С. 55-67.
26. Соломатин Р. С. Численное моделирование процессов высокоскоростного смешения и горения в неоднородных топливо-воздушных смесях; Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН. Москва, 2022. 191 с.
27. Старик А. М., Титова Н. С., Шарипов А. С., Козлов В. Е. О механизме окисления синтер-газа // Физика горения и взрыва. – 2010. – Т. 46, № 5. – С. 3-19.
28. Ширяева А. А. Моделирование высокоскоростных течений со смешанными режимами турбулентного горения на основе трехмерных уравнений Рейнольдса: Дис. канд. физ.-мат. наук; ЦАГИ. Жуковский, – 2018. – 217 с.
29. Ширяева А. А. Применение модели реактора частичного перемешивания для учета взаимодействия турбулентности и горения на основе уравнений Рейнольдса // Ученые записки ЦАГИ. – 2018. – Т. 49, № 8. – С. 27-39.
30. Щетинков Е. С. Физика горения газов. — М.: Наука, 1965. – 740 с.
31. Якубовский К. Я., Токталиев П. Д., Лебедев А. Б. Расчетное исследование неустойчивых режимов гомогенного горения смеси метан/воздух в малоэмиссионной камере сгорания // Горение и взрыв. – 2018. – Т. 11, № 1. – С. 35-46.
32. Adams T., Grant C., Watson H. A simple algorithm to relate measured surface roughness to equivalent sand-grain roughness // International Journal of Mechanical Engineering Mechatronics. – 2012. – Vol. 1, No. 2. – P. 66-71.
33. ANSYS CFD. [Электронный ресурс]. URL: <https://www.ansys.com/products/fluids#tab1-2> (дата обращения: 05.11.2021).
34. Ansys Chemkin-Pro. [Электронный ресурс]. URL: <https://www.ansys.com/products/fluids/ansys-chemkin-pro> (дата обращения: 05.11.2021).
35. Ansys Fluent Theory Guide. Canonsburg, PA 15317: ANSYS, Inc., 2021.
36. Aupoix B. Improved heat transfer predictions on rough surfaces // International Journal of Heat and Fluid Flow. – 2015. – Vol. 56. – P. 160-171.
37. Aupoix B. Roughness corrections for the k- ω shear stress transport model: status and proposals // Journal of Fluids Engineering. – 2015. – Vol. 137, No. 2. – 10 p.

38. Balland S., Vincent-Randonnier A. Numerical Study of the Hydrogen/Air Combustion with CEDRE on LAERTE Dual Mode Ramjet Combustion Experiments // 20th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference: Glasgow, Scotland. AIAA paper. – 2015. No. 2015-3629. – 10 p.
39. Beerer D., McDonell V. Autoignition of hydrogen and air inside a continuous flow reactor with application to lean premixed combustion // Journal of Engineering for Gas Turbines and Power. – 2008. – Vol. 130, No. 5. – 8 p.
40. Belanger J., Hornung H. A combustion driven shock tunnel to complement the free piston shocktunnel T5 at GALCIT // 17th Aerospace Ground Testing Conference: Nashville, USA. AIAA paper. – 1992. No. 92-3968. – 10 p.
41. 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, No. 3. – P. 540-550.
42. Bird R. B., Stewart W., Lightfoot E. Transport Phenomena. – 2nd изд. – New York: John Wiley & Sons, Inc., 2002. – 914 p.
43. Bosnyakov S., Kursakov I., Lysenkov A., Matyash S., Mikhailov S., Vlasenko V., Quest J. Computational tools for supporting the testing of civil aircraft configurations in wind tunnels // Progress in Aerospace Sciences. – 2008. – Vol. 44, No. 2. – P. 67-120.
44. Bowman C. T. A shock-tube investigation of the high-temperature oxidation of methanol // Combustion and Flame. – 1975. – Vol. 25. – P. 343-354.
45. Boyce R., Gerard S., Paull A. The HyShot scramjet flight experiment-flight data and CFD calculations compared // 12th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies. AIAA paper. – 2003. No. 2003-7029. – 8 p.
46. Burke M. P., Chaos M., Ju Y., Dryer F. L., Klippenstein S. J. Comprehensive H₂/O₂ kinetic model for high-pressure combustion // International Journal of Chemical Kinetics. – 2012. – Vol. 44, No. 7. – P. 444-474.
47. Burrows M. C., Kurkov A. P. An Analytical and Experimental Study of Supersonic Combustion of Hydrogen in Vitiated Air Stream // AIAA Journal. – 1973. – Vol. 11, No. 9. – P. 1217-1218.
48. Cambier L., Heib S., Plot S. The Onera elsA CFD software: input from research and feedback from industry // Mechanics & Industry. – 2013. – Vol. 14, No. 3. – P. 159-174.
49. Chapman S., Cowling T. G. The mathematical theory of non-uniform gases: an account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction and diffusion in gases. – Cambridge university press, 1990. – 448 p.
50. Chemical-Kinetic Mechanisms for Combustion Applications: San Diego. [Электронный ресурс]. URL: <http://combustion.ucsd.edu> (дата обращения: 14.04.2023).
51. Cheng T. S., Wehrmeyer J. A., Pitz R. W., Jarrett Jr 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, No. 1. – P. 157-173.
52. Chomiak J., Karlsson A. Flame liftoff in diesel sprays // Proceedings of 26th Symposium (International) on Combustion. – 1996. No. 2. – P. 2557-2564.

53. Cohen L. S., Guile R. N. Investigation of the mixing and combustion of turbulent, compressible free jets // NASA Contract Report. – 1969. No. CR 69-1473. – 103 p.
54. Colebrook C. F., Blench T., Chatley H., Essex E., Finniecome J., Lacey G., Williamson J., Macdonald G. Correspondence. turbulent flow in pipes, with particular reference to the transition region between the smooth and rough pipe laws.(includes plates) // Journal of the Institution of Civil engineers. – 1939. – Vol. 12, No. 8. – P. 393-422.
55. Correa S. Non-equilibrium step-stabilized combustion of hydrogen in supersonic air // 24th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference: Massachusetts, USA. AIAA paper. – 1988. No. 88-3223. – 9 p.
56. Craig R. R. A shock tube study of the ignition delay of hydrogen-air mixtures near the second explosion limit. – Air Force Aero Propulsion Lab Wright-Patterson AFB OH, 1966. – 35 p.
57. Curtiss C. F., Hirschfelder J. O. Integration of stiff equations // Proceedings of the National Academy of Sciences. – 1952. – Vol. 38, No. 3. – P. 235-243.
58. Davidenko D., Gökalp I., Dufour E., Magre P. Numerical simulation of hydrogen supersonic combustion and validation of computational approach // 12th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies: Virginia, USA. AIAA paper. – 2003. No. 2003-7033. – 11 p.
59. 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. AIAA paper. – 2006. No. 2006-7913. – 25 p.
60. Defoort S., Ferrier M., Serre L., Pastre J.-L., Paridaens C., Scherrer D., Ingenito A., Hendrick P., Bruno C. LAPCAT II: conceptual design of a Mach 8 TBCC civil aircraft, enforced by full Navier-Stokes 3D nose-to-tail computation // 17th AIAA International space Planes and hypersonic systems and Technologies Conference. AIAA paper. – 2011. No. 2011-2317. – 18 p.
61. Dixon-Lewis G. Flame Structure and Flame Reaction Kinetics. I. Solution of Conservation Equations and Application to Rich Hydrogen-Oxygen Flames // Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. – 1967. – Vol. 298, No. 1455. – P. 495-513.
62. Eliasson P. A Navier-Stokes solver for unstructured grids //FOI/FFA Report FOIR-0298-SE, FOI; Swedish Defence Research Agency: Stockholm, Sweden. – 2001.
63. Ertesvåg I. S. Analysis of some recently proposed modifications to the Eddy Dissipation Concept (EDC) // Combustion Science and Technology. – 2020. – Vol. 192, No. 6. – P. 1108-1136.
64. Eucken A. On the thermal conductivity, the specific heat and the viscosity of gases // Physikalische Zeitschrift. – 1913. – Vol. 14, No. 4. – P. 324-333.
65. Evans J. S., Schexnayder Jr C. J. Influence of chemical kinetics and unmixedness on burning in supersonic hydrogen flames // AIAA journal. – 1980. – Vol. 18, No. 2. – P. 188-193.
66. Evans J. S., Schexnayder Jr C. J., Beach Jr H. L. Application of a two-dimensional parabolic computer program to prediction of turbulent reacting flows // NASA Technical paper. – 1978. – No. 1169. – 60 p.

67. FlowVision CFD. [Электронный ресурс]. URL: <https://flowvision.ru/ru/> (дата обращения: 01.06.2023).
68. Franzelli B., Riber E., Gicquel L. Y., Poinsot T. Large eddy simulation of combustion instabilities in a lean partially premixed swirled flame // Combustion and Flame. – 2012. – Vol. 159, No. 2. – P. 621-637.
69. Fureby C. Subgrid models, reaction mechanisms, and combustion models in large-eddy simulation of supersonic combustion // AIAA journal. – 2021. – Vol. 59, No. 1. – P. 215-227.
70. Fureby C., Fedina E., Tegnér J. A computational study of supersonic combustion behind a wedge-shaped flameholder // Shock waves. – 2014. – Vol. 24. – P. 41-50.
71. Gardner A. D., Hannemann K., Paull A., Steelant J. Ground testing of the HyShot supersonic combustion flight experiment in HEG // Shock Waves Springer, 2005. P. 329-334.
72. Gerlinger P., Nold K., Aigner M. Investigation of hydrogen-air reaction mechanisms for supersonic combustion // 44th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit. AIAA paper. – 2008. No. 2008-4682. – 18 p.
73. Girimaji S. S. Assumed β -pdf model for turbulent mixing: Validation and extension to multiple scalar mixing // Combustion Science and Technology. – 1991. – Vol. 78, No. 4-6. – P. 177-196.
74. Goodwin D. G., Moffat H. K., Schoegl I., Speth R. L., Weber B. W. Cantera: An Object-oriented Software Toolkit for Chemical Kinetics, Thermodynamics, and Transport Processes, 2.5.1. [Электронный ресурс]. URL: <https://www.cantera.org> (дата обращения: 30.11.2021).
75. Goussis D. On the construction and use of reduced chemical kinetic mechanisms produced on the basis of given algebraic relations // Journal of Computational Physics. – 1996. – Vol. 128, No. 2. – P. 261-273.
76. 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, No. 1-6. – P. 191-217.
77. Grigson C. Drag losses of new ships caused by hull finish // Journal of Ship Research. – 1992. – Vol. 36, No. 02. – P. 182-196.
78. Hirschfelder J. O., Curtiss C. F. The theory of flame propagation // The Journal of Chemical Physics. – 1949. – Vol. 17, No. 11. – P. 1076-1081.
79. Hirschfelder J. O., Curtiss C. F., Bird R. B. Molecular theory of gases and liquids // Molecular theory of gases and liquids. – 1964. – 1283 p.
80. Howarth L. J. Concerning the effect of compressibility on laminar boundary layers and their separation // Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical Physical Sciences. – 1948. – Vol. 194, No. 1036. – P. 16-42.
81. Hu E., Huang Z., He J., Miao H. Experimental and numerical study on laminar burning velocities and flame instabilities of hydrogen-air mixtures at elevated pressures and temperatures // International Journal of Hydrogen Energy. – 2009. – Vol. 34, No. 20. – P. 8741-8755.
82. Jachimowski C. J. An analysis of combustion studies in shock expansion tunnels and reflected shock tunnels // NASA Technical report. – 1992. No. 3224. – 12 p.

83. Jachimowski C. J. An analytical study of the hydrogen-air reaction mechanism with application to scramjet combustion // NASA Technical report. – 1988. No. 2791. – 17 p.
84. Jackson K., Gruber M., Barhorst T. The HIFiRE flight 2 experiment: an overview and status update // 45th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit. AIAA paper. – 2009. No. 2009-5029. – 19 p.
85. Jayatilleke C. L. V. The influence of Prandtl number and surface roughness on the resistance of the laminar sub-layer to momentum and heat transfer. – 1966.
86. Krejci M. C., Mathieu O., Vissotski A. J., Ravi S., Sikes T. G., Petersen E. L., Kérmonès A., Metcalfe W., Curran H. J. Laminar flame speed and ignition delay time data for the kinetic modeling of hydrogen and syngas fuel blends // Journal of Engineering for Gas Turbines Power. – 2013. – Vol. 135, No. 2. – 10 p.
87. Kroll N., Eisfeld B., Bleecke H. FLOWer // Notes on Numerical Fluid Mechanics. – 1999. – Vol. 71. – P. 58-68.
88. Kundu K., Penko P., Yang S. Reduced reaction mechanisms for numerical calculations in combustion of hydrocarbon fuels // 36th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. AIAA paper. – 1998. No. 98-0803. – 16 p.
89. Kwon O. C., Faeth G. M. Flame/stretch interactions of premixed hydrogen-fueled flames: measurements and predictions // Combustion and Flame. – 2001. – Vol. 124, No. 4. – P. 590-610.
90. Larsson A., Zettervall N., Hurtig T., Nilsson E., Ehn A., Petersson P., Alden M., Larfeldt J., Fureby C. Skeletal methane–air reaction mechanism for large eddy simulation of turbulent microwave-assisted combustion // Energy&Fuels. – 2017. – Vol. 31, No. 2. – P. 1904-1926.
91. Latin R. M., Bowersox R. D. Flow properties of a supersonic turbulent boundary layer with wall roughness // AIAA journal. – 2000. – Vol. 38, No. 10. – P. 1804-1821.
92. Le J., Yang S., Liu W., Xing J. Massively parallel simulations of kerosene-fueled model scramjet // AIAA/CIRA 13th International Space Planes and Hypersonics Systems and Technologies Conference. – 2005. No. 2005-3318. – 13 p.
93. Li J., Zhao Z., Kazakov A., Dryer F. L. An updated comprehensive kinetic model of hydrogen combustion // International journal of chemical kinetics. – 2004. – Vol. 36, No. 10. – P. 566-575.
94. Lindemann F. A., Arrhenius S., Langmuir I., Dhar N., Perrin J., Lewis W. M. Discussion on “the radiation theory of chemical action” // Transactions of the Faraday Society. – 1922. – Vol. 17. – P. 598-606.
95. Liou M.-S. A sequel to ausm: Ausm+ // Journal of computational Physics. – 1996. – Vol. 129, No. 2. – P. 364-382.
96. Liu B., He G.-Q., Qin F., An J., Wang S., Shi L. Investigation of influence of detailed chemical kinetics mechanisms for hydrogen on supersonic combustion using large eddy simulation // International Journal of Hydrogen Energy. – 2019. – Vol. 44, No. 10. – P. 5007-5019.
97. Magnussen B. F. The Eddy Dissipation Concept—A Bridge Between Science and Technology // ECCOMAS thematic conference on computational combustion: Lisbon. – 2005. – 24 p.

98. Magnussen B. F. On the structure of turbulence and a generalized eddy dissipation concept for chemical reaction in turbulent flow // 19th AIAA Aerospace Sciences Meeting: Missouri, USA. – 1981. – 7 p.
99. Magnussen P. Investigations into the reacting structures of laminar and premixed turbulent flames by laser-induced fluorescence"; Ph. D. Thesis. – Norwegian University of Science and Technology, 2005.
100. 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. – Vol. 71, No. 2. – P. 147-168.
101. Marinov N. M., Westbrook C., Pitz W. Detailed and global chemical kinetics model for Hydrogen // Transport Phenomena in Combustion. – 1996. – Vol. 1. – P. 118.
102. Marteney P. J. Analytical study of the kinetics of formation of nitrogen oxide in hydrocarbon-air combustion // Combustion Science and Technology. – 1970. – Vol. 1, No. 6. – P. 461-469.
103. McGee H. A. Molecular engineering. – McGraw-Hill, 1991. – 444 p.
104. Menter F. R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications // AIAA Journal. – 1994. – Vol. 32, No. 8. – C. 1598-1605.
105. Menter F. R., Kuntz M., Langtry R. Ten years of industrial experience with the SST turbulence model // Turbulence, heat mass transfer. – 2003. – Vol. 4, No. 1. – P. 625-632.
106. Micka D. J., Driscoll J. F. Combustion characteristics of a dual-mode scramjet combustor with cavity flameholder // Proceedings of the combustion institute. – 2009. – Vol. 32, No. 2. – P. 2397-2404.
107. Mikhail A. Ivankin, Alexey Nikolaev, Vladimir A. Sabelnikov, Anna A. Shiryaeva, Vadim Talyzin, Vlasenko V. V. Complex numerical-experimental investigations of combustion in model high-speed combustor ducts // Acta Astronautica. – 2018. – Vol. 158. – P. 425-437.
108. Moretti G. A new technique for the numerical analysis of nonequilibrium flows // AIAA Journal. – 1965. – Vol. 3, No. 2. – P. 223-229.
109. Mura A., Demoulin F.-X. Lagrangian intermittent modelling of turbulent lifted flames // Combustion Theory and Modelling. – 2007. – Vol. 11, No. 2. – P. 227-257.
110. Nikuradse J. Laws of flows in rough pipes // Technical Memorandum 1292. –1937.
111. NUMECA Fine. [Электронный ресурс]. URL: <https://www.numeca.de/en/products-cfd-solutions/> (дата обращения: 01.06.2023).
112. O'Byrne S., Danehy P., Cutler A. Dual-pump CARS thermometry and species concentration measurements in a supersonic combustor // 42nd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. AIAA paper. – 2004. No. 2004-710. – 16 p.
113. Ó Conaire M., Curran H. J., Simmie J. M., Pitz W. J., Westbrook C. K. A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation // International journal of chemical kinetics. – 2004. – Vol. 36, No. 11. – P. 603-622.
114. Pelletier G., Ferrier M., Vincent-Randonnier A., Mura A. Delayed Detached Eddy Simulations of Rough-Wall Turbulent Reactive Flows in a Supersonic Combustor

- // 23rd AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference: Montreal, Canada. – 2020. No. hal-03224513. – 17 p.
115. Pelletier G., Ferrier M., Vincent-Randonnier A., Sabelnikov V., Mura A. Wall roughness effects on combustion development in confined supersonic flow // Journal of Propulsion and Power. – 2021. – Vol. 37, No. 1. – P. 151-166.
 116. Peters N. Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion // Progress in Energy and Combustion Science. – 1984. – Vol. 10, No. 3. – P. 319-339.
 117. Peters N., Kee R. J. The computation of stretched laminar methane-air diffusion flames using a reduced four-step mechanism // Combustion and flame. – 1987. – Vol. 68. – No. 1. – P. 17-29.
 118. Peters N., Rogg B. Reduced kinetic mechanisms for applications in combustion systems. Springer Science & Business Media, – 1993.
 119. Petrova N. Turbulence-chemistry interaction models for numerical simulation of aeronautical propulsion systems: Ph.D; Ecole polytechnique X, 2015. 316 p.
 120. Pitsch H. FlameMaster, A C++ Computer Program for 0D Combustion and 1D Laminar Flame Calculations. – 1998.
 121. Pope S. B., Cheng W. K. The stochastic flamelet model of turbulent premixed combustion // Symposium (International) on Combustion. – 1989. No. 1. – P. 781-789.
 122. Refloch A., Courbet B., Murrone A., Villedieu P., Laurent C., Gilbank P., Troyes J., Tessé L., Chaineray G., Dargaud J. CEDRE software // Aerospace Lab. – 2011. No. 2. – P. 1-10.
 123. Rogers R. C., Chinitz W. Using a global hydrogen-air combustion model in turbulent reacting flow calculations // AIAA journal. – 1983. – Vol. 21, No. 4. – P. 586-592.
 124. Roudakov A. K. V., Bezgin V., Gouskov O., Lomkov K., Prokhorov A. Researches of hypersonic propulsion in central institute of aviation motors // Fourth Symposium on Aerothermodynamics for Space Vehicles. – 2002. – 81-92 p.
 125. Sabel'nikov V., Voloshenko O., Ostras V., Sermanov V., Walther R. Gasdynamics of hydrogen-fueled scramjet combustors // 29th Joint Propulsion Conference and Exhibit. AIAA paper. – 1993. No. 93-2145. – 12 p.
 126. Sabel'nikov V. A., Penzin V. I. Scramjet research and development in Russia // Scramjet propulsion, Reston, V.A., American Institute of Aeronautics and Astronautics, Inc., 2000,. – 2000. – C. 223-367.
 127. Sabelnikov V., Fureby C. Extended LES-PaSR model for simulation of turbulent combustion // Progress in Propulsion Physics. – 2013. – Vol. 4. – P. 539-568.
 128. Salvador B.-R. Effect of chemical kinetic mechanisms on turbulent combustion: PhD Thesis in Aerospace Engineering; – University of California, Los Angeles, 2020. – 116 p.
 129. Samuels S. et al. Correlation of ignition delay with natural gas and IGCC type fuels // Univ. of California, Irvine. – 2006.
 130. Saxena P., Williams F. Testing a small detailed chemical-kinetic mechanism for the combustion of hydrogen and carbon monoxide // Combustion and Flame. – 2006. – Vol. 145, No. 1-2. – P. 316-323.

131. Schwamborn D., Gerhold T., Heinrich R. The DLR TAU-code: recent applications in research and industry // ECOMMAS CDF. – 2006.
132. Seery D. J., Bowman C. T. An experimental and analytical study of methane oxidation behind shock waves // Combustion and Flame. – 1970. – Vol. 14, No. 1. – P. 37-47.
133. Shiryaeva A., Vlasenko V., Anisimov K. Development and Application of Numerical Technology for simulation of different combustion types in high-speed viscous gas turbulent flows // 44th AIAA Fluid Dynamics Conference. AIAA paper. – 2014. No. 2014-2097. – 15 p.
134. Shiryaeva A. A., Sabelnikov V. A. Critical analysis of classical turbulent combustion experiments on the basis of RANS simulations // AIP Conference Proceedings. – 2018. No. 1. – 030078 p.
135. Singh D. J., Jachimowski C. J. Quasiglobal reaction model for ethylene combustion // AIAA journal. – 1994. – Vol. 32, No. 1. – P. 213-216.
136. Slack M., Grillo A. Investigation of hydrogen-air ignition sensitized by nitric oxide and by nitrogen dioxide. – NASA, 1977. – №. NASA-CR-2896.
137. Smith G. P., Golden D. M., Frenklach M., Moriarty N. W., Eiteneer B., Goldenberg M., Bowman C. T., Hanson R. K., Song S., William C. Gardiner J., Lissianski V. V., Qin Z. GRI-MECH 3.0. [Электронный ресурс]. URL: http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/ (дата обращения: 28.05.2021).
138. Smith G. P., Tao Y., Wang H. Foundational fuel chemistry model version 1.0 (FFCM-1) // epub, accessed July. – 2016. – Vol. 26. – C. 2018.
139. Smooke M. D. Reduced kinetic mechanisms and asymptotic approximations for methane-air flames: a topical volume. Lecture Notes in Physics. Springer-Verlag, 1991. Lecture Notes in Physics. – 251 p.
140. Snyder A. D. et al. Shock tube studies of fuel-air ignition characteristics. – MONSANTO RESEARCH CORP DAYTON OH, 1965.
141. Spalding D. B. The theory of flame phenomena with a chain reaction // Phil. Trans. R. Soc. Lond. A. – 1956. – Vol. 249, No. 957. – P. 1-25.
142. Spalding D. B., Stephenson P. Laminar flame propagation in hydrogen+ bromine mixtures // Proc. R. Soc. Lond. A. – 1971. – Vol. 324, No. 1558. – P. 315-337.
143. Stagni A., Cuoci A., Frassoldati A., Faravelli T., Ranzi E. Lumping and reduction of detailed kinetic schemes: an effective coupling // Industrial and Engineering Chemistry Research. – 2014. – Vol. 53, No. 22. – P. 9004-9016.
144. Sutherland W. LII. The viscosity of gases and molecular force // The London, Edinburgh, Dublin Philosophical Magazine Journal of Science. – 1893. – Vol. 36, No. 223. – P. 507-531.
145. Taylor S. C. Burning velocity and the influence of flame stretch : дис. – University of Leeds, 1991.
146. 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 mass transfer. – 2001. – Vol. 44, No. 14. – P. 2711-2726.
147. Vagelopoulos C. M., Egolfopoulos F. N. Direct experimental determination of laminar flame speeds // Symposium (international) on combustion. – 1998. No. 1. – 513-519 p.

148. Vajda S., Rabitz H., Yetter R. Effects of thermal coupling and diffusion on the mechanism of H₂ oxidation in steady premixed laminar flames // Combustion and Flame. – 1990. – Vol. 82, No. 3-4. – P. 270-297.
149. Vincent-Randonnier A., Moule Y., Ferrier M. Combustion of hydrogen in hot air flows within LAPCAT-II dual mode ramjet combustor at ONERA-LAERTE facility-experimental and numerical investigation // 19th AIAA international space planes and hypersonic systems and technologies conference. AIAA paper. – 2014. No. 2104-2932. – 16 p.
150. 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. – 2019. – Vol. 37, No. 3. – P. 3703-3711.
151. Volino R. J., Devenport W. J., Piomelli U. Questions on the effects of roughness and its analysis in non-equilibrium flows // Journal of Turbulence. – 2022. – Vol. 23, No. 8. – P. 454-466.
152. Waidmann W., Alff F., Brummund U., Böhm M., Clauss W., Oschwald M. Experimental investigation of the combustion process in a supersonic combustion ramjet (scramjet) // DGLR Jahrbuch. – 1994. – P. 629-638.
153. Wang H., You X., Joshi A. V., Davis S. G., Laskin A., Egolfopoulos F., Law C. K. USC mech version II. High-temperature combustion reaction model of H₂/CO/C₁-C₄ compounds. – May 2007.
154. Warnatz J. The mechanism of high temperature combustion of propane and butane // Combustion Science and Technology. – 1983. – Vol. 34, No. 1-6. – P. 177-200.
155. Wazny M., Jasztal M., Szajnar S. CFD-FASTTRAN-software package for numerical analysis of flow around a body by the air stream // Maintenance and Reliability. – 2008. No. 4. – P. 55-62.
156. Westbrook C. K., Dryer F. L. Chemical kinetic modeling of hydrocarbon combustion // Progress in Energy and Combustion Science. – 1984. – Vol. 10, No. 1. – P. 1-57.
157. Westbrook C. K., Dryer F. L. Comprehensive mechanism for methanol oxidation // Combustion Science and Technology. – 1979. – Vol. 20, No. 3-4. – P. 125-140.
158. Westbrook C. K., Mizobuchi Y., Poinsot T. J., Smith P. J., Warnatz J. Computational combustion // Proceedings of the Combustion Institute. – 2005. – Vol. 30, No. 1. – P. 125-157.
159. Wilke C. R. A viscosity equation for gas mixtures // The journal of chemical physics. – 1950. – Vol. 18, No. 4. – P. 517-519.
160. Yu Y. C. Experimental and analytical investigations of longitudinal combustion instability in a continuously variable resonance combustor (CVRC) : дис. – Purdue University, 2009.
161. Zettervall N., Fureby C. A computational study of ramjet, scramjet and dual-mode ramjet combustion in combustor with a cavity flameholder // 2018 AIAA Aerospace Sciences Meeting. AIAA paper. – 2018. No. 2018-1146. – 14 p.