

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГАЗОКАПЕЛЬНЫХ РЕАГИРУЮЩИХ ПОТОКОВ В КАМЕРАХ СГОРАНИЯ ДВИГАТЕЛЬНЫХ УСТАНОВОК

© В.А. Волков<sup>†</sup>, В.Н. Гаврилюк<sup>†</sup>, В.Ю. Гидаспов<sup>‡</sup>, М.М. Макаров<sup>†</sup>, А.Н. Павлов<sup>†</sup>,  
В.Ю. Стрельцов<sup>‡</sup>, А.В. Хохлов<sup>†</sup>

<sup>†</sup>– ООО «Ника Софтвэр», Россия, Москва, Волоколамское ш., д.4,  
тел: +7(095)7855748, e-mail: antonk@nika.sokol.ru

<sup>‡</sup>– Московский авиационный институт, Россия, Москва, Волоколамское ш., д.4.

Предлагаемая статья посвящена вопросам численного моделирования трехмерных турбулентных реагирующих газочапельных потоков, наблюдаемых в камерах сгорания двигательных установок. Построена физико-математическая модель таких течений, которая учитывает особенности подачи топлив в камеры сгорания, включая фазовые превращения компонент и взаимодействие фаз, а также сопряженный теплообмен со стенками камеры. Решаются осредненные по Фавру трехмерные нестационарные уравнения Навье-Стокса, уравнение переноса энергии, трехмерные уравнения теплопроводности для твердого тела, дополненные подмоделями термодинамических и теплофизических свойств, газочапельных химических превращений, межфазного сопротивления и тепломассообмена. Обсуждаются вопросы использования таких моделей в рамках пакета прикладных программ, приводятся примеры решения тестовых и практических задач.

## NUMERICAL SIMULATION OF CHEMICALLY REACTING GAS-DROPLET MIXTURES FOR COMBUSTION CHAMBERS OF PROPULSION ENGINES

*V.A.Volkov<sup>†</sup>, V.N.Gavrioliouk<sup>†</sup>, V.Yu.Gidasпов<sup>‡</sup>, A.V.Khokhlov<sup>†</sup>, M.M.Makarov<sup>†</sup>, A.N.Pavlov<sup>†</sup>, V.Yu.Streltsov<sup>‡</sup>*

<sup>†</sup> – NIKA Software, Russia, Moscow, Volokolamskoye sh 4,  
tel: +7(095)7855748, e-mail: antonk@nika.sokol.ru

<sup>‡</sup> – Moscow Aviation Institute, Russia, Moscow, Volokolamskoye sh 4.

The proposed paper refers to the numerical simulation of 3D turbulent chemically reacting flows of gas/droplet mixtures, those that are typical for the combustion chamber of a propulsion engine. A model of such flows is composed that depicts the specifics of propellant supply to the combustion chamber including such details as phase change of propellants and gas-droplet interaction. It is also possible to solve conjugated heat transfer task at the same time. The used model bases on the solution of Favre averaged Navier-Stokes system, energy conservation equation and 3D thermal conductivity equation for solid media in combination with the models of phase conversion and chemical reactions. Applicability of such model is discussed and the examples of test and practical solutions are given.

### 1. Введение

Прогресс в развитии компьютерной техники является дополнительным стимулом для развития численных методов моделирования сложных физических явлений. Производительность настольных систем, которые сегодня доступны любому инженеру или исследователю, в несколько раз превосходит производительность систем, которые десять лет назад были только в достаточно крупных организациях. Поэтому круг потенциальных потребителей программных продуктов моделирования существенно расширился. В настоящей статье обсуждается методика численного моделирования, основанная на технологиях программного продукта EFD.Lab фирмы NIKA GmbH, который изначально был разработан для решения практических инженерных задач.

Предлагаемая методика моделирования реагирующих газочапельных смесей объединяет в себе методы решения уравнений Навье-Стокса с К-Е моделью турбулентности, расчета погра-

ничного слоя, расчета движения капель топлива в трехмерном турбулентном потоке реагирующего газа с учетом тепломассообмена, расчетов равновесно и неравновесно реагирующего газа, а также универсальную методику расчета термодинамических и теплофизических свойств.

К настоящему времени накоплен значительный опыт математического моделирования процессов горения и самовоспламенения. Разработаны методы построения детальных и, на их основе, упрощенных многостадийных кинетических механизмов [1,2,3], описывающих процесс горения различных топлив. Необходимо лишь отметить, что вопрос о применимости таких механизмов должен быть решен для каждого конкретного приложения. В ряде случаев возможно применение равновесных моделей и их воплощение в методиках «мгновенного сгорания», в соответствии с которыми реакции лимитируются только процессом смешения. Такие модели требуют решения только одного уравнения переноса. Также возможно применение кинетических механизмов, состоящих из одной или нескольких реакций; число уравнений переноса при этом зависит от числа условных реагентов, принятых к рассмотрению.

Ключевым вопросом моделирования реагирующих потоков на сегодня является учет влияния турбулентности на процесс горения. Обзор современных достижений в этой области изложен в [4]. Существуют два подхода к вопросу учета влияния турбулентности (или перемежаемости) в рамках решения осредненных уравнений и моделей турбулентности, основанных на гипотезе Буссинеска. Первый подход связан с гипотезой, выдвинутой Сполдингом, о том, что количество вещества, вступающего в реакцию, ограничено процессом смешения компонент и может быть определено исходя из осредненных параметров турбулентного потока. Наиболее простой реализацией этой идеи является модель «распада вихрей» (eddy break-up) для «равновесной химии» [5] и ее модификация для «неравновесной химии», называемая «концепцией диссипации вихря» (eddy dissipation concept) [6]. Идея последней заключается в установлении связи между осредненными параметрами турбулентности, например  $k$  и  $\epsilon$ , и скоростью химических реакций. Также существуют и другие модификации этой идеи, например [7]. Второй подход относится к применению функций плотности вероятности для моделирования турбулентных свойств реагирующего потока. Утверждается, что флуктуации концентрации компонент и температуры, которые оказывают влияние на характер протекания химических реакций, могут быть описаны искусственно вводимыми функциями распределения. Стоит отметить, что реализации таких подходов, в целом, не обеспечивают выполнение законов сохранения вещества и энергии, поэтому при их использовании лучшее совпадение с экспериментальными данными достигается лишь в ряде конкретных случаев [8,9,10]. Поэтому в данной работе применяется подход, который является развитием концепции диссипации вихря.

## 2. Математическая модель реагирующей газокапельной смеси

**2.1. Модель, используемая для расчета газовой фазы.** Математическая модель для описания стационарных и нестационарных турбулентных реагирующих газокапельных смесей основывается на методе решения системы осредненных по Фавру (сжимаемых) уравнений Навье-Стокса, уравнений К-Е модели турбулентности, уравнения переноса полной энтальпии и необходимого количества уравнений переноса реагирующих компонент. Для расчета стационарных течений используется метод установления по времени. Система уравнений имеет следующий вид:

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = S_m, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} (\tau_{ij} + \tau_{ij}^R) + S_i, \quad i = 1, 2, 3, \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho H}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i H}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ -u_j (\tau_{ij} + \tau_{ij}^R) - \left( \frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \left( \frac{\partial H}{\partial x_i} - \frac{\partial u^2}{2 \partial x_i} \right) \right] = \\ = \frac{\partial p}{\partial t} - \tau_{ij}^R \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \rho \varepsilon + S_H, \quad H = h + |u|^2 / 2, \end{aligned} \quad (3)$$

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t} + \frac{\partial \rho k u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right) + \tau_{ij}^R \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \rho \varepsilon, \quad (4)$$

$$\frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial \rho \varepsilon u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right) + f_1 C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \tau_{ij}^R \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - f_2 C_{\varepsilon 2} \frac{\rho \varepsilon^2}{k}, \quad (5)$$

$$\frac{\partial \rho y_m}{\partial t} + \frac{\partial \rho y_m u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial y_m}{\partial x_i} + S_{y,m}, \quad m = 1, 2, \dots, N_c, \quad (6)$$

где  $\tau_{ij} = \mu s_{ij}$ ,  $\tau_{ij}^R = \mu_t s_{ij} - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij}$ ,  $s_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k}$ ,  $S_m = \sum_m S_{m,m}$  – источник массы при

фазовых превращениях,  $S_f = \rho \mathbf{g} + S_{di}$  – действие массовых сил и источник импульса при взаимодействии фаз,  $S_H = \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}_i + Q + S_{dh}$  – работа сил тяжести, источники тепла и источник, связанный с фазовыми превращениями,  $S_{y,m} = S_{m,m} + W_m$  – источник компонента за счет фазовых и химических превращений,  $C_{\mu}$ ,  $C_{\varepsilon 1}$ ,  $C_{\varepsilon 2}$  – константы модели турбулентности,  $f_{\mu}$ ,  $f_1$ ,  $f_2$  – функции модели ламинарно-турбулентного перехода,  $\mathbf{g}$  – ускорение массовых сил,  $H$  – полная энтальпия единицы массы,  $k$  – кинетическая энергия турбулентности,  $p$  – давление,  $Pr$  – число Прандтля,  $Pr_t$  – турбулентное число Прандтля,  $\sigma_k$ ,  $\sigma_\varepsilon$  – константы модели турбулентности,  $t$  – время,  $u_i$  – компоненты вектора скорости,  $x_i$  – декартовы координаты,  $\varepsilon$  – диссипация кинетической энергии турбулентности,  $\mu$  – коэффициент динамической вязкости,  $\mu_t$  – коэффициент турбулентной вязкости,  $\rho$  – плотность,  $\tau$  – тензор сдвиговых напряжений,  $\tau^R$  – тензор напряжений Рейнольдса,  $y_m$  – массовая доля  $m$ -й компоненты.

Необходимо отметить ряд особенностей системы (1)-(6) и методики её решения.

Первый важный момент связан с тем, что плотность газа не находится из (1)-(6). Для её вычисления используется уравнение состояния  $\rho = F(P, H, y)$ , вид которого определяется подмоделью термодинамики. В программной реализации, расчет термодинамических и теплофизических свойств газа или газокапельной смеси, таких как вязкость, теплоемкость и теплопроводность, коэффициенты диффузии паров и др., выделены в единый легко заменяемый блок.

Второй важный момент – это то, что метод разрабатывался для турбулентных течений. В этом случае единственно приемлемой гипотезой является равенство единице числа Льюиса  $Le = \rho C_p D / \lambda$ . Применяя закон Фика и данную гипотезу, можно преобразовать уравнение сохранения полной энергии к виду (3).

Третьим важным моментом является вычисление источников членов. Не привязываясь к конкретной реализации, аппроксимации таких членов не должны приводить к нарушению законов сохранения вещества, импульса и энергии. К тому же, точность, с которой удовлетворяются эти законы, определяет общую точность расчета, а также влияет на устойчивость и сходимость метода в целом.

Также необходимо отметить, что при построении консервативной модели выгодно записывать уравнение энергии относительно термохимической энтальпии, поскольку тогда все химические и термические процессы превращения энергии, которые по своей сути тесно связаны, не нарушают консервативность системы в целом и не приводят к физически неверным резуль-

татам. С другой стороны, в этом случае проще учитывать и реальные свойства газов или жидкостей. Наконец, в этом случае отсутствуют “химические” источники в уравнении энергии.

Построение расчетной сетки, применяемой для конечно-разностной дискретизации приведенных уравнений, основывается на технологии прямоугольных локально раздробленных адаптивных сеток, которая обеспечивает возможность автоматического построения сетки для областей с очень сложной геометрией [11]. При адаптации сетки к поверхности учитываются направление нормали и изменение объема ячейки за счет её пересечения с поверхностью. Для построения аппроксимационных формул используется конечно-объемный подход, при этом величины относятся к центрам масс ячеек. Такой подход позволяет построить консервативные разностные схемы [11-15]. Для решения связки уравнений неразрывности и импульса применяется процедура расщепления, подобная SIMPLE. Все пространственные операторы и конвективные члены аппроксимируются со вторым порядком точности. Монотонность схемы обеспечивается с помощью нелинейной аппроксимации конвективных членов с ограничением. Для решения задач сопряженного теплообмена используется единая система дискретных уравнений энергии в газе и теле.

Сеточные уравнения, полученные при дискретизации и линеаризации исходных уравнений, решаются методом множественных сеток [16]. Этот метод обеспечивает почти линейный рост количества операций, необходимых для решения системы при увеличении числа ячеек. Процедура построения последовательности сеток и соответствующих систем линейных алгебраических уравнений полностью автоматизирована, не требует дискретизации и использует свойства локально раздробленной прямоугольной сетки. Для созданного набора сеток используется блочная процедура, которая позволяет соотносить набор переменных с любой ячейкой любой сетки и позволяет одинаково обрабатывать сетки в случае исходной геометрии любой сложности. Для сглаживания применяется релаксационный метод типа Гаусса-Зейделя, который стабилизируется в случае необходимости введением локального итерационного параметра.

При решении задач сопряженного теплообмена используется уравнение теплопроводности и условие сопряжения, обеспечивающее равенство тепловых потоков со стороны газа и тела. Если тепловой поток или температура заданы, то для решения задачи теплообмена может быть применено условие Неймана или Дирихле.

Для вычисления напряжений трения и коэффициента теплоотдачи интегрируются уравнения пограничного слоя с граничными условиями на стенке и его внешней границе. В отличие от традиционных пристеночных функций интегрирование уравнения пограничного слоя осуществляется численно в каждой рассматриваемой на поверхности точке. Такой подход снижает требования к густоте расчетной сетки вблизи поверхности и допускает стыковку при больших значениях  $y^+$ .

**2.2. Расчет термодинамических и теплофизических свойств.** Термодинамические свойства реагирующего газа описываются с помощью модели многокомпонентного совершенного газа в рамках допущения о равновесной заселенности энергетических уровней, отвечающих всем внутренним степеням свободы молекул и атомов [17]. В этом случае удельный термодинамический потенциал Гиббса имеет следующий вид:

$$G(p, T, \gamma) = \sum_{i=1}^{N_c} [RT \ln(p\gamma_i / p_0 \sum_{j=1}^{N_c} \gamma_j) + G_i^0(T)], \quad (7)$$

где  $R$  – универсальная газовая постоянная,  $\gamma_i$  – мольно-массовая концентрация  $i$ -й компоненты,  $p_0=101325$  Па – стандартное давление,  $G_i^0(T)$  – стандартные молярные потенциалы Гиббса отдельных компонент, которые связаны с приведенными стандартными потенциалами  $\Phi_i^0(T)$  следующим образом [19]:

$$G_i^0(T) = \Delta_f H_i^0(T_0) - [H_i^0(T_0) - H_i^0(0)] - T\Phi_i^0(T), \quad (8)$$

где  $T_0=298.15\text{K}$  – стандартная температура,  $H_i^0(0)$  – стандартная энтальпия  $H_i^0(T)$  при абсолютном нуле,  $\Delta_f H_i^0(T_0)$  – энтальпия образования  $i$ -го вещества при стандартной температуре.

Аналогично, термодинамические свойства жидкой фазы вещества частиц также описываются молярным потенциалом Гиббса:

$$G_i(p, T) = G_i^0(T) + \mu_i(p - p_0)[\rho_i^0(T)]^{-1}, \quad (9)$$

где  $\rho_i^0(T)$  – плотность жидкой фазы,  $\mu_i$  – молекулярный вес жидкой компоненты.

Для вычислений  $\Phi_i^0(T)$  применяются, предложенные в [17] полиномы, которые аппроксимируют табличные данные по приведенным стандартным потенциалам многих газообразных и конденсированных веществ:

$$\Phi^0(T) = \varphi_0 + \varphi_{\ln} \ln(T) + \varphi_{-2} T^{-2} + \varphi_{-1} T^{-1} + \varphi_1 T + \varphi_2 T^2 + \varphi_3 T^3 + \varphi_4 T^4. \quad (10)$$

В настоящей работе используется двухдиапазонная аппроксимация на интервалах температуры  $(100-1000)\text{K}$  и  $(1000-6000)\text{K}$ , коэффициенты  $\varphi_k$  подбираются таким образом, чтобы в точке стыковки  $T=1000\text{K}$  совпадали значения молярных теплоемкостей  $C_p$ , вычисленные по “левой” и “правой” аппроксимационным формулам. Теплоемкости при  $T \leq 100\text{K}$  и  $T \geq 6000\text{K}$  считаются постоянными и равными своим значениям при  $100\text{K}$  и  $6000\text{K}$  соответственно, выражение для приведенного стандартного потенциала [17] при этом восстанавливается из предположения о постоянстве теплоемкости.

Прочие термодинамические величины выражаются через потенциал Гиббса и его частные производные по давлению и температуре (например, удельный объем:  $v = [\partial G / \partial p]_T = (RT/p) \cdot \sum_{(i)} \gamma_i$ , энтальпия:  $h = G - T(\partial G / \partial T)_p$ , теплоемкость:  $C_p = -T(\partial^2 G / \partial T^2)_p$ ).

Коэффициент вязкости рассчитывается по формуле Уилки, а коэффициент теплопроводности по формуле Массона и Саксена с использованием корреляции Эйкена [18]:

$$\eta = \sum_{(i)} \eta_i (\gamma_i / B_i), \quad B_i = \sum_{(j)} A_{ij} \gamma_j, \quad A_{ij} = [1 + (\eta_i / \eta_j)^{1/2} (\mu_j / \mu_i)^{1/4}]^2 [8(1 + \mu_i / \mu_j)]^{-1/2}, \quad (11)$$

$$\eta_i = \frac{5}{16} \left[ \frac{\mu_i RT}{\pi} \right]^{1/2} \left[ N_A \sigma_i^2 \Omega_i^{(2,2)*} \right]^{-1}, \quad \lambda = \sum_{(i)} \eta_i (1,32c_{pi} + 0,45R / \mu_i) (\gamma_i / B_i). \quad (12)$$

Параметры потенциалов взаимодействия одинаковых молекул  $\sigma_i$ ,  $\varepsilon_i$ ,  $\delta_i$  и аппроксимация Броука для вычисления интегралов столкновений Штокмайера  $\Omega_i^{(2,2)*}$  брались из [18].

Кинетический механизм газофазных реакций полагается многостадийным и состоящим из обратимых реакций:



Здесь  $r$  – номера стадий,  $\bar{v}_i^{(r)}$  – стехиометрические коэффициенты,  $M_i$  – символы химических компонент. Выражения для  $W_i$ , отвечающие механизму (13), имеют вид [19]

$$W_i = \sum_{(r)} (\bar{v}_i^{(r)} - \bar{v}_i^{(r)}) (\bar{W}^{(r)} - \bar{W}^{(r)}), \quad \bar{W}^{(r)} = \bar{K}^{(r)}(T) \exp \left[ \sum_{(i)} \bar{v}_i^{(r)} \ln(\rho \gamma_i) \right]. \quad (14)$$

С целью согласования кинетики типа (13)-(14) с термодинамикой, описываемой потенциалом Гиббса вида (7), используется следующая связь между константами скоростей каждой пары взаимнообратных реакций, образующих обратимые стадии (13):

$$\frac{\bar{K}^{(r)}(T)}{\bar{K}^{(r)}(T)} = \exp \left[ \sum_{(i)} (\bar{v}_i^{(r)} - \bar{v}_i^{(r)}) \left( \frac{G_i^0(T)}{RT} + \frac{\ln RT}{p_0} \right) \right]. \quad (15)$$

Для аппроксимации температурной зависимости констант скоростей прямых реакций используется обобщенная формула Аррениуса [19]:  $K(T) = A \exp(-E/(RT) + n \ln T)$ .

Необходимо отметить, что использование соотношения (15), в котором все  $G_i^0(T)$  заданы в одной и той же системе начал отсчета термодинамических величин, гарантирует неотрицательность вклада в производство энтропии от каждой пары реакций (13). Тем самым исключается возможность существования у рассматриваемой модели химической кинетики каких-либо нефизических свойств.

**2.3. Модель сопротивления и тепломассообмена каплей.** Параметры одиночных капель в газовом потоке находятся из системы уравнений

$$dx_{li}/dt = u_{li}; \quad du_{li}/dt = \dot{u}_{li} = (u_{li} - u_i)/\tau_v; \quad dm_l/dt = \dot{m}_l; \quad de_l/dt = \dot{e}_l. \quad (16)$$

Здесь  $m_l$ ,  $e_l$  – масса и внутренняя энергия капли,  $x_{li}$ ,  $u_{li}$  – координата и скорость капли в  $i$ -м направлении. Для вычисления  $\tau_v$ ,  $\dot{m}_l$ ,  $\dot{e}_l$  используется полуэмпирическая модель квазистационарного испарения одиночной капли, обтекаемой многокомпонентным газом в континуальном режиме [20]. Данная модель была апробирована в [21,22].

**2.4. Кинетическая модель окисления керосина.** Для моделирования процесса сгорания паров керосина использовалась брутто-реакция [21]:  $C_{10}H_{22} + 15.5O_2 \rightleftharpoons 10CO_2' + 11H_2O'$ . За основу для определения константы скорости брутто реакции взяты данные из [19]. Продукты сгорания  $CO_2'$  и  $H_2O'$  являются “псевдовеществами”, имеющими ту же матрицу состава, что и углекислый газ и вода, но несколько отличные термодинамические свойства. Термодинамические свойства продуктов сгорания подбирались из условия максимального совпадения теплоты сгорания, вычисленной по брутто-реакции и определенной в результате расчетов равновесного состава продуктов сгорания для бедных горючих смесей керосина с воздухом с учетом большого числа компонент.

Известно, что в камерах сгорания двигателей концентрации большинства компонент, входящих в состав продуктов сгорания, близки к их равновесным значениям [24]. Это связано с достаточно высоким уровнем температур ( $T > 1300K$ ), исключение составляют продукты окисления азота ( $NO_x$ ) и углерода (CO), концентрации которых в ряде случаев изменяются существенно неравновесно. Поэтому при проведении оценочных расчетов вредных выбросов в настоящей работе считается, что все химические реакции в которых  $NO_x$  и CO не участвуют – протекают равновесно, а те в которых участвуют – неравновесно.

При моделировании процесса образования токсичных компонент поле газодинамических параметров считается известным, т.е. известны распределения компонент вектора скорости, поля плотности, температуры, коэффициента избытка окислителя и т.д. При этом скорости элементарных реакций выражаются через осредненные концентрации и температуру, т.е. влияние на них турбулентных пульсаций не учитывается. Для определения концентраций компонент, входящих в состав продуктов сгорания решается нелинейная система дифференциальных и алгебраических уравнений.

$$\frac{d\delta_i \gamma_i}{dt} = \frac{1}{\rho} W_i(\rho, T, \gamma_1, \dots, \gamma_n), \quad i = 1, \dots, n$$

– уравнения для определения «неравновесных» концентраций,  $\delta_i=0$ – для «равновесных» компонент и 1 – для «неравновесных».

«Равновесные» концентрации в каждой рассчитываемой точке определяются из решения задачи об определении равновесного состава при заданных значениях давления ( $P$ ), энтальпии ( $h$ ), атомарного состава ( $\gamma_k^0$ ) и концентраций «неравновесных» компонент, которая сводится к нахождению максимума выпуклого функционала:

$$F(y, \frac{1}{T}) = \ln(\prod_{i=1}^{N_c} \delta_i x_i) + \sum_{k=1}^{N_A} \frac{\gamma_k^0 - \sum_{i=1}^{N_c} \delta_i A_i^k \gamma_i}{\sum_{i=1}^{N_c} \delta_i \gamma_i} y_k - \frac{h}{RT \sum_{i=1}^{N_c} \delta_i \gamma_i} + \frac{\sum_{i=1}^{N_c} \delta_i \gamma_i G_i^0(T)}{RT \sum_{i=1}^{N_c} \delta_i \gamma_i}, \quad (17)$$

$$\text{где } x_i = \exp\left(\sum_{k=1}^{N_A} A_i^k y_k - \left(\ln \frac{P}{P_0} + \frac{G_i^0(T)}{RT}\right)\right) \text{ и } \gamma_i = x_i \sum_{j=1}^{N_c} \delta_j \gamma_j / \sum_{j=1}^{N_c} \delta_j x_j.$$

Для описания неравновесного образования  $\text{NO}_x$  и  $\text{CO}$  использовался кинетический механизм, включающий 36 обратимых стадий и 32 компоненты, при этом считалось, что “неравновесно” образуются  $\text{NO}$ ,  $\text{NO}_2$ ,  $\text{CO}$ . Набор реакций с участием  $\text{CO}$  был взят из кинетического механизма, предложенного в [23], а кинетика образования окислов азота из [25], [26].

**2.5. Взаимодействие моделей.** Важнейшим вопросом является обеспечение корректной совместной работы используемых моделей. Как уже было сказано ранее, важнейшим критерием правильности стыковки моделей считается то, как выполняются уравнения сохранения. Для того чтобы обеспечить выполнение этих законов, необходимы специальные вычислительные приёмы.

Например, для того чтобы обеспечить правильный учет обмена импульсом, энергией и массой между газовой и капельной фазами, процедура стыковки производится следующим образом. Используя конечно-объёмный подход можно точно проинтегрировать изменение массы, импульса и энергии в каждом элементарном объёме в связи с прохождением капель. Для того чтобы связать количество топлива, подаваемого в виде капель, и количество Лагранжевых частиц, учитываемых в расчете, используется понятие счетной плотности. Легко подсчитать сколько и каких капель пролетает через каждый объём за заданный промежуток времени. Причем в стационарной постановке можно разделить траекторию частицы на отрезки, соответствующие пересечению границ контрольных объемов и проинтегрировать, например, массу, утраченную каплей на таком отрезке. Суммируя массу от всех частиц, прошедших данную ячейку с учетом счетной плотности, можно точно определить, сколько массы перешло в газ. В нестационарном случае необходимо периодически испускать ансамбль капель из стартовых точек, и отслеживать сколько ячеек пройдено за шаг по времени. Такая процедура обеспечивает строгое выполнение законов сохранения при взаимодействии фаз, при условии, конечно, правильного вычисления источниковых членов в уравнениях сохранения (1)-(6).

$$S_{m,m} = -\sum_l n_l \dot{m}_l y_{ml}, \quad S_{di} = -\sum_l (n_l \dot{m}_l u_{l,i} + n_l m_l \dot{u}_{li}), \quad S_{dh} = -\sum_l n_l [\dot{m}_l (e_l + u_l^2 / 2) + m_l (\dot{e}_l + u_{li} \dot{u}_{li})], \quad (18)$$

где  $n_l$  – счетная плотность  $l$ -го класса капель,  $y_{ml}$  – массовая доля  $m$ -й компоненты в продуктах испарения капель.

Равновесная модель не требует дополнительных усилий по обеспечению консервативности, поскольку все продукты могут быть вычислены локально из соотношения компонент. В

случае же кинетически реагирующей системы возможны два подхода. Первый связан с непосредственным совместным решением уравнений переноса, имеющих в правой части члены, связанные с химическими реакциями. Такой подход связан с ограничениями на временной шаг, поскольку нелинейность правой части может быть разрешена либо при малых шагах, либо при большом числе внутренних итераций линеаризованной системы. Этот способ связан со значительными затратами вычислительных ресурсов, и решение трехмерной задачи может быть проблематично. Приемлемой альтернативой упомянутому подходу является применение расщепления по физическим процессам, например [27].

$$\frac{\partial \rho y_m}{\partial t} + \frac{\partial \rho y_m u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial y_m}{\partial x_i} + S_{y,m} + \rho \frac{\hat{y}_m - y_m}{\Delta t}, \quad (19)$$

$$\frac{\partial \rho \hat{y}_m}{\partial t} = W_m, \quad m = 1, 2, \dots, N_c. \quad (20)$$

При этом на одном шаге интегрирования уравнений переноса (19), может быть выполнено несколько шагов интегрирования уравнений химической кинетики (20) т.е. ограничение на шаг ослабляется. Источниковый член в правой части уравнений переноса компонент (19) обеспечивает необходимое изменение концентрации. Необходимо отметить, что такой подход может приводить к чрезмерному размазыванию фронта пламени при больших временных шагах, поэтому требуемый шаг интегрирования можно оценить, сопоставляя характерное время реакции и время уноса массы через границы контрольного объема.

### 3. Примеры расчетов

**3.1 Стабилизация пламени в предварительно перемешанной смеси.** Пример расчета стабилизации пламени за уголковым стабилизатором в предварительно перемешанной смеси бензина с воздухом основывается на экспериментальных данных [28]. В эксперименте измерялись параметры турбулентности и профиля температуры, которые были использованы для проверки работоспособности модели в приложении к случаю предварительно перемешанной смеси.

Экспериментальная установка представляет собой канал прямоугольной формы с размещенным внутри уголковым стабилизатором пламени. Расчет производился в трехмерной постановке, так как канал был достаточно узок, и невозможно было пренебречь влиянием боковых стенок. Необходимо также отметить, что торцы уголкового стабилизатора отстояли от боковых стенок канала как в эксперименте, так и в расчете.

В расчете использовался упрощенный кинетический механизм, состоящий из одной брутто-реакции. При задании начальных и граничных условий использовались данные измерений турбулентности. Входной поток бензино-воздушной смеси имел температуру 412K, скорость 150 м/с при атмосферном давлении и коэффициенте избытка окислителя  $\alpha=1.5$ .

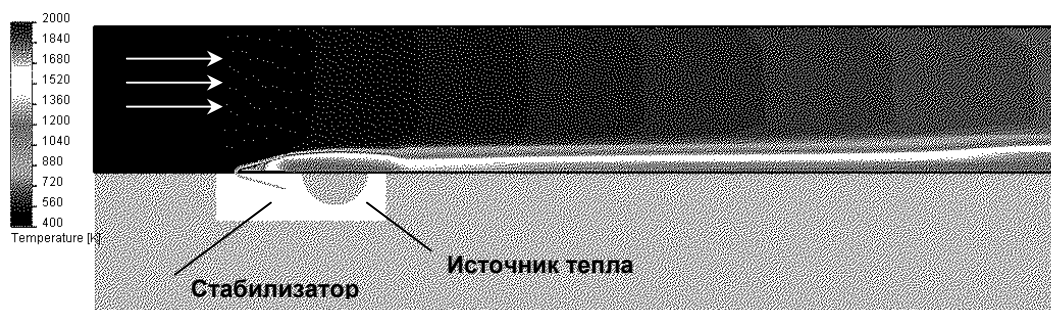


Рис.1.1 Схема расчета, совмещенная с распределением температуры в центральном сечении прямоугольного канала



Схема расчета показана на рис.1.1. Моделирование производилось по нестационарной методике с осреднением поля температуры по времени. Сначала было получено стационарное решение для холодной смеси, а потом, используя его как начальное приближение, расчет продолжался до установления. «Поджог» смеси производился временным включением источника тепла, расположенного в зоне обратных токов.

Сравнение рассчитанного и измеренного профилей температуры (рис.1.2) показывает совпадение размера зоны обратных токов, положения и величины минимума и максимума температуры и даёт основание утверждать, что явление в целом моделируется верно.

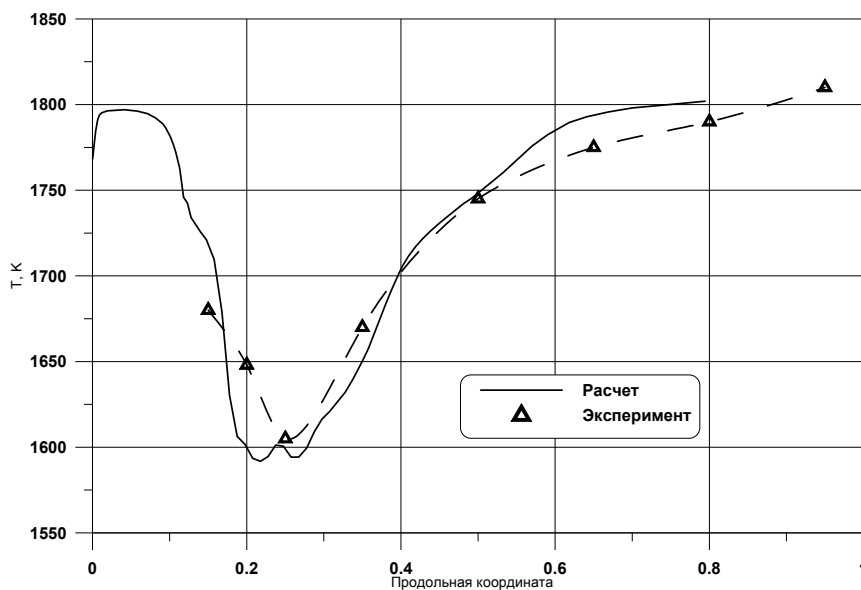


Рис.1.2. Профиль температуры, построенный вдоль линии пересечения плоскостей симметрии прямоугольного канала

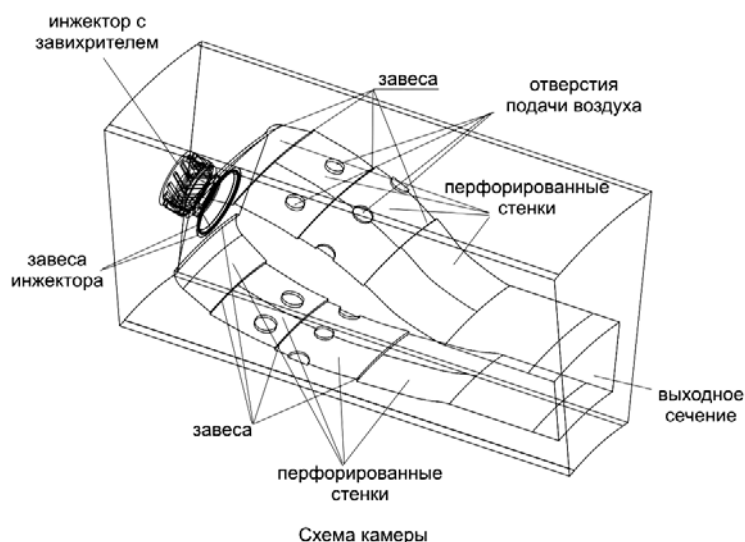


Рис.2.1. Схема сектора камеры сгорания ВРД

**3.2. Расчет камеры сгорания воздушно-реактивного двигателя.** Расчет камеры сгорания ВРД проводился с целью определения тепловой нагрузки на стенки камеры и оценки величины вредных выбросов при работе. По результатам расчетов были выработаны рекомендации

по оптимизации рабочего процесса и архитектуры камеры для снижения вредных выбросов.

Геометрия расчетной области соответствовала геометрии реальной камеры вплоть до мелких деталей (рис.2.1). При постановке граничных условий для газовой и капельной фаз учитывали особенности ввода воздуха и жидкого горючего в конкретную камеру сгорания. В частности, учитывали все щели и отверстия в днище и в боковых стенках камеры, через которые в нее подавался воздух для завес охлаждения и для организации полного сгорания. Параметры течения в завихрителе фронтального устройства определялись в том же расчете. Для камеры в целом задавался расход воздуха и расход топлива. Спектр размеров капель, образующихся при распаде жидкой пелены, как и все остальные характеристики начального участка поля течения полидисперсной капельной фазы, задавали с использованием экспериментальных данных. Поле течения каждой фракции капельной фазы рассчитывали на своей собственной Лагранжевой сетке, состоящей из траекторий капель, относящихся к данной фракции. Сеточные, т.е. рассчитываемые, траектории выбирали так, чтобы они равномерно и с требуемой густотой покрывали всю область распространения данной фракции.

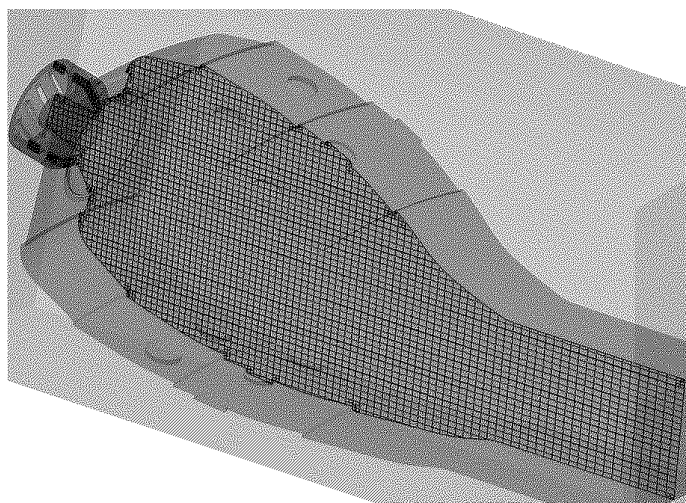


Рис.2.2. След сетки в осевом сечении

В частности, в приведенном ниже примере параметры камеры на входе были следующие: температура воздуха  $T_3=744\text{K}$ , давление  $P_3=21.4 \times 10^5 \text{ Па}$ , расход воздуха  $1.229 \text{ кг/с}$ , расход топлива (керосин)  $0.0248 \text{ кг/с}$ . Размер капель задавался в диапазоне от  $1.2$  до  $68 \text{ мкм}$  для набора из  $20$  фракций. При расчете траекторий капель использовалось  $30$  стартовых точек, расположенных в месте распада жидкой пелены, образуемой инжектором центробежного типа с закрученным центральным потоком. Начальная скорость капель в опорных траекториях варьировалась по величине и направлению относительно оси форсунки. Взаимодействием между фракциями пренебрегали. Также не учитывалось влияние радиационного теплопереноса на нагрев капель. Расчетная сетка (рис.2.2) имела размерность  $209542$  ячеек. Время расчета составило  $62$  часа на компьютере с Athlon XP 1900+.

Серия рисунков 2.3÷2.6 иллюстрирует полученные результаты. Рис.2.3 показывает набор опорных траекторий испаряющихся капель керосина для  $20$  фракций, выпущенных с одной из скоростей. Конец траектории показывает место, где капля полностью испарилась. Соответствующее распределение концентрации газообразного керосина показано на рис.2.5. Рассчитанное в кольцевой камере поле температуры показано на рис.2.4, где, в частности, можно наблюдать проникновение струй чистого воздуха на стадии разбавления, на рис.2.6 приведено рассчитанное тепловое воздействие на стенку камеры. В тех местах, где температура потока высока, видны пики, образующиеся за счет локального торможения в месте излома поверхности.

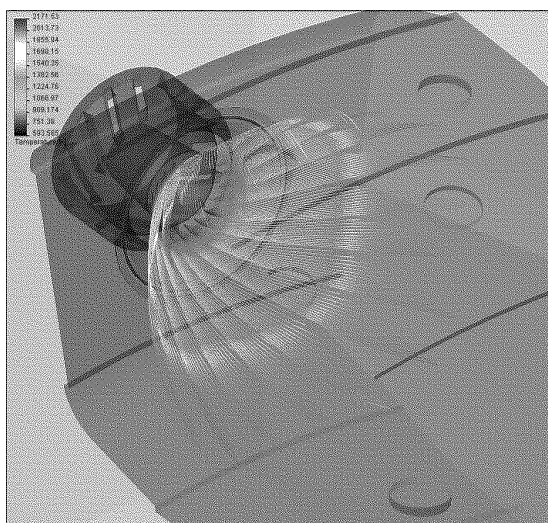


Рис.2.3. След одного из наборов опорных траекторий, использованных в расчете

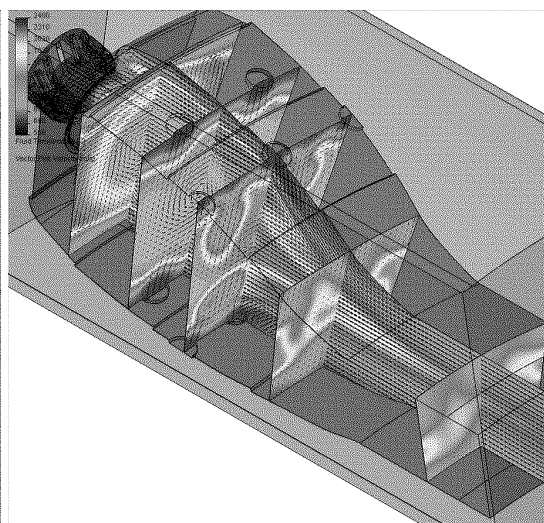


Рис.2.4. Распределение температуры потока в некоторых сечениях

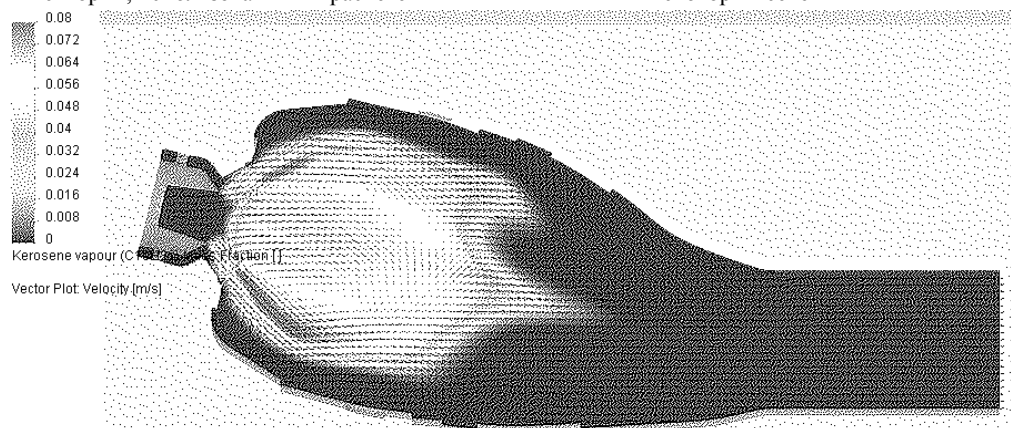


Рис.2.5. Распределение газообразного керосина в центральном сечении

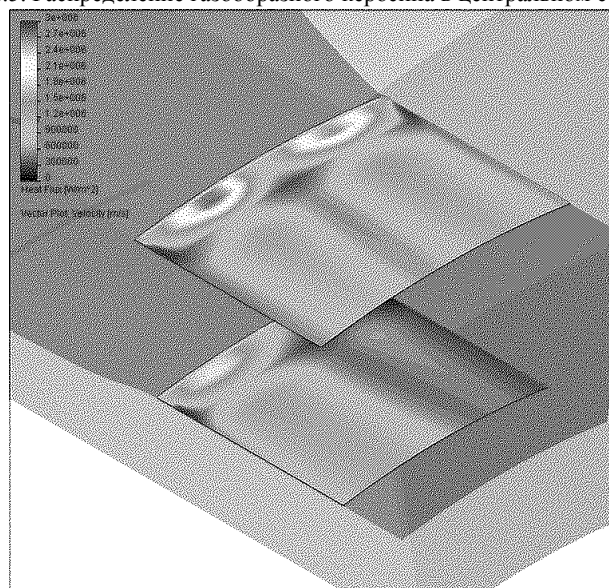


Рис.2.6. Распределение тепловых потоков на стенках выходного канала

Расчет вредных выбросов на выходе из камеры позволяет оптимизировать подачу топлива и воздуха с точки зрения улучшения эмиссионных характеристик при условии сохранения высокой полноты сгорания. Результаты, полученные в данном расчете, хорошо согласуются с эмиссионными характеристиками аналогичных устройств [29]. В частности, рассчитанный индекс эмиссии окислов азота  $I_{\text{NO}_x}$  для разных режимов работы находится в диапазоне от 14 до 30 г/кг<sub>топл.</sub>.

### 3.3. Оценка теплового воздействия на стенки камеры кислородно-водородного ЖРД.

Оптимизация рабочих процессов в камере сгорания ЖРД связана с анализом такой информации как температурное воздействие на стенки камеры, полнота сгорания, потери на трение и неравновесность, потери, связанные с несовершенством геометрии. Для демонстрации возможностей предложенного метода проведен расчет теплового воздействия на стенки камеры сгорания. Специфика задачи заключается в том, что в камеру подаются криогенные компоненты топлива, причем один из компонентов (кислород) подается в виде жидкости при сверхкритических условиях. Компоненты реагируют неравновесно, а процесс смешения и сгорания имеет нестационарный характер. Необходимо учесть течение в пограничном слое и рассчитать коэффициент теплоотдачи.

В соответствии с указанными особенностями, использовалось специальное уравнение состояния, которое правильно аппроксимирует свойства сверхкритического кислорода. Для расчета химических реакций применяется механизм, хорошо апробированный на разных задачах, включая задачи детонации и самовоспламенения. Механизм учитывает восемь компонент ( $\text{O}_2$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{OH}$ ,  $\text{OH}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}_2$ ,  $\text{H}$ ,  $\text{O}$ ) и состоит из 19 обратимых реакций.

В качестве объекта моделирования была выбрана калориметрическая экспериментальная кислород - водородная камера [30]. Камера была условно разделена на сегменты в поперечном направлении, и количество теплоты, поступающее в каждый из сегментов, было измерено. В качестве входных параметров были приняты следующие: давление в камере  $P_k=10$  МПа, соотношение компонент  $K_M=5.9$ , температуры компонент  $T_{\text{O}_2}=101.3$  К и  $T_{\text{H}_2}=106.4$  К, расход топлива 8 кг/с. Расчетная сетка (рис.3.1) имела 161886 ячеек.

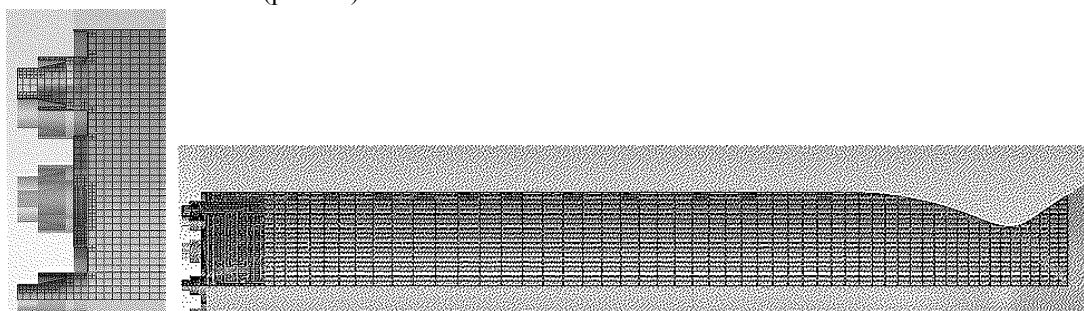


Рис.3.1. След расчетной сетки в осевом сечении

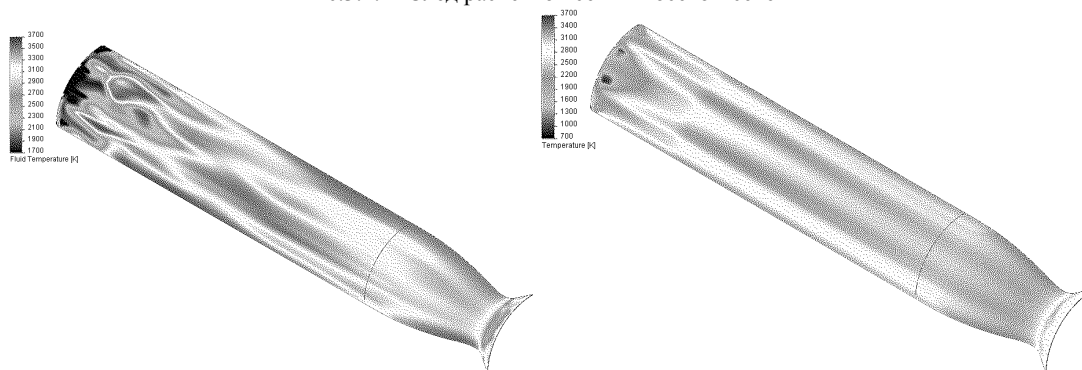


Рис.3.2. Мгновенная (слева) и осредненная (справа) температура стенки камеры

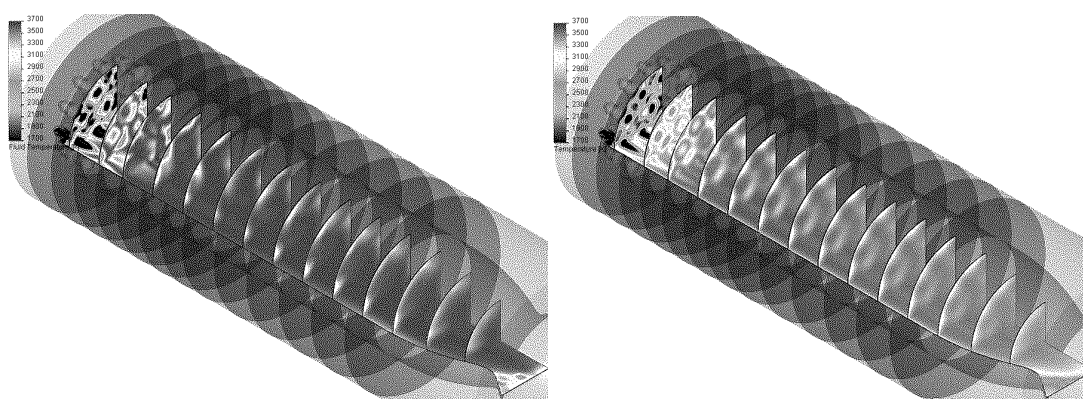


Рис.3.3. Мгновенная (слева) и осредненная (справа) температура в некоторых сечениях

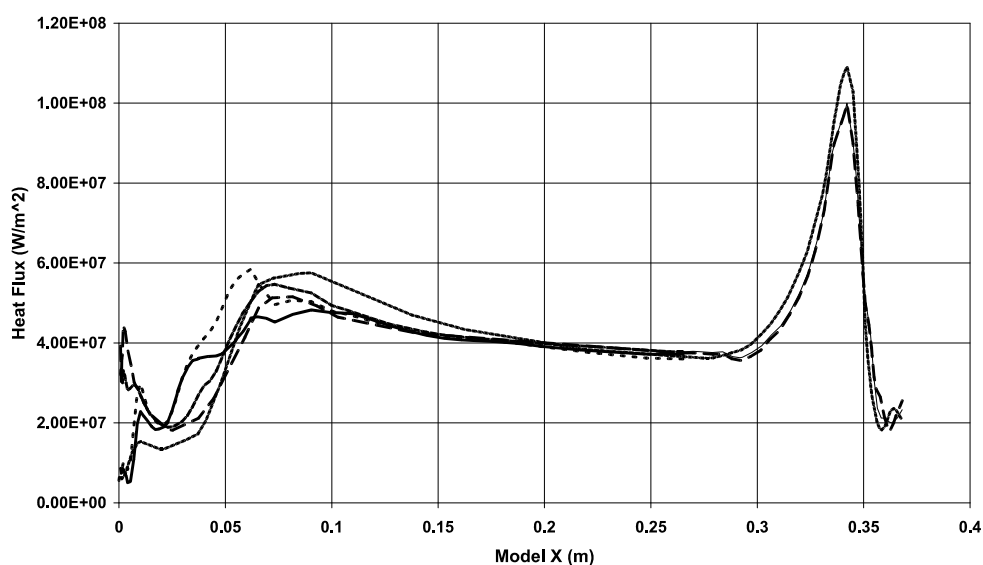


Рис.3.4. Осредненный тепловой поток вдоль ряда образующих

Использовалась методика расчета, которая позволяет учитывать нестационарный характер течения и обеспечивает простое и правильное согласование газодинамического и химического масштабов времени, а также возможность моделировать процесс запуска. Для получения осредненных величин по времени накапливается средняя величина температуры газа и теплового потока. Расчет продолжается до стабилизации осредненных величин. Для ускорения расчета применялись расщепление по физическим процессам и SMP модель для параллельного расчета уравнений химической кинетики.

Рис.3.2 и 3.3 показывают мгновенное и осредненное по времени распределение температуры внутри и на стенках камеры. Использование осредненные величин позволяет определить локальные тепловые потоки, которые в случае их вычисления по мгновенным величинам могут существенно отличаться от реальных. Распределение тепловых потоков вдоль ряда образующих стенки камеры показано на рис.3.4. Можно отметить повышение тепловых потоков в сечении, соответствующем началу активного горения, и пик в критическом сечении сопла. Такое повышение в начальной части камеры не всегда регистрируется в экспериментах. Сравнение тепловой нагрузки, измеренной экспериментально и полученной в расчете для одного из сечений, показано на рис.3.5.

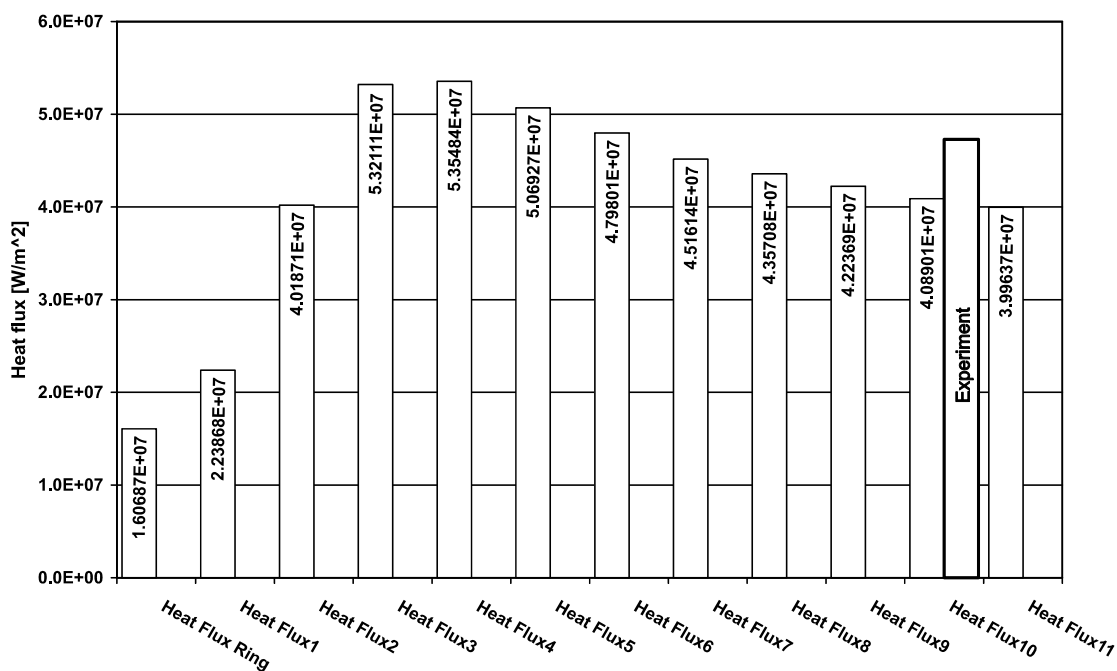


Рис.3.5. Сравнение тепловой нагрузки на сегменты камеры с экспериментальными данными

### Заключение

Предлагаемая методика расчета реагирующей газокапельной смеси удовлетворительно согласуется с экспериментальными данными и может быть использована при проектировании и оптимизации камер сгорания различного назначения. Методика позволяет определять локальные, интегральные и эмиссионные характеристики камер сгорания. При необходимости отдельные компоненты методики могут быть усложнены, например, за счет учета эффектов дробления и коагуляции капель, влияния радиационного теплообмена, введением более сложных механизмов реакций и т.д. для того, чтобы повысить достоверность получаемых результатов.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Smooke M.D.* Reduced kinetic mechanisms and asymptotic approximations for methane-air flames. Lecture notes in physics, Springer, NY, 1991.
2. *Maas U, Pope S.B.* Simplifying chemical kinetics: Intrinsic low-dimensional manifolds in composition space // *Comb. Flame* 88:239, 1992.
3. *Maas U, Pope S.B.* Implementation of simplified chemical kinetics based on intrinsic low-dimensional manifolds.
4. *Warnatz J., Maas U., Dibble R.W.* Combustion. Physical and chemical fundamentals, modelling and assumptions, experiments, pollutant formation. Springer, 2001.
5. *Сполдинг Д.Б.* Горение и массообмен. М. Машиностроение 1985.
6. *Spalding D.B.* Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames // 13<sup>th</sup> Symp. Comb., The Combustion Institute, Pittsburg, 1970. p.649.
7. *Magnussen B.F., Hjertager B.H.* On mathematical models of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion // 16<sup>th</sup> Symp. (Int'l.) on Combustion. The Combustion Institute, 1976.
8. *Pope S.B.* PDF methods for turbulent reactive flows // *Progress in Energy Combustion Science* 11:119, 1986.
9. *Pope S.B.* Computations of Turbulent Combustion: Progress and Challenges // 23<sup>rd</sup> Symp. Comb., The Combustion Institute, Pittsburgh, 1991, p.591.
10. *Peters N.* The Use of Flamelet Models in CFD-Simulations. Institut für Technische Mechanik, RWTH Aachen, ERCOFTAC-Centre, Germany.

11. *Gavriliok V.N., Denisov O.P., Nakonechny V.P., Odintsov E.V., Sergienko A.A., Sobachkin A.A.* Numerical Similation of Working Processes in Rocket Engine Combustion Chamber // IAF-93-S.463, October, 1993, Graz, Austria.
12. *Krulle G., Gavriliouk V., Schley C.-A. and Sobachkin A.* Numerical simulation technology of aerodynamic processes and its applications in rocket engine problems // 45th Congress of the Int. Astronautical Federation, Jerusalem, Israel, October 9-14, 1994, IAF-94-S2.414, p.1-12.
13. *Hagemann G., Schley C.-A., Odintsov E. and Sobatchkin A.* Nozzle flow field analysis with particular regard to 3D-plug-cluster configurations // 32nd AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conf., Lake Buena Vista, FL, July 1-3, 1996, AIAA-96-2954, p.1-16.
14. *Schley C.-A., Deplanque J., Merkle C., Duthoit V. and Gavriliouk V.* Fundamental and technological aspects of combustion chamber modelling // Proc. 3rd Int. Symp. Space Propulsion, Beijing, China, August 11-13, 1997, p.1-15.
15. *Pavlov A.N., Sazhin, S.S., Fedorenko R.P. and Heikal M.R.* A conservative finite difference method and its application for analysis of a transient flow around a square prism // Int. J. Numer. Methods Heat Fluid Flow, v.10, №1, p.6-46, 2000.
16. *Trottenberg U., Oosterlee C.W., Schuller A. with Brandt A., Oswald P. and Stuben K.* Multigrid Academic Press, San Diego, 2001.
17. *Гурвич Л.В. и др.* Термодинамические свойства индивидуальных веществ: Справочное издание в 4-х томах. -М.: Наука, 1982.
18. *Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т.* Свойства газов и жидкостей. -Л.: Химия, 1982, 592с.
19. Физико-химические процессы в газовой динамике. Справочник. Т.2: Физико-химическая кинетика и термодинамика // Под ред. Г.Г.Черного и С.А.Лосева – М.: Научно-издательский центр механики. 2002, 368 с.
20. *Faeth G.M.* Evaporation and combustion of sprays // Prog. Energy Combust. Sci., 1983, v.9, №1/2, p.1-76.
21. *Волков В.А., Мусин В.Р., Пирумов У.Г., Прохоров М.Б., Стрельцов В.Ю.* Численное моделирование процесса нейтрализации окиси углерода дозированным впрыском воды в высокотемпературную смесь продуктов сгорания // Известия РАН, МЖГ, 1993, №6, с.96-106.
22. *Волков В.А., Гидаснов В.Ю., Пирумов У.Г., Стрельцов В.Ю.* Численное моделирование течений реагирующих газок капельных и газовых смесей в экспериментах по воспламенению метанола // ТВТ, 1998, т.36, №3, с.424-434.
23. *Westbrook C.K., Dryer F.L.* A Comprehensive mechanism for methanol oxidation // Comb. Sci. and Tech. 1979, v.20, p.125-140.
24. *Roberts R., Aceto L.D., Kollrak R. et al.* An Analytical Model for Nitric Oxide Formation in a Gas Turbine Combustor // AIAA Journal, 1972, v.10, №6, p.820-826.
25. *Adelman H.G., Browning L.H., Pefley R.K.* Predicted Exhaust Emissions from a Methanol and Jet Fueled Gas Turbine Combustor // AIAA Journal, 1976, v.14, p.793-798.
26. *Sriram V., Steele W.G.* Temperature distribution and nitrous oxide formation in the non-adiabatic combustion of fuel oil // AIAA Paper, 1982, №882, p.1-8.
27. *Shang H.M. et al.* Investigation of Chemical Kinetics Integration Algorithms for Reacting Flows // AIAA Paper 95-0806, 1995.
28. *Солнцев В.П., Голубев В.А.* Исследование процесса сгорания бензино-воздушной смеси в условиях взаимодействия турбулентных следов, образованных стабилизаторами // Известия высших учебных заведений МВО СССР, серия «Авиационная техника», 1959.
29. *Lister D.* ICAO Engine Exhaust Emission Data Bank, update 2003, based on ICAO doc 9646, 1995.
30. *Preclik D et al.* Cryogenic Rocket Calorimeter Chamber Experiments and Heat Transfer Simulations. // AIAA 98-3440.