



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 10 за 2016 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

**Гудич И.Г., Жуков В.Т.,
Мануковский К.В., Новикова Н.Д.,
Рыков Ю.Г., Феодоритова О.Б.**

Численное моделирование
высокоскоростной камеры
сгорания с использованием
пакета OpenFOAM

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Численное моделирование высокоскоростной камеры сгорания с использованием пакета OpenFOAM / И.Г.Гудич [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2016. № 10. 32 с. doi:[10.20948/prepr-2016-10](https://doi.org/10.20948/prepr-2016-10)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2016-10>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В. Келдыша
Российской академии наук**

**И.Г. Гудич, В.Т. Жуков, К.В. Мануковский,
Н.Д. Новикова, Ю.Г. Рыков, О.Б. Феодоритова**

**Численное моделирование
высокоскоростной камеры сгорания
с использованием пакета OpenFOAM**

Москва — 2016

*Гудич И.Г., Жуков В.Т., Мануковский К.В., Новикова Н.Д., Рыков Ю.Г.,
Феодоритова О.Б.*

Численное моделирование высокоскоростной камеры сгорания с использованием пакета OpenFOAM

В работе рассматриваются течения многокомпонентных сред с наличием турбулентных явлений и горения для численного исследования газодинамических процессов в модели прямого воздушного двигателя. Для обеспечения зажигания смеси использовано кратковременное запирающее устройство канала потоком сжатого воздуха, подача которого осуществляется поперек основного потока. Рассмотрены режимы течения многокомпонентной смеси без горения и с горением углеводородного топлива. Произведена верификация расчетов демонстрацией сходимости приближенных решений при измельчении сетки. В расчетах используется многопроцессорный суперкомпьютер К-100, средства для работы с графикой, а также библиотека MPI – для коммуникации между различными вычислительными узлами.

Ключевые слова: математическое моделирование, уравнения Навье-Стокса, вязкая сжимаемая среда, турбулентные течения, процессы горения, прямого воздушного реактивного двигателя, OpenFOAM

Igor Grigorievich Gudich, Victor Timofeevich Zhukov, Konstantin Victorovich Manukovskii, Natalia Dmitrievna Novikova, Yuri Germanovich Rykov, Olga Borisovna Feodoritova

Numerical simulation of high-speed combustion chamber by OpenFOAM

The flows of multicomponent media with turbulence and combustion for the numerical study of gas-dynamic processes in the model ramjet/scramjet engine are considered. To provide ignition of mixture the short time channel lock by compressed air is used. The lock is performed across the main flow. The flow regimes of multicomponent mixture without combustion and with combustion of fossil fuels are considered. The verification of calculations with the help of demonstration of the convergence of approximate solutions by mesh refinement is performed. The calculations use a hybrid supercomputer K-100, tools for working with graphics, as well as the MPI library – for the communication between computing nodes.

Key words: mathematical modeling, Navier-Stokes equations, compressible viscous medium, turbulent flows, combustion process, ramjet/scramjet engine, OpenFOAM

Работа выполнена при поддержке при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 14-21-00025.

Введение

Процессы, происходящие в прямоточных воздушно-реактивных двигателях на гиперзвуковых скоростях полета, представляют собой сложную комбинацию газодинамических явлений, таких как: развитие турбулентных пограничных слоев, их взаимодействие с ударными волнами и формирование псевдоскачка, комплекс физических явлений, связанных с горением топлива и ответственных за формирование и поддержание двигателем тяги, необходимой для устойчивого атмосферного полета высокоскоростного летательного аппарата. Вследствие высоких скоростей, сложной структуры происходящих процессов и вытекающей отсюда сложности постановки и высокой стоимости натурных экспериментов (продувок в аэродинамических трубах) важную роль приобретает возможность проведения предсказательных численных расчетов, включая научно-обоснованный выбор методов, алгоритмов и математических моделей.

Настоящая работа предпринята для численного анализа функционирования модельной камеры сгорания. Модельная задача предложена коллективом ЦАГИ [1]. Задача охватывает большой круг интересных математических и вычислительных вопросов и представляется крайне полезной с точки зрения изучения вычислительных возможностей различных методик, их работоспособности и гибкости. Отметим также, что она представляет не только методический, но и практический интерес, поскольку подготавливает естественный переход к трехмерным постановкам и реальным компоновкам.

Для проведения численных экспериментов мы используем пакет OpenFOAM (версия 2.3.1) [2]. Пакет OpenFOAM представляет собой открытую объектно-ориентированную библиотеку, написанную на языке C++ и предназначенную для численного моделирования задач механики сплошной среды. Библиотека поддерживает механизмы массивного распараллеливания с помощью MPI. Элементы OpenFOAM активно используются в

промышленности, в академической сфере и экспертном сообществе. Описанная в настоящем препринте методология расчетов ранее была верифицирована и частично валидирована авторами настоящего препринта для задач академического плана, см. [3], [4].

Открытость исходных кодов данного пакета предоставляет широкие возможности по изучению и модификации реализованных в нем математических и вычислительных моделей. К их числу относятся методы дискретизации дифференциальных уравнений в частных производных, модели турбулентности, методы решения систем дискретных уравнений и другие.

Дискретизация уравнений в OpenFOAM получается методом контрольного объема, который обеспечивает строгое соблюдение законов сохранения массы, импульса и полной энергии. Для дискретизации расчетная область разбивается на некоторое число непересекающихся контрольных объемов таким образом, что каждый узел сетки содержится в одном контрольном объеме. Дифференциальные уравнения интегрируются по каждому контрольному объему и получаются интегральные соотношения. Для вычисления интегралов используются различные полиномиальные аппроксимации, задаваемые в соответствующих параметрах OpenFOAM.

Дискретизации дифференциальных уравнений по времени основаны на явной и неявных схемах. Первые используют как противопотоковый, так и современный центрально-разностный варианты. Последние реализованы с помощью различных итерационных методов (предобусловленные методы сопряженных и бисопряженных градиентов, алгебраический многосеточный метод).

1. Математическая модель

Расчеты течения газа проводились на основе системы осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье-Стокса с введением дополнительных членов и уравнений для учета эффектов турбулентности и горения (ниже по

повторяющимся индексам предполагается суммирование), описание подобной модели см., например, в [5]:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j) &= 0, \\
\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) &= -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \tau_{ij} \\
\frac{\partial(\rho h_s)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j h_s) + \frac{\partial(\rho K)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j K) - \frac{\partial p}{\partial t} &= \\
&= \frac{\partial}{\partial x_j}(u_i \tau_{ij}) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\chi \frac{\partial}{\partial x_j} h_s \right) + \sum_{m=1}^N \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\chi h_{s,m} \frac{\partial}{\partial x_j} Y_m \right) + S_{hc},
\end{aligned} \tag{1}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho k u_j) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left((\mu + \sigma_k \mu_t) \frac{\partial}{\partial x_j} k \right) + \tilde{P}_k - \rho \beta^* k \omega, \\
\frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \omega u_j) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left((\mu + \sigma_\omega \mu_t) \frac{\partial}{\partial x_j} \omega \right) + \\
&+ \alpha \rho S^2 - \rho \beta \omega^2 + (1 - F_1) 2 \rho \sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \frac{\partial k}{\partial x_j},
\end{aligned} \tag{2}$$

$$\frac{\partial(\rho Y_m)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho Y_m u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left((\mu + \mu_t) \frac{\partial}{\partial x_j} Y_m \right) + \omega_m, \quad m = 1, \dots, N. \tag{3}$$

Система уравнений (1)–(3) дополняется уравнением состояния для смеси идеальных газов

$$p = \left(\sum_{m=1}^N Y_m \frac{R}{M_m} \right) \rho T \tag{4}$$

и калорическим уравнением состояния

$$h = h_s + h_c = \sum_{m=1}^N Y_m \int_{T_{std}}^T C_{p,m} dT + \sum_{m=1}^N Y_m h_{c,m}. \quad (5)$$

В системе уравнений (1)–(3) использованы следующие обозначения:

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

– тензор вязких напряжений, компоненты которого получены осреднением по мелкомасштабным пульсациям; $\vec{u} = \{u_i\}$ – вектор скорости осредненного течения; ρ – плотность; p – давление; T – температура; и Y_m , M_m – массовая концентрация и молекулярный вес m -ой компоненты, N – количество компонент в смеси; K – удельная кинетическая энергия; μ и μ_t – молекулярная и турбулентная вязкости; k и ω – турбулентная кинетическая энергия и удельная скорость диссипации турбулентной энергии соответственно.

В приведенных выше формулах использованы также следующие обозначения:

$$\chi = \frac{C_v}{C_p} \left(\left(1.32 + 1.77 \frac{R}{C_v} \right) \mu + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right)$$

– коэффициент диффузии, в котором $\mu = 1.46 \cdot 10^{-6} T^{1.5} / (T + 122)$, ($[T] = K$) – динамическая вязкость, зависящая от температуры по закону Сазерленда. Заметим, что коэффициент μ не зависит от состава смеси и принят для всех компонент одинаковым. Pr_t – турбулентное число Прандтля ($Pr_t = 1$); R – универсальная газовая постоянная; C_v – удельная теплоемкость при постоянном объеме, множитель перед μ – модифицированная поправка Эйкена

к коэффициенту теплопроводности для смеси многоатомных газов (учитывает поступательные и внутренние степени свободы), далее

$$C_p = \sum_{m=1}^N Y_m C_{p,m}$$

– удельная теплоемкость смеси при постоянном давлении. Для каждой компоненты смеси зависимость удельной теплоемкости от температуры задается многочленом, аппроксимирующим известные термодинамические таблицы (см. например [6]) в нужном диапазоне:

$$C_{p,m} M_m = R(a_{1,m} + a_{2,m}T + a_{3,m}T^2 + a_{4,m}T^3 + a_{5,m}T^4). \quad (6)$$

Наконец, S_{hc} – дополнительный член в уравнении энтальпии для учета изменения энергии, обусловленного протеканием химических реакций. Величина S_{hc} определяется по формуле

$$S_{hc} = -\sum_{m=1}^N \omega_m h_{c,m},$$

где ω_m – скорость производства или расходования m -ой компоненты за счет химических реакций $[\text{кг}/(\text{м}^3 \cdot \text{с})]$, $h_{c,m}$ – энтальпия образования вещества при стандартной температуре $T_{std} = 298.15 \text{ K}$.

Для описания химических реакций используется редуцированный механизм, состоящий из одной квазиглобальной реакции горения условного углеводородного топлива $C_n H_m$ и элементарных обратимых реакций для восьми химических компонент: H , O , OH , H_2O , O_2 , H_2 , CO , CO_2 . Константы скоростей химических реакций подчиняются модифицированному закону Аррениуса $k = AT^n \exp(-E_a/(RT))$ (с зависимостью от температуры множителя перед экспонентой). Исключение составляет глобальная брутто-реакция окисления топлива до CO и H_2O . Она задается в нестандартной форме (множитель перед экспонентой зависит от давления).

В данной работе для описания турбулентности использована SST-модель Ментера [7], включающая два дифференциальных уравнения для транспорта удельной кинетической энергии турбулентности k и удельной скорости диссипации турбулентной энергии ω .

В (2) \tilde{P}_k представляет собой скорость генерации турбулентной кинетической энергии $\tilde{P}_k = \min(\tau_{ij} \partial u_i / \partial x_j, 10\beta^* \rho k \omega)$. Функция переключения F_1 имеет вид

$$F_1 = \tanh \left\{ \left\{ \min \left(\max \left(\frac{\sqrt{k}}{\beta^* y \omega}, \frac{500\mu}{\rho y^2 \omega} \right), \frac{4\sigma_{\omega 2} \rho k}{CD_{k\omega} y^2} \right) \right\}^4 \right\},$$

$$\text{где } CD_{k\omega} = \max \left(2\rho\sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \nabla k \nabla \omega, 10^{-10} \right).$$

Коэффициент турбулентной вязкости имеет вид

$$\mu_t = \rho \frac{a_1 k}{\max(a_1 \omega, |S| F_2)}, \text{ где } F_2 = \tanh \left[\left[\max \left(2 \frac{\sqrt{k}}{\beta^* y \omega}, \frac{500\mu}{\rho y^2 \omega} \right) \right]^2 \right].$$

В вышеприведенных формулах и в (2) S – тензор скоростей деформации:

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

Все константы α , β , σ_k , σ_ω рассчитываются согласно интерполяционной формуле $\psi = F_1 \psi_1 + (1 - F_1) \psi_2$ с подстановкой вместо ψ_1 , ψ_2 значений: $\alpha_1 = 5/9$, $\alpha_2 = 0.44$, $\beta_1 = 3/40$, $\beta_2 = 0.0828$, $\sigma_{k1} = 0.85$, $\sigma_{k2} = 1$, $\sigma_{\omega 1} = 0.5$, $\sigma_{\omega 2} = 0.856$. Входящий в выражения для F_1 , F_2 параметр β^* задан постоянным: $\beta^* = 0.09$.

В данной работе использовались квадратичные аппроксимации для энтальпии входящих в смесь веществ. Такие аппроксимации являются частью

поставленной модельной задачи и предоставлены ЦАГИ [1]. Коэффициенты квадратичной аппроксимации приведены в табл. 1.

Предлагаемая кинетическая модель представлена ниже в табл. 2, в которой указаны параметры всех реакций.

Таблица 1

Аппроксимирующие коэффициенты термодинамической модели

$$h = A + BT + CT^2, [h] = \text{Дж/кг}$$

	A	B	C
H	210.261096×10^6	20.640924×10^3	0
O	15.1645896×10^6	1.33433316×10^3	0
OH	1.79917263×10^6	1.65671676×10^3	0.08415468
H ₂ O	-13.91053833×10^6	1.58386644×10^3	0.28512108
O ₂	-0.25057998×10^6	0.84070944×10^3	0.08289864
H ₂	-3.99755664×10^6	13.42371816×10^3	0.8239622
C _n H _m	-2.5372008×10^6	1.842192×10^3	0.41868
CO	-4.2579756×10^6	1.025766×10^3	0.06929154
CO ₂	-9.2402676×10^6	0.94370472×10^3	0.114969528
N ₂	-0.2900405×10^6	0.96254532×10^3	0.07913052

В табл. 2 использован формат представления, предложенный нашими коллегами из ЦАГИ. Он несколько отличается от традиционного формата $k = AT^n \exp(-E_a/(RT))$, включающего в себя энергию активации, и имеет вид

$$k = AT^n \exp\left(-\frac{E}{\tilde{T}}\right), \quad \tilde{T} = \frac{T[K]}{1000 K}.$$

Индексами “*f*” и “*b*” в табл. 2 обозначены прямая и обратная реакции соответственно.

Таблица 2

Детальная кинетическая модель, используемая в экспериментах

Реакция	A_f	n_f	E_f	A_b	n_b	E_b
$H + O_2 \rightleftharpoons OH + O$	2.24×10^8	0	8.84	1.3×10^7	0	0
$O + H_2 \rightleftharpoons OH + H$	1.74×10^7	0	4.76	7.33×10^7	0	3.67
$OH + H_2 \rightleftharpoons H + H_2O$	2.19×10^7	0	2.59	8.41×10^7	0	10.57
$2OH \rightleftharpoons O + H_2O$	5.75×10^6	0	0.39	5.75×10^7	0	9.47
$H_2 + M \rightleftharpoons 2H + M$	2.4×10^{13}	-2	61.51	7.5×10^3	-1	0
$H_2O + M \rightleftharpoons H + OH + M$	3.4×10^{-1}	0	0	9.26×10^4	-1	0
$OH + M \rightleftharpoons O + H + M$	2.02×10^{12}	-2	52	2.0×10^3	-1	0
$O_2 + M \rightleftharpoons 2O + M$	5.8×10^{10}	-1	60.6	6.0×10^2	0	0
$CO + OH \rightleftharpoons CO_2 + H$	3.2×10^6	0	3.17	2.7×10^{11}	-0.79	15.45
$CO + O + M \rightleftharpoons CO_2 + M$	5.05×10^3	0	0.90	1.8×10^{10}	-0.7	64.92
$CO_2 + O \rightleftharpoons CO + O_2$	0.75×10^9	0.66	29.8	3.1×10^{13}	0	25.68

Дополнительная прямая брутто-реакция имеет вид $C_{7.16}H_{14} + 7.08 O_2 \rightarrow 7.16 CO + 7 H_2O$ и ее скорость описывается эмпирической формулой

$$P = A\tilde{p}^B \rho^2 \left(\frac{Y}{M}\right)_{C_{7.16}H_{14}} \left(\frac{Y}{M}\right)_{O_2} \exp\left(-\frac{E}{\tilde{T}}\right), \quad \tilde{p} = \frac{p [Па]}{1.013 \times 10^5 Па}.$$

Здесь ρ – плотность смеси $[\text{кг}/\text{м}^3]$, параметры A, B, E являются кусочно-постоянными и терпят разрыв при температуре $T = 1075\text{K}$; слева и справа от разрыва они задаются значениями из верхней и нижней строк соответственно:

	A	B	E
$T < 1075\text{K}$	3.127×10^8	-0.794	13.5961
$T \geq 1075\text{K}$	3.81×10^9	-0.0804	22.6602

Скорости прямых и обратных реакций представляются в виде

$$P = \rho^\sigma \kappa_{f/b}(T) \prod_{i=1}^{\sigma} \left(\frac{Y}{M} \right)_i,$$

где константа реакции вычисляется по трехпараметрической формуле Аррениуса $\kappa(T) = A\tilde{T}^n \exp(-E/\tilde{T})$; $\sigma = 2$ для бимолекулярных реакций и $\sigma = 3$ для тримолекулярных реакций.

Использованная кинетическая схема является составной частью поставленной модельной задачи.

2. Вычислительная модель

Мы не будем описывать детально вычислительные аспекты и концепции, на которых базируется программный пакет OpenFOAM. Отошлем заинтересованного читателя к двум большим работам, опубликованным в 2014–2015 годах, [8], [9]. Здесь ограничимся контурным описанием выбранных нами вариантов.

Открытая библиотека OpenFOAM содержит большое количество готовых решателей для описания специальных вариантов, например, стационарных и нестационарных течений, сжимаемого и несжимаемого газов, реагирующего газа, с возможным учетом турбулентности и т.д. Дополнительно существует возможность выбрать модели турбулентности, горения, термодинамики. Главное достоинство библиотеки – возможность использовать перегруженные

операторы для самостоятельной реализации сложных физических моделей. Решатели OpenFOAM разрабатываются исследователями достаточно большого сообщества вычислителей-программистов.

OpenFOAM основывается на конечно-объемных аппроксимациях и предоставляет выбор значительного числа дискретизационных схем. Основная масса решателей базируется на алгоритме сопряжения скорости и давления SIMPLE. Существует возможность декомпозиции расчетной области на основе нескольких известных программных комплексов (METIS, Scotch и другие) и параллельного счета задачи. Для решения линейных систем уравнений предоставлены некоторые варианты метода подпространств Крылова: предобусловленный метод сопряженных градиентов для симметричных матриц и предобусловленный метод бисопряженных градиентов для несимметричных матриц.

Мы в своих экспериментах использовали два решателя: сначала в модели идеального газа рассчитывали газодинамическое течение в канале (решатель sonicFOAM), которое затем использовали в качестве начального приближения для расчета многокомпонентной реагирующей среды (решатель reactingFOAM).

В основе обоих решателей лежит один и тот же алгоритм PIMPLE, который относится к алгоритмам SIMPLE типа и использует некоторые дополнительные корректирующие процедуры для обеспечения сходимости на каждом временном шаге. Для аппроксимации конвективных членов нами использовались схемы второго порядка точности с лимитерами, например, для аппроксимации «турбулентных» конвективных членов применялась NVD схема Gamma [10] с параметром $\beta = 0.5$:

```
div(phi,omega) Gauss Gamma 1.0;
```

```
div(phi,k) Gauss Gamma 1.0.
```

Аппроксимация диффузионных членов базируется на линейной интерполяции, что соответствует второму порядку точности. Мы не будем подробно останавливаться на всех деталях вычислительного характера,

отложив описание для специальной публикации. Здесь же отметим только, что для расчета поставленной задачи нам пришлось внести некоторые изменения и дополнения в оригинальный код, часть которых сделана на макроуровне языка OpenFOAM, другая часть на уровне языка C++.

Приведем в качестве примера модификацию, внесенную в решатель reactingFOAM. В его оригинальном варианте в уравнении для энтальпии реакций h_s (см. (1)) отсутствовали члены $\nabla \cdot (\vec{u} \cdot \boldsymbol{\tau})$ и $\sum_{m=1}^N \nabla \cdot (\chi h_{s,m} \nabla Y_m)$. Для исправления этой ситуации в файл EEqn.H были внесены изменения, выделенные ниже жирным шрифтом

```

{
  volScalarField& he = thermo.he();

  fvScalarMatrix EEqn
  (
    fvm::ddt(rho, he) + mvConvection->fvmDiv(phi, he)
    + fvc::ddt(rho, K) + fvc::div(phi, K)
    + (
      he.name() == "e"
      ? fvc::div
      (
        fvc::absolute(phi/fvc::interpolate(rho), U),
        p,
        "div(phi,v,p)"
      )
      : -dpdt
    )
    - fvm::laplacian(turbulence->alphaEff(), he)
    reaction->Sh()
    + fvOptions(rho, he)
    + fvc::div(turbulence->muEff()*(fvc::grad(U)&U))
    + fvc::div( turbulence->muEff()*(dev2(fvc::grad(U)).T())&U)
  );
  if(he.name() != "e")
  {
    volScalarField& TCells = thermo.T();
    volScalarField& pCells = thermo.p();
    forAll(hsi, i)
    {

```

```

forAll(TCells, celli)
  {
    hsi[i][celli] = thermo.composition().Hs(i,pCells[celli], TCells[celli]);
  }
}
forAll(Y, i)
  {
    EEqn -= fvc::laplacian(turbulence->alphaEff()*hsi[i], Y[i]);
  }
}
EEqn.relax();
fvOptions.constrain(EEqn);
EEqn.solve();
fvOptions.correct(he);
thermo.correct();
Info<< "min/max(T) = " << min(T).value() << ", " << max(T).value() << endl;

```

Дополнительно в файл createFields.H добавлено описание

```

PtrList<volScalarField> hsi(Y.size());
forAll(hsi,i)
  {
    hsi.set( i,
      new volScalarField (
        IOobject
        (
          "hsi " + Y[i].name(),
          runTime.timeName(),
          mesh,
          IOobject::NO_READ,
          IOobject::NO_WRITE
        ),
        mesh,
        dimensionedScalar("hsi"+Y[i].name(),
          dimEnergy/dimMass, 0.0)
      ) );
  }

```

Более низкий уровень программирования понадобился, например, для учета глобальной брутто-реакции, входящей в приведенный кинетический механизм. Дело в том, что OpenFOAM использует для конвертации формат представления CHEMKIN. Однако реакция горения условного углеводородного

топлива имеет нестандартную форму и не может быть представлена в этом формате.

Рассмотренная модельная задача состоит в расчете течения реагирующего газа в канале с расширением в виде обратного уступа. В канал слева втекает сверхзвуковой поток газа с пограничными слоями; в невязком ядре потока число Маха близко к значению 2.5. На стенках канала для учета прилипания потока ставится граничное условие в виде пристеночных функций. На небольшом расстоянии вверх по потоку от уступа внутрь канала подается углеводородное топливо в газовой фазе, а в некоторый момент времени в конце канала включается пневмодроссель – поток сжатого воздуха короткое время вдувается в канал перпендикулярно течению. Геометрию задачи, расположение отверстий для вдува топлива и место дросселирования можно увидеть на рис. 1.

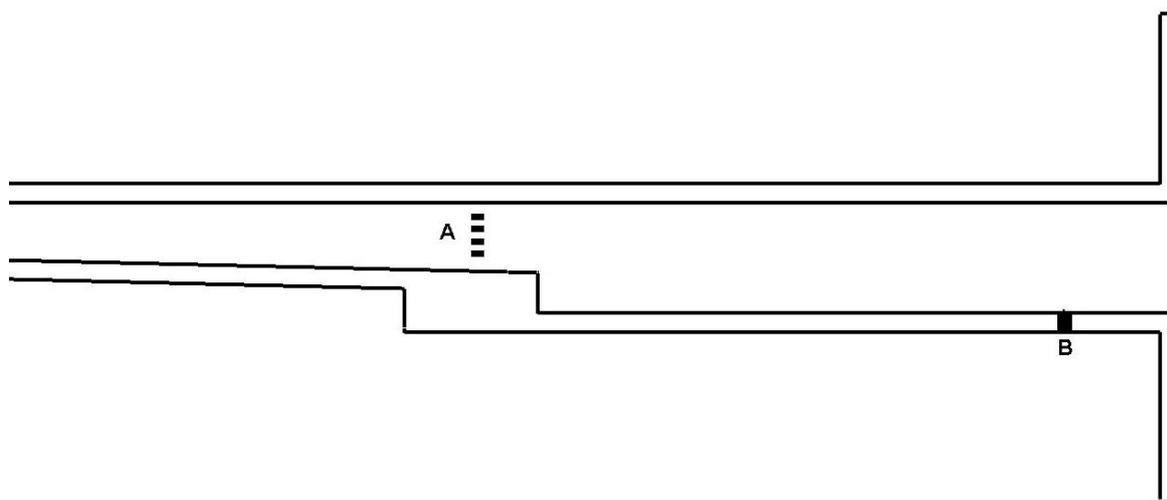


Рис. 1. Геометрия задачи: А – зона впрыска; В – область дросселирования

Расчетная область представляет собой прямоугольник $[0:2.7] \times [-1.014:1]$, внутрь которого помещен канал с обратным уступом (см. рис. 2).

Для проведения расчетов выделено восемь граничных частей – это шесть частей прямоугольника, ограничивающих расчетную область (на рис. 2 они обозначены “inlet-1”, “inlet-2”, “inlet-3”, “outlet”, “top”, “bottom”), поверхность

канала (обозначение – “body”), на которой выделен отрезок для моделирования дросселя (обозначен “throttle”).

На вход канала (граница «inlet-2») подается профилированный поток 10-компонентного газа с массовыми концентрациями $Y_H = Y_O = Y_{OH} = Y_{H_2} = 0$, $Y_{C_nH_m} = 0$, $Y_{O_2} = 0.245$, $Y_{CO_2} = 0.11745$, $Y_{N_2} = 0.5895$, $Y_{H_2O} = 0.04704$, $Y_{CO} = 0.00043$. Профили всех величин заданы таблицами вида $f(y_i)$, $i = 1, \dots, 60$.

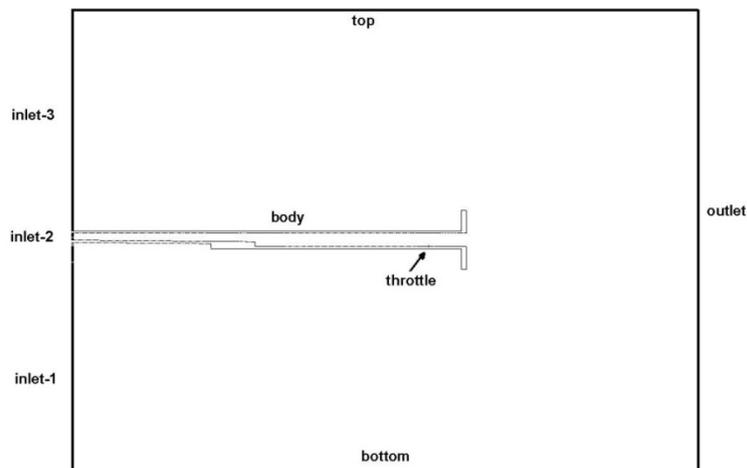


Рис. 2. Геометрия расчетной области с указанием счетных границ

На внешних границах расчетной области “outlet”, “inlet-1”, “inlet-3”, “top”, “bottom” для всех рассчитываемых величины задается краевое условие $\partial f / \partial \vec{n} = 0$. Исключение составляют массовые концентрации смеси – на всех границах, кроме границы «outlet», $Y_{CO} = Y_{C_nH_m} = Y_H = Y_{H_2} = Y_{H_2O} = Y_O = Y_{OH} = 0$, $Y_{CO_2} = 0.0004051864$, $Y_{O_2} = 0.2345016207$, $Y_{N_2} = 0.7650931929$.

На всей поверхности канала (граница “body”) задано условие прилипания $u = 0$. Давление, температура и массовые концентрации определяется условием $\partial T / \partial \vec{n} = 0$, $\partial p / \partial \vec{n} = 0$, $\partial Y / \partial \vec{n} = 0$. Граничные условия на стенках канала для

турбулентных величин k , ω ставились при помощи аппарата пристеночных функций.

Начальные распределения всех полей однородны: $p = 101300 \text{ Па}$,
 $T = 283 \text{ К}$, $U = (0,0) \text{ м/с}$, $Y_H = Y_O = Y_{OH} = Y_{H_2} = Y_{C_nH_m} = Y_{H_2O} = Y_{CO} = 0$,
 $Y_{O_2} = 0.2345016207$, $Y_{CO_2} = 0.0004051864$, $Y_{N_2} = 0.7650931929$, $\omega = 1008.52 \text{ 1/с}$,
 $k = 82.3862 \text{ м}^2/\text{с}^2$.

Первоначально мы воспользовались сеткой, предоставленной коллегами из ЦАГИ. Это блочно-структурная сетка, содержащая 108592 расчетных ячеек, число ячеек поперек канала на входе равно 60, максимальный показатель анизотропии 144, на пограничный слой число приходится около 10 ячеек (рис. 3). Всюду ниже эту сетку именуем как `grid_1x1`. Ее фрагменты показаны на рис. 4.

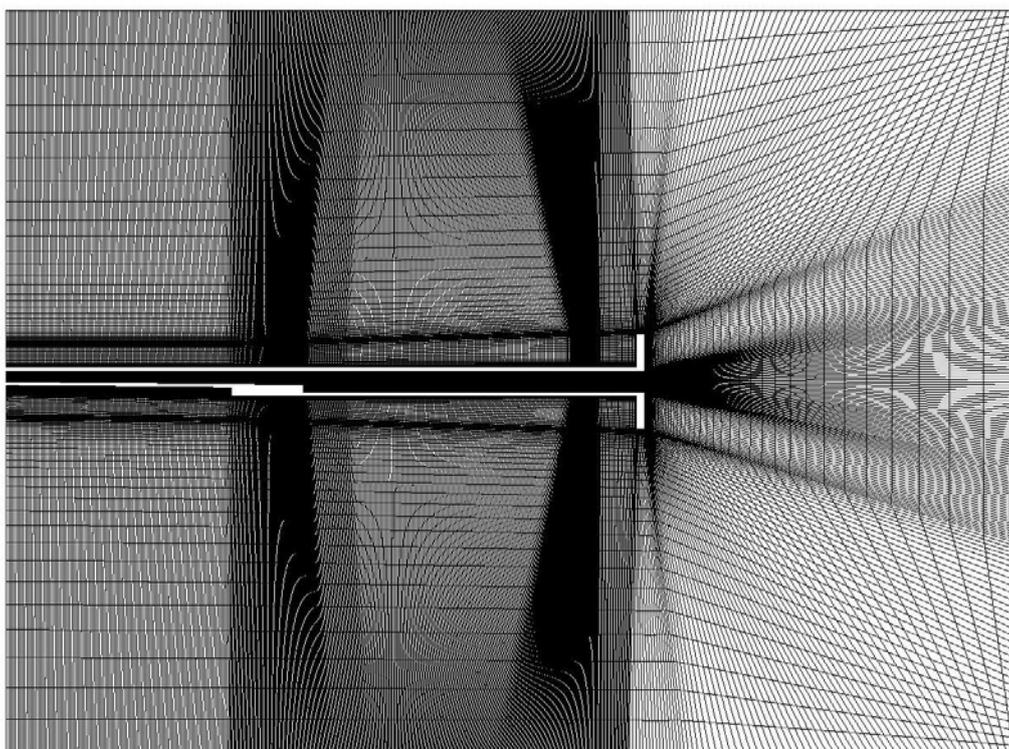


Рис. 3. Блочная структурная сетка

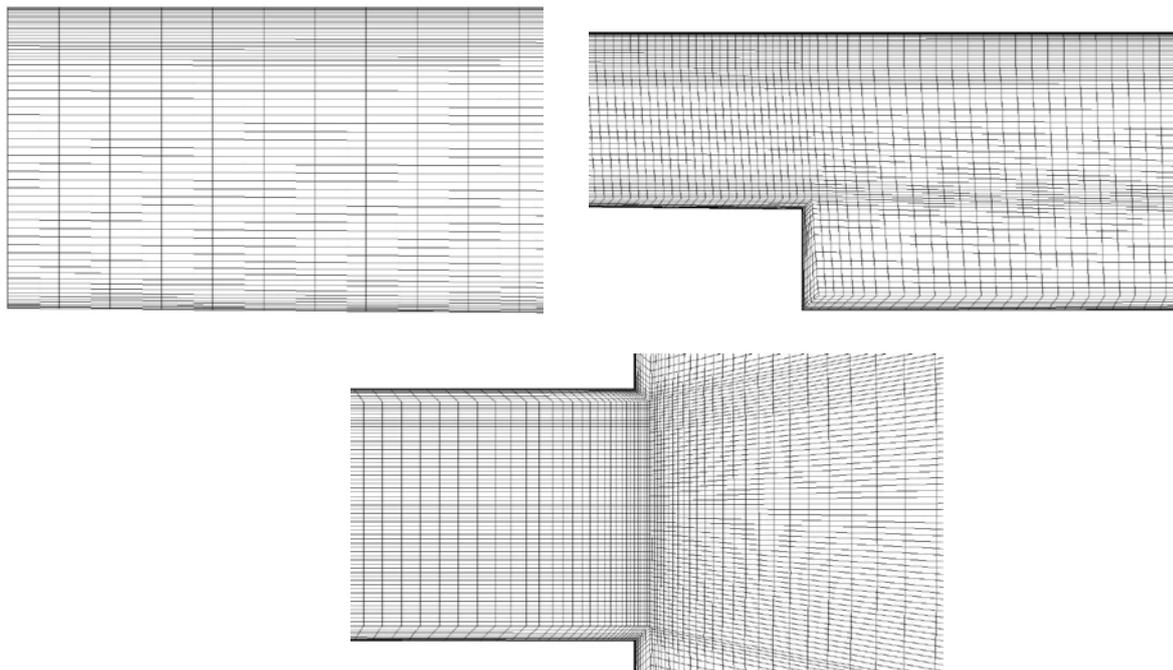


Рис. 4. Фрагменты сетки на входе в воздухозаборник, в зоне расширения канала и выходе из воздухозаборника

Моделирование впрыска топлива и включение процесса дросселирования подробно описано ниже в параграфе «Вычислительные эксперименты».

Все расчеты по решению задач математического моделирования модельной камеры сгорания проводились на гибридном вычислительном кластере К-100 в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН (см. [11]).

3. Вычислительные эксперименты

Для отработки методики предварим расчет полной задачи изучением нескольких подзадач. Первая подзадача воспроизводит течение в канале газовой смеси с заданными массовыми концентрациями на входе канала и демонстрирует влияние на картину течения впрыска холодного топлива. Вторая подзадача рассматривает картину взаимодействия течения в канале с потоком сжатого воздуха, выдуваемого вверх, перпендикулярно стенке (дросселирование). При этом впрыск топлива не осуществляется. В обеих подзадачах газ не является реагирующим. Реакции рассматриваются только при

расчетах полной задачи, когда включены уже все процессы – подача топлива и зажигание смеси после короткого периода дросселирования.

Задача 1. В этой задаче нас интересует влияние на характеристики течения впрыска холодного углеводородного топлива, осуществляемого внутрь канала немного выше обратного уступа.

В канале на расстоянии 0.4 от полной длины канала от входа располагаются четыре отверстия для подачи топлива

$$Y_{C_nH_m} = 1, \quad Y_{O_2} = Y_{CO_2} = Y_{N_2} = Y_{H_2O} = Y_{CO} = Y_H = Y_O = Y_{OH} = Y_{H_2} = 0.$$

Параметры подаваемого топлива известны. Среди них $T_{C_nH_m}$ – статическая температура, $K_{C_nH_m}$ – кинетическая энергия вдуваемого топлива, параметры турбулентности $k_{C_nH_m}$, $\omega_{C_nH_m}$. Дополнительно задается полный расход топлива $G_{C_nH_m}$, $[G_{C_nH_m}] = \frac{KZ}{C \cdot M}$. Соответственно расход топлива через каждое отверстие составляет $G_{омв} = 0.25 G_{C_nH_m}$. Полный расход массы топлива соответствует значению интегрального коэффициента избытка воздуха $\alpha = 1.34$.

Вдув топлива моделируется добавлением в уравнения системы правых частей в четырех кластерах ячеек, моделирующих отверстия вдува

$$\frac{\rho^{n+1} - \rho^n}{\tau} \cdot S + \sum_m \vec{F}_m^{\rho} \vec{n}_m = G_{омв},$$

$$\frac{\rho^{n+1} h_s^{n+1} - \rho^n h_s^n}{\tau} \cdot S + \sum_m \vec{F}_m^{\rho h_s} \vec{n}_m = W_{h_s} + G_{омв} \cdot (K_{C_nH_m} + [h_s(T_{C_nH_m})]_{C_nH_m}),$$

$$\frac{\rho^{n+1} Y_{C_nH_m}^{n+1} - \rho^n Y_{C_nH_m}^n}{\tau} \cdot S + \sum_m \vec{F}_m^{\rho Y_{C_nH_m}} \vec{n}_m = W_{C_nH_m} + G_{омв},$$

$$\frac{\rho^{n+1} k^{n+1} - \rho^n k^n}{\tau} \cdot S + \sum_m \vec{F}_m^{\rho k} \vec{n}_m = W_k + G_{омв} \cdot k_{C_nH_m},$$

$$\frac{\rho^{n+1} \omega^{n+1} - \rho^n \omega^n}{\tau} \cdot S + \sum_m \vec{F}_m^{\rho\omega} \vec{n}_m = W_\omega + G_{\text{отв}} \cdot \omega_{C_n H_m}.$$

Здесь S – площадь расчетной ячейки, \vec{n}_m – внешняя нормаль к грани ячейки, m – индекс суммирования по всем граням, ограничивающим ячейку, \vec{F}_m^{ρ} , $\vec{F}_m^{\rho h_s}$, $\vec{F}_m^{\rho Y_{C_n H_m}}$, $\vec{F}_m^{\rho k}$, $\vec{F}_m^{\rho\omega}$ – потоки через грань ячейки; W_{h_s} , $W_{C_n H_m}$, W_k , W_ω – источниковые члены, не связанные с впрыском топлива, см. уравнения (1–3).

В расчетах впрыск топлива стартует после установления газодинамической картины течения в канале, и начинается второй этап расчета стационарной картины. Топливо подается непрерывно в течение всего второго этапа установления.

Для определения подходящей сетки проведем серию расчетов на сгущающейся последовательности вложенных сеток, обозначив их ниже grid_1x1 (сетка, предложенная ЦАГИ, с числом ячеек 108592), grid_2x2, grid_4x4, grid_8x8. Каждая из сеток получена из предыдущей удвоением числа ячеек по обоим направлениям в прямоугольнике, целиком содержащем внутри себя канал. Этот прямоугольник (зона дробления) не совпадает со всей расчетной областью (см. рис. 5). Сетка grid_4x4 состоит из $\sim 6.6 \times 10^5$ ячеек, и объем сетки grid_8x8 равен $\sim 2.4 \times 10^6$ ячеек.

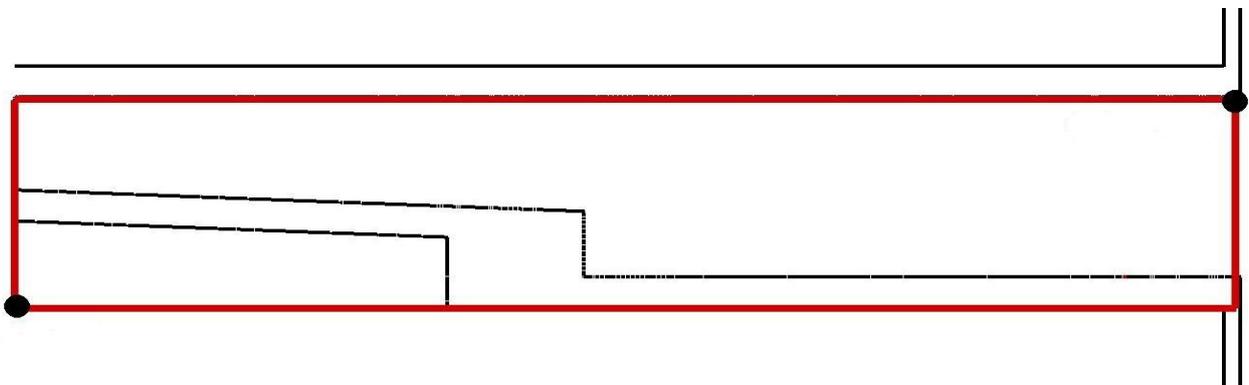


Рис. 5. Геометрия блока, в котором происходит измельчение сетки

На рис. 6 и 7 приведены профили давления $p/(1.1p_\infty)$ и температуры T для двух сеток grid_1x1 и grid_4x4 вдоль середины канала (рис. 6) и его верхней кромки (рис. 7). Под серединой канала мы понимаем линию, проходящую через середину границы inlet_2 и параллельную горизонтальной оси OX .

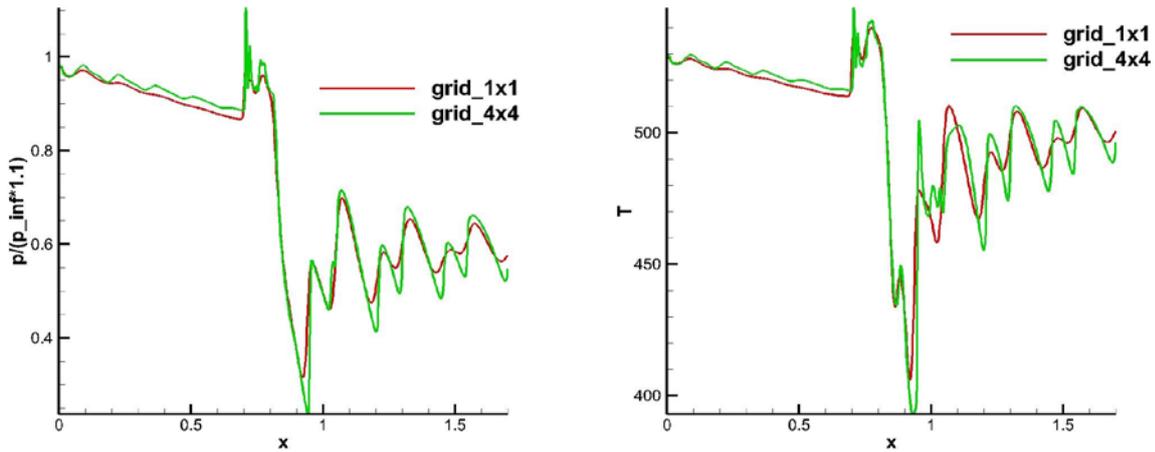


Рис. 6. Распределение нормированного давления (слева) и температуры (справа) на сетках grid_1x1 и grid_4x4 вдоль середины канала

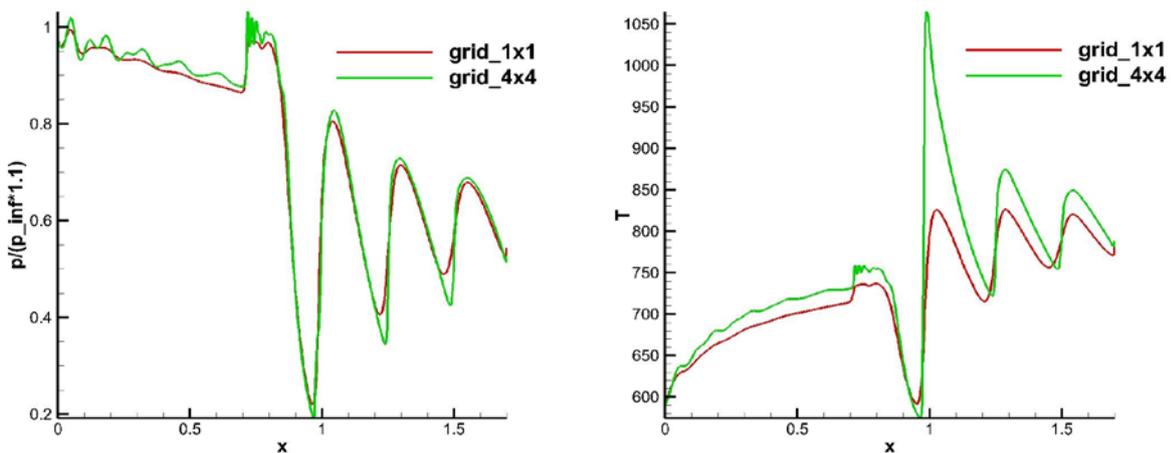
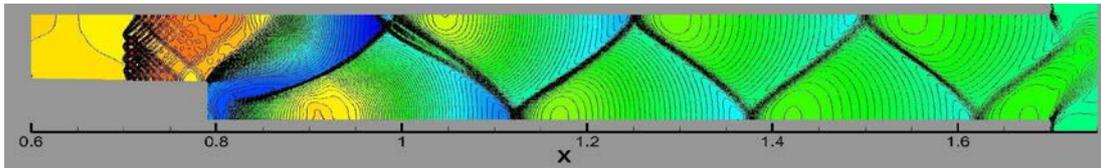
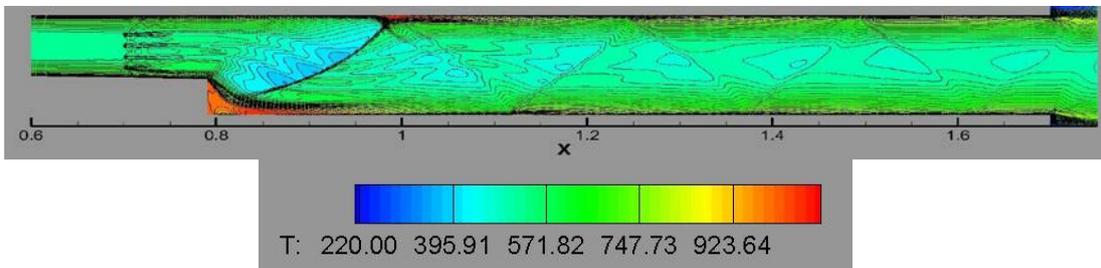


Рис. 7. Распределение нормированного давления (слева) и температуры (справа) на сетках grid_1x1 и grid_4x4 вдоль верхней кромки канала

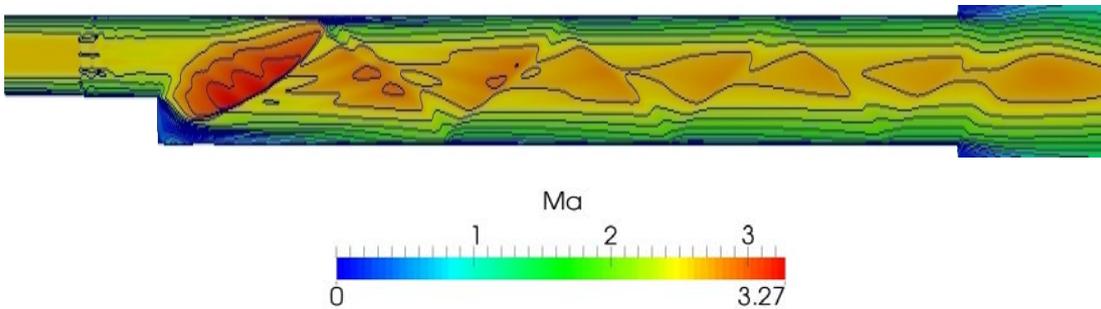
Проведенные расчеты позволяют сделать вывод, что сетка grid_4x4 имеет достаточное пространственное разрешение для получения достоверного результата при решении задачи 1. Приведем на этой сетке установившиеся поля нормированного давления p/p_∞ температуры T и числа Маха, см. рис. 8.



а) давление p/p_∞



б) температура



в) число Маха

Рис. 8. Поля давления p/p_∞ , температуры T и числа Маха на сетке grid_4x4, установленные после подачи топлива

Задача 2. В этой задаче рассматривается взаимодействие течения многокомпонентного газа в исходном модельном канале с потоком сжатого воздуха, выдуваемого вверх перпендикулярно стенке (дресселирование) в течение короткого времени. Подача углеводородного топлива отключена.

Дроссель работает в течении $t=0.00832$ с. Сжатый воздух подается в щель, расположенной на расстоянии $0.14 L$ от конца канала (L – полная длина канала). Предполагается, что число Маха равно 1 в потоке вдуваемого воздуха. Кроме того, известны давление торможения вдуваемого воздуха p_{total} , его температура торможения T_{total} и состав газа в струе сжатого воздуха (массовые доли компонент смеси):

$$Y_{O_2} = 0.2345016207, Y_{CO_2} = 0.0004051864, Y_{N_2} = 0.7650931929, Y_H = 0,$$

$$Y_O = Y_{OH} = Y_{H_2O} = Y_{H_2} = Y_{C_nH_m} = Y_{CO} = 0.$$

Параметры турбулентности в струе сжатого воздуха $k_{SST} = 400 \text{ м}^2/\text{с}^2$, $\omega_{SST} = 22200 \text{ 1/с}$.

В вычислительных экспериментах процедура дросселирования моделируется изменением краевых условий в предписанном участке нижней границы канала после полного установления течения.

Мы используем уже описанную выше вычислительную стратегию: сначала в модели идеального газа ($\gamma = 1.4$) рассчитываем газодинамическое течение в канале и используем полученные газодинамические поля в качестве начального приближения для моделирования течения многокомпонентной среды. Краевые условия при переходе от одного решателя к другому не меняются. После установления течения в канале включаем процедуру дросселирования, изменив краевое условие на соответствующей части нижней стенки канала. Расчет завершается с окончанием работы дросселя.

Расчеты проводим на серии сеток, введенных в рассмотрение выше при описании задачи 1. При этом первоначально проверку сходимости проводим в рамках модели однокомпонентного газа. На рис. 9 приведены графики давления p/p_∞ на сетках `grid_1x1`, `grid_4x4` и `grid_8x8` вдоль верхней и нижней стенок канала, а также середины канала в момент окончания работы дросселя.

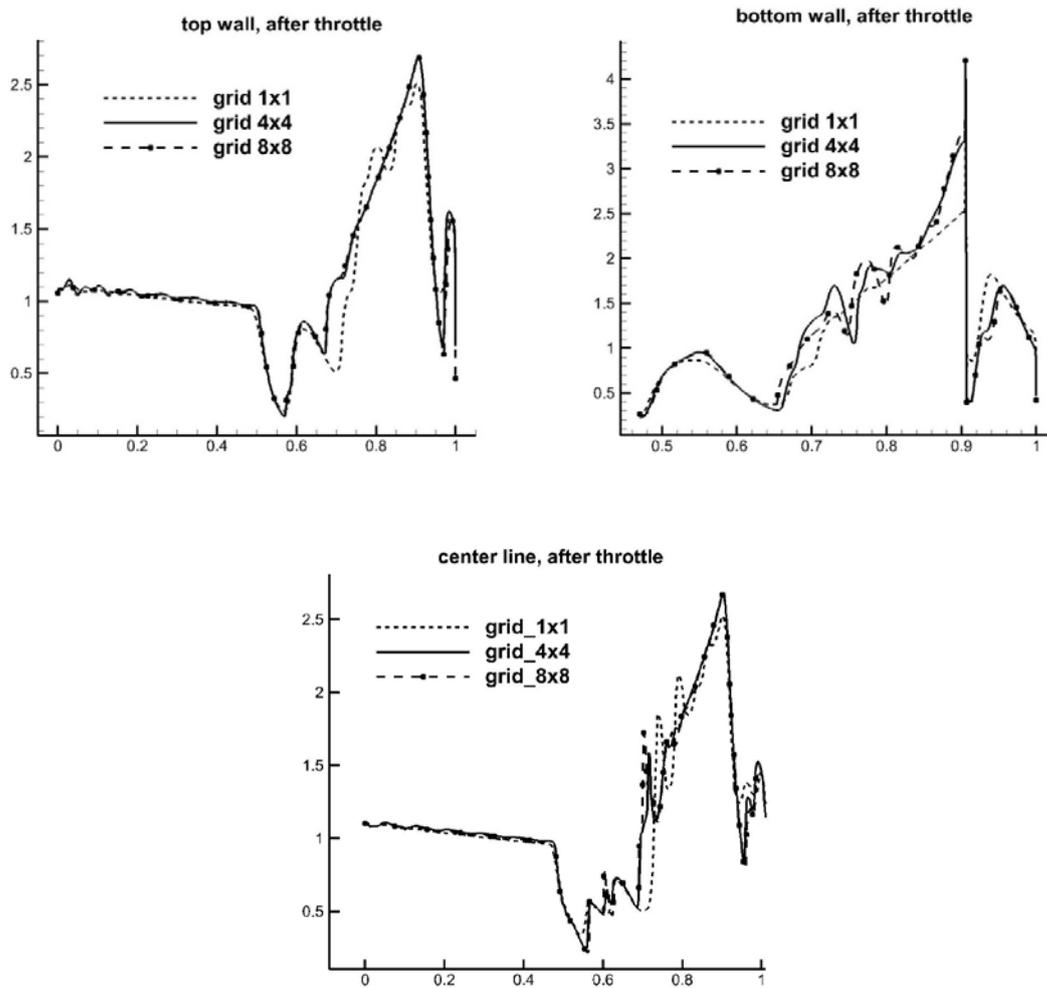


Рис. 9. Сравнение графиков давления p/p_∞ на верхней, нижней стенках и вдоль середины канала на сетках – grid_1x1, grid_4x4 и grid_8x8 в модели однокомпонентного газа

Как видно из сравнения одномерных графиков результаты на сетках grid_4x4 и grid_8x8 практически совпадают. Дополним картину двумерными полями давления в канале в момент окончания работы дросселя на тех же сетках grid_1x1, grid_4x4 и grid_8x8, см. рис. 10.

Переход ко все более подробным сеткам обнаруживает, что в канале вниз по потоку формируется система ударных волн. Кроме того, в районе дросселя все более явно просматривается зона повышенного давления. Представляется, что возникшая система ударных волн может оказывать влияние на режим

горения в канале, и сетка `grid_4x4` уже достаточно для того, чтобы ухватить и воспроизвести особенности решения полной задачи (хотя этот вопрос нуждается в дополнительных проверках).

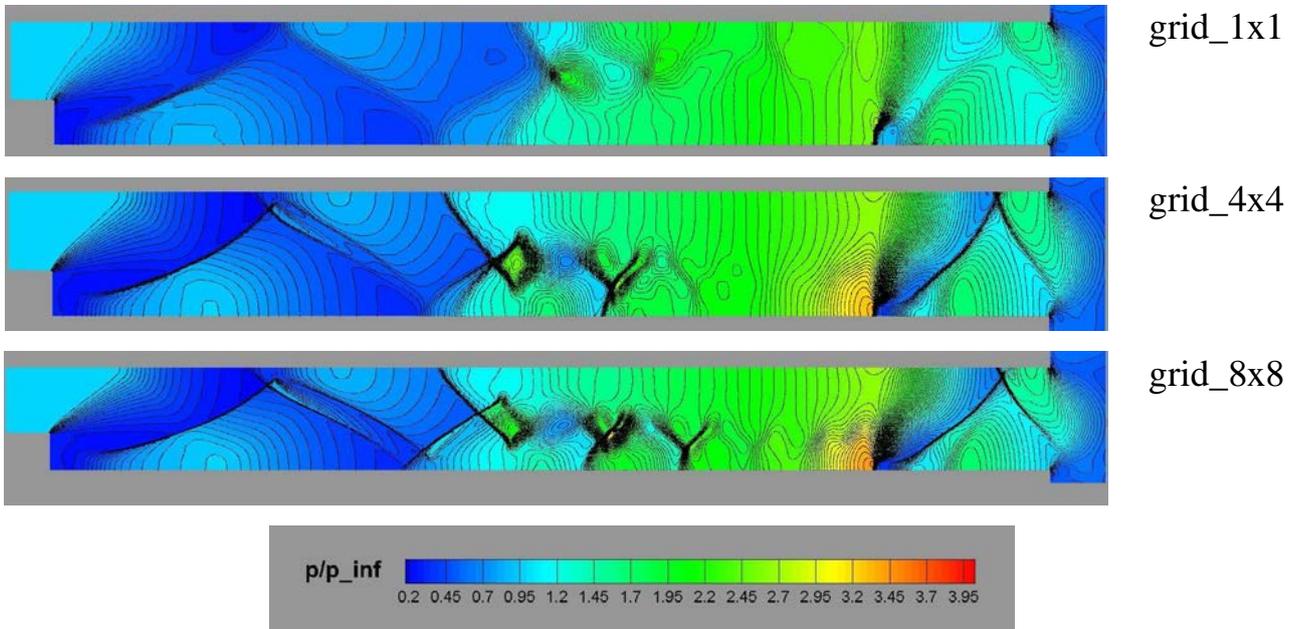


Рис. 10. Нормированное поле давления, посчитанное на основе модели однокомпонентного газа на сетках `grid_1x1`, `grid_4x4` и `grid_8x8`

Перейдем теперь к модели многокомпонентного газа и расчет проведем на сетке `grid_4x4`. Как можно видеть из рис. 11, многокомпонентность оказывает существенное влияние на количественную сторону течения – меняется положение скачка, зона повышенного давления формируется уже на верхней стенке канала.

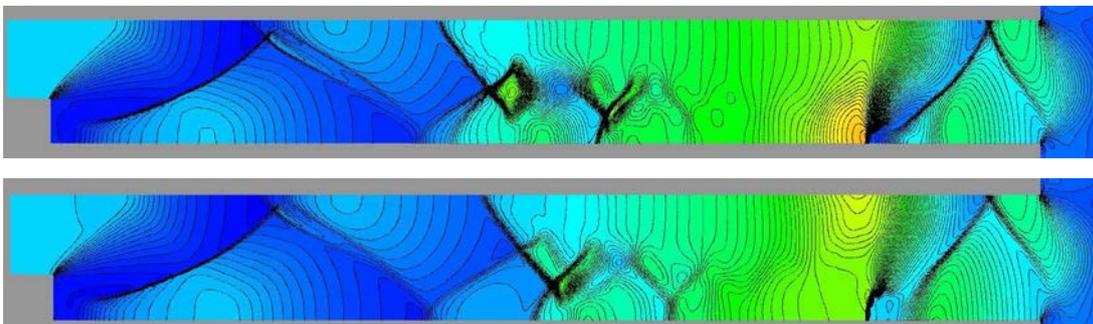


Рис. 11. Поля давления на сетке `grid_4x4` в модели однокомпонентного газа (верхний график) и многокомпонентного газа (нижний график)

Дополним картину течения полями температуры, чисел Маха и скорости в момент окончания работы дросселя на сетке grid_4x4, см. рис. 12.

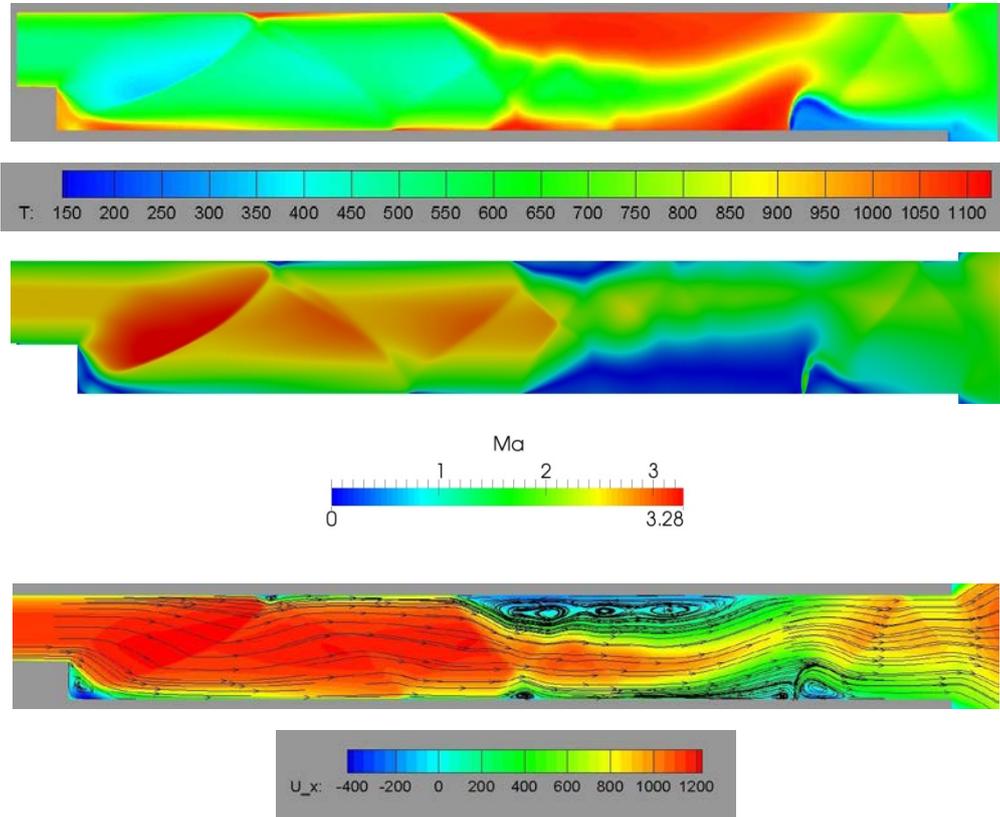


Рис. 12. Поля температуры, числа Маха, линии тока и поле продольной компоненты скорости U_x в приближении многокомпонентного газа.

Сетка grid_4x4

Отметим, что расчеты однокомпонентного и многокомпонентного газов выполнены на разных решателях (sonicFOAM и reactingFOAM соответственно). Чтобы снять вопрос о влиянии на результаты вычислительного алгоритма и его конкретной реализации, мы провели дополнительные расчеты: воспользовались решателем reactingFOAM, предназначенным для анализа течений многокомпонентной среды, и сосчитали течение однокомпонентного газа с $\gamma = 1.4$, сохранив начально-краевую и вычислительную постановки. Результаты совпали. Таким образом, у нас нет оснований думать, что причина отмеченного различия в выборе решателя.

Перейдем к полной постановке задачи. Анализ распределений основных газодинамических характеристик для рассмотренного набора сеток и для первых двух типов расчетов показывает, что сетка `grid_4x4` имеет пространственное разрешение, минимально возможное (с точки зрения получения достоверного результата) для проведения полного расчета с учетом всех физических явлений – впрыска топлива, дросселирования и горения.

Волна сжатия достигает середины канала за обратным уступом и в этот момент инициирует поджиг смеси топлива с воздухом. Это происходит по истечении одной четверти от полного времени дросселирования. Поля распределений температуры и давления на момент поджига приведены на рис. 13.

Далее волна сжатия быстро распространяется вверх по потоку и поднимается выше места впрыска топлива. Горение следует за псевдоскачком. Это происходит по прошествии половины времени от полного времени работы дросселя. Газодинамическая картина на момент достижения инжекторов волной горения представлена ниже на рис. 14.

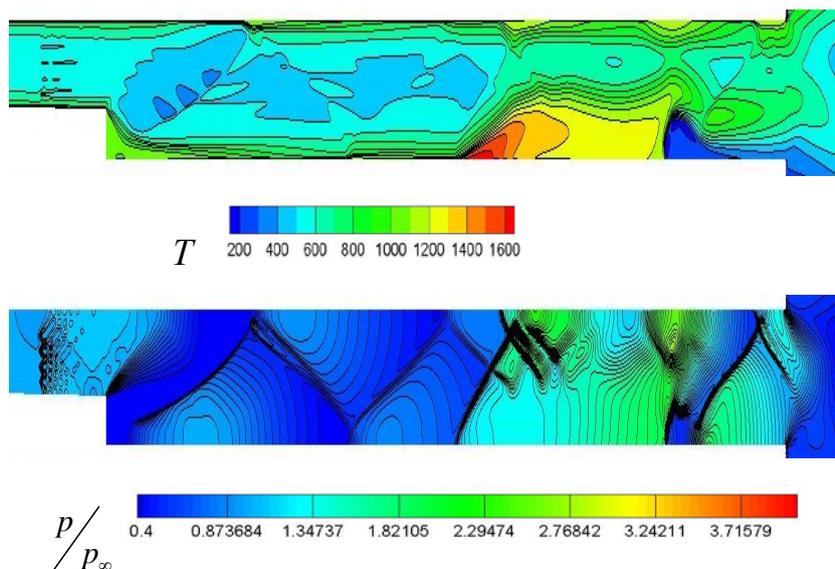


Рис. 13. Поля температуры T и нормированного давления p/p_∞

в момент поджига

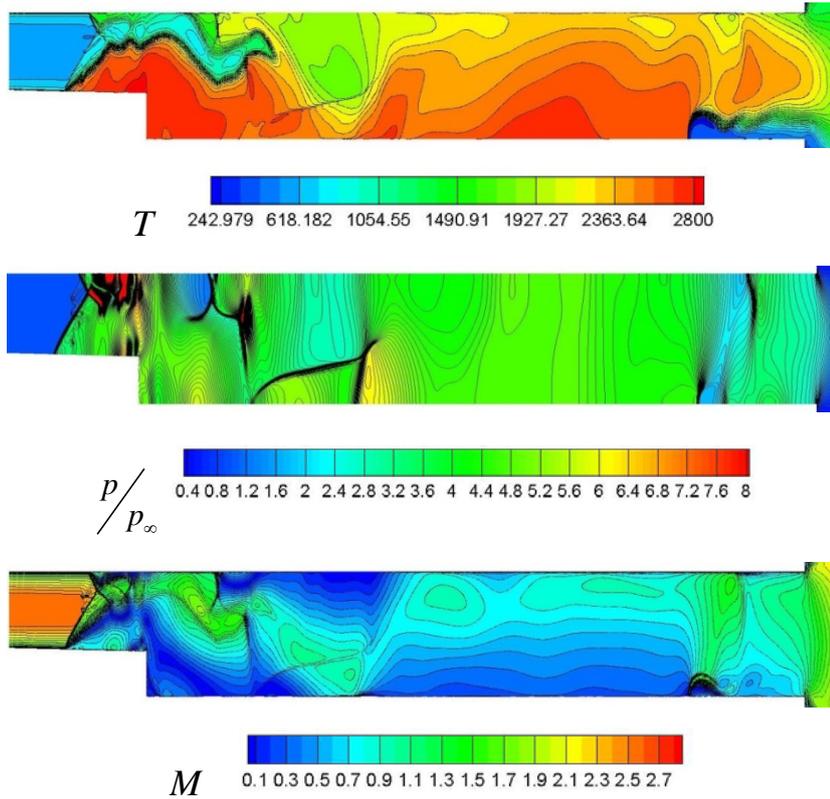


Рис. 14. Поле температуры T , давления p/p_∞ и числа Маха на момент достижения волной горения инжекторов

Проходя через инжекторы в сторону входа в канал, волна сжатия проталкивает влево топливо, однако оно быстро сгорает (см. рис. 15).

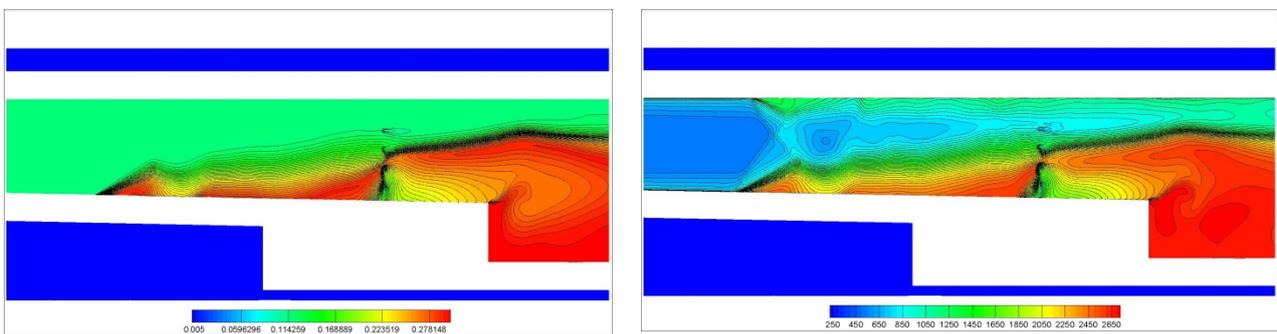


Рис. 15. Относительная концентрация CO_2 (слева) и температура T (справа)

Через короткий отрезок времени волна горения отступает, в то время как волна сжатия продолжает двигаться в сторону входа в канал. Однако позднее волна горения возвращается, возникает пульсационный режим, см. рис.16, где

показано поведение во времени давления и температуры в трех точках (сенсорах) p1, p2, p3. Красная линия, проведенная поперек канала, указывает место впрыска топлива. Время отсчитывается от момента окончания работы дросселя.

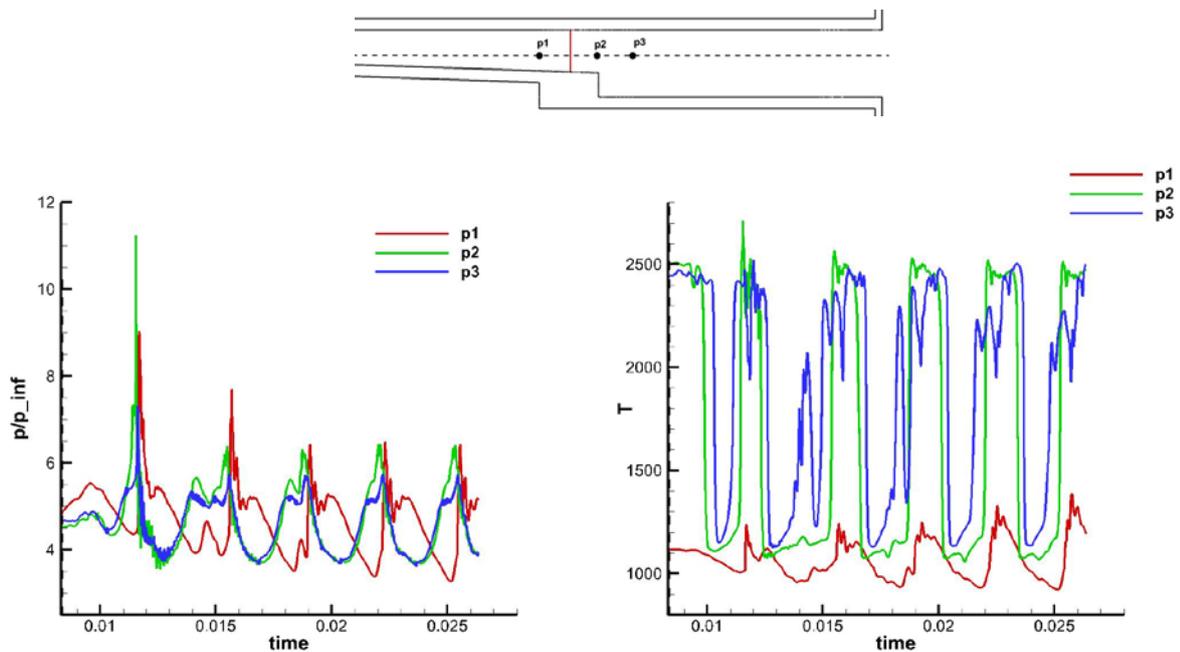


Рис. 16. Зависимость давления и температуры от времени в точках p1, p2, p3

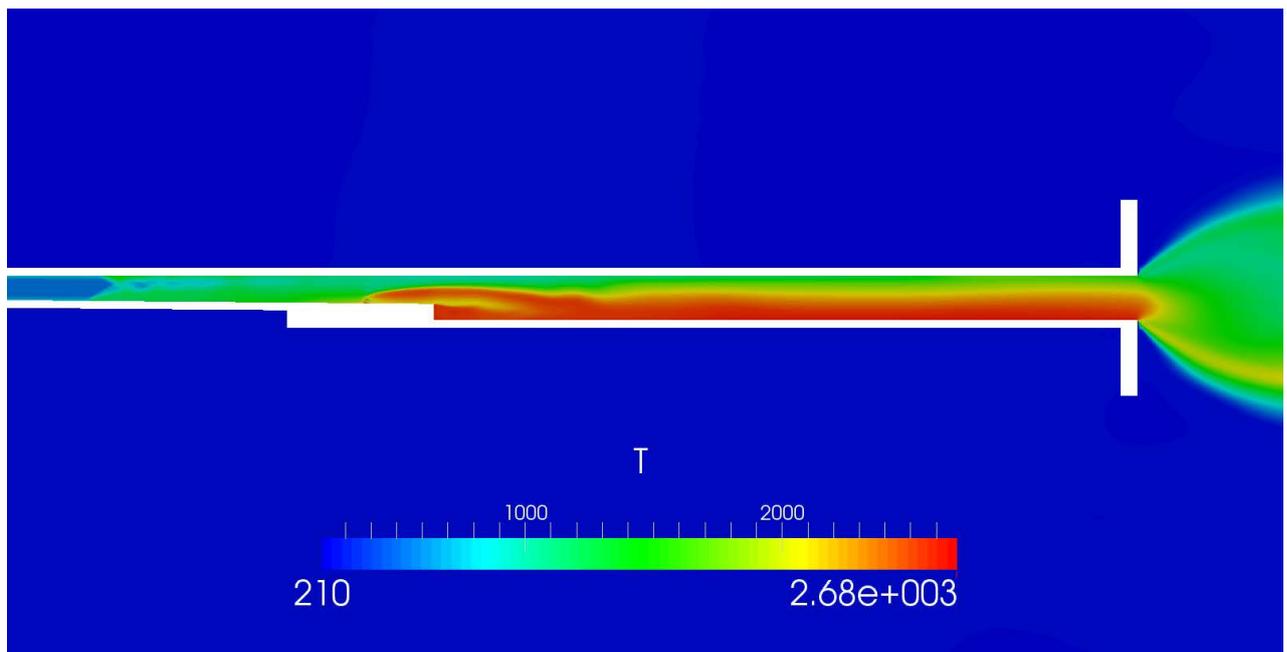


Рис. 17. Поле температуры

Заключение

Результаты расчетов, полученных с помощью комплекса OpenFOAM, показывают принципиальную возможность его использования для расчетов многокомпонентных реагирующих смесей.

Сравнение полученных результатов с расчетами по алгоритмам ЦАГИ показывают некоторое различие в результатах. Однако следует заметить, что расчеты по программам OpenFOAM и ЦАГИ отличались не только вычислительными алгоритмами, но и математическими постановками. Прежде всего, отметим различие в моделях турбулентности: мы использовали SST-модель турбулентности Ментера, а в расчетах наших коллег из ЦАГИ работала модель $(q - \omega)$ Коукли [12]. Помимо этого модели несколько отличались подбором коэффициентов в уравнениях.

В дальнейшем предполагается для понимания причин расхождения провести тщательное сравнение всех аспектов численного моделирования, а также дополнительно сформулировать ряд тестовых модельных задач и проанализировать сравнительные характеристики по широкому спектру показателей.

Данная задача требует дальнейшего углубления расчетных исследований, поскольку можно ожидать существенного влияния на характер течения пока неучтенных в модели процессов (влияния турбулентного перемешивания на горение, обмена энергией со стенками канала и т.п.). Проведенная работа позволяет перейти к изучению динамики многокомпонентной реагирующей среды в трехмерной постановке, что предполагается отразить в последующих публикациях.

Авторы выражают благодарность В.В. Власенко за инициирование данной работы и полезные обсуждения.

Библиографический список

1. Власенко В.В., Ширяева А.А. Расчеты течения в модельной высокоскоростной камере сгорания с использованием различных моделей химической кинетики // Горение и взрыв. Т. 8, №1, 2015, стр.116-125.
2. OpenFOAM®. URL: <http://www.openfoam.com>
3. Жуков В.Т., Мануковский К.В., Новикова Н.Д., Рыков Ю.Г., Феодоритова О.Б. Исследование картины течения в модельном тракте двигателя высокоскоростного летательного аппарата // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2015. № 5. 23 с.
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2015-5>
4. Жуков В.Т., Мануковский К.В., Новикова Н.Д., Рыков Ю.Г., Феодоритова О.Б. Расчет, анализ и визуализация течения в модельном тракте двигателя высокоскоростного летательного аппарата // Научная визуализация, т. 7, № 1 (2015), 78–95.
5. C. Fureby, E. Fedina, J. Tegner. A computational study of supersonic combustion behind a wedge-shaped flameholder // Shock waves, v. 24, issue 1 (2014), pp. 41-50.
6. Дзюбан А. Термодинамика в глобальной сети: текстовый поиск и базы данных. МГУ им. Ломоносова. Научный семинар лаборатории химической термодинамики. 2014.
URL: http://td.chem.msu.ru/uploads/files/courses/labseminar/2014/td_www.pdf
7. F.R. Menter, M. Kuntz, R. Langtry. Ten Years of Industrial Experience with the SST Turbulence Model. 2003.
8. F. Moukalled, L. Mangani, M. Darwish. The finite volume method in computational Fluid Dynamics. Springer. 2015.
9. T. Maric, J. Hopken, K. Mooney. The OpenFOAM technology primer. URL: www.sourceflux.de/book, 2014.

10. H. Jasak. Error Analysis and Estimation for the Finite Volume Method with Applications to Fluid Flows. PhD, Imperial College of Science, Technology and Medicine, 1996.
11. Гибридный вычислительный кластер К-100 URL:
<http://www.kiam.ru/MVS/resourses/k100.html>
12. T.J. Coakley. Turbulence modeling methods for the compressible Navier-Stokes equations. // AIAA-83-1693, 1983.

Оглавление

Введение	3
1. Математическая модель.....	4
2. Вычислительная модель	11
3. Вычислительные эксперименты	18
Заключение.....	30
Библиографический список.....	31