

На правах рукописи

Соломатин Роман Сергеевич

Численное моделирование процессов высокоскоростного смешения и
горения в неоднородных топливо-воздушных смесях

Специальность 1.2.2 — математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва 2022

Работа выполнена в Федеральном государственном учреждении «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук»

Научный руководитель: Меньшов Игорь Станиславович, д.ф.-м.н.,
главный научный сотрудник
ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

Официальные оппоненты: Власенко Владимир Викторович, д.ф.-м.н.,
доцент, заместитель заведующего
лабораторией отделения силовых установок
ФГУП «ЦАГИ»

Шорстов Виктор Александрович, к.ф.-м.н.,
старший научный сотрудник
ФАУ «ЦИАМ им. П.И. Баранова»

Ведущая организация: ФГБУН Федеральный исследовательский
центр химической физики
им. Н.Н. Семенова РАН

Защита состоится 8 декабря 2022 г. в 11:00 часов на заседании
диссертационного совета 24.1.237.01, созданного на базе
ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, 125047, Москва, Миусская пл., д.4

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте
ИПМ им. М.В. Келдыша РАН <https://www.keldysh.ru/council/3/>

Автореферат разослан __. __. 2022 г.

Учёный секретарь диссертационного совета
к.ф.-м.н.

М.А. Корнилина

Общая характеристика работы:

Актуальность темы работы:

В настоящее время происходит постоянное развитие двигателестроительной отрасли, обусловленное постоянно растущими требованиями к параметрам двигательных и энергетических установок. Существует необходимость повышения мощности и эффективности рабочего цикла, поэтому исследования, направленные на решение данной задачи, являются востребованными. К текущему моменту уже практически достигнуты пределы характеристик, которыми могут обладать камеры сгорания, рабочий цикл которых предусматривает дозвуковые скорости характерных процессов. Поэтому основным вектором дальнейшего развития стало повышение скоростей в камерах до сверхзвуковых значений. Термодинамический цикл, основанный на управляемом сверхзвуковом горении, является более эффективным по сравнению с теми схемами организации рабочего процесса в энергетических установках, которые массово используются сегодня. Основная область применения реактивных двигателей — военное и гражданское авиастроение, а в связи с возрастающими требованиями к воздушным судам, такими как увеличение скорости и дальности полета, переход на сверхзвуковое горение как более эффективный процесс, является закономерным путем развития двигательных установок.

Процессы, протекающие в сверхзвуковых потоках, а применительно к камерам сгорания в первую очередь речь идет о процессах смешения, воспламенения и горения, сложны в исследовании ввиду высоких скоростей и малых времен. С развитием вычислительной техники все большую долю в общем объеме исследований занимает вычислительный эксперимент. Создание моделей, описывающих процессы в сверхзвуковых газовых потоках, является сегодня чрезвычайно актуальной задачей. Она позволяет не только подробно изучить объект исследования, но и сэкономить на проведении большого числа лабораторных экспериментов с вариацией параметров, которые ввиду больших нагрузок на оборудование являются достаточно затратными.

Первые газодинамические модели являлись достаточно простыми и были способны предсказывать лишь основные характеристики течений. В настоящее время требования к точности сильно возросли. Высокоточное предсказательное моделирование многокомпонентных газовых течений, в особенности на сверхзвуковых скоростях, невозможно без учета таких параметров как вязкость, теплопроводность, диффузия и, что наиболее важно, их турбулентных аналогов. Правильное моделирование турбулентности особенно важно так как наибольший интерес представляют задачи, приближенные к реальным. Горение в камере практически никогда не происходит в подготовленной, перемешанной смеси. Форма камеры может быть достаточно сложной,

а топливо и окислитель в абсолютном большинстве случаев попадают в зону реакции отдельно. Данные факторы ведут к неравномерному по объему смешению и образованию сильных пространственных градиентов концентраций. Вязкость газа и турбулентные эффекты оказывают критическое влияние на процесс смешения, так как на стенках образуются пограничные слои, а на особенностях геометрии — зоны рециркуляции. Характерные размеры этих особенностей в случае сверхзвуковых скоростей могут быть значительными и сильно влиять как на динамику течения, так и на химические процессы, протекающие в смеси.

Процессы горения в плохо перемешанных смесях обладают такими особенностями, как снижение полноты сгорания, изменение расположения и геометрии зоны пламени по сравнению с горением подготовленной смеси в схожих условиях. Все вышесказанное должно учитываться при разработке современных высокоточных математических моделей. В настоящее время работа по созданию таких моделей ведется учеными по всему миру, что подтверждается большим количеством публикаций по данной теме.

Цели и задачи диссертационной работы:

Целью настоящей работы ставится создание комплексной физико-математической модели, вычислительного алгоритма и программных модулей для моделирования процессов высокоскоростного смешения и горения с учетом влияния пограничных слоев в неоднородных, предварительно неперемешанных смесях с использованием вихреразрешающих подходов.

В качестве топливно-окислительной смеси предполагается использование водорода с воздухом, так как предполагается дальнейшее использование модели для моделирования процессов в камерах сгорания реактивных двигателей нового поколения, где в качестве топлива используется водород, а окислителя — заборный воздух.

Для достижения цели работы необходимо решение следующих задач:

- Разработка модели высокоскоростного смешения и горения газовых потоков с учетом диффузии с применением различных подходов к моделированию турбулентности, в том числе вихреразрешающих, а также модели горения водородо-воздушных смесей с применением детального кинетического механизма, работающего в широком диапазоне температур, давлений и составов.
- Разработка вычислительных алгоритмов и программных модулей для реализации модели высокоскоростного смешения и горения.
- Проведение интеграции разработанных моделей, алгоритмов и программных модулей в программный комплекс для моделирования пространствен-

ных нестационарных течений вязкого, сжимаемого, многокомпонентного, реагирующего газа.

- Проведение верификации и валидации работы реализованных вычислительных алгоритмов на решении модельных задач.
- Численное исследование процессов смешения и горения в модельной камере Барроуса-Куркова с применением разработанной модели.

Научная новизна:

Новизна работы включает комплекс решений (математических, алгоритмических и программных), а также результаты расчетов, обеспечивающих достижение цели работы. Созданная модель применима как для прикладных, так и для фундаментальных научных исследований. В отличие от большинства существующих на настоящий момент моделей, носящих преимущественно инженерный характер, текущая может быть применена в том числе для детального изучения физико-химических процессов, протекающих в системе, ввиду:

- учета турбулентных эффектов (вязкость, теплопроводность, диффузия), оказывающих существенное влияние на протекание процессов смешения, которое растет с повышением характерных скоростей,
- использования детального кинетического механизма, который позволяет получать правильные значения задержек самовоспламенения и тепловыделения в широком диапазоне давлений, температур и коэффициентов избытка топлива, что важно при моделировании сверхзвукового горения в неоднородных смесях.

Также стоит отметить численные методы, используемые для решения системы уравнений модели:

- гибридная схема интегрирования по времени с определением параметра гибридности в каждой расчетной ячейке позволяет снять ограничение на величину шага по времени,
- модифицированная гибридная схема Кранка-Николсон обеспечивает второй порядок аппроксимации в неявной области, при этом переключаясь на обратную схему Эйлера вблизи стенок для ускорения сходимости,
- безматричная реализация алгоритма LU-SGS обеспечивает экономию ресурсов памяти, что очень важно при проведении расчетов с использованием подробных сеток,

- ФДН-метод Гира 2-го порядка для эффективного решения «жесткой» системы уравнений химической кинетики.

Научная значимость и практическая ценность исследования:

Со второй половины прошлого века по всему миру широко ведутся научные и прикладные исследования в области использования горения в сверхзвуковых потоках в качестве рабочего процесса в камерах энергетических установок, в том числе реактивных двигателей. Несмотря на то, что уже разработаны ряд физико-математических моделей, описывающих процессы в камерах сгорания данных установок, моделирование процессов смешения компонентов топлива и окислителя, и высокоскоростное горение в условиях неоднородной смеси с использованием детальных кинетических механизмов представляет сложную и не до конца решенную до настоящего времени задачу. Моделирование этих процессов представляет как фундаментальный, так и прикладной интерес, т.к. в реальных условиях пламя распространяется чаще всего по неоднородной смеси с наличием градиента концентрации, и механизм распространения в этих условиях существенно отличается от механизма горения в однородных смесях. При этом формирование градиента концентрации существенно зависит от процесса смешения в зоне пламени, который происходит в условиях высоких скоростей подачи топлива и окислителя. Разработка новых и совершенствование существующих математических моделей очень важно для решения задачи по оптимизации процессов смешения и воспламенения в сверхзвуковых потоках.

Методы исследования и степень достоверности результатов:

Методы исследования, используемые в работе, основываются на численном моделировании. Для проведения численных экспериментов используется метод конечных объемов. Расчеты проводятся на неструктурированных неравномерных сетках. Интегрирование по времени осуществляется с использованием гибридных разносных схем 2-го порядка аппроксимации. В качестве основного метода численного решения дискретных уравнений используется безматричная реализация метода LU-SGS. Применение интерполяционной схемы подсеточного восполнения решения и получения значений на грани обеспечивает 2-й порядок по пространству на неравномерных сетках. В качестве языков программирования применяются Си и Fortran. Параллельность осуществляется с помощью протокола MPI.

Используемая математическая модель основана на аналоге осредненных трехмерных уравнений Навье-Стокса, записанных для многокомпонентной смеси. В качестве модели турбулентности используется модель Спаларта-Аллмараса (SA). Для моделирования турбулентности применяются подходы RANS и модифицированный DES (IDDES). Моделирование химических

реакций осуществляется с помощью детального кинетического механизма, состоящего из 22 обратимых реакций.

Достоверность результатов, получаемых с использованием разработанной в рамках диссертационной работы модели, обеспечивается результатами моделирования на ЭВМ модельных тестовых задач и сопоставлением полученных решений с экспериментальными и уже известными расчетными данными.

Личный вклад автора:

Лично автором была проведена разработка моделей, алгоритмов и программных модулей для реализации подходов к моделированию турбулентности, детального кинетического механизма. Реализован алгоритм взаимодействия газодинамического и кинетического модулей. Также автором была выполнена реализация гибридного модифицированного численного метода Кранка-Николсон и низкодиссипативного метода расчета конвективных потоков. Автор разработал и реализовал несколько программных модулей, расширяющих функционал используемого программного комплекса. Все численные исследования, результаты которых изложены в диссертационной работе, проведены лично автором в процессе научной деятельности. Материалы из совместных публикаций, использованные в работе, содержат оригинальные результаты автора.

Положения, выносимые на защиту:

- Математическая модель турбулентного перемешивания и горения в высокоскоростных потоках реагирующих газов с использованием вихререшающего подхода.
- Численные гибридные схемы решения нестационарных уравнений течения вязкого, теплопроводного, многокомпонентного газа с учетом турбулентного теплопереноса и неравновесных химических реакций.
- Алгоритмическая и программная реализация разработанной модели и методов в рамках программного комплекса для моделирования пространственных нестационарных течений сжимаемой вязкой теплопроводной газовой смеси на многопроцессорных ЭВМ.
- Верификация и валидация разработанной вычислительной методики и ее программной реализации с использованием международной базы тестов.
- Результаты вычислительных экспериментов по исследованию физико-химических процессов в экспериментальной сверхзвуковой камере сгорания с использованием разработанной вычислительной методики.

Апробация:

Результаты работы докладывались на российских и международных конференциях, среди которых: «The 8th International Symposium on Nonequilibrium Processes, Plasma, Combustion and Atmospheric Phenomena» в Сочи (2018), «научная конференция отдела горения и взрыва ФИЦ ХФ РАН им. Н.Н. Семенова» в Москве (2019, 2020), «12-й Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики» в Уфе (2019), «6-й Минский международный коллоквиум по физике ударных волн, горению и детонации» в Минске (2019), «International Colloquium on Pulse and Continuous Detonations» в Санкт-Петербурге (2020, 2022).

Основные результаты по теме диссертации были опубликованы в 7 печатных работах, 6 из которых включены в список ВАК и/или входят в мировые индексы цитирования (SCOPUS, Web of Science).

Объем и структура диссертации:

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списка литературы, приложения. Полный объем диссертации составляет 188 страниц, включая 118 рисунков и 2 таблицы. Список литературы содержит 104 наименования.

Содержание работы:

Введение посвящено обзору экспериментальных и расчетных работ, направленных на исследование процессов сверхзвукового смешения и горения в высокоскоростных газовых потоках. В рамках описания численных исследований приводится формулировка основных существующих подходов к моделированию турбулентности: DNS (метод прямого численного моделирования), RANS (метод осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье-Стокса), LES (метод моделирования крупных вихрей), DES (метод моделирования отсоединенных вихрей) с указанием их преимуществ и недостатков. Также во введении представлены актуальность, научная новизна и практическая значимость работы, сформулированы цель и задачи, описаны методы исследования, приведены положения, выносимые на защиту и сведения о личном вкладе диссертанта.

Первая глава посвящена разработке модели турбулентного смешения в сверхзвуковых многокомпонентных газовых потоках. В ней приводится подробное описание используемых подходов и модели турбулентности.

Раздел 1.1 описывает подход, основанный на решении осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье-Стокса (RANS). После применения процедуры осреднения по времени система уравнений Навье-Стокса для многокомпо-

нентной смеси может быть записана следующим образом:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i \vec{U}) = \nabla \cdot (\rho \vec{I}_i) \\ \frac{\partial (\rho \vec{U})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{U} \vec{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}_m + \boldsymbol{\tau}_t) \\ \frac{\partial (\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{U} H) = \\ \quad = -\nabla \cdot [\vec{U} \cdot (\boldsymbol{\tau}_m + \boldsymbol{\tau}_t) + (\vec{\zeta}_m + \vec{\zeta}_t)] + \nabla \cdot \left(\rho \sum_i H_i \vec{I}_i \right) \end{array} \right. , \quad (1)$$

где ρ_i — плотность i -го компонента смеси, ρ — плотность смеси, $\vec{U} = (U_x, U_y, U_z)$ — вектор скорости, p — давление, $E = C_v T + 0.5 (U_x^2 + U_y^2 + U_z^2)$ — удельная полная энергия газа, $H = C_p T + 0.5 (U_x^2 + U_y^2 + U_z^2)$ — удельная полная энтальпия смеси, H_i — энтальпия компонента, $\boldsymbol{\tau}_m, \boldsymbol{\tau}_t$ — молекулярная и турбулентная составляющие тензора вязких напряжений, $\vec{\zeta}_m, \vec{\zeta}_t$ — молекулярная и турбулентная составляющие вектора плотности теплового потока. $\vec{I}_i = (I_{i,x}, I_{i,y}, I_{i,z})$ — диффузионный поток i -го компонента. Все величины являются осредненными, знаки осреднения опущены.

Молекулярные составляющие тензора напряжений и вектора плотности теплового потока определяются с помощью реологического закона Ньютона и закона теплопроводности Фурье. Если используемая модель турбулентности является линейной, для вычисления величины $\boldsymbol{\tau}_t$ используется гипотеза Буссинеска, а $\vec{\zeta}_t$ вычисляется аналогично $\vec{\zeta}_m$. Дополнительно коэффициенты вязкости и теплопроводности связываются через аналогию Рейнольдса, которая справедлива как для молекулярных коэффициентов, так и для турбулентных. В данной работе число Прандтля и его турбулентный аналог полагаются постоянными.

В **разделе 1.2** приводится формулировка классической модели Спаларта-Аллмараса (SA) 1992 г.¹, состоящая из одного уравнения переноса для модифицированной турбулентной вязкости $\tilde{\nu}$, а также используемой в работе поправки 2012 г.², служащей для предотвращения обращения в ноль модифицированной завихренности $\tilde{\Omega}$.

В **разделе 1.3** формулируется подход, основанный на моделировании крупных вихрей (LES), приводится система LES уравнений, описывается разница между системами уравнений Рейнольдса и LES уравнений.

¹Spalart, P.R., and S.R. Allmaras. A one-equation turbulence model for aerodynamic flows // AIAA Paper 1992-0439. 1992. 22 p.

²Allmaras, S.R., F.T. Johnson, and P.R. Spalart. Modifications and Clarifications for the Implementation of the Spalart-Allmaras Turbulence Model // ICCFD7-1902. 7th International Conference on Computational Fluid Dynamics, Big Island, Hawaii, 9-13 July 2012. 11 p.

Раздел 1.4 посвящен описанию метода отсоединенных вихрей на основе SA модели турбулентности (SA-DES). Механизм объединения RANS и LES подходов базируется на понятии характерного линейного масштаба. В классической SA модели линейным масштабом является расстояние до стенки d_w , в то время как подсеточные LES модели опираются на величину, называемую размером фильтра: $l_{LES} = C_{LES}\Delta$. Замена характерного линейного масштаба в SA модели турбулентности на l_{LES} позволяет получить ее подсеточный аналог, а путем введения гибридного линейного масштаба $l_{DES} = \min(l_{RANS}, l_{LES})$ и замены d_w на l_{DES} в уравнениях SA модели турбулентности формулируется гибридный SA-DES подход.

В **разделе 1.5** формулируется поправка к SA-DES подходу на низкие числа Рейнольдса. Данная поправка предотвращает подавление турбулентности в LES области расчета вдали от стенок из-за активации низкоренольдсовых членов SA модели. Для этого масштаб l_{LES} модифицируется путем домножения константы C_{DES} на функцию $\Psi(\chi)$ ³: $l_{LES} = \Psi C_{LES}\Delta$.

Раздел 1.6 посвящен описанию модифицированного метода моделирования отсоединенных вихрей с отложенным переходом (SA-IDDES)⁴. Данный метод является модификацией метода DES и одним из наиболее современных гибридных методов моделирования турбулентности. Применение в расчетах метода IDDES позволяет снизить зависимость от используемой расчетной сетки и предотвратить RANS-LES переход внутри пограничного слоя.

Раздел 1.7 формулирует общий вид математической модели высокоскоростного смешения газовых потоков. Предполагая малость значений $\text{div}\vec{U}$, преобразуем уравнение модели турбулентности и добавим данное уравнение к системе уравнений законов сохранения (1).

Получим систему, записанную относительно вектора консервативных переменных:

$$\frac{\partial \vec{q}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\vec{F}_x - \vec{G}_x) + \frac{\partial}{\partial y} (\vec{F}_y - \vec{G}_y) + \frac{\partial}{\partial z} (\vec{F}_z - \vec{G}_z) = \vec{S}, \quad (2)$$

где

$$\begin{aligned} \vec{q} &= (\rho_i, \rho U_k, \rho E, \tilde{\nu}), \\ \vec{F}_k &= (\rho_i U_k, \rho U_x U_m + \delta_{km} p, (\rho E + p) U_k, \tilde{\nu} U_k), \\ \vec{G}_k &= \left(-\rho I_{1,k}, \tau_{km}, \chi_k - \rho \sum_i H_i I_{i,k}, \frac{1}{\sigma} (\nu + \tilde{\nu}) \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial k} \right), \\ \vec{S} &= (0, \dots, 0, P^\nu - D^\nu + \frac{c_{b2}}{\sigma} [(\nabla \tilde{\nu}) \cdot (\nabla \tilde{\nu})]). \end{aligned} \quad (3)$$

³Spalart, P.R., S. Deck, M.L. Shur, K.D. Squires, M.Kh. Strelets, and A. Travin. A new version of detached-eddy simulation, resistant to ambiguous grid densities. Theor. Comput. Fluid Dyn. 20. 2006. Pp 181-195.

⁴Shur, M.L., P.R. Spalart, M.Kh. Strelets, and A. Travin. A hybrid RANS-LES approach with delayed-DES and wall-modelled LES capabilities. International Journal of Heat and Fluid Flow 29. 2008. Pp. 1638-1649.

Здесь \vec{q} — вектор консервативных переменных, \vec{F}_k — вектора конвективных потоков, \vec{G}_k — вектора вязких потоков, \vec{S} — вектор источников, $\chi_k = \sum_j (U_j \tau_{jk}) - \zeta_k$.

Конвективные потоки для уравнения модели турбулентности в системе (2)-(3) вычисляются через поток массы. Отдельное граничное условие для конвективного потока вязкости на стенках не ставится.

Диффузионные потоки вычисляются по закону Фика. Аналогично ламинарному и турбулентному числам Прандтля, числа Шмидта в расчетах полагаются постоянными.

Вторая глава описывает принципы моделирования химических реакций между компонентами газовой смеси. В **разделе 2.1** приводятся общие сведения о моделировании химического взаимодействия в газах, использовании различных кинетических механизмов (глобальных, детальных, полных).

Раздел 2.2 посвящен устройству блока химической кинетики в разрабатываемой модели. Система дифференциальных уравнений для моделирования химических реакций, состоит из уравнений для изменения мольных концентраций компонентов и уравнения тепловыделения

$$\begin{cases} \frac{dX_s}{dt} = \sum_r (b_{s,r} - f_{s,r}) \left[K_r^f \prod_s (X_s)^{f_{s,r}} - K_r^b \prod_s (X_s)^{b_{s,r}} \right], \\ \frac{dT}{dt} = \frac{\sum_s \left(\frac{\partial X_s}{\partial t} (RT - H_s) \right)}{\sum_s (X_s C_{v_s})}, \end{cases} \quad (4)$$

где индекс r обозначает номер реакции в кинетическом механизме, индекс s — номер компонента газовой смеси. $f_{s,r}$ и $b_{s,r}$ — стехиометрические коэффициенты для s -ого компонента в прямой и обратной r -ой реакции соответственно, $X_s = \rho_s / M_s$, K_r^f и K_r^b — константы скорости реакции для прямой и обратной реакции соответственно.

В работе используется детальный механизм горения водородо-воздушных смесей, разработанный А. Керомнесом⁵. Данный механизм имеет зависимость скоростей реакций от температуры и давления. Зависимость от давления вводится в форме Трое. Константы скоростей реакций вычисляются по закону Аррениуса. Для теплоемкости и энтальпии используется полиномиальная зависимость от температуры.

В **разделе 2.3** рассматривается интеграция блока химической кинетики в систему газодинамических уравнений для их совместного решения. Взаимодействие газодинамического и кинетического блоков может осуществляться

⁵Keromnes, A. et al. An experimental and detailed chemical kinetic modeling study of hydrogen and syngas mixture oxidation at elevated pressures // Combustion and Flame 160. 2013. Pp. 995–1011.

двумя способами: разделение по процессам в случае нестационарного расчета и использование изменений параметров газовой смеси в результате химических реакций в качестве источников для газодинамической системы при стационарном расчете.

В **третьей главе** рассматриваются используемые численные методы и особенности программной реализации. **Раздел 3.1** посвящен описанию гибридной явно-неявной схемы интегрирования по времени и численного метода LU-SGS, применяемых для решения системы дискретных уравнений.

Раздел 3.1 посвящен описанию гибридной явно-неявной схемы интегрирования по времени и численного метода LU-SGS, применяемых для решения системы дискретных уравнений.

Пространственная дискретизация системы уравнений (2)-(3) основана на методе конечных объёмов. Интегрирование по времени дискретной системы выполняется с использованием гибридной явно-неявной схемы Меньшова-Накамуры, позволяющей преодолеть ограничения на величину шага по времени. Особенностью данной схемы является введение в каждой расчетной ячейки параметра гибридности $\omega \in [0, 1]$, а также промежуточного временного слоя ω_i

$$\vec{q}_i^{\omega_i} = \vec{q}_i^n + (1 - \omega_i) (\vec{q}_i^{n+1} - \vec{q}_i^n). \quad (5)$$

При $\omega_i = 1$ во всех расчетных ячейках схема переходит в схему типа «предиктор-корректор», имеющую второй порядок точности по пространству и времени при курантовском ограничении на шаг по времени. В гибридном режиме параметр ω_i определяется локально в каждой расчетной ячейке так, чтобы базовая схема предиктор-корректор, стартующая с промежуточных значений, обеспечивала минимальную численную диссипацию при выполнении принципа невозрастания нормы-максимум численного решения.

$$\begin{aligned} \vec{q}_i^* &= \vec{q}_i^{\omega_i} - \frac{\Delta t}{2V_i} \omega_i \sum_{\sigma} \left(\vec{F}_{\sigma}^{\omega_i} - \vec{G}_{\sigma}^{\omega_i} \right) s_{\sigma} + \omega_i \frac{\Delta t}{2} \vec{S}_i^{\omega_i}, \\ \vec{q}_i^{n+1} &= \vec{q}_i^n - \frac{\Delta t}{V_i} \sum_{\sigma} \left(\vec{F}_{\sigma}^* - \vec{G}_{\sigma}^* \right) s_{\sigma} + \Delta t \vec{S}_i^*. \end{aligned} \quad (6)$$

Схема (6) является неявной во всех случаях кроме случая, когда $\omega = 1$ во всех ячейках расчетной сетки. Поэтому она решается методом установления по псевдовремени на каждом временном шаге.

В качестве основного численного метода используется безматричная модификация метода LU-SGS, применение которого позволяет избежать хранения и операции обращения разреженных матриц большой размерности, что ведет к сокращению расхода памяти вычислительных систем и повышению производительности, а используемые модификации позволяют полностью избежать операции обращения матриц. Формулировка используемого метода

LU-SGS в терминах приращения вектора консервативных переменных представляется в виде прямого и обратного обходов⁶:

$$\left\{ \begin{array}{l} \delta \vec{q}_{i,*}^{n+1,m} = - \frac{\left[\vec{R}_i^{n+1,m} + \sum_{j<i} \vec{G}_\sigma \left(\delta \vec{q}_{j,*}^{n+1,m} \right) \right]}{\left(1 + \frac{\Delta t}{\Delta \tau} \right) + d_i} \\ \delta \vec{q}_i^{n+1,m} = \delta \vec{q}_{i,*}^{n+1,m} - \frac{\left[\sum_{j>i} \vec{G}_\sigma \left(\delta \vec{q}_j^{n+1,m} \right) \right]}{\left(1 + \frac{\Delta t}{\Delta \tau} \right) + d_i} \end{array} \right. , \quad (7)$$

где j — индекс ячейки, соседней с i -й через грань σ , вектор \vec{G}_σ определяется как:

$$\vec{G}_\sigma \left(\delta \vec{q}_j^{n+1,m} \right) = 0.5 \frac{\Delta t}{\Delta \tau} s_\sigma (1 - \omega_j) \left[\mathbf{T}_j^{-1} \delta \vec{f}_j^{n+1,m} - (\rho_\sigma - 2\bar{\nu}_\sigma) \delta \vec{q}_j^{n+1,m} \right], \quad (8)$$

m — номер итерации, $\Delta \tau$ — итерационный параметр «псевдовремя», \mathbf{T} — матрица перехода к ортонормированному базису на грани σ , ρ_σ — спектральный радиус матрицы Якоби, $\bar{\nu}_\sigma$ — модифицированный вектор диагональных элементов матрицы, мажорирующей якобиан, \vec{R}_i — вектор невязки,

$$\vec{d}_i = 0.5 \frac{\Delta t}{\Delta \tau} (1 - \omega_i) \left[\sum_\sigma s_\sigma (\rho_\sigma - 2\bar{\nu}_\sigma) - V_i \frac{\partial \vec{S}}{\partial \vec{q}} \right]. \quad (9)$$

В разделе 3.2 приводится описание методов Гира, применяемых для решения «жесткой» системы уравнений химической кинетики, а также интегратора DLSODE⁷, используемого в качестве реализации. Основным преимуществом методов Гира перед неявными методами Рунге-Кутты является меньшая размерность нелинейной системы для поиска \vec{q}^{n+1} . Необходимость наличия разгонного участка для методов Гира может быть преодолена за счет использования представления Нордсика⁸, на котором основана работа интегратора DLSODE.

$$\vec{z}^{n+1} = \vec{z}^n \mathbf{P} + \vec{l} (h f^{n+1} - \vec{e}_1^T \vec{z}^n \mathbf{P}), \quad (10)$$

⁶Men'shov, I.S., and Y. Nakamura. On implicit Godunov's method with exactly linearized numerical flux // Computers & Fluids 29. 2000. Pp. 595-616.

⁷Radhakrishnan, K., and A.C. Hindmarsh. Description and Use of LSODE, the Livermore Solver for Ordinary Differential Equations. Lawrence Livermore National Laboratory Report UCRL-ID-113855. 1993. 124 p.

⁸Хайрер, Э., и Г. Ваннер. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежёсткие задачи // Москва, издательство «Мир», 1990. 512 с.

где $\vec{e}_1 = (0, 1, 0, \dots, 0)$, $\vec{l} = (l_0, 1, l_2, \dots, l_k)$ — вектор коэффициентов метода, \mathbf{P} — матрица Паскаля, z^n — вектор решения в представлении Нордсика:

$$\vec{z}^n = \left(q^n, h\dot{q}^n, \frac{h^2}{2}\ddot{q}^n, \dots, \frac{h^m}{m!}q^{n,(m)} \right)^T, \quad (11)$$

$q^{n,(m)}$ обозначает производную m -го порядка от q^n .

Интегрирование кинетической системы уравнений выполняется по алгоритму «предиктор-корректор». Работа данного алгоритма может быть представлена как:

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{z}^{n+1,0} &= \mathbf{z}^n \mathbf{A} \\ \vec{e}^{n+1,0} &= 0 \end{aligned} \right\}, \quad (12)$$

$$\left. \begin{aligned} \vec{g}(\vec{q}^{n+1,s}) &= h^{n+1} \vec{f}(\vec{q}^{n+1,s}) - h^{n+1} \dot{\vec{q}}^{n+1,0} - \vec{e}^{n+1,s} \\ \vec{e}^{n+1,s+1} &= \vec{e}^{n+1,s} + \mathbf{P}^{-1} \vec{g}(\vec{q}^{n+1,s}) \\ \vec{q}^{n+1,s+1} &= \vec{q}^{n+1,0} + \vec{e}^{n+1,s+1} l_0 \\ \vec{e}^{n+1} &= \vec{e}^{n+1,S} \\ \mathbf{z}^{n+1} &= \mathbf{z}^{n+1,0} + \vec{e}^{n+1} \vec{l} \end{aligned} \right\} s = 0, 1, \dots, S-1, \quad (13)$$

где $\mathbf{P} = \mathbf{I} - h^{n+1} \beta_0 \mathbf{J}$, $h^{n+1} = t^{n+1} - t^n$, \mathbf{J} — матрица Якоби системы, s — итерация корректора.

Система нелинейных уравнений, полученная после аппроксимации системы ОДУ, решается методом Ньютона-Рафсона.

Раздел 3.3 содержит описание особенностей реализации и используемых программных решений.

Для вычисления конвективных потоков может применяться метод Годунова или низкодиссипативный метод, основанный на гибридизации метода Русанова и метода центральных разностей.

Вязкие потоки определяются с помощью обобщенного метода центральных разностей. Второй порядок по пространству обеспечивается использованием интерполяционной схемы, основанной на MUSCL подходе⁹. Для повышения устойчивости при интерполяции используются ограничители MINMOD и ALBADA2. При расчете течений без ударных волн ограничители могут быть заменены на корректор, основанный на выборе среднего из трех значений.

Наряду с основной гибридной явно-неявной схемой интегрирования по времени может быть использована схема Кранка-Николсон (К-Н) для получения второго порядка аппроксимации в неявной области. В работе используется модификация, переводящая вблизи стенок схему К-Н в неявную схему

⁹Van Leer B. Towards the ultimate conservative difference scheme. V – A second-order sequel to Godunov's method. Journal of Computational Physics. V. 32. 1979. Pp. 101-136.

Эйлера¹⁰.

$$V \frac{\bar{q}^{n+1} - \bar{q}^n}{\Delta t} = \frac{1}{2} (1 + \theta) R(\bar{q}^{n+1}) + \frac{1}{2} (1 - \theta) R(\bar{q}^n) = 0, \quad (14)$$

где

$$\theta = \frac{1}{2} \left(1 - \tanh \left(\frac{d_w - d_t}{0.2d_t} \right) \right). \quad (15)$$

Здесь d_w — расстояние от стенки, константа d_t используется для фиксации расстояния от стенки, на котором реализуется переход на схему К-Н.

Для улучшения сходимости могут применяться комбинированный метод GMRES-LU-SGS, основанный на использовании матрицы, полученной путем приближенной факторизации системы методом LU-SGS, в качестве предобуславливателя для обобщенного метода наименьших невязок, а также алгоритм сглаживания невязки.

Также в разделе приводятся программные средства и библиотеки используемые для проведения многопроцессорных расчетов, а также нахождения кратчайшего расстояния от точки расчетной области до стенки.

Четвертая глава диссертации посвящена верификации и валидации реализованных моделей и численных алгоритмов путем выполнения вычислительного эксперимента по моделированию различных задач. В **разделе 4.1** рассматриваются задачи по вычислению задержек самовоспламенения водородно-воздушных смесей при различных параметрах, моделирование одномерной детонационной волны с помощью модели ЗНД для верификации детального кинетического механизма.

На рисунке 1 приводятся результаты расчетов задержек самовоспламенения в нульмерных расчетах для бедной водород-кислородной смеси $\phi = 0.5$, разбавленной азотом в пропорции 1:5. Результаты расчетов сравнивались с экспериментальными данными из работы А. Keromnes.

По результатам сравнения можно сделать вывод о высокой точности работы реализованного детального кинетического механизма в широком диапазоне начальных температур и давлений.

В **разделах 4.2–4.4** приводятся результаты моделирования турбулентного пограничного слоя, слоя смешения и течения в расширяющемся диффузоре с применением SA-RANS подхода. Данные задачи решались в 2D постановке в стационарном режиме ($\Delta t \rightarrow \infty$, один шаг по времени с большим количеством итераций). В качестве численного метода применялся комбинированный метод GMRES-LU-SGS с размерностью пространства Крылова 3. Во всех трех задачах воздух находился при нормальных условиях. Скорость

¹⁰Edwards, J.R., J.A. Boles, and R.A. Baurle. LES / RANS simulation of a supersonic reacting wall jet // AIAA Paper 2010-0370, LF99-10036. 2010. 20 p.

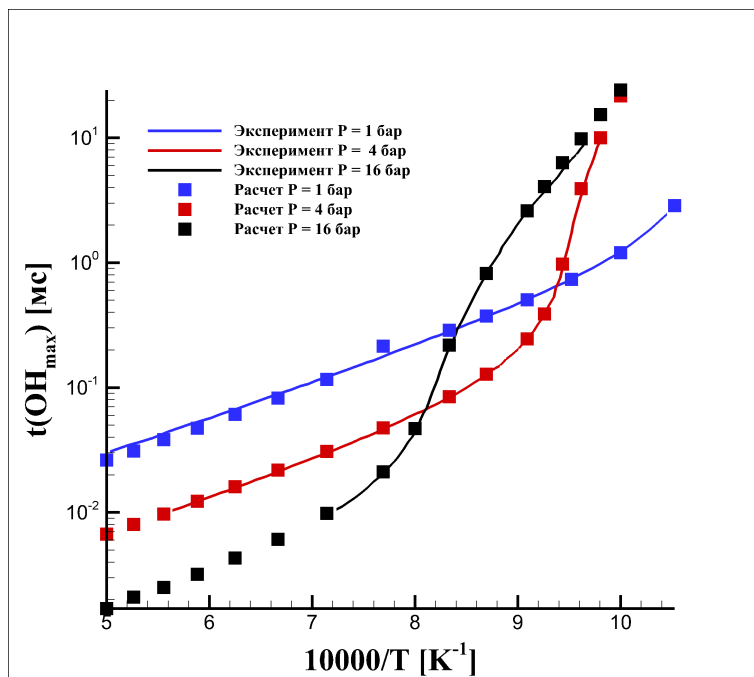


Рис. 1: Величина задержки воспламенения в зависимости от температуры и давления для смеси водород-кислород с коэффициентом избытка топлива $\phi = 0.5$, разбавленной азотом в пропорции 1:5.

потока дозвуковая. На входных границах задавался массовый расход. Поверхности, на которых происходило формирование пограничных слоев, считались адиабатическими.

Первая задача посвящена моделированию стационарного турбулентного пограничного слоя на плоской пластине. Для расчета использовались сетки различной разрешающей способности с размерами первой пристеночной ячейки $y^+ = 3, 22$ и 335 в переменных «закона стенки».

Рисунок 2 показывает распределение коэффициента трения вдоль пластины для трех используемых сеток. Полученные результаты сравнивались с результатами расчетов кодом CFL3D, приведенными в базе моделей турбулентности NASA¹¹, а также аналитическим решением Кармана-Шонхерра (K-S теория).

Расчёт на самой подробной дает правильное распределение коэффициента трения, совпадающее с референсными теоритическими и расчетными данными. Расчеты на сетках с $y^+ = 22$ и 335 в свою очередь занижают коэффициент трения, причем в случае сетки с $y^+ = 335$ отличие составляет порядок.

Далее решалась задача по моделированию установившегося течения воздушного потока в модельном ассиметричном диффузоре Оби. Расчеты про-

¹¹Turbulence Modelling Resource of Langley Research Center [электронный ресурс]. URL: <https://turbmodels.larc.nasa.gov>.

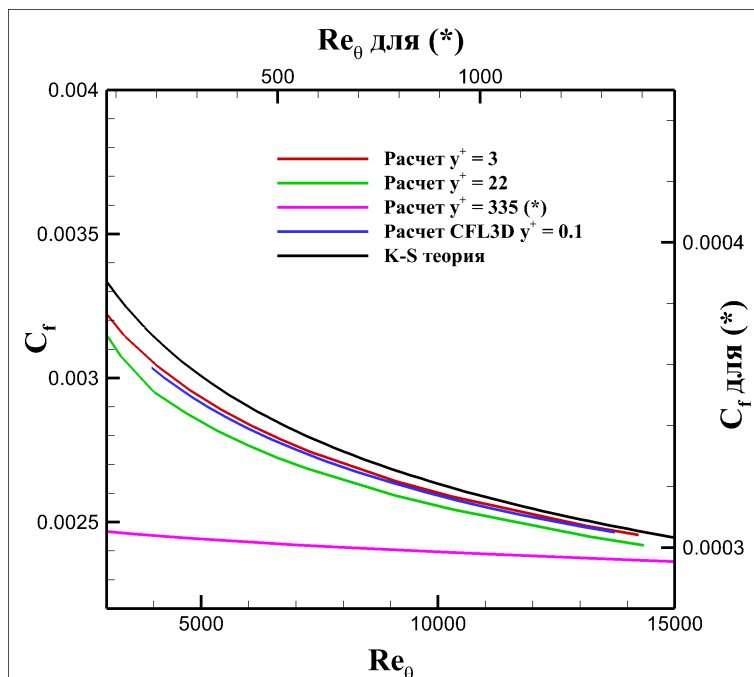


Рис. 2: Сравнение распределения коэффициента трения на пластине для различных сеток.

водились на двух сетках, имеющих различную разрешающую способность в вертикальном направлении. Для обеих расчетных сеток были построены безразмерные профили скорости в нескольких сечениях вдоль диффузора и проведено сравнение с экспериментальными данными из валидационной базы NASA¹². Полученные профили показывают хорошее соответствие экспериментальным данным, однако на грубой сетке корреляция несколько хуже, из-за недостаточного разрешения для правильного вертикального переноса импульса.

Для валидации алгоритма турбулентного смешения потоков далее была рассмотрена задача о моделировании формирования стационарного слоя смешения между параллельными воздушными потоками, движущимися с разной скоростью. На входе потоки разделены плоской пластиной, на которой формируются пограничные слои. Для слоя смешения были также построены профили скорости в нескольких сечениях вдоль области смешения. Сравнение проводилось с экспериментальными данными из базы моделей турбулентности NASA. По результатам сравнения также была отмечена хорошая корреляция.

В разделе 4.5 проводится анализ быстродействия комбинированного метода GMRES-LU-SGS. В качестве рассматриваемой задачи была выбрана задача о формировании турбулентного пограничного слоя на пластине из раз-

¹²NRARC Alliance Verification and Validation Archive [электронный ресурс]. URL: <https://www.grc.nasa.gov/WWW/wind/valid/archive.html>

дела 4.2. Расчеты проводились на сетке $y^+ = 3$. Задача решалась с использованием численных методов LU-SGS, GMRES-LU-SGS с различной размерностью пространства Крылова, а также применением алгоритма сглаживания невязки. Критерием быстродействия считалось количество итераций за которое относительная невязка достигала заданного значения и общее время выполнения расчета. Все расчеты выполнялись в однопроцессорном режиме.

В качестве контрольных значений относительной невязки были выбраны 0.1, 0.01 и 0.001. В первых двух случаях быстрее всего окончился расчет с использованием метода LU-SGS, а в третьем — с использованием GMRES-LU-SGS с размерностью пространства Крылова 3 в связи с чем были сделаны следующие выводы: использование комбинированного метода GMRES+LU-SGS позволяет повысить скорость сходимости, однако его применение оправдано только если необходима сходимость по относительной невязке на три и более порядков, что требуется в основном в стационарных расчетах.

Раздел 4.6 посвящен исследованию диссипативности и устойчивости реализованных схем аппроксимации по пространству на примере модельного теста Shu-Osher о взаимодействии ударной волны с неоднородной средой. Вычисления проводились на равномерной сетке с использованием различных схем расчета конвективных потоков и лимитирования интерполированных значений. В расчетах использовался шаг по времени $dt = 1$ мкс, что соответствовало явной схеме и второму порядку аппроксимации по времени. Решение рассматривалось на момент времени $t = 1.8$ мс.

На рисунке 3 представлены профили плотности и давления для двух серий расчетов, различающихся методом вычисления конвективных потоков. Для расчетов на рисунке слева применялся метод Годунова, а на рисунке справа — гибридный низкодиссипативный метод. Вычисления выполнялись с использованием ограничителей MINMOD и ALBADA2, а также корректора значений.

Было отмечено, что использование ограничителей производных при расчетах с использованием метода Годунова приводит к существенному смазыванию и уменьшению амплитуды физических осцилляций, в то время как расчет с коррекцией значений показывает достаточно низкий уровень схемной вязкости. Использование коррекции приводит к возникновению неустойчивости по давлению за ударной волной, которая, однако, не распространяется далее. С другой стороны, расчеты с использованием гибридного метода демонстрируют лучшие диссипативные свойства. Тем не менее, в случае расчета с коррекцией неустойчивость, возникающая за фронтом ударной волны, не подавляется и на профиле давления возникают высокочастотные осцилляции. Расчет с использованием метода Годунова не уступает второму расчету в точности при использовании коррекции значений, но при этом является более

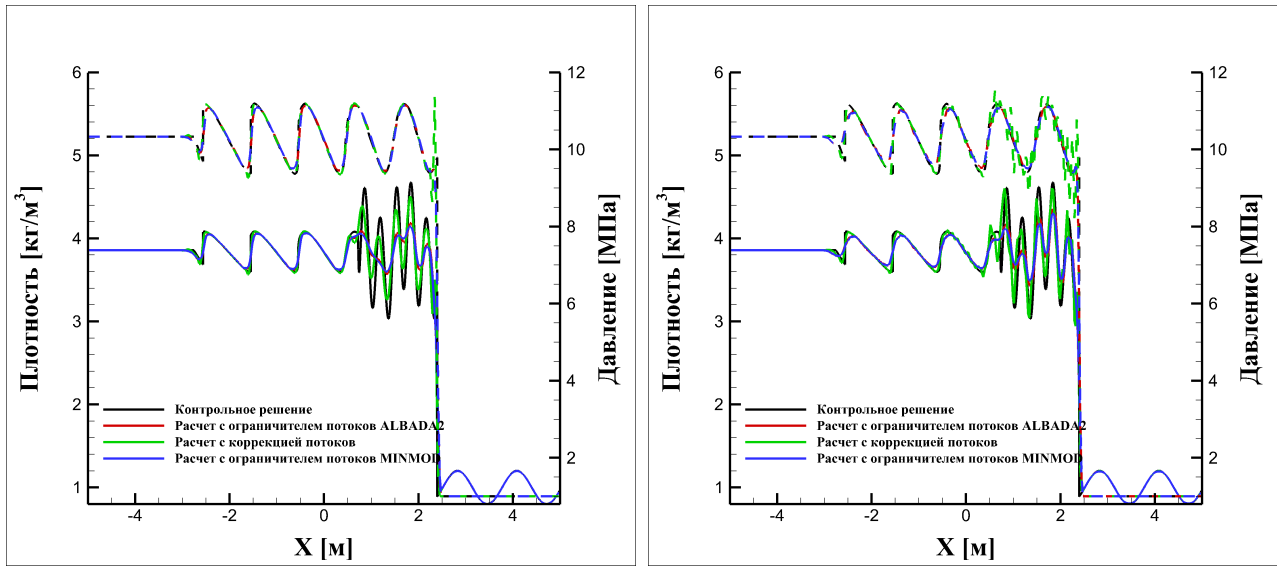


Рис. 3: Профили плотности в расчетах с использованием метода Годунова (слева) и гибридного низкодиссипативного метода (справа). Сплошные линии — плотность, пунктирные — давление.

устойчивым, поэтому он был выбран для проведения расчетов с использованием вихреразрешающих подходов.

В разделе 4.7 проводится валидация алгоритмов SA-IDDES подхода на решении задачи о формировании нестационарного пограничного слоя в прямоугольном периодическом канале в сверхзвуковом потоке. Длина, высота и ширина канала составляли 10, 8.9 и 5 см соответственно. Параметры потока брались из задачи о смешении водорода с инертным газом в камере сгорания Барроуса-Куркова¹³.

Все стенки в расчете считались адиабатическими, входная и выходная граница замыкались периодическими граничными условиями. Для обеспечения постоянной толщины погранслоя в канале использовался объемный источник в форме градиента давления. В качестве начальных данных для IDDES расчета использовался RANS профиль с наложенными на поперечные компоненты скорости синусоидальными возмущениями.

Количество ячеек в сетке — около 3 млн. Размер по нормали к стенке первой ячейки соответствовал $y^+ = 2$.

Задача решалась с использованием как гибридной явно-неявной схемы интегрирования по времени, так и модифицированной схемы К-Н. В качестве численного метода применялся LU-SGS с двумя итерациями сглаживания невязки. Величина шага по времени в обоих случаях составляла 100 нс, что обеспечивало переход на явную схему интегрирования на расстоянии ~ 2 мм от стенки при применении явно-неявной схемы. Параметр гибридной схемы

¹³Burrows, M.C., and A.P. Kurkov. Analytical and Experimental Study of Supersonic Combustion of Hydrogen in a Vitiated Airstream // NASA-TM-X-2828. 1973. 34 p.

К-Н настраивался так, чтобы на расстоянии 0.5 мм от стенки происходил переход на классическую схему К-Н второго порядка. Основная константа метода C_{DES} равнялась 0.6. Зона RANS-LES перехода начиналась на расстоянии ~ 1 мм от стенки.

Расчет с применением гибридной явно-неявной схемы выполнялся до момента времени 6.15 мс, а с использованием гибридной схемы К-Н до момента 5.6 мс, что эквивалентно примерно 110 и 100 продувкам канала соответственно. Для получения осредненных профилей параметров было выполнено осреднение параметров по времени за период ~ 1 мс, а также вдоль оси X.

Качество решения оценивалось путем построения профилей осредненной продольной скорости в размерных переменных и переменных «закона стенки», которые сравнивались с аналогичными профилями для RANS решения. На рисунке 4 приводятся результаты сравнения профилей для нижней и боковой стенок канала.

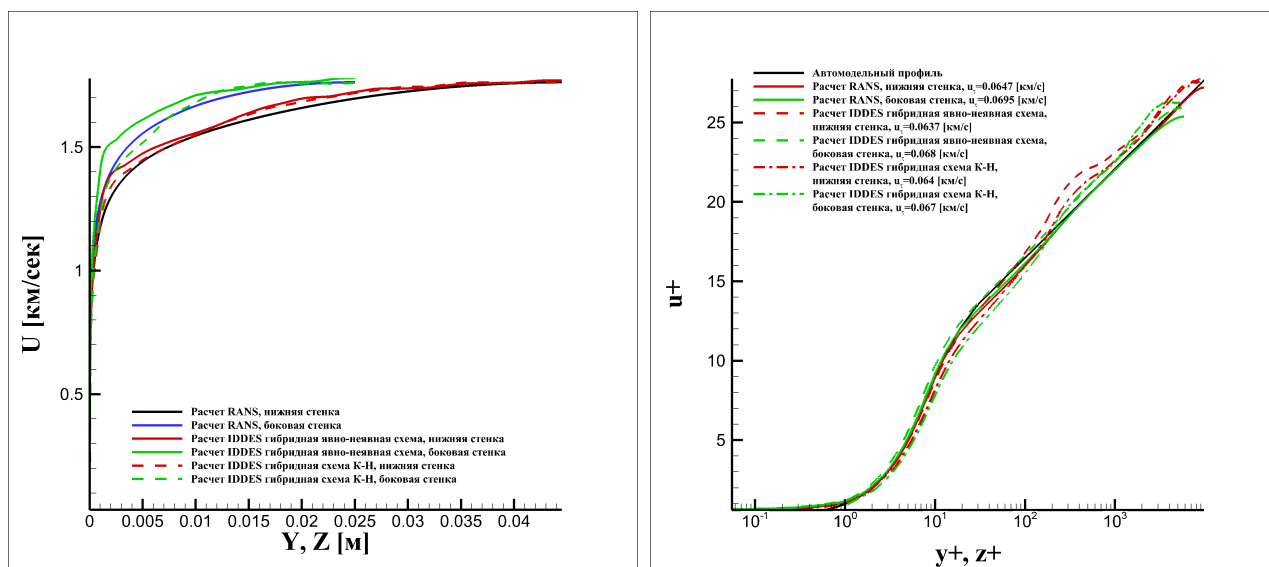


Рис. 4: Профили продольной и осредненной продольной скорости (слева), а также безразмерные профили скорости в переменных «закона стенки» (справа) полученные в рамках RANS и IDDES подходов соответственно.

Расчеты демонстрируют очень близкие результаты в ядре течения в канале, что объясняется вторым порядком аппроксимации схемы в данной области в обоих случаях. Преимущество схемы К-Н состоит в обеспечении 2-го порядка аппроксимации вблизи стенок. За счет этого в данной области К-Н схема показала чуть лучшее соответствие контрольным профилям. Однако стоит отметить, что при проведении расчетов сходимость по относительной невязке на 2 порядка для гибридной явно-неявной схемы достигалась за 20 итераций, а для гибридной схемы К-Н за 60 итераций. Это делает использование гибридной явно-неявной схемы более эффективным.

В пятой главе выполняется численное исследование физико-химических процессов внутри камеры сгорания Барроуса-Куркова. Данная камера имеет длину 35.6 см, ширину 5 см, а высоту от 8.9 см на входе до 10.5 см на выходе. Через камеру продувается сверхзвуковой поток газа со скоростью, соответствующей $M = 2.44$. Вдоль нижней стенки в камеру из форсунки подается водород с $M = 1$. Высота форсунки — 0.4 см. От камеры форсунка отделяется стенкой толщиной 0.076 см.

Расчетная область, кроме непосредственно камеры сгорания включала отрезок изолятора и часть водородной форсунки. Задача решалась в двух постановках. В первой постановке сквозь камеру продувался инертный газ и происходило смешение потоков без химических реакций между ними. Во второй постановке газовый поток представлял из себя воздух с водяным паром (vitiated air) и после смешения происходило самовоспламенение смеси. Каждая из постановок рассматривалась в рамках подходов 2D RANS (верхняя и нижняя стенки с прилипанием, боковые — с проскальзыванием), 3D RANS (все стенки с прилипанием) и 3D IDDES (нижняя стенка камеры и изолятора, а также стенки форсунки с прилипанием, боковые — периодические).

Размер сетки для RANS расчетов составлял 83 т. и 8.8 млн ячеек в 2D и 3D соответственно. IDDES расчеты выполнялись на сетке в 11.2 млн ячеек. Размер пристеночной ячейки соответствовал $y^+ = 2$.

Интегрирование по времени выполнялось с использованием гибридной явно-неявной схемы. RANS расчеты велись в стационарном режиме до сходимости решения. Для IDDES расчета был выбран шаг в 15 нс, который обеспечивал расчет по явной схеме во всей LES области и зоне перехода. При аппроксимации на грань в RANS расчетах использовался ограничитель ALBADA2, а в IDDES корректор значений.

Раздел 5.1 посвящен исследованию первой постановки. Стенки камеры сгорания считались изотермическими с температурой 298 К. Выходное граничное условие задавалось зависящим от локального числа Маха. В качестве входного граничного условия для водорода задавался массовый расход, а для сверхзвукового потока — профиль параметров, полученный при решении дополнительной задачи о продувке канала прямоугольного сечения длиной 1 м. Задача о течении в канале решалась в рамках RANS подхода. Для формирования нестационарного течения в изоляторе в процессе IDDES расчета, на первых 10 см расчетной области работал алгоритм рециклинга пульсаций.

Рисунок 5 демонстрирует структуру слоя смешения для 3D IDDES расчета на момент времени $t = 2.5$ мс как распределение массовой доли водорода в центральном продольном сечении камеры.

Во входном и выходном сечениях камеры были построены профили основных параметров и проведено сравнение с экспериментами авторов каме-

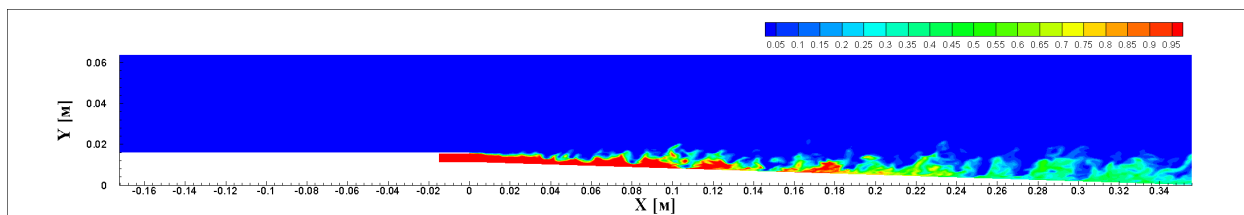


Рис. 5: Распределение массовой доли водорода в центральной продольной плоскости камеры сгорания для 3D IDDES расчета

ры и расчетными¹⁴ данными. Для трехмерных расчетов профили строились вдоль центрального сечения камеры. Осреднение по времени профилей параметров для IDDES расчета выполнялось за период 1.5 мс. На рисунке 6 приводятся результаты сравнения для давления Пито и мольной доли водорода в выходном сечении соответственно. На горизонтальной оси отложено расстояние от нижней стенки камеры. Значения давления Пито обезразмеривались на значение $P_{Pitot,ref} = 18.5 \cdot 10^5$ Па.

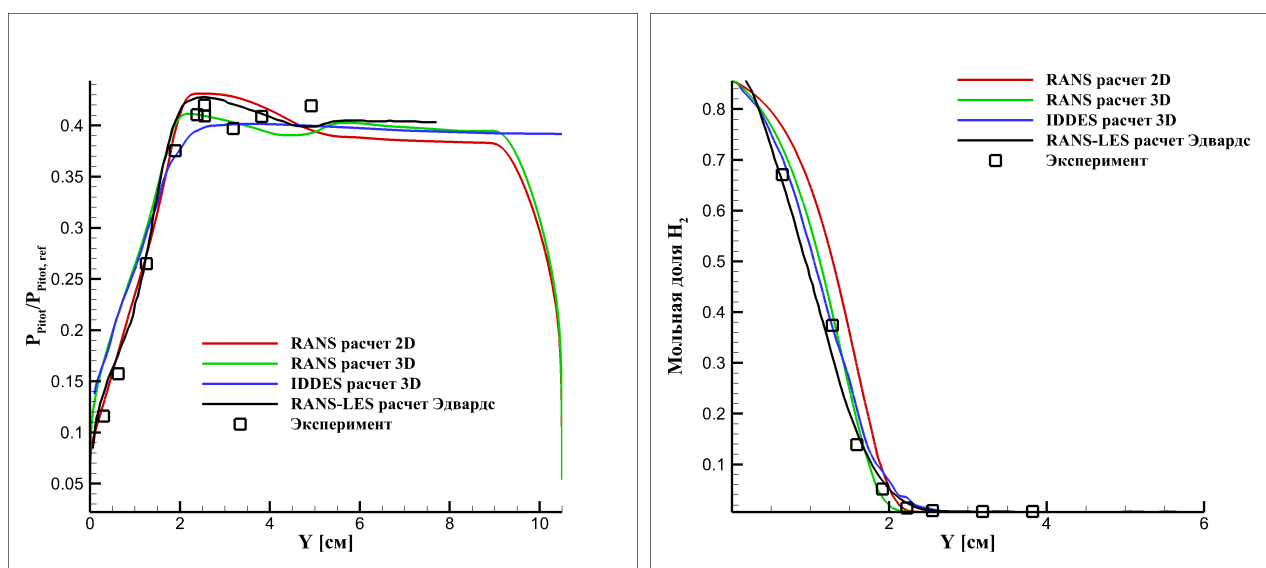


Рис. 6: Профили давления Пито (слева) и мольной доли водорода (справа) в выходном сечении камеры в сравнении с экспериментальными и расчетными данными.

Сравнение показывает, что RANS расчеты дают сходные результаты, однако 3D расчет показывает несколько лучшую корреляцию с экспериментальными данными (см. рис. 6) за счет учета боковых погранслоев. Профили, полученные в IDDES расчете, также показывают хорошую корреляцию с экспериментальными и расчетными данными как во входном, так и в выходном сечениях. Профили мольных долей компонент, также лучше совпадают

¹⁴Edwards, J.R., J.A. Boles, and R.A. Baurle. LES / RANS simulation of a supersonic reacting wall jet // AIAA Paper 2010-0370, LF99-10036. 2010. 20 p.

с экспериментом в случае учета боковых пограничных слоев в RANS расчете. Несмотря на то, что в IDDES расчете отсутствует учет боковых пограничных слоев, профили мольных долей также находятся в очень хорошем соответствии с экспериментальными точками и коррелируют с результатами RANS-LES расчета Edwards, что свидетельствует о правильно подобранной расчетной сетке и численном методе.

В разделе 5.2 исследуется вторая постановка, описывающая смешение с горением между потоками технического воздуха и водорода. Здесь стенки считались сделанными из меди и способными прогреваться на глубину до 0.017 м. Остальные граничные условия брались аналогичными первой постановке.

На рисунке 7 приводится распределение статической температуры для 3D IDDES расчета в центральном продольном и нескольких поперечных сечениях. Также на рисунок нанесена изоповерхность температуры 2250 К, являющаяся условной границей зоны пламени. Здесь и далее рисунки приводятся на момент $t = 3.0$ мс.

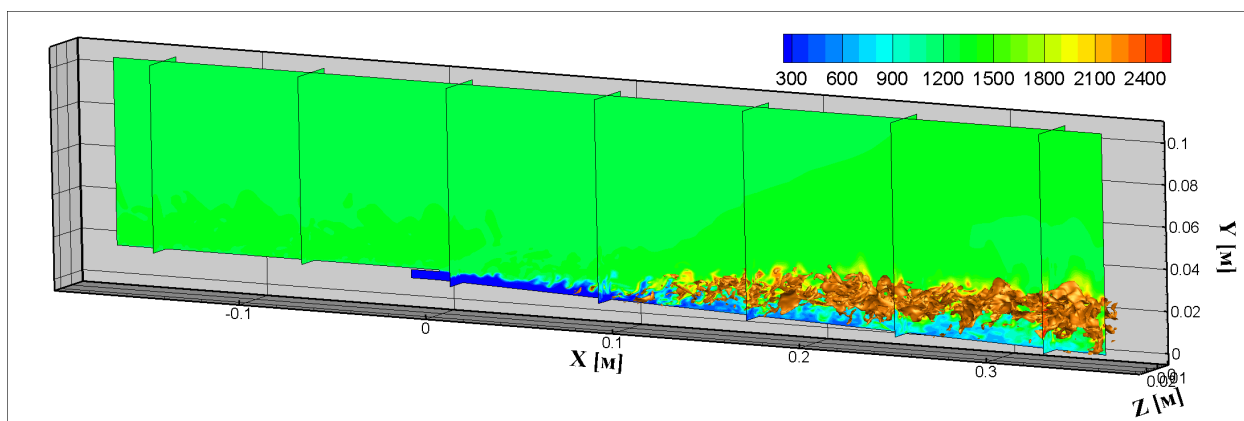


Рис. 7: Распределение статической температуры 3D IDDES расчета.

Для данной постановки также строились профили основных параметров во входном и выходном сечениях камеры для сравнения с экспериментальными данными авторов камеры и расчетными данными Эдвардса. Для получения средних по времени профилей параметров для IDDES расчета, выполнялось осреднение за период 2.0 мс. Результаты сравнения для полной температуры и мольной доли водяного пара в выходном сечении камеры приводятся на рисунке 8. Полная температура обезразмеривалась на величину $T_{tot,ref} = 2276$ К.

По результатам сравнения можно сделать заключение о хорошей корреляции полученных результатов с экспериментальными и расчетными данными. Профили полной температуры, полученные в RANS расчетах, хорошо соответствуют как расчетам Эдвардса, так и экспериментальным точкам, однако, в полученных результатах пик в зоне пламени имеет меньшую ширину,

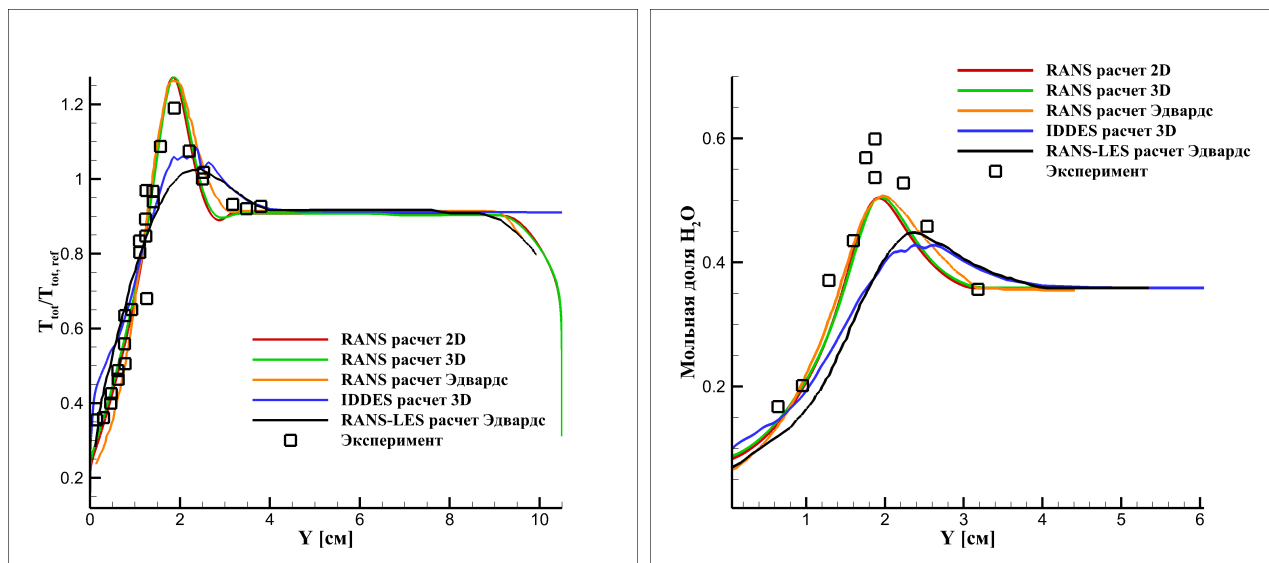


Рис. 8: Профили полной температуры (слева) и мольной доли водяного пара (справа) в выходном сечении камеры в сравнении с экспериментальными и расчетными данными.

а также область падения полной температуры над зоной пламени. Данное различие предположительно может быть определено различием в используемых расчетных сетках в области пламени, как следствие, особенностями процессов переноса. В гибридных расчетах происходит занижение пика полной температуры в зоне пламени, что может свидетельствовать о сниженной полноте сгорания. Это подтверждается также сниженным пиком мольной концентрации водяного пара.

В процессе выполнения работы были достигнуты следующие результаты:

- Разработана численная модель турбулентного смешения и горения в высокоскоростных газовых потоках. Модель смешения основана на использовании гибридного RANS-LES подхода IDDES к моделированию турбулентности, который позволяет получать нестационарное LES решение с разрешением вихревых структур в основной расчетной области, при этом оставаясь в рамках осредненного RANS подхода вблизи стенок. Это позволяет существенно экономить вычислительные ресурсы. В качестве полуэмпирической модели турбулентности используется модель Спаларта-Аллмараса (SA), которая позволяет обеспечить высокую точность результатов при моделировании пристеночных течений. Химические реакции между газовыми компонентами моделируются с помощью детального кинетического механизма, включающего реакции, имеющие зависимость скорости, как от температуры, так и от давления. Использование данного механизма позволяет получать правильные значения задержек самовоспламенения и тепловыделения в широком диапазоне дав-

лений, температур и коэффициентов избытка топлива, что очень важно при моделировании реакций в предварительно перемешанных смесях.

- Разработанная модель была реализована в виде вычислительных алгоритмов и программных модулей, которые были интегрированы в параллельный программный комплекс для моделирования пространственных течений потоков вязкого сжимаемого многокомпонентного газа на многопроцессорных ЭВМ.
- Проведена верификация и валидация работы как отдельных блоков модели, так и модели в целом путем численного решения модельных задач и сравнения результатов с контрольными данными.
- Выполнено моделирование процессов сверхзвукового смешения и горения в камере сгорания Барроуса-Куркова с применением RANS и IDDES подходов. Проведен сравнительный анализ результатов между собой, а также с экспериментальными и расчетными данными других авторов.

По результатам численных экспериментов были сделаны следующие выводы:

- Результаты расчетов с использованием реализованной модели хорошо согласуются с экспериментальными данными и не уступают в точности альтернативным расчетам других авторов, что позволяет говорить о том, что модель может быть использована для решения более сложных комплексных задач.
- Для проведения расчетов с использованием вихреразрешающих подходов необходимо использовать численные схемы, обладающие низкой схемной вязкостью, для формирования нестационарных турбулентных структур, а также расчетных сеток с достаточной разрешающей способностью и соответствующей геометрией ячеек для получения качественных результатов.
- Пограничные слои имеют существенную толщину при сверхзвуковых скоростях течений, что оказывает сильное влияние на процессы смешения, а следовательно, и горения, поэтому должны разрешаться максимально точно.

Также можно отметить, что предложенная вычислительная модель обладает широкими возможностями для модификации, которые могут быть использованы как для улучшения качества текущих результатов, так и для расширения области применения модели.

Публикации автора по теме диссертации:

Публикации в изданиях рекомендованных ВАК

1. Соломатин Р.С., И.В. Семенов, И.С. Меньшов. К расчету турбулентных течений на основе модели Спаларта-Аллмараса с применением LU-SGS-GMRES алгоритма // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша, препринт № 119. 2018. 30 с.
2. Соломатин Р.С., И.В. Семенов. Численное моделирование сверхзвукового смешения в камере сгорания Барроуса-Куркова с использованием SA-RANS модели // Горение и взрыв, Т. 12. № 3. 2019. С. 69-77.
3. Solomatin, R.S. and I.V. Semenov. Modelling of hydrogen-air supersonic mixing and combustion in near-wall region // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. Vol. 36. № 2. 2021. Pp. 101-115.
4. Solomatin, R., I. Semenov and I. Menshov. Mixing and Combustion in Supersonic Near-Wall Shear Flows // WCCM-ECCOMAS2020 proceedings. 2021. 8 p. URL: https://www.scipedia.com/public/Solomatin_et_al_2021a.
5. Соломатин Р.С. О моделировании формирования нестационарного турбулентного пограничного слоя в рамках SA-IDDES подхода // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша, препринт № 33. 2022. 34 с.
6. Соломатин Р.С. Реализация модели смешения и горения турбулентных течений в рамках программного комплекса // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша, препринт № 47. 2022. 28 с.

Публикации в прочих изданиях

1. Соломатин Р.С., И.В. Семенов. Моделирование сверхзвукового смешения в камере сгорания Барроуза-Куркова методом SA-RANS // Nonequilibrium processes. Vol. 2. Сборник трудов конференции 8th International Symposium On Nonequilibrium Processes, Plasma, Combustion, And Atmospheric Phenomena. 2019. С. 341-351.

Соломатин Роман Сергеевич

Численное моделирование процессов высокоскоростного смешения и горения в
неоднородных топливо-воздушных смесях

Автореф. дис. на соискание ученой степени канд. физ.-мат. наук

Подписано в печать __. __. _____. Заказ № _____

Формат 60x90/16. Усл. печ. л. 1. Тираж 100 экз.

ИПМ им.М.В.Келдыша РАН. 125047, Москва, Миусская пл., 4