

**Федеральное государственное учреждение
"Федеральный исследовательский институт
Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша
Российской академии наук"**

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

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
д.ф.-м.н, с.н.с
Меньшов Игорь Станиславович

Москва 2022

Содержание

Введение	4
1 Модель турбулентного смешения в сверхзвуковых газовых потоках	44
1.1 Метод осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье-Стокса (RANS)	44
1.2 Модель турбулентности Спаларта-Аллмараса	49
1.3 Метод моделирования крупных вихрей (LES)	51
1.4 Метод моделирования отсепарированных вихрей на основе модели Спаларта-Аллмараса (SA-DES)	53
1.5 Поправка к методу SA-DES на низкие числа Рейнольдса	55
1.6 Усовершенствованный метод моделирования отсепарированных вихрей с отложенным переходом (SA-IDDES)	57
1.7 Общий вид модели высокоскоростного смешения многокомпонентных газовых потоков	60
2 Модель химических реакций. Детальный кинетический механизм	64
2.1 Моделирование химических реакций. Использование различных кинетических механизмов	64
2.2 Описание используемого кинетического механизма и метода моделирования химических реакций	66
2.3 Интеграция химической кинетики в газодинамические уравнения	68

3 Используемые численные методы и особенности реализации	70
3.1 Численный метод для решения основной системы уравнений	70
3.2 Численный метод для решения системы уравнений химической кинетики	78
3.3 Особенности реализации и используемые программные решения .	86
4 Верификация и валидация разработанной модели	91
4.1 Валидация кинетического механизма	91
4.2 Моделирование стационарного турбулентного пограничного слоя на плоской пластине	96
4.3 Моделирование стационарного течения в асимметричном диффузоре Оби	101
4.4 Моделирование стационарного турбулентного слоя смешения . .	103
4.5 Сравнение производительности методов LU-SGS и GMRES-LU-SGS	107
4.6 Тест Shu-Osher о взаимодействии ударной волны со сверхзвуковой средой	111
4.7 Моделирование сверхзвукового нестационарного течения в прямоугольном периодическом канале	120
5 Моделирование процессов смешения и горения в модельной камере сгорания Барроуса-Куркова	136
5.1 Смешение водорода с инертным газом	138
5.2 Смешение с горением водорода и технического воздуха	151
Заключение	173
Список литературы	176
Приложение А	189

Введение

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 камера姆 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 ис-

следований 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 раздельно. 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.

Степень научной разработанности темы:

Считается, что изучение процессов горения началось в конце 19-го века, когда в большом количестве начали появляться научные работы по данной теме. До этого также существовали теоретические и экспериментальные исследования химических процессов горения, однако они носили единичный характер. Основной из таких работ, считающейся основой всей современной науки о горении, является разработка кислородной теории горения А.Л. Лувузье в 1773 году. Опираясь на данную теорию проводили свои эксперименты Р. Бунзен (1866), А.Л. ле Шателье (1881), а также были сформированы первые аспекты теории распространения детонации В.А. Михельсоном, Д. Чепменом и Ж. Жуге.

В течение первой половины 20-го века шло активное изучение горения, в процессе которого интерес ученых все больше смещался в сторону процессов в высокоскоростных потоках. Экспериментальные исследования показали, что существует много факторов, которые напрямую влияют на процесс горения. В первую очередь таким фактором является процесс смешения, который непосредственно предшествует горению. В случае высокоскоростных потоков характерные времена процессов могут быть очень малыми, из-за чего смешение происходит сильно неравномерно в пространстве, с образованием больших градиентов концентраций. Результат смешения критически влияет на процесс горения. Появляются зоны, в которых смесь не прогорает до конца, а также меняется геометрия и положение зоны пламени. Еще одним важным фактором становится геометрия «камеры сгорания», если речь идет о горении внутри закрытого пространства. При одних и тех же газодинамических параметрах смеси на входе в камеру, ее геометрия может влиять как на расположение зоны пламены, так и на факт воспламенения смеси в принципе. Данные особенности вызывали большой интерес ученых, что привело к появлению большого количества сначала экспериментальных, а с появлением ЭВМ и расчетных работ.

Самой простой с точки зрения практической реализации компоновкой является смешение коаксиальных потоков, подающихся через трубы постоянного диаметра, вложенные одна в другую. Схематично такая установка, реализующая смешение водорода с воздухом, показана на рисунке 1.

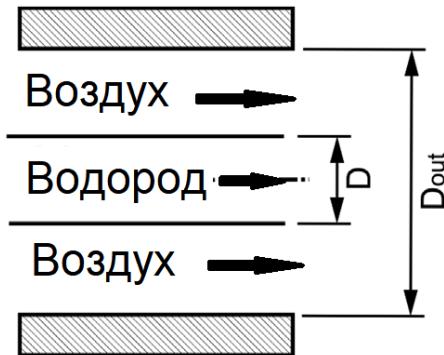


Рис. 1: Схематичное изображение экспериментальной установки для исследования смешения коаксиальных потоков [1].

Одной из первых экспериментальных работ, реализующих данную простейшую компоновку, являются работы *Cohen & Guile* [2, 3] 1970 года. В них рассматривались процессы смешения и горения холодного водорода, который подавался из внутреннего сопла радиусом 1 см со скоростью, соответствующей числу Маха $M = 1.46$, с горячим воздухом, подающимся из подогревателя через внешнее сопло радиусом 5 см с $M = 1.86$. На рисунке 2 приводятся схема сопла, а также шлирен-фотография пламени на срезе сопла.

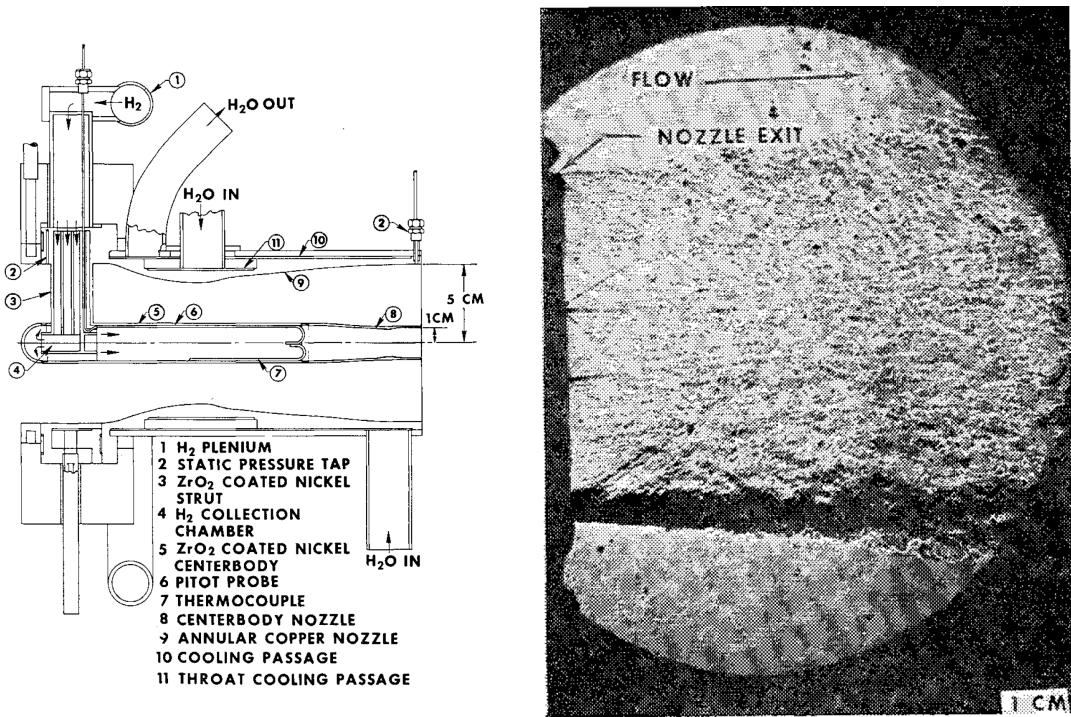


Рис. 2: Схема сопла экспериментальной установки (слева) и шлирен-фотография пламени на срезе сопла (справа) из работы *Cohen & Guile* [3].

В работе были рассмотрены два случая, отличающиеся концентрацией кислорода во внешнем потоке. В первом случае газ представлял собой именно подогретый воздух, а во втором, большая часть кислорода была замещена азотом для снижения реакционной способности.

Спустя 8 лет была опубликована работа *Evans, Schexnayder & Beach* [4], ставшая классической в изучении сверхзвукового горения, а в дальнейшем международной тестовой постановкой для проведения валидации работы математических моделей, описывающих процессы сверхзвукового смешения и горения. Работа является вычислительной и посвящена моделированию экспериментов с помощью двумерного кода, однако основной ценностью данной работы является именно большое количество экспериментальных данных. В работе [4] рассматриваются как собственные экспериментальные исследования [5] 1975 года также посвященные смешению потоков на выходе из соосных сопел, так и эксперименты *Cohen & Guile* [3], *Eggers* [6], *Burrows & Kurkov* [7, 8]. Эксперимен-

тальные данные описывают состав смеси, температуру и давление на разных расстояниях от точки смешения, по которым вплоть до настоящего времени производится калибровка разрабатываемых моделей.

Еще одной классической работой, результаты которой также широко используются для проверки работы математических моделей, является работа *Cheng et al.* [9]. В ней проводится экспериментальное исследование диффузионного горения водородо-воздушной смеси с помощью ультрафиолетового рассеяния Рамана. Схема горелки, которая использовалась в работе, приводится на рисунке 3.

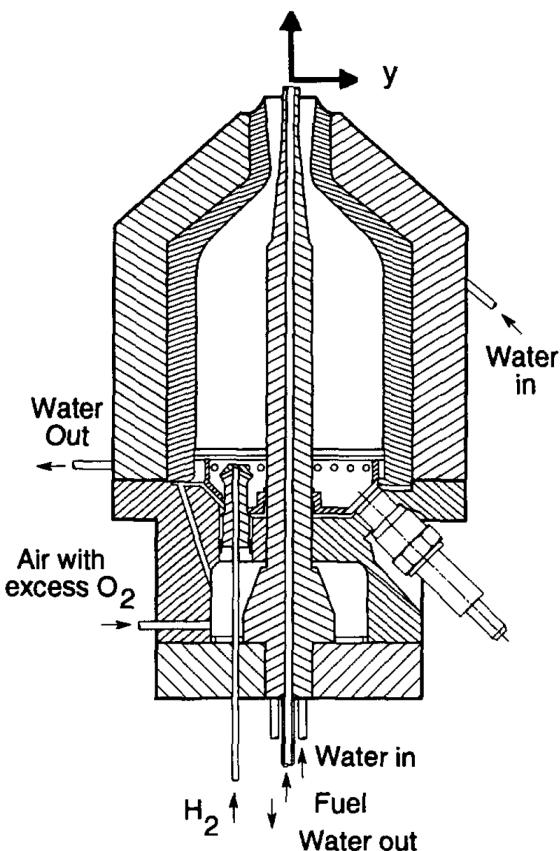


Рис. 3: Схема экспериментальной установки из работы *Cheng et al.* [9].

Диаметры внутреннего и внешнего сопла в данной экспериментальной установке отличаются совсем незначительно: 1 мм и 2.36 мм соответственно. Особенностью задачи является горение в естественных условиях — потоки взаимодействуют не только между собой, но и с окружающей средой. На рисунке 4

приводятся фотографии пламени: шлирен-фотография слева и фотография с долгой экспозицией справа.

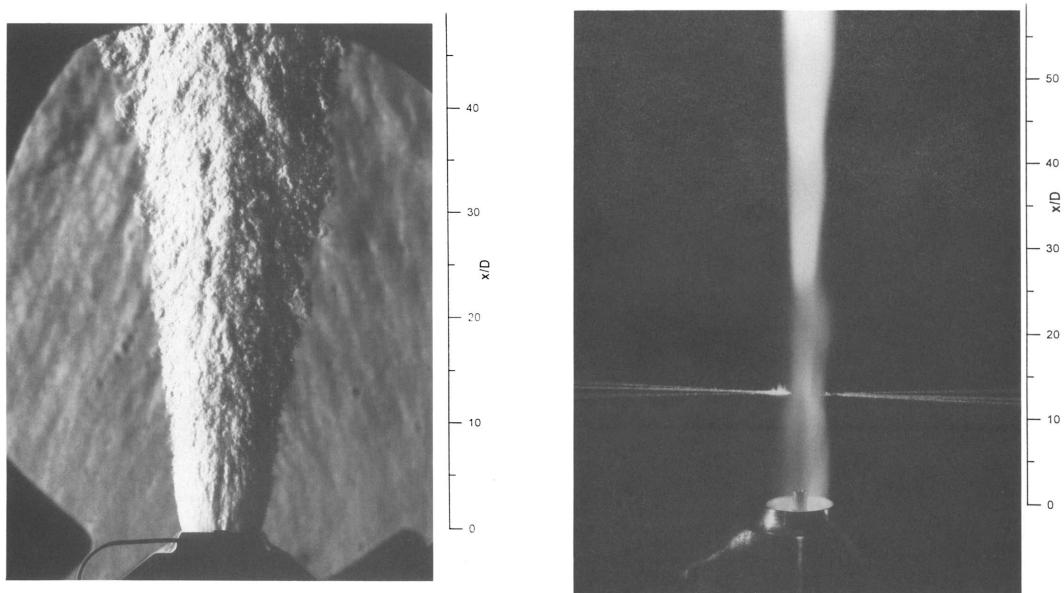


Рис. 4: Фотографии пламени горелки: шлирен-фотография (слева) и фотография с долгой экспозицией (справа) из работы *Cheng et al.* [9].

Также заслуживает упоминания эксперимент *Cutler et al.* [10, 11]. Установка также представляла горелку, в которой струя холодного гелия вдувалась в поток воздуха. Характерное число Маха для обоих потоков составляла $M = 1.8$. Данная постановка также широко используется для проведения валидации моделей смешения и горения благодаря высокой точности измерений, проведенных авторами эксперимента. Более того, авторы изначально ставили целью создание валидационного теста, поэтому максимально подробно описали параметры установки и газовых потоков. На рисунке 5 приводится общая схема установки из работы [10].

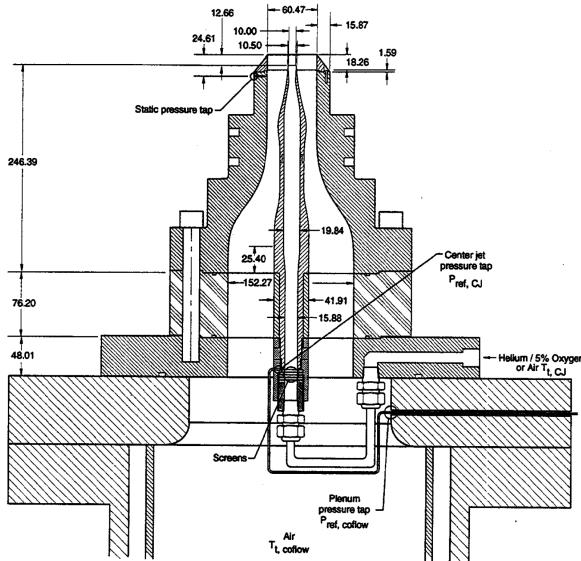


Рис. 5: Схема экспериментальной установки из работы Cutler *et al.* [10].

Создаваемые экспериментальные установки не ограничивались простой компоновкой, рассматривающей смешение коаксиальных потоков. Большое количество работ посвящено исследованию процессов смешения и горения в камерах с более сложной геометрией и конструкцией, характеризующихся наличием уступов, каверн, подачей топлива под углом к потоку окислителя. Ярким примером камеры с уступом является модельная камера сгорания Барроуса-Куркова [7, 8], о которой уже упоминалось ранее. В данной камере подача водорода осуществляется вдоль нижней стенки из форсунки высотой 4 мм (см. рисунок 6), а сама камера является расширяющейся. Экспериментальные данные, полученные авторами камеры, широко используются для валидации моделей, описывающих процессы турбулентного смешения и горения в сверхзвуковых потоках в пристеночных областях. Моделированию процессов в камере Барроуса-Куркова посвящена глава 5 настоящей диссертации.

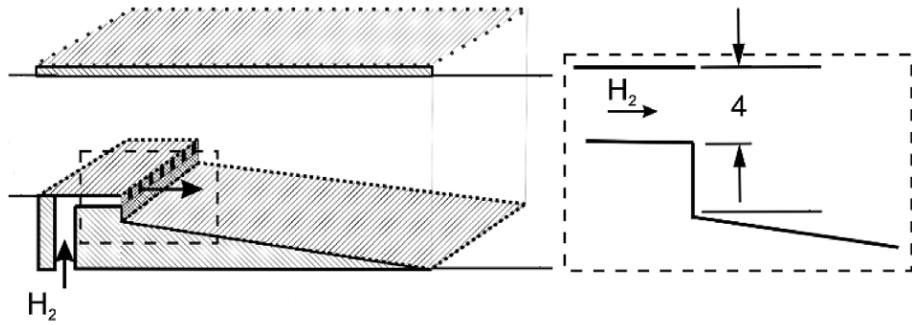


Рис. 6: Схема впрыска водорода в эксперименте *Burrows & Kurkov* [1].

В начале 90-х годов в Центральном институте авиационного моторостроения им. П.И. Баранова (ЦИАМ) была проведена серия экспериментов по исследованию влияния положения впрыска и расхода через топливные форсунки на работу кольцевой камеры сгорания под руководством В.А. Виноградова [12]. Схематичное изображение камеры приводится на рисунке 7. Водород подавался через три группы форсунок, обозначенных на рисунке как I, II и III. Группы отличались количеством форсунок, диаметром и углом впрыска по отношению к потоку.

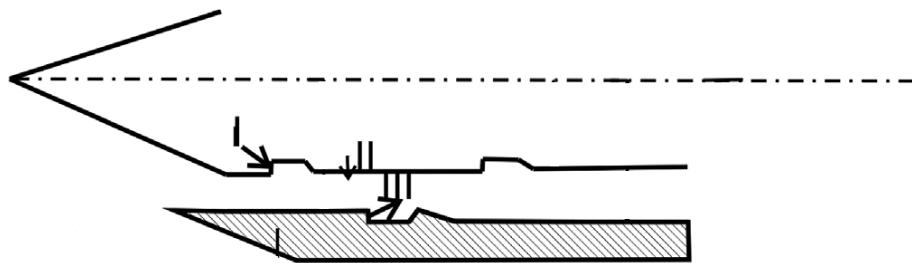


Рис. 7: Схема экспериментальной установки из работы [12].

Основными результатами работы стали рекомендации по выбору позиции впрыска и расходу топлива для эффективной работы кольцевой камеры при дальнейших полетных испытаниях.

Экспериментальные исследования также активно проводятся в Центральном аэрогидродинамическом институте (ЦАГИ). Примером может служить эксперимент ЦАГИ Т-131, где установка представляет прямоточную сверзвуковую

камеру сгорания с обратным уступом (см. рисунок 8). Через камеру продувается сверхзвуковой воздушный поток, а перед уступом в изоляторе установлен пилон, через который в камеру подается топливо. В работе [13] скорость воздушного потока соответствовала $M = 3.0$, а через форсунки пилона в течении 5 секунд подавался водород, что обеспечивало значения коэффициента избытка топлива в камере в диапазоне $\phi = 0.4 \div 0.8$.

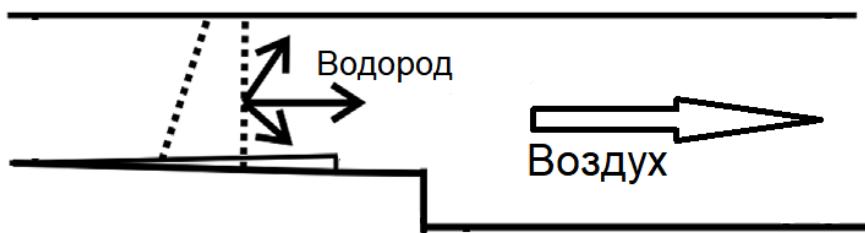


Рис. 8: Схема экспериментальной установки ЦАГИ Т-131 [13].

Для инициации процесса горения использовался так называемый «пневмодроссель» — форсунка, запирающая потоком воздуха камеру на выходе. С помощью изменения расхода воздуха регулировалась интенсивность запирания, а следовательно процесс воспламенения. Анализ процессов в камере с помощью метода спектроскопии Рамана в работе [13] позволил изучить влияние смешения на процессы воспламенения и горения. Также в данной экспериментальной установке проводились исследования с использованием углеводородного топлива (керосина) [14].

Наработки, полученные учеными ЦАГИ при проведении эксперимента Т-131, были использованы в дальнейшем при экспериментальных исследованиях в рамках международных проектов, последним из которых стал HEXAFLY-INT (High-Speed Experimental Fly Vehicles — International), стартовавший в 2014 году [15]. Данный проект является продолжением проекта LAPCAT II, в рамках которого разрабатывался концепт гиперзвукового летательного аппарата нового поколения [16]. В рамках проекта HEXAFLY-INT предполагается подготовка и осуществление летных испытаний данного концепта. Российскими экс-

perimentatorами выполняются исследования силовой установки для отработки различных режимов работы [17]. На рисунке 9 показана экспериментальная модель проточного тракта силовой установки HEXAFLY-INT, а на рисунке 10 — фотография нагрева экспериментальной установки в время испытаний из диссертационной работы А.А. Ширяевой [18].

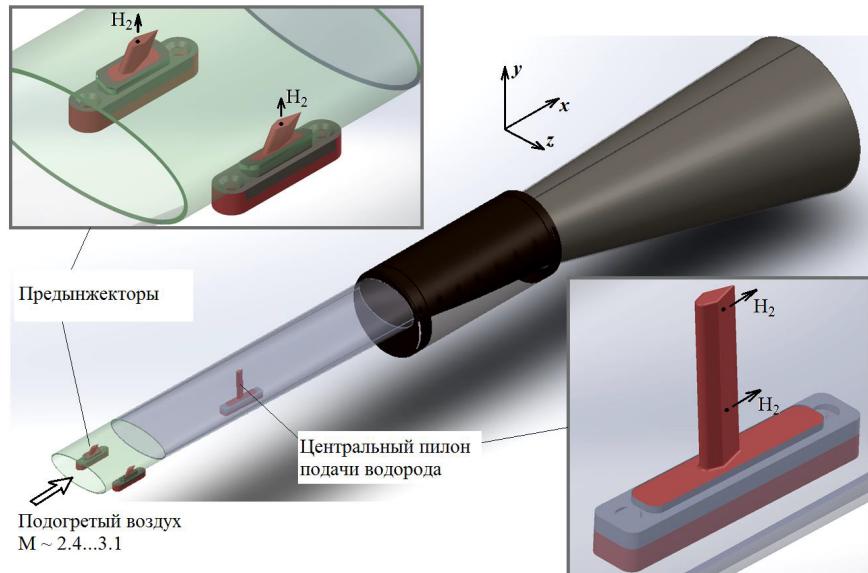


Рис. 9: Экспериментальная модель внутреннего проточного тракта силовой установки HEXAFLY-INT [18].

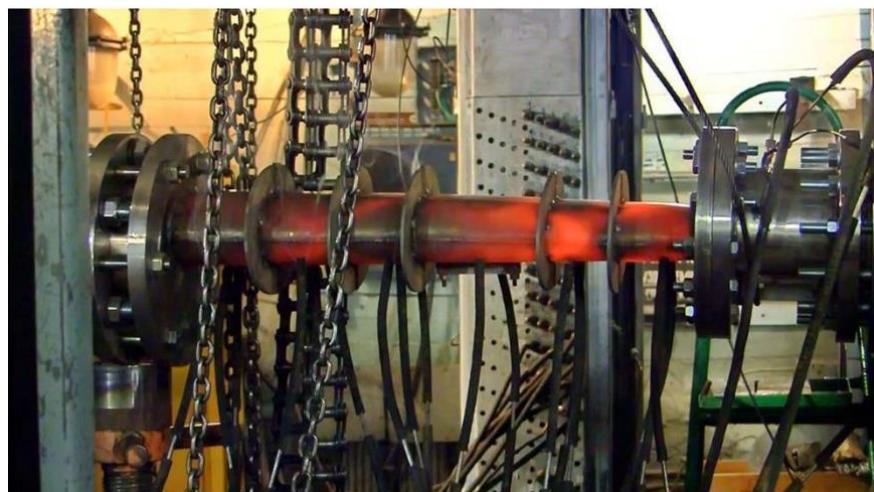


Рис. 10: Фотография нагрева модели силовой установки HEXAFLY-INT во время испытаний [18].

Говоря об исследованиях в области высокоскоростного смешения и горения, нельзя не отметить Федеральный исследовательский центр химической физики (ФИЦ ХФ) им. Н.Н. Семенова, где в отделе горения и взрыва под руководством С.М. Фролова ведется большое количество как экспериментальных, так и вычислительных работ. Основной областью научных интересов данной исследовательской группы является детонация как наиболее перспективный случай сверхзвукового горения. Разработка ведется как в области импульсных детонационных установок [19, 20], двигательных установок на непрерывной детонации [21, 22], применения сверхзвукового горения и детонации в различных областях [23, 24]. На рисунке 11 приводится фотография импульсного прямоточного реактивного двигателя на тестовом стенде из работы [19], а на рисунке 12 — схема двигателя, работающего на непрерывной вращающейся детонации [21], с указанием зон, в которых протекают процессы высокоскоростного смешения и горения.

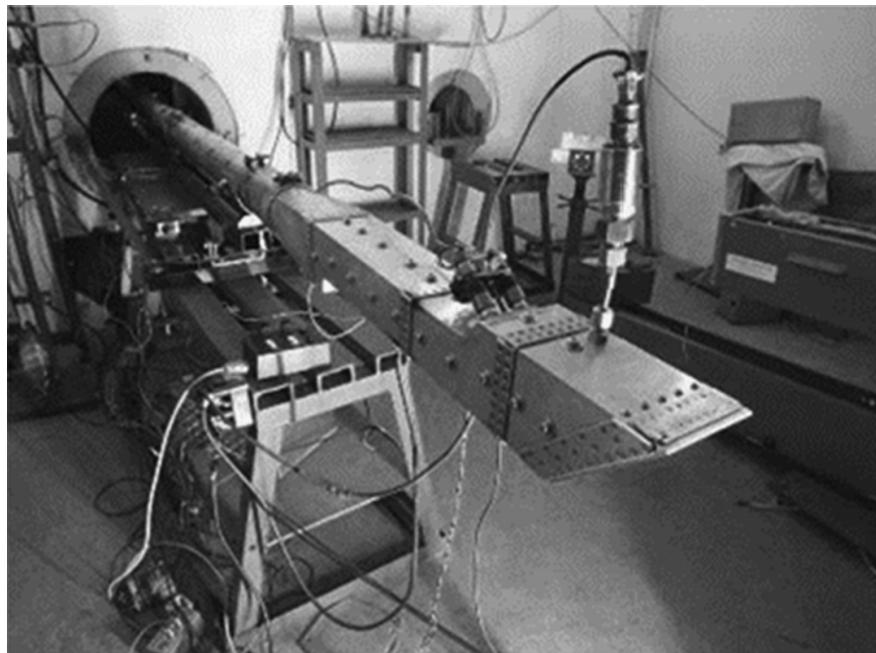


Рис. 11: Фотография импульсного детонационного двигателя на тестовом стенде ФИЦ ХФ РАН [19].

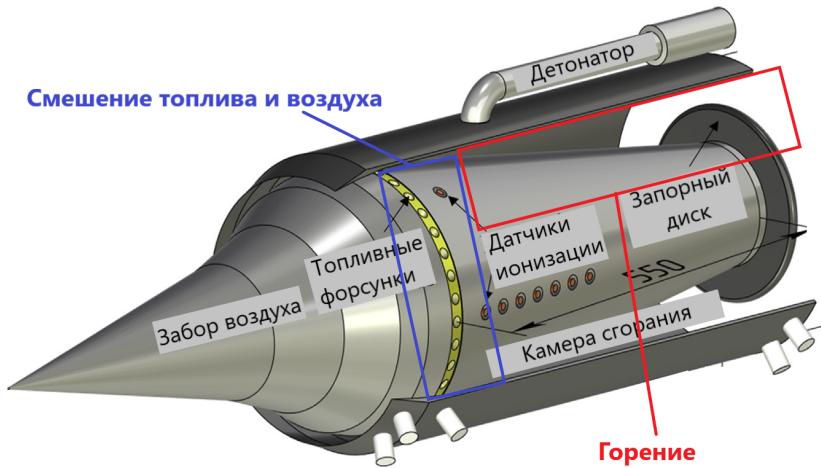


Рис. 12: Схема тестового двигателя на непрерывной вращающейся детонации ФИЦ ХФ РАН [21].

Экспериментальные исследования являются неотъемлемой частью разработки теории, однако в случае сверхзвукового горения присутствует сложность регистрации процессов, связанная с высокими скоростями и малыми характерными временами, а также повышенная нагрузка на оборудование и дороговизна проведения тестов с широкой вариацией параметров. Учитывая это, все большее распространение получают численные исследования с применением математического моделирования, чему способствует развитие вычислительной техники и рост доступных вычислительных мощностей.

Первые расчеты по моделированию процессов высокоскоростного смешения и горения выполнялись с использованием модели невязкого сжимаемого газа. Газовая динамика в данной модели описывается системой уравнений Эйлера. Данная модель является достаточно простой и как следствие нетребовательной к вычислительным ресурсам, поэтому получила широкое распространение в период первых численных исследований.

Модель невязкого сжимаемого газа позволяла проводить простые численные исследования процессов горения в реагирующих смесях. Главным ограничением являлась невозможность описания процессов смешения и ее пригодность

только для расчетов горения в подготовленных смесях. Несмотря на это, даже такая простая модель дала возможность ученым проверить базовые законы возникновения и распространения детонации, которая является частным случаем сверхзвукового горения.

С увеличением доступных вычислительных ресурсов появилась возможность создания более сложных и ресурсоемких моделей, а также проведения расчетов с большим пространственным и временным разрешением. Начинается разработка более совершенных газодинамических моделей, учитывающих вязкость, теплопроводность и диффузию в газах. Данные модели основываются на более сложной системе уравнений Навье-Стокса и позволяют моделировать процессы смешения между потоками, а также учитывать влияние пограничных слоев и рециркуляционных зон, что сильно приблизило рассматриваемые постановки в численных исследованиях к экспериментальным.

Модели вязкости, теплопроводности и диффузии включают в себя турбулентность, которая до настоящего времени является сложным и малоизученным явлением. Тем не менее, ее необходимо учитывать так как в природе практически не существует ламинарных течений, а процессы перемешивания всегда носят турбулентный характер.

Учет турбулентных эффектов, как важнейшего аспекта, влияющего на процессы высокоскоростного смешения и горения, ведет к значительному усложнению вычислительных моделей. Подходы к моделированию турбулентности представляют обширную область вычислительной газодинамики, а их грамотное применение — сложная и многогранная задача со своей историей исследования в несколько десятков лет. Турбулентность имеет стохастическую природу, принципиально трехмерный и нестационарный характер, а также включает широкий спектр пространственно-временных масштабов, что делает невозможным создание универсальной модели, позволяющей описывать одновременно существенно разные течения.

Общепринятая теория гласит, что турбулентные течения могут быть описаны с помощью системы уравнений Навье-Стокса, однако аналитическое решение данной системы уравнений не получено до сих пор, а ее численное решение, требующее разрешения всех пространственных и временных масштабов является чрезвычайно затратной по вычислительным ресурсам задачей. Решение реальных практических задач, рассматривающих течения внутри сложных геометрий при высоких числах Рейнольдса с помощью прямого численного моделирования DNS (Direct Numerical Simulation) станет доступно только в будущем при многократном увеличении мощностей вычислительной техники.

Для течений при высоких числах Рейнольдса справедлив энергетический спектр турбулентности, представленный на рисунке 13 [25].

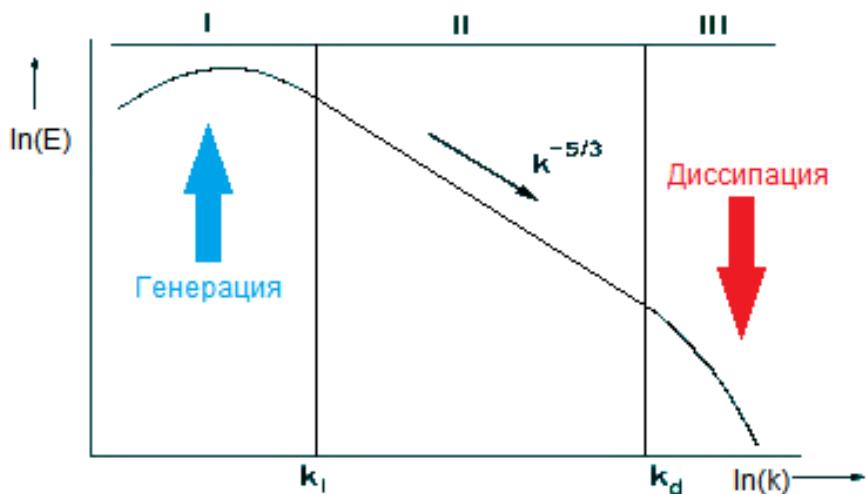


Рис. 13: Энергетический спектр турбулентности — зависимость энергии турбулентности от волнового числа [25].

Данный спектр может быть разделен на три характерные области. Крупномасштабные вихри, имеющие размер порядка интегрального линейного масштаба рассматриваемого течения L , являются энергонесущими и берут энергию из осредненного течения. Данный вид вихрей имеет наименьшее волновое число $k_I = 2\pi/L$ и им соответствует первая область на графике рисунка 13.

Предельное волновое число, которое может иметь вихрь, соответствует колмогоровскому масштабу $\eta = (\nu^3/\varepsilon)^{1/4}$, $k_d = 2\pi/\eta$, где ε — скорость диссипации

энергии турбулентности, ν — кинематическая вязкость. Вихри, имеющие волновые числа, превышающие k_d , диссирируют и отвечают за перевод кинетической энергии турбулентности в тепло. Данному «семейству» мелких вихрей соответствует область III на графике.

Область II соответствует так называемому энергетическому каскаду. В турбулентных вихревых структурах, соответствующих размерам $\eta < l < L$, не происходит ни генерации, ни диссириации турбулентной энергии, а лишь ее передача от крупных вихрей к мелким. Энергетический спектр внутри каскада является универсальным и описывается законом Колмогорова: $E \sim k^{-5/3}$.

Оценки показывают, что затраты на проведение расчета методом прямого численного моделирования растут как $Re^{11/4}$, что означает увеличение затрат почти в тысячу раз на каждое увеличение на порядок характерного числа Рейнольдса задачи. Поэтому для расчетов методом DNS доступны исключительно течения, имеющие небольшие числа Рейнольдса и рассматриваемые в ограниченных пространственных областях. Пока же DNS применяется только в фундаментальных научных расчетах, направленных на изучение законов турбулентности [26].

Для решения практических задач, описывающих течения с большими числами Рейнольдса, в противовес прямому численному моделированию появился подход RANS, основанный на решении осредненных по Рейнольдсу [27] уравнений Навье-Стокса (уравнений Рейнольдса). Данный метод позволяет получить исключительно характеристики осредненного течения без разрешения турбулентных структур, но требует несопоставимо меньше вычислительных ресурсов.

Важной особенностью RANS (Reynolds averaged Navier-Stokes) подхода является использование так называемой полуэмпирической модели турбулентности, отвечающей за вычисление турбулентных характеристик потока. В 70-х и 80-х годах прошлого века было разработано большое количество моделей турбулентности, каждая из которых обладала своими особенностями, преимущества-

ми и недостатками. Попытки объединения наработок и создания универсальной модели турбулентности, пригодной для моделирования любых течений, достаточно быстро были признаны несостоятельными и были свернуты.

С практической точки зрения наиболее интересными являются задачи аэrodинамики, связанные с внешним и внутренним обтеканием. На настоящее время, общепринятым является решение, что для таких задач наиболее подходящими являются две модели турбулентности: модель Спаларта и Аллмараса (SA модель) [28], и модель Ментера (Shear Stress Transport или SST модель) [29]. Первая из них содержит одно дифференциальное уравнение переноса (для модифицированной турбулентной вязкости $\tilde{\nu}$), а вторая — два таких уравнения (для кинетической энергии турбулентности k и удельной скорости ее диссиpации ω).

Далее приводятся примеры расчетов с применением двух данных моделей турбулентности для различных модельных геометрий. Рисунки 14-17 взяты из работы [25].

На рисунке 14 показаны результаты моделирования турбулентного пограничного слоя на плоской пластине. Данный тест является простейшей валидационной постановкой и графики на рисунке 14 демонстрируют, что результаты, полученные с применением обеих моделей, хорошо согласуются с теорией.

Расчеты показывают, что SA и SST модели демонстрируют точные и близкие друг другу результаты при расчете безотрывных и предотрывных течений. Однако если геометрия задачи подразумевает формирование отрывных зон, характеристики течения, предсываемые моделями, начинают отличаться от экспериментальных данных. Примером может служить показанный на рисунке 15 ассиметричный диффузор Оби [30]. В верхней части рисунка представлена расчетная сетка, а на нижней — графики распределения трения вдоль стенок диффузора. Расчеты проводились авторами работы [25]. Полученные результаты демонстрируют, что при расчете с использованием SA модели точка отрыва находится ниже по потоку и ближе к экспериментальному значению, чем при

расчетах с использованием SST модели. Однако SST модель гораздо лучше описывает профиль трения вдоль прямой верхней стенки диффузора. Как было указано выше, обе модели завышают длину участка релаксации после точки присоединения, что также можно видеть на рисунке 16, демонстрирующем профили продольной скорости и касательных напряжений вдоль диффузора.

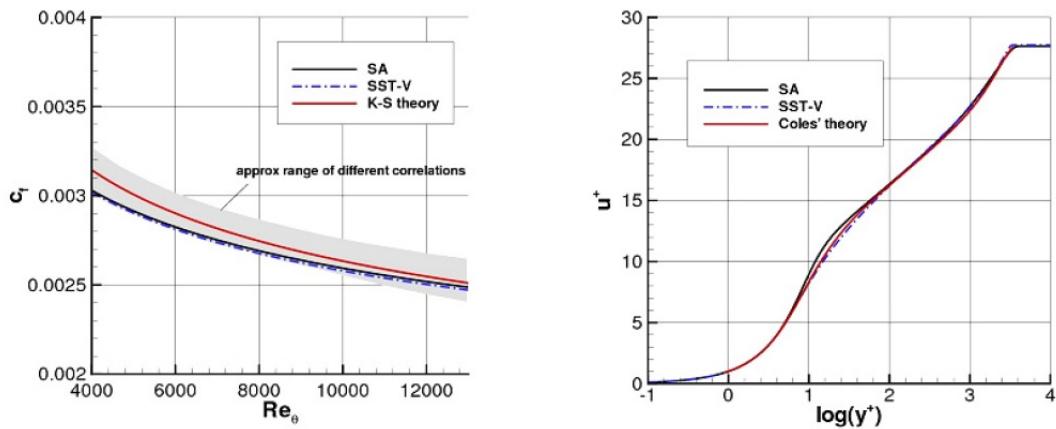


Рис. 14: Сравнение результатов расчета коэффициента трения и профиля скорости в турбулентном пограничном слое на плоской пластине, полученных с использованием SA и SST моделей, с теорией и экспериментальными корреляциями [25].

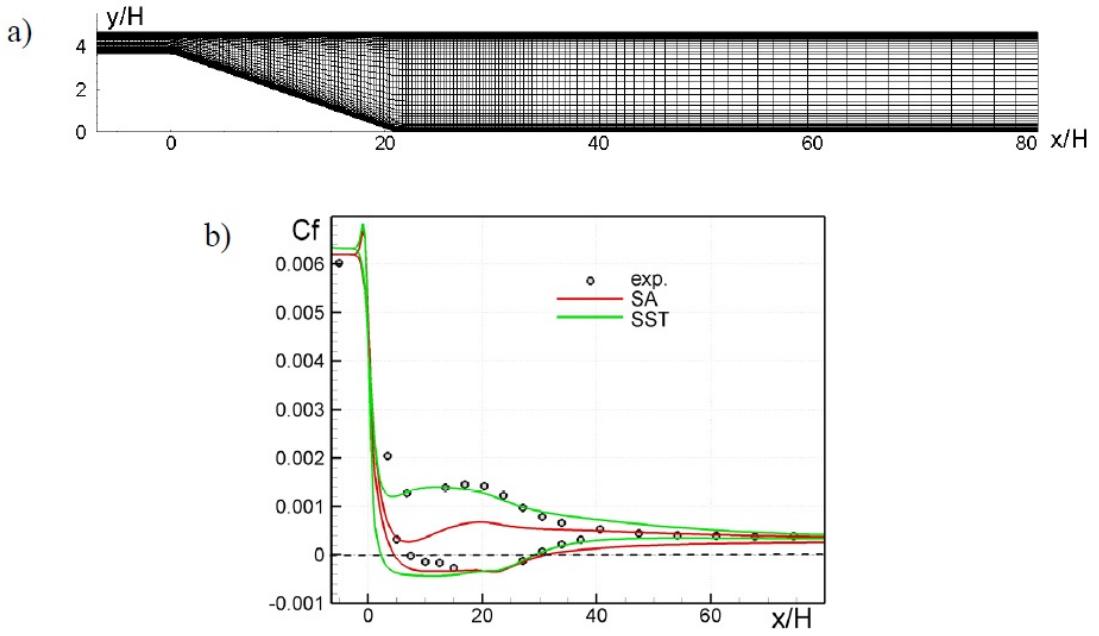


Рис. 15: Геометрия диффузора (а) и сравнение экспериментальных распределений трения вдоль наклонной и прямой стенок ассиметричного плоского диффузора с расчетными распределениями, полученными с использованием SA и SST моделей (б) [25].

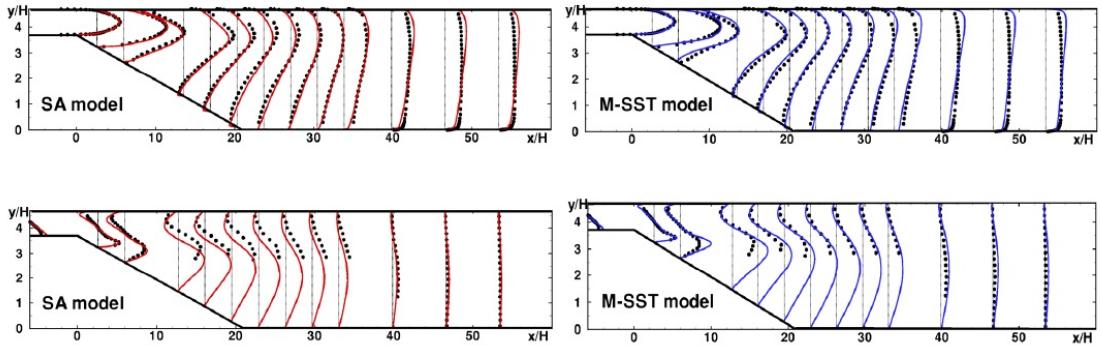


Рис. 16: Сравнение экспериментальных профилей продольной скорости (верхний ряд) и касательных напряжений (нижний ряд) в различных сечениях диффузора с результатами расчетов с использованием SA и SST моделей [25].

В описанных выше примерах рассматривались исключительно дозвуковые течения. В случае, если задачи обтекания решаются для трансзвуковых и сверхзвуковых течений, то формирование отрывных зон на особенностях геометрий

становится неизбежным, а следовательно, на таких задачах SA и SST модель также показывают результаты, посредственно коррелирующие с экспериментальными данными и между собой. Рисунок 17 демонстрирует зависимость расчетного коэффициента сопротивления от угла атаки при расчете обтекания профиля NACA0012 при числе Рейнольдса $Re = 10^5$.

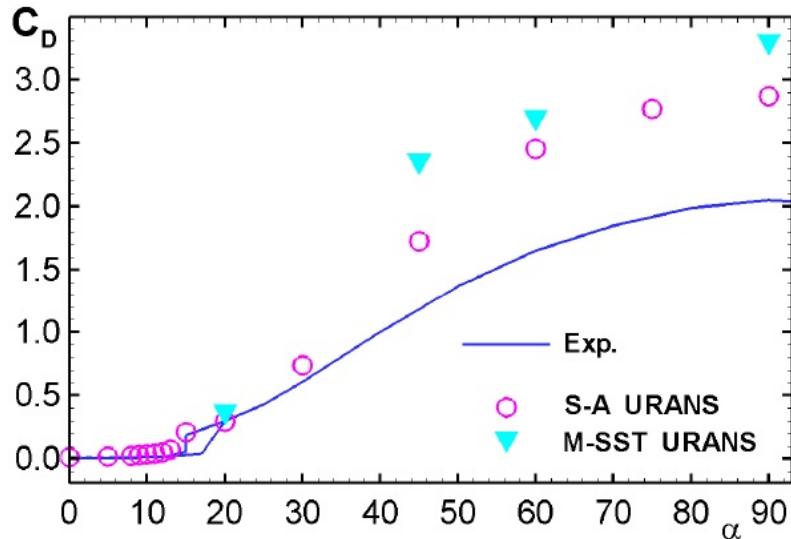


Рис. 17: Сравнение расчетных зависимостей коэффициента сопротивления профиля NACA0012 от угла атаки, полученных с использованием SA и SST RANS моделей, с экспериментальными данными [25].

Так как прямое численное моделирование требует слишком высоких вычислительных затрат, а RANS подход имеет ограниченную область применимости и позволяет получать исключительно осредненные макрохарактеристики потока, появилась необходимость создания подхода, представляющего промежуточный этап между RANS и DNS. Так в 80-х годах прошлого века появился подход, называемый методом моделирования крупных вихрей (Large Eddies Simulation, LES) [31]. Главной особенностью данного подхода является замена осреднения параметров реального турбулентного потока по времени (переход от уравнений Навье-Стокса к уравнениям Рейнольдса), «фильтрацией» этих параметров от коротковолновых мод, то есть их пространственным осреднением по областям с размерами порядка размера фильтра.

В терминах универсального турбулентного энергетического спектра процедура фильтрации означает, что если размеру фильтра соответствует волновое число k_Δ , лежащее в области энергетического каскада $k_I < k_\Delta < k_d$ (см. рисунок 18), то моделироваться будут только мелкие, не зависящие от геометрии расчетной области, вихри. Моделирование неразрешаемой части спектра осуществляется с помощью так называемой «подсеточной» модели, работа которой напоминает работу полуэмпирической модели турбулентности в рамках RANS подхода, однако несет кардинально иной смысл. Роль подсеточной модели в LES сводится к обеспечению правильной скорости каскадной передачи энергии турбулентности от крупных к мелким вихрям в пределах каскадного (II-го) интервала волновых чисел, что эквивалентно правильной скорости диссипации наименьших из разрешаемых вихрей.

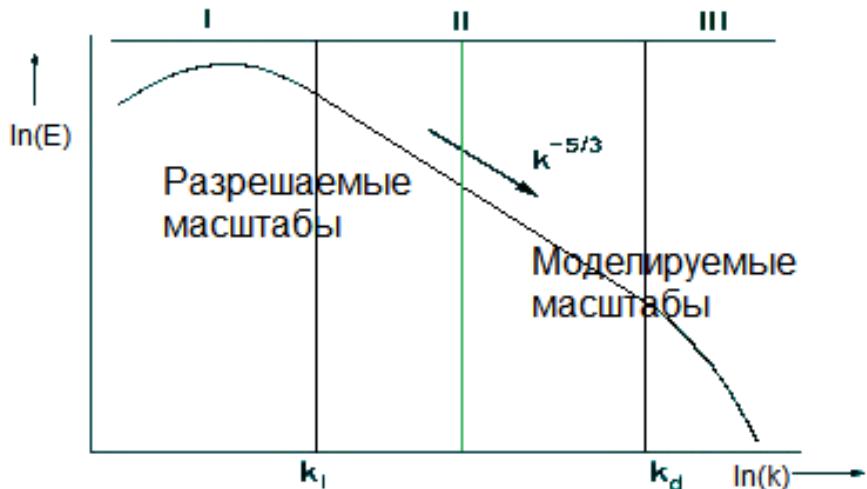


Рис. 18: Разрешаемые и моделируемые масштабы турбулентных структур в терминах энергетического спектра [25].

Такое частичное моделирование дает методу моделирования крупных вихрей преимущество перед RANS, так как в рамках осредненного подхода требуется моделирование всех вихрей вне зависимости от их размера, а крупные энергонесущие вихри не могут быть описаны каким-то единым законом. Это означает, что подсеточные модели LES могут быть устроены значительно про-

ще, чем полуэмпирические модели турбулентности и при этом показывать высокую точность результатов.

Однако данное преимущество «компенсируется» тем, что LES все еще требует несопоставимых с RANS вычислительных затрат, путь и меньших, чем в случае прямого численного моделирования. Метод моделирования крупных вихрей также требует ведения расчетов на достаточно подробных сетках, но требования к ним гораздо менее жёсткие, чем предъявляет DNS (увеличение вычислительных затрат пропорционально $Re^{0.4}$ вдали от стенок и $Re^{2.25}$ вблизи них).

Таким образом, несмотря на повышение точности расчета по сравнению с RANS и снижение требуемых вычислительных затрат по сравнению с DNS, метод моделирования крупных вихрей все еще остается очень трудоемким и применимым для моделирования только свободных течений вдали от стенок. Моделирование же пристеночных течений, в особенности при высоких числах Рейнольдса, с применением LES подхода остается трудновыполнимой задачей.

Дальнейшее развитие подходов к моделированию турбулентности определилось двумя утверждениями: RANS с высокой точностью позволяет моделировать пристеночные течения с относительно небольшими вычислительными затратами и плохо подходит для моделирования отрывных течений, в то время как LES слишком трудоемок вблизи стенок, но позволяет точно и с адекватными затратами считать свободные течения. Гибридный подход, получивший название метод моделирования отсепарованных вихрей (Detached Eddies Simulation, DES) [32] был основан на простом принципе: вблизи стенок он работает как RANS, а вдали от них — как LES. Важным преимуществом также является тот факт, что используемая в RANS область модель, может быть использована как подсеточная модель в области LES, так как требования к полуэмпирическим моделям выше, чем к подсеточным.

На рисунке 19 приведены результаты расчетов докритического обтекания цилиндра, выполненные в рамках различных методов моделирования турбу-

лентности. Визуализация вихревой структуры производилась путем вывода изоповерхности второго собственного числа тензора градиента скорости.

Благодаря простоте реализации и высокой точности расчета широкого спектра течений, метод отсеченных вихрей быстро получил признание, и на сегодняшний день DES и его модификации являются основными методами, используемыми для моделирования турбулентных течений, как в рамках научных вычислительных экспериментов, так и практических инженерных расчетов.

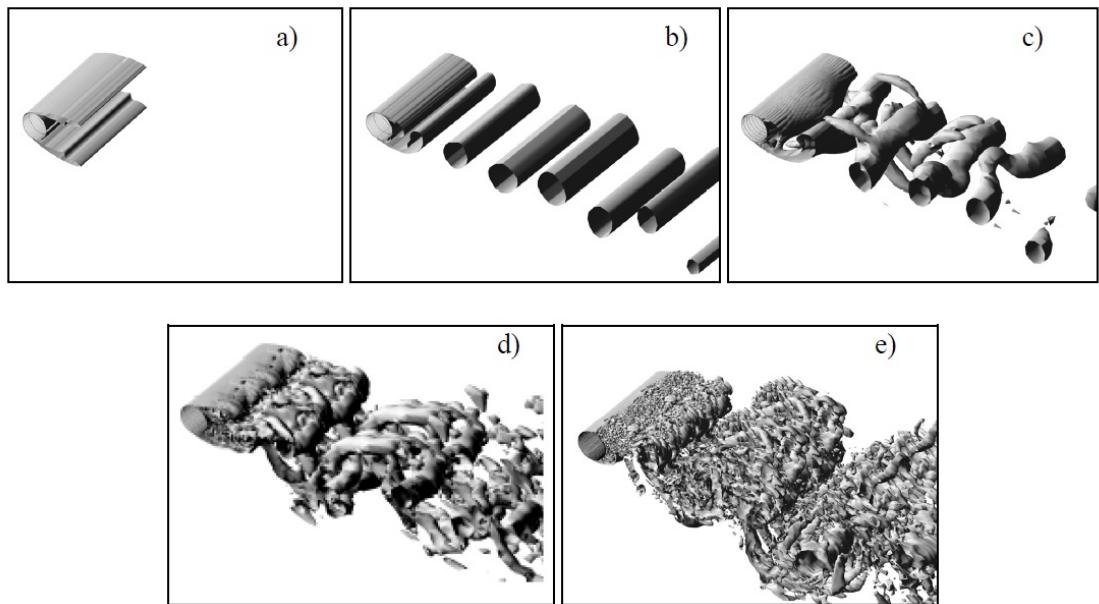


Рис. 19: Изоповерхности второго собственного числа тензора градиента скорости λ_2 , полученные в результате расчетов с использованием различных методов: а) 2D-RANS, б) 2D-URANS, в) 3D-URANS, г) 3D-DES на грубой сетке, д) 3D-DES на подробной сетке [25].

В настоящее время с развитием моделей и ростом доступных вычислительных мощностей численный эксперимент становится основным методом проведения исследований. Экспериментальные постановки [9, 4, 7] являются классическими, поэтому для них присутствует большое количество расчетных результатов с применением разнобrazных моделей.

Примером моделирования эксперимента *Cheng et al.* с использованием RANS подхода могут служить работы [33, 34]. На рисунке 20 приводятся

изолинии давления в пламени из работы [33]. С развитием возможностей вычислительного эксперимента появились работы, в которых моделирование данного эксперимента выполнялось с применением более современных подходов [35, 36, 37]. На рисунке 21 показано распределение температуры в горелке Ченга из работы [37].

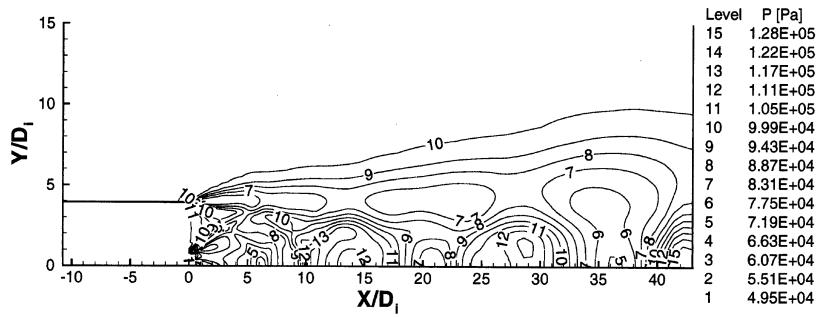


Рис. 20: Изолинии давления в пламени, полученные при RANS моделировании эксперимента *Cheng et al.* в работе [33].

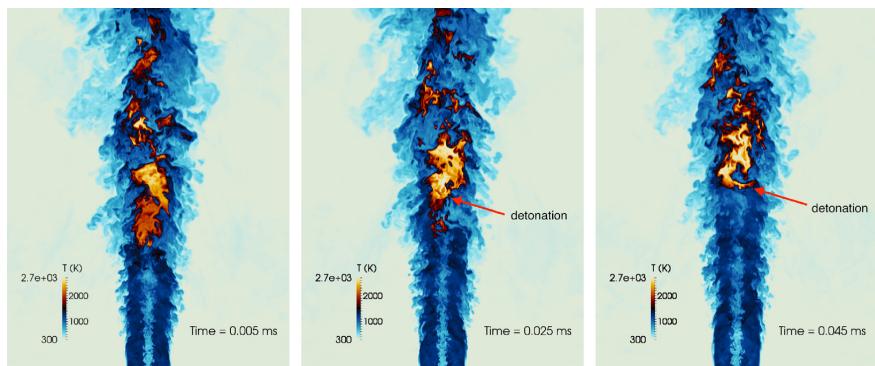


Рис. 21: Распределение температуры, полученное при LES моделировании эксперимента *Cheng et al.* в работе [37].

Рисунок 22 демонстрирует результаты по распределению температуры в пламени при моделировании эксперимента *Evans et al.* [4] в применении осредненного RANS подхода, полученные в работе [38]. Также можно отметить работу [39], в которой были представлены одни из первых вычислительных результатов, хорошо согласующихся с экспериментальными данными не только для данной постановки, но и для эксперимента *Burrows & Kurkov* [7, 8]. В свою

очередь, в качестве примера расчета данной постановки может быть приведена работа [40]. На рисунке 23 показано распределение градиента плотности при проведении LES расчетов разными численными схемами.

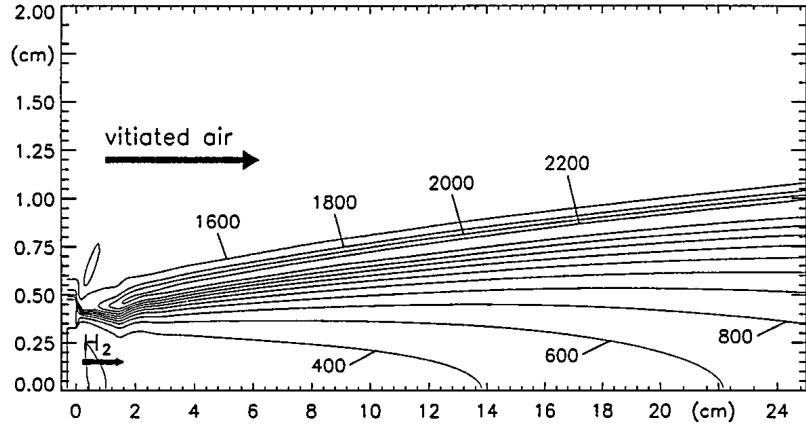


Рис. 22: Изолинии температуры в пламени, полученные при RANS моделировании эксперимента *Evans et al.* в работе [38].

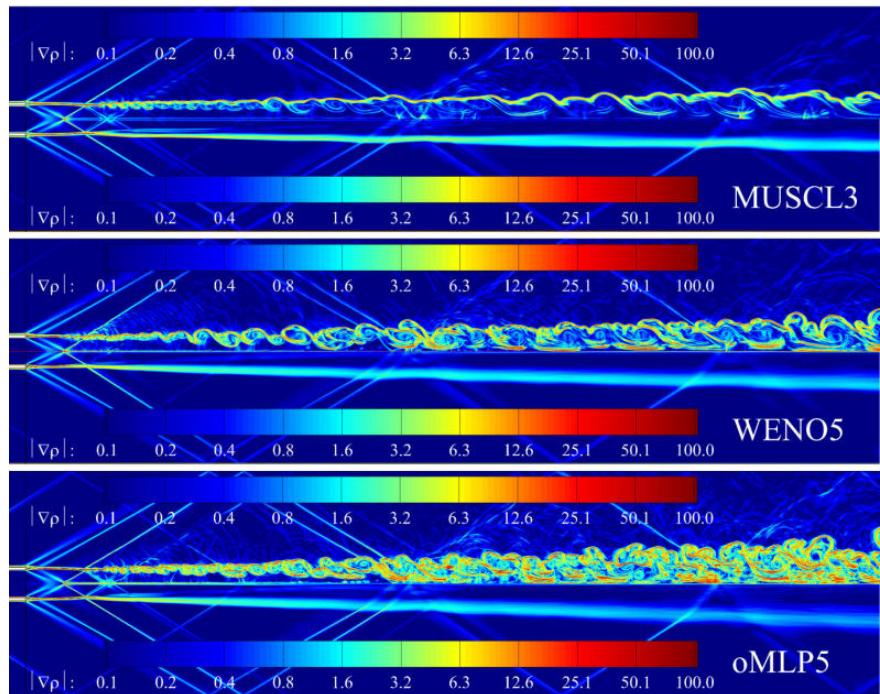


Рис. 23: Распределения градиента плотности, полученные при LES моделировании эксперимента *Evans et al.* с использованием различных численных схем в работе [40].

Как уже было отмечено ранее, камера сгорания Барроуса-Куркова [7, 8] активно используется для валидации работы моделей, предназначенных для моделирования пристеночных процессов в высокоскоростных потоках. Несмотря на то, что эксперимент был поставлен 50 лет назад, данная постановка не теряет актуальности и до настоящего времени; до сих пор публикуется большое количество работ, описывающих применение все более современных моделей. Самые первые попытки моделирования данного эксперимента были предприняты в работах [4, 41], однако доступными на тот момент методами хорошего согласия с экспериментальными данными получить не удалось. Первые существенные успехи в моделировании камеры сгорания Барроуса-Куркова были достигнуты Ибрагими в начале 90х годов. В работах [39, 42] он опубликовал результаты моделирования камеры с помощью 2D RANS подхода и впервые указал на необходимость учета пограничных слоев на входе в камеру при проведении расчетов (см. рисунок 24).

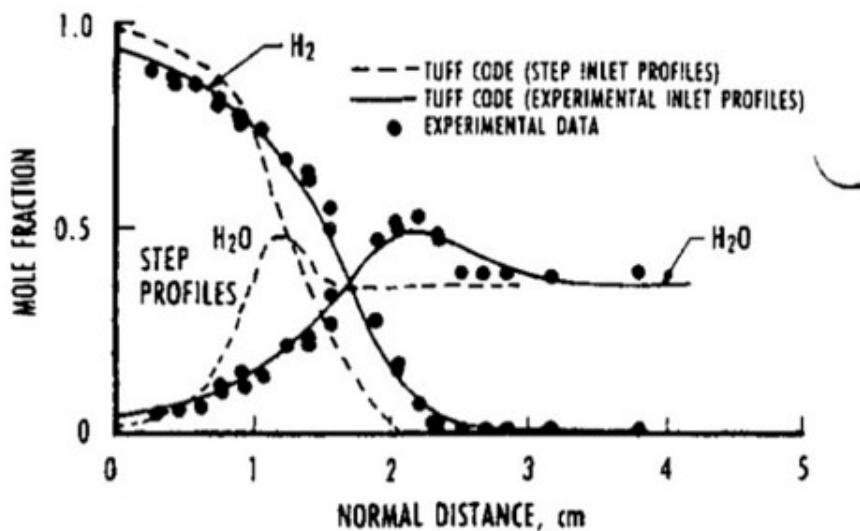


Рис. 24: Профили мольных компонент в выходном сечении без учета и с учетом пограничных слоев на входе при моделировании процессов смешения и горения в эксперименте Burrows-Kurkov из работы [42].

Позже, опираясь на результаты Ибрагими, в NASA производилась настройка кода WIND US, долгое время использовавшегося в качестве основного для

CFD расчетов. Моделирование производилось с использованием RANS подхода на основе моделей $k - \varepsilon$ и SST. Результаты были опубликованы в [43, 44] и на сегодняшний день лежат в основе валидационного кейса NASA, входящего в базу [45].

В работах [34, 46, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53] моделирование проводится производилось в рамках RANS подхода с применением двухпараметрических моделей турбулентности: $k - \varepsilon$, $k - \omega$, $k - \zeta$ и SST. В части из них, в частности в работах [46, 48, 49, 52] авторами применялись модели с переменными значениями турбулентных чисел Прандля и Шмидта и исследовалось их влияние на процессы смешения и воспламенения в камере.

В работе [46] проведено исследование влияния учета взаимодействия кинетики с турбулентностью (TCI) на примере модели β -PDF [54]. Лучшее соответствие с экспериментом было получено при использовании ламинарной модели (без учета TCI). Аналогичные результаты были получены в работе [51] при проведении расчетов без учета TCI и с моделью flamelet.

С развитием вычислительных ресурсов стало появляться все больше работ, в которых моделирование камеры сгорания Барроуса-Куркова выполняется с использованием гибридных RANS-LES подходов к моделированию турбулентности. Основными из таких работ могут быть выделены: [55] — DES подход, [56, 57] — RANS/LES гибридизация на основе Г-функции, которая была введена в работе [58], [59] — LES с пристеночным моделированием (WMLES) на основе динамической модели Смагоринского.

На рисунке 25 представлено распределение температуры вдоль камеры, полученное в работе [51] с использованием RANS подхода

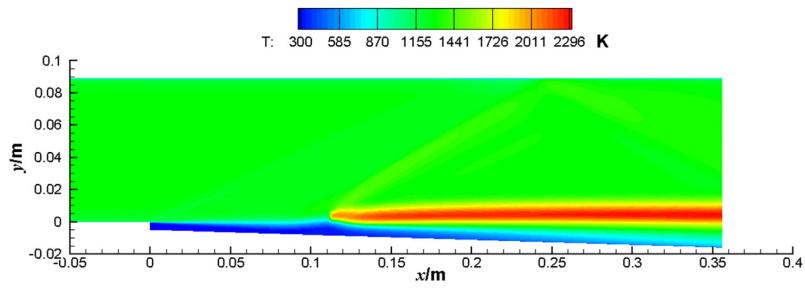


Рис. 25: Распределение температуры в продольном сечении при RANS моделировании эксперимента *Burrows-Kurkov* из работы [51].

Аналогичные распределения температуры из работы [57] представлены на рисунке 26. Здесь моделирование выполнялось с применением современного вихреразрешающего RAN-LES подхода с применением различных моделей TCI и кинетических механизмов.

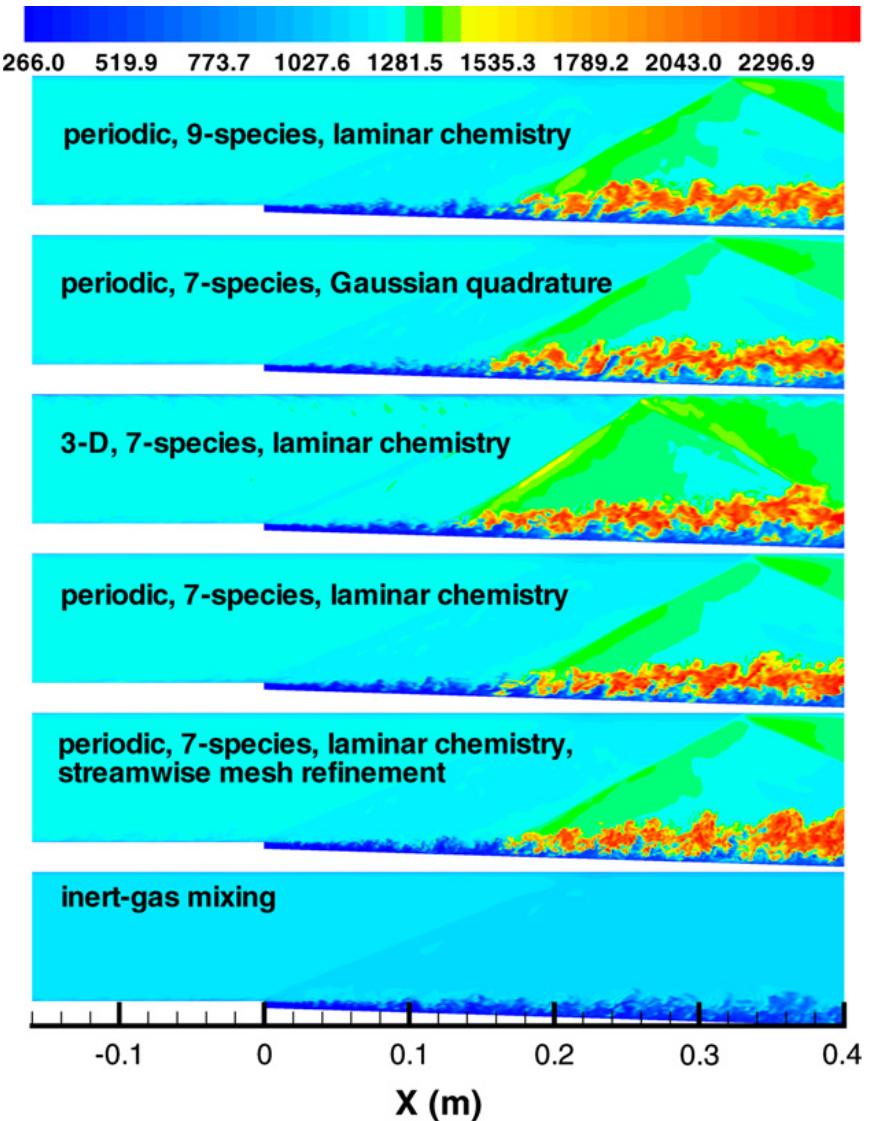


Рис. 26: Распределение температуры в продольном сечении при RANS-LES моделировании эксперимента *Burrows-Kurkov* из работы [57].

Моделирование эксперимента ЦАГИ Т-131 выполнялось в частности В.В. Власенко в работе [60]. В рамках проекта HEXAFLY-INT [15] также проводятся вычислительные исследования для численного сопровождения экспериментов [18]. На рисунке 27 приводятся распределения температуры в различных сечениях при моделировании проточного тракта HEXAFLY-INT из диссертации А.А. Ширяевой [18].

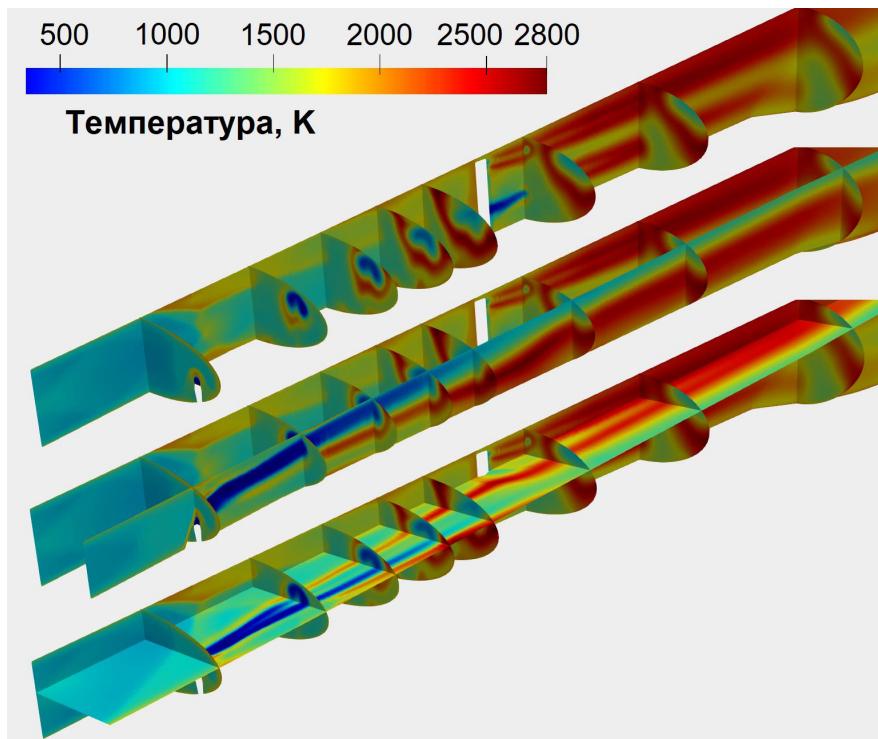


Рис. 27: Распределение температуры в различных сечениях в расчетах проточного тракта HEXAFLY-INT [18].

Разработка экспериментальных установок и также прототипов детонационных реактивных двигателей, которая ведется в отделе горения и взрыва ФИЦ ХФ РАН также обязательно сопровождается численными исследованиями. На рисунке 28 показан результат моделирования рабочего процесса в двигателе, работающем на непрерывной детонации из работы [22].

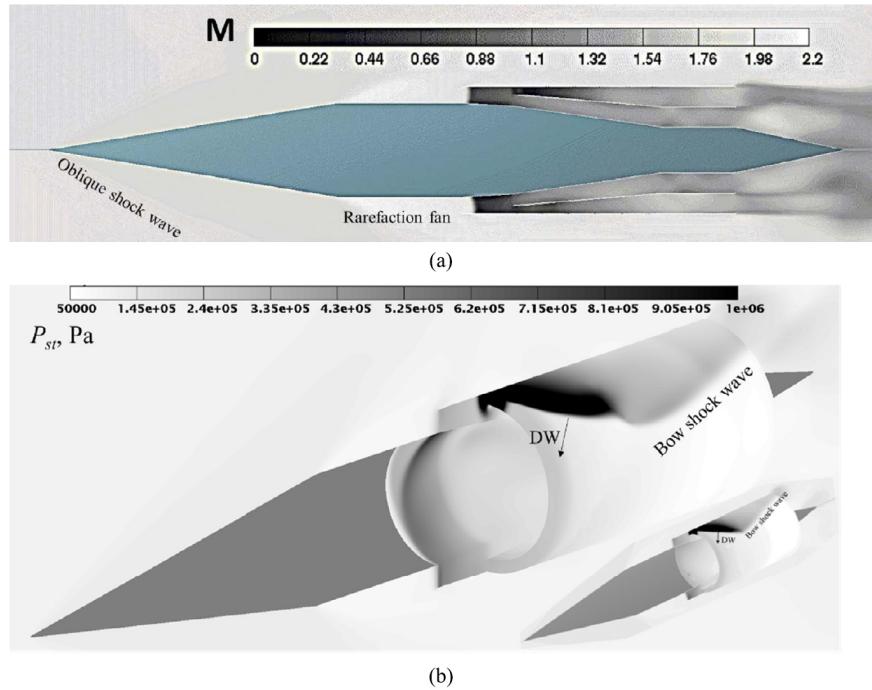


Рис. 28: Распределения локального числа Маха в продольном сечении (а) и статического давления на поверхностях двигателя (б), полученные при моделировании условий полета с $M = 2.0$ [22].

При проведении моделирования процессов сверхзвукового смешения и горения наряду с газодинамической моделью очень важным является используемый кинетический механизм, описывающий реакции между компонентами. Используемые в начале эры математического моделирования кинетические механизмы также как и газодинамические модели, были простыми и состояли из одной или нескольких реакций. К примеру влияние различных кинетических механизмов на результат моделирования экспериментов [9, 4] изучалось в работе [41]. С развитием вычислительной техники кинетические механизмы усложнились и в настоящее время для расчетов все чаще используются детальные кинетические механизмы, содержащие несколько десятков реакций. На рисунке 26 можно видеть результаты моделирования как с использованием кинетических механизмов, содержащих семь реакций между семью компонентами [61] и 19 реакций между девятью компонентами [62].

Приведенное описание существующих моделей, а также экспериментальных и вычислительных исследований свидетельствует о том, что высокоскоростное горение продолжают широко исследоваться и данная тема не теряет своей актуальности. Некоторые аспекты до сих пор остаются на стадии изучения, а создание комплексной физико-математической модели для проведения высокоточного предсказательного моделирования является задачей, над которой ведется активная работа.

Цели 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 — забортный 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 пространственных 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.

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 разностных 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.

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.

Положения, выносимые на защиту:

- Математическая модель турбулентного перемешивания и горения в высокоскоростных потоках реагирующих газов с использованием вихреразрешающего подхода.
- Численные гибридные схемы решения нестационарных уравнений течения вязкого, теплопроводного, многокомпонентного газа с учетом турбулентного тепломассопереноса 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.

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.

Апробация:

Результаты работы прошли апробацию на более чем 10 российских и международных конференциях, среди которых:

1. The 8th International Symposium on Nonequilibrium Processes, Plasma, Combustion and Atmospheric Phenomena, Sochi, Russia, October 1-5, 2018.
2. 8-я всероссийская научная конференция с международным участием «Механика композиционных материалов и конструкций, сложных и гетерогенных сред» им. И.Ф. Образцова и Ю.Г. Яновского, ИПРИМ РАН, 18-19 декабря, 2018.

3. 12-я ежегодная научная конференция отдела горения и взрыва ИХФ им. Н.Н. Семенова РАН, Москва, ИХФ РАН, 6-8 февраля, 2019.
4. 12-й Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики, Уфа, Россия, 19-24 августа, 2019.
5. 6-й Минский международный коллоквиум по физике ударных волн, горению и детонации, Минск, Беларусь, 11-14 ноября, 2019.
6. 13-я научная конференция отдела горения и взрыва ФИЦ ХФ РАН им. Н.Н. Семенова, Москва, ФИЦ ХФ РАН, 12-14 февраля, 2020.
7. 12th International Colloquium on Pulse and Continuous Detonations, St. Petersburg, 19-22 October, 2020.
8. 14th WCCM & ECCOMAS Congress 2020, on-line, 11-14 January, 2021.
9. 13th International Colloquium on Pulse and Continuous Detonations, St. Petersburg, 18-21 April, 2022.

Основные результаты по теме диссертации были опубликованы в 7 печатных работах, 6 из которых включены в список ВАК [63, 64, 66, 67, 68, 69] и/или входят в мировые индексы цитирования (SCOPUS, Web of Science) [66, 67]. Работы [68, 69] написаны без соавторов.

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.

Автор выражает особую благодарность своему научному руководителю д.ф.-м.н. Меньшову Игорю Станиславовичу и заведующему ОВМ НИИСИ РАН к.ф.-м.н. Семенову Илье Витальевичу за ценные советы и замечания, а также огромную помощь в ведении научной деятельности.

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.

Первая глава посвящена разработке модели турбулентного смешения в сверхзвуковых многокомпонентных газовых потоках. В ней приводится подробное описание подходов, основанных на решении осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье-Стокса (RANS), моделировании крупных вихревых структур (LES), а также на их объединении (DES, IDDES). Также дается формулировка классической полуэмпирической модели турбулентности Спаларта-Аллмараса (SA). Описывается метод использования данной модели в качестве подсеточной модели для LES подхода, а также единой модели турбулентности в рамках гибридных подходов DES и IDDES. Приводится описание дополнительных слагаемых для уравнений сохранения массы и энергии, отвечающих за учет межкомпонентной диффузии.

Вторая глава описывает принципы моделирования химических реакций между компонентами газовой смеси. В ней приводится описание блока химической кинетики в разрабатываемой модели: системы дифференциальных уравнений, состоящей из уравнений для изменения мольных концентраций компонентов и уравнения тепловыделения, а также выбранного к реализации детального кинетического механизма для горения водородно-воздушных смесей (A.

Keromnes et al. 2013). Рассматривается интеграция блока химической кинетики в систему газодинамических уравнений для их совместного решения.

В третьей главе рассматриваются используемые численные методы и особенности программной реализации. Описывается гибридная явно-неявная схема интегрирования по времени, численный комбинированный метод GMRES-LU-SGS, применяемый в качестве основного численного метода для решения системы дискретных уравнений, а также семейство методов Гира, с помощью которых выполняется интегрирование жесткой системы уравнений химической кинетики. Приводится схема совместного решения уравнений газовой динамики и химической кинетики с позиции численных методов. Также глава содержит описание программных средств и библиотек используемых для проведения многопроцессорных расчетов, интегрирования системы уравнений химической кинетики, нахождения кратчайшего расстояния от точки расчетной области до стенки.

Четвертая глава работы посвящена верификации и валидации реализованных моделей и численных алгоритмов путем выполнения вычислительно-го эксперимента по моделированию различных задач. В первом разделе 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. Далее в разделах 4.2–4.4 приводятся результаты моделирования турбулентного пограничного слоя, слоя смешения и течения в расширяющемся диффузоре с применением SA-RANS подхода. В разделе 4.5 проводится исследование быстродействия численного метода GMRES-LU-SGS с разной размерностью пространства Крылова на решении задачи о формировании турбулентного погранслоя на плоской пластине. Раздел 4.6 посвящен исследованию диссипативности и устойчивости реализованных схем аппроксимации по пространству на примере модельного теста Шу-Ошера о взаимодействии ударной волны со средой переменной плотности. В разделе 4.7 проводится

валидация алгоритмов SA-IDDES подхода на решении задачи о формировании нестационарного пограничного слоя в прямоугольном периодическом канале.

В пятой главе выполняется численное исследование физико-химических процессов внутри камеры сгорания Барроуса-Куркова. Рассматриваются постановки, описывающие смешение сверхзвуковых потоков водорода и инертного газа, а также смешение потоков водорода и технического воздуха с последующим воспламенением и горением. Моделирование проводится с применением подходов RANS и IDDES. Полученные результаты сравниваются с доступными экспериментальными и расчетными данными других авторов, а также между собой, и проводится их анализ.

Поддержка работы:

Представленные исследования проводились, в том числе в рамках государственного задания НИИСИ РАН № 0065-2019-0005 и № 0580-2021-0005 и при поддержке гранта РФФИ «аспирант» № 19-31-90132.

Глава 1

Модель турбулентного смешения в сверхзвуковых газовых потоках

1.1 Метод осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье-Стокса (RANS)

Система уравнений Навье-Стокса для описания трехмерного течения вязкого, сжимаемого, теплопроводного, многокомпонентного газа, состоящего из n компонент, может быть записана в следующем виде относительно вектора консервативных переменных:

$$\frac{\partial \vec{q}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\vec{F}_x - \vec{G}_x) + \frac{\partial}{\partial y} (\vec{F}_y - \vec{G}_y) + \frac{\partial}{\partial z} (\vec{F}_z - \vec{G}_z) = \vec{S}, \quad (1.1.1)$$

где \vec{q} — вектор неизвестных в консервативной форме, $\vec{F}_x, \vec{F}_y, \vec{F}_z$ — вектора конвективных потоков, $\vec{G}_x, \vec{G}_y, \vec{G}_z$ — вектора вязких потоков, \vec{S} — вектор источников.

ков, который обычно принимается равным нулю:

$$\begin{aligned}\vec{q} &= \left(\rho_1, \dots, \rho_n, \rho U_x, \rho U_y, \rho U_z, \rho E \right), \\ \vec{F}_x &= \left(\rho_1 U_x, \dots, \rho_n U_x, \rho U_x^2 + p, \rho U_x U_y, \rho U_x U_z, (\rho E + p) U_x \right), \\ \vec{F}_y &= \left(\rho_1 U_y, \dots, \rho_n U_y, \rho U_x U_y, \rho U_y^2 + p, \rho U_y U_z, (\rho E + p) U_y \right), \\ \vec{F}_z &= \left(\rho_1 U_z, \dots, \rho_n U_z, \rho U_x U_z, \rho U_y U_z, \rho U_z^2 + p, (\rho E + p) U_z \right), \\ \vec{G}_x &= \left(-\rho I_{1,x}, \dots, -\rho I_{n,x}, \tau_{xx}, \tau_{xy}, \tau_{xz}, \chi_x - \rho \sum_i H_i I_{i,x} \right), \\ \vec{G}_y &= \left(-\rho I_{1,y}, \dots, -\rho I_{n,y}, \tau_{xy}, \tau_{yy}, \tau_{yz}, \chi_y - \rho \sum_i H_i I_{i,y} \right), \\ \vec{G}_z &= \left(-\rho I_{1,z}, \dots, -\rho I_{n,z}, \tau_{zx}, \tau_{zy}, \tau_{zz}, \chi_z - \rho \sum_i H_i I_{i,z} \right).\end{aligned}\quad (1.1.2)$$

Здесь

$$\begin{aligned}\tau_{xx} &= 2\mu \left(\frac{\partial U_x}{\partial x} - \frac{1}{3} \operatorname{div} \vec{U} \right), \tau_{yy} = 2\mu \left(\frac{\partial U_y}{\partial y} - \frac{1}{3} \operatorname{div} \vec{U} \right), \\ \tau_{zz} &= 2\mu \left(\frac{\partial U_z}{\partial z} - \frac{1}{3} \operatorname{div} \vec{U} \right), \tau_{xy} = \mu \left(\frac{\partial U_x}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial x} \right), \\ \tau_{xz} &= \mu \left(\frac{\partial U_x}{\partial z} + \frac{\partial U_z}{\partial x} \right), \tau_{yz} = \mu \left(\frac{\partial U_y}{\partial z} + \frac{\partial U_z}{\partial y} \right),\end{aligned}\quad (1.1.3)$$

$$\chi_x = U_x \tau_{xx} + U_y \tau_{xy} + U_z \tau_{xz} - \zeta_x, \chi_y = U_x \tau_{xy} + U_y \tau_{yy} + U_z \tau_{yz} - \zeta_y,$$

$$\chi_z = U_x \tau_{xz} + U_y \tau_{yz} + U_z \tau_{zz} - \zeta_z,$$

ρ_i — плотность i -го компонента, $\rho = \sum \rho_i$ — плотность смеси, p — давление, U_x, U_y, U_z — компоненты вектора скорости, $E = C_v T + 0.5 (U_x^2 + U_y^2 + U_z^2)$ — удельная полная энергия газа, $H = C_p T + 0.5 (U_x^2 + U_y^2 + U_z^2)$ — удельная полная энталпия смеси, H_i — энталпия компонента, T — температура, $C_v = (C_p - R/m)$ — удельная теплоемкость газа при постоянном объеме, C_p — удельная теплоемкость при постоянном давлении, m — молярная масса смеси, $\vec{\zeta}$ — вектор плотности теплового потока, $\vec{I}_i = (I_{i,x}, I_{i,y}, I_{i,z})$ — диффузационный поток i -го компонента, μ — ламинарная динамическая вязкость смеси.

В качестве замыкающего соотношения используется уравнение состояния.

В настоящей работе газ считается идеальным.

$$p = \frac{\rho R T}{m}, \quad (1.1.4)$$

где R — универсальная газовая постоянная.

В своей работе [27] Рейнольдс предложил процедуру осреднения для уравнений Навье-Стокса для случая несжимаемой жидкости. Осредненное значение величины за период $2T$ вычисляется по следующей формуле:

$$\bar{f}(t) = \frac{1}{2T} \int_{t-T}^{t+T} f(\tau) d\tau, \quad (1.1.5)$$

где f — осредняемая функция. Период полагается достаточно большим относительно временных масштабов всех турбулентных структур, присутствующих в течении и достаточно малым относительно временного масштаба осредненного течения.

Для осредненных величин предполагается выполнение следующих соотношений:

$$\overline{f + g} = \bar{f} + \bar{g}, \quad \bar{c} = c, \quad \overline{cf} = c\bar{f}, \quad \overline{df/ds} = d\bar{f}/ds, \quad (1.1.6)$$

где f и g — параметры течения, представимые в виде средней и пульсационной составляющих $f = \bar{f} + f'$ и $g = \bar{g} + g'$, c — произвольная константа, s — пространственная переменная или время.

В случае учета сжимаемости газа обычно используется осреднение по Фавру [70]. Для давления и плотности используется вышеописанная процедура осреднения по Рейнольдсу, а для остальных переменных рассчитываются средневзвешенные значения

$$\tilde{f} = \frac{\overline{\rho f}}{\bar{\rho}}. \quad (1.1.7)$$

Тогда система осредненных уравнений Навье-Стокса, называемая системой уравнения Рейнольдса, для сжимаемого многокомпонентного газа представля-

ется в следующем виде:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i \vec{U}) = \nabla \cdot (\rho \vec{I}_i) \\ \frac{\partial (\rho \vec{U})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{U} \vec{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}_m + \boldsymbol{\tau}_t) \\ \frac{\partial (\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{U} H) = \\ = -\nabla \cdot [\vec{U} \cdot (\boldsymbol{\tau}_m + \boldsymbol{\tau}_t) + (\vec{\zeta}_m + \vec{\zeta}_t)] + \nabla \cdot \left(\rho \sum_i H_i \vec{I}_i \right) \end{cases}, \quad (1.1.8)$$

где $\vec{U} = (U_x, U_y, U_z)$, $\boldsymbol{\tau}_m, \boldsymbol{\tau}_t$ — молекулярная и турбулентная составляющие тензора вязких напряжений, $\vec{\zeta}_m, \vec{\zeta}_t$ — молекулярная и турбулентная составляющие вектора плотности теплового потока. В системе (1.1.8) все величины являются осредненными, знаки осреднения опущены.

Молекулярные составляющие тензора напряжений и вектора плотности теплового потока в (1.1.8) определяются с помощью реологического закона Ньютона и закона теплопроводности Фурье:

$$\boldsymbol{\tau}_m = 2\mu(T) \left(\mathbf{S} - \frac{1}{3} \mathbf{I} \nabla \cdot \vec{U} \right), \quad \vec{\zeta}_m = -\lambda(T) \nabla T, \quad (1.1.9)$$

где $\mathbf{S} = \frac{1}{2} \left(\nabla \vec{U} + [\nabla \vec{U}]^T \right)$ — тензор скоростей деформаций, \mathbf{I} — единичный тензор, $\mu(T)$, $\lambda(T)$ — коэффициенты молекулярной динамической вязкости и теплопроводности, зависящие от температуры.

Система уравнений (1.1.8) не является замкнутой, так как отсутствует прямая связь между турбулентными составляющими тензора напряжений $\boldsymbol{\tau}_t$ и вектора плотности теплового потока $\vec{\zeta}_t$ с параметрами осредненного течения. Данная связь должна быть задана дополнительно с помощью уравнений модели турбулентности.

Наиболее распространенные полуэмпирические модели турбулентности, такие как модель Спаларта-Аллмараса (SA) [28] и модель Ментера (SST) [29] являются линейными моделями, что означает, что они используют гипотезу Буссинеска, постулирующую линейную связь между $\tau_{t,ij}$ и S_{ij} . Турбулентный

тепловой поток для линейных моделей определяется аналогично молекулярному по закону Фурье.

$$\boldsymbol{\tau}_t = 2\mu_t \left(\mathbf{S} - \frac{1}{3}\mathbf{I}\nabla \cdot \vec{U} \right) + \frac{2}{3}k\mathbf{I}, \quad \vec{\zeta}_t = -\lambda_t \nabla T, \quad (1.1.10)$$

где μ_t — коэффициент турбулентной динамической вязкости, $k = \frac{1}{2}(\overline{U'_x^2} + \overline{U'_y^2} + \overline{U'_z^2})$ — кинетическая энергия турбулентности, U'_i — пульсационные составляющие скорости, λ_t — коэффициент турбулентной теплопроводности.

Дополнительно задается связь коэффициентов вязкости с коэффициентами теплопроводности, которая носит название аналогии Рейнольдса:

$$\lambda = \frac{C_p \mu}{Pr}. \quad (1.1.11)$$

Данное отношение справедливо как для молекулярных коэффициентов, так и для турбулентных. Число Прандтля Pr и его турбулентный аналог Pr_t полагаются постоянными. В рассматриваемых в главе 4 задачах ламинарное число Прандтля бралось равным 0.733, а турбулентное 0.7-0.9.

Для системы уравнений Рейнольдса на твердых стенках ставятся граничные условия прилипания и непроницаемости для скорости

$$\vec{U} = 0, \quad (1.1.12)$$

и условия первого $T = T_w$ или второго $\lambda = \frac{\partial T}{\partial n} = \zeta_w$ рода по температуре. Если численный метод требует задания граничного условия для давления, в большинстве случаев задается условие равенства нулю производной от давления по нормали к поверхности

$$\frac{\partial p}{\partial n} = 0. \quad (1.1.13)$$

В случае дозвуковых течений обычно используются условие массового расхода на входной границе и заданное давление на выходной. Для сверхзвуковых течений на входе задаются параметры потока, а на выходе значения экстраполируются из расчетной области.

1.2 Модель турбулентности Спаларта-Аллмараса

Оригинальная модель, сформулированная в [28], состоит из одного уравнения переноса:

$$\frac{d\tilde{\nu}}{dt} = P^\nu - D^\nu + \frac{1}{\sigma} \{ \nabla \cdot [(\nu + \tilde{\nu}) \nabla \tilde{\nu}] + c_{b2} [(\nabla \tilde{\nu}) \cdot (\nabla \tilde{\nu})] \} + f_{t1} \Delta U^2, \quad (1.2.1)$$

где $d/dt = \partial/\partial t + U \cdot \nabla$ — Лагранжева производная. Уравнение записывается относительно модифицированной турбулентной вязкости $\tilde{\nu}$, которая связана с кинематической турбулентной вязкостью как

$$\tilde{\nu} = \frac{\nu_t}{f_{v1}}, \quad f_{v1} = \frac{\chi^3}{\chi^3 + c_{\nu1}^3}, \quad \chi = \frac{\tilde{\nu}}{\nu}. \quad (1.2.2)$$

Кинематическая турбулентная вязкость в свою очередь соотносится с динамической вязкостью как $\nu_t = \mu_t/\rho$. $\nu = \mu/\rho$ — кинематическая молекулярная вязкость.

В правой части уравнения (1.2.1) стоят слагаемые, отвечающие за генерацию, диссиацию, перенос и ламинарно-турбулентный переход (ЛТП). В данной работе используется полностью турбулентный (fully-turbulent) подход, при котором ламинарным участком пограничного слоя пренебрегают, поэтому далее считается, что последнее слагаемое в правой части равно нулю.

Генерационный член P^ν и диссиационный член D^ν вычисляются как

$$P^\nu = c_{b1} (1 - f_{t2}) \tilde{\Omega} \tilde{\nu}, \\ D^\nu = \left(c_{w1} f_w - \frac{c_{b1}}{\kappa^2} f_{t2} \right) \left(\frac{\tilde{\nu}}{d_w} \right)^2, \quad (1.2.3)$$

где

$$\tilde{\Omega} = \Omega + f_{v2} \frac{\tilde{\nu}}{\kappa^2 d_w^2}, \quad f_{v2} = 1 - \frac{\chi}{1 + \chi f_{v1}}, \\ f_w = g \left(\frac{1 + c_{w3}^6}{g^6 + c_{w3}^6} \right)^{1/6}, \quad g = r + c_{w2} (r^6 - r), \quad r = \frac{\tilde{\nu}}{\tilde{\Omega} \kappa^2 d_w^2}, \quad (1.2.4)$$

d_w — расстояние от центра ячейки до ближайшей стенки, $\kappa = 0.41$ — постоянная Кармана, Ω — модуль тензора завихренности:

$$\Omega = (2\Omega_{ij}\Omega_{ij})^{1/2}, \quad \Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (1.2.5)$$

Функция f_{t2} обеспечивает подавление численного ламинарно-турбулентного перехода в пограничном слое и определяется выражением

$$f_{t2} = C_{t3} \cdot \exp(-C_{t4}\chi^2). \quad (1.2.6)$$

Константы модели полагаются равными

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{2}{3}, \quad \kappa = 0.41, \quad c_{b1} = 0.1355, \quad c_{b2} = 0.622, \\ c_{w1} &= \frac{c_{b1}}{\kappa^2} + \frac{1 + c_{b2}}{\sigma}, \quad c_{w2} = 0.3, \quad c_{w3}, \quad c_{v1} = 7.1, \\ C_{t1} &= 1, \quad C_{t2} = 2, \quad C_{t3} = 1.2, \quad C_{t4} = 0.5. \end{aligned} \quad (1.2.7)$$

Для предотвращения сингулярности в случае обращения величины $\tilde{\Omega}$ в ноль или отрицательную величину, формула для вычисления модифицируется в соответствии с поправками, предложенными авторами модели в [71]:

$$\begin{aligned} \bar{\Omega} &= f_{v2} \frac{\tilde{\nu}}{(\kappa d_w)^2}, \\ \tilde{\Omega} &= \begin{cases} \Omega + \bar{\Omega}, & \bar{\Omega} \geq -c_2\Omega \\ \Omega + \frac{\Omega(c_2^2\Omega + c_3\bar{\Omega})}{(c_3 - 2c_2)\Omega - \bar{\Omega}}, & \bar{\Omega} < -c_2\Omega \end{cases}, \end{aligned} \quad (1.2.8)$$

где $c_2 = 0.7, c_3 = 0.9$.

На рисунке 29 приводится зависимость величины $\tilde{\Omega}$ от $\bar{\Omega}$ без использования и с использованием модификации, описанной выше. Здесь $\Omega_{wave} = \tilde{\Omega}$, $\Omega_{dash} = \bar{\Omega}$.

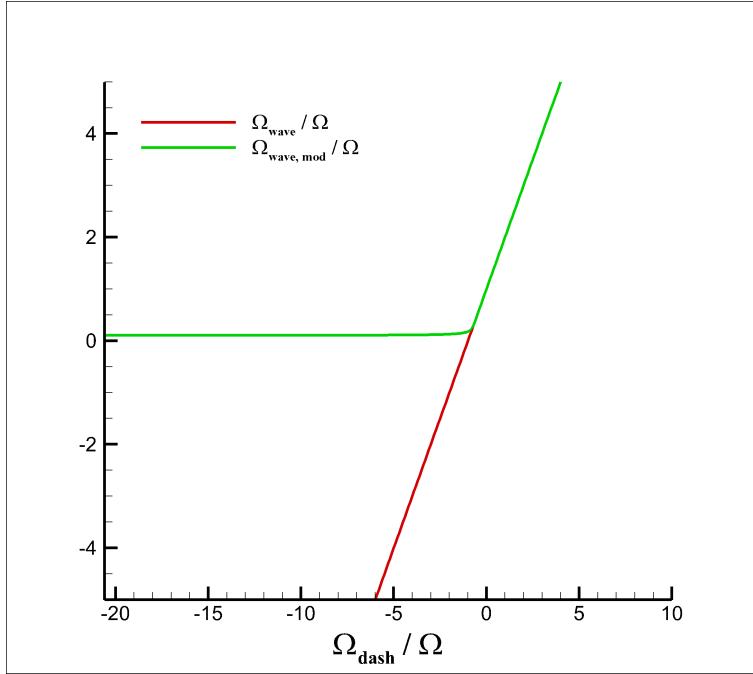


Рис. 29: Зависимость величины $\tilde{\Omega}$ от $\bar{\Omega}$.

Дополнительно полагается, что $r = 10$ в случае $\tilde{\Omega} = 0$.

Границные условия для уравнения (1.2.1) задаются следующим образом:

- На стенках истинная турбулентная вязкость, а, следовательно, и модифицированная турбулентная вязкость должны обращаться в нуль $\tilde{\nu} = 0$.
- На входной границе для модифицированной турбулентной вязкости задается условие первого рода, а на выходной — значение экстраполируется изнутри области.

1.3 Метод моделирования крупных вихрей (LES)

Система уравнений, на которой базируется метод моделирования крупных вихрей, может быть получена из системы уравнений Навье-Стокса путем представления каждой величины как суммы крупно- и мелкомасштабной составляющих и применения процедуры фильтрации. После этого величина раскладывается на разрешаемую и моделируемую (подсеточную) составляющие соответственно.

После проведения данных операций уравнения принимают следующую форму [31]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i \vec{U}) = \nabla \cdot (\rho \vec{I}_i) \\ \frac{\partial (\rho \vec{U})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{U} \vec{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}_m + \boldsymbol{\tau}_{SGS}) \\ \frac{\partial (\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{U} H) = \\ \quad = -\nabla \cdot [\vec{U} \cdot (\boldsymbol{\tau}_m + \boldsymbol{\tau}_{SGS}) + (\vec{\zeta}_m + \vec{\zeta}_{SGS})] + \nabla \cdot \left(\rho \sum_i H_i \vec{I}_i \right) \end{array} \right. . \quad (1.3.1)$$

Если судить исключительно по внешнему виду системы, отличие от уравнений Рейнольдса (1.1.8) заключается только в обозначении дополнительных слагаемых в уравнениях импульса и энергии. В данной системе используется индекс «SGS» (sub-grid scale) вместо индекса «t» (turbulent) в системе (1.1.8). Однако за сменой индекса кроется различие подходов RANS и LES, которое проявляется при замыкании системы с помощью дополнительных соотношений — модели турбулентности для RANS и подсеточной модели для LES.

Несмотря на то, что подсеточные модели также базируются на применении гипотезы Буссинеска и закона теплопроводности Фурье

$$\boldsymbol{\tau}_{SGS} = 2\mu_{SGS} \left(\mathbf{S} - \frac{1}{3} \mathbf{I} \nabla \cdot \vec{U} \right) + \frac{2}{3} k \mathbf{I}, \quad \vec{\zeta}_{SGS} = -\lambda_{SGS} \nabla T, \quad (1.3.2)$$

методы определения турбулентной и подсеточной вязкости в большинстве случаев отличаются. Подсеточные модели устроены проще и часто основаны на мгновенном вычислении подсеточной вязкости из параметров потока. Однако в определенных случаях модель турбулентности может быть преобразована в подсеточный аналог и использована в рамках LES подхода. На данном принципе основан гибридный метод отсединенных вихрей, который будет описан далее.

1.4 Метод моделирования отсекаемых вихрей на основе модели Спаларта-Аллмараса (SA-DES)

Важнейшим параметром, определяющим работу модели, является характерный линейный масштаб. В классической SA модели линейным масштабом является расстояние до стенки d_w . С другой стороны, характерным масштабом, на который опираются подсеточные модели метода LES, является размер фильтра Δ .

В качестве размера фильтра чаще всего выступают либо средний $\Delta = \sqrt[3]{\Delta_x \Delta_y \Delta_z}$, либо максимальный $\Delta = \max(\Delta_x, \Delta_y, \Delta_z)$ шаг сетки в рассматриваемой точке.

Обычно размер фильтра дополнительно умножается на некоторую константу C_{LES} , зависящую от конкретной расчетной схемы. Данная константа калибруется на задаче о затухании изотропной турбулентности (DIHT), для получения правильного энергетического спектра, соответствующего закону $E \sim k^{-5/3}$.

Тогда, характерные масштабы RANS и LES подходов:

$$l_{RANS} = d_w, \quad l_{LES} = C_{LES}\Delta. \quad (1.4.1)$$

Так как полуэмпирические RANS-модели обычно являются более совершенными, чем подсеточные, то могут быть использованы для расчета подсеточной вязкости в LES области.

Утверждается, что замена характерного линейного масштаба в SA модели турбулентности даст ее подсеточный аналог [25]:

$$\frac{d\tilde{\nu}_{SGS}}{dt} = P^\nu - D^\nu + \frac{1}{\sigma} \{ \nabla \cdot [(v + \tilde{\nu}_{SGS}) \nabla \tilde{\nu}_{SGS}] + c_{b2} [(\nabla \tilde{\nu}_{SGS}) \cdot (\nabla \tilde{\nu}_{SGS})] \}, \quad (1.4.2)$$

где

$$\begin{aligned} D^\nu &= \left(c_{w1} f_w - \frac{c_{b1}}{\kappa^2} f_{t2} \right) \left(\frac{\tilde{\nu}_{SGS}}{C_{LES} \Delta} \right)^2, \\ \bar{\Omega} &= f_{v2} \frac{\tilde{\nu}_{SGS}}{\kappa^2 (C_{LES} \Delta)^2}, \\ r &= \frac{\tilde{\nu}_{SGS}}{\bar{\Omega} \kappa^2 (C_{LES} \Delta)^2}, \end{aligned} \quad (1.4.3)$$

$\tilde{\nu}_{SGS}$ — модифицированная подсеточная вязкость. Остальные обозначения совпадают с обозначениями оригинальной модели.

Гибридизация подходов RANS и LES в рамках метода моделирования отссоединенных вихрей производится путем введения гибридного линейного масштаба l_{DES} [32].

$$l_{DES} = \min(l_{RANS}, l_{LES}) = \min(d_w, C_{DES} \Delta). \quad (1.4.4)$$

Здесь индекс константы меняется, так как в абсолютном большинстве случаев значения константы для подходов LES и DES для одной расчетной схемы не совпадают. Тогда уравнения (1.4.2)-(1.4.3) преобразуются следующим образом:

$$\frac{d\tilde{\nu}_{DES}}{dt} = P^\nu - D^\nu + \frac{1}{\sigma} \{ \nabla \cdot [(\nu + \tilde{\nu}_{DES}) \nabla \tilde{\nu}_{DES}] + c_{b2} [(\nabla \tilde{\nu}_{DES}) \cdot (\nabla \tilde{\nu}_{DES})] \}, \quad (1.4.5)$$

$$\begin{aligned} D^\nu &= \left(c_{w1} f_w - \frac{c_{b1}}{\kappa^2} f_{t2} \right) \left(\frac{\tilde{\nu}_{DES}}{l_{DES}} \right)^2, \\ \bar{\Omega} &= f_{v2} \frac{\tilde{\nu}_{DES}}{\kappa^2 l_{DES}^2}, \\ r &= \frac{\tilde{\nu}_{DES}}{\bar{\Omega} \kappa^2 l_{DES}^2}. \end{aligned} \quad (1.4.6)$$

Таким образом, в областях, где расчетная сетка является слишком грубой для разрешения турбулентных структур, то есть там, где $l_{RANS} < C_{DES} \Delta$ модель работает как RANS модель турбулентности, а в областях с мелкой сеткой, такой, что $C_{DES} \Delta < l_{RANS}$ — как подсеточная модель LES. В присоединенном пограничном слое расчетная сетка чаще всего является сильно анизотропной с шагом по продольному направлению сильно большим, чем шаг в поперечном направлении (см. рисунок 30) и размер фильтра следует вычислять как максимальный

из шагов сетки, так как данный способ гарантирует выполнение соотношения $d_w < C_{DES}\Delta$ вблизи стенки.

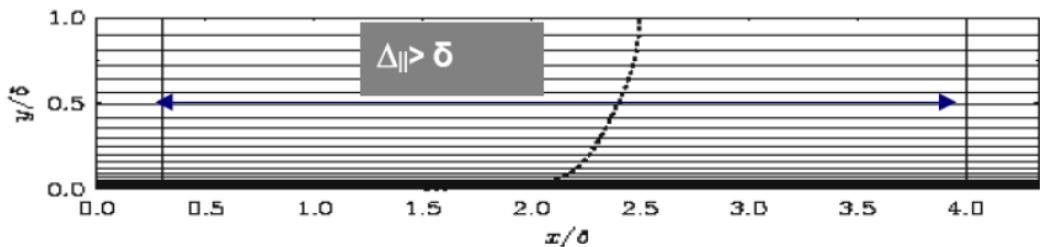


Рис. 30: Сетка типичная для присоединенного погранслоя [25].

1.5 Поправка к методу SA-DES на низкие числа Рейнольдса

Классический метод моделирования отссоединенных вихрей на основе модели Спаларта-Аллмараса не лишен недостатков, основным из которых является чрезмерное падение уровня турбулентной вязкости вдали от стенок. SA модель содержит специальные функции, обеспечивающие подавление турбулентности в вязком подслое и переходной области пограничного слоя, а именно функции f_{v1} и f_{v2} , а также функцию f_{t2} , подавляющую спонтанный ЛТП. Все три функции зависят от отношения модифицированной турбулентной и молекулярной вязостей $\chi = \tilde{\nu}/\nu$ и становятся «активными» вблизи стенки, где это отношение падает ниже определенного уровня ($\chi < 15$). Однако, при использовании гибридного подхода DES уменьшение χ до такого или даже более низкого уровня может происходить в LES области вдали от твердых стенок как следствие использования подробной сетки. Такое снижение χ воспринимается моделью как «близость стенки», вследствие чего происходит активация вышеописанных функций, обеспечивающих дальнейшее быстрое падение χ практически до нуля.

Если рассмотреть предельную форму подсеточной модели (1.4.2) в случае равенства генерации и диссипации, модель перейдет в модель типа Смагоринского [72] $\nu_{SGS} = (\tilde{C}\Delta)^2 S$. Но в отличие от оригинальной модели, где C является константой, здесь \tilde{C} имеет зависимость от χ .

Для компенсации данной зависимости необходимо в выражение для линейного масштаба LES области ввести дополнительный множитель и определить линейный масштаб следующим образом:

$$C_{DES, \text{mod}} = C_{DES} \Psi(\chi), \quad \Psi(\chi) = 1/C_{norm}(\chi), \quad C_{norm} = \tilde{C}/\tilde{C}_{\chi \rightarrow \infty}. \quad (1.5.1)$$

Тогда выражение для гибридного масштаба (1.4.4) меняется на

$$l_{DES} = \min(d_w, C_{DES} \Psi(\chi) \Delta). \quad (1.5.2)$$

Выражение для $\Psi(\chi)$ определяется следующим образом [73]:

$$\Psi^2 = \max \left[1, \min \left[100, \frac{1 - \frac{c_{b1}}{c_{w1}\kappa^2 f_w^*} [f_{t2} + (1 - f_{t2}) f_{v2}]}{f_{v1} \max(10^{-10}, 1 - f_{t2})} \right] \right], \quad (1.5.3)$$

где $f_w^* = 0.4241$ — равновесное значение f_w при высоких числах Рейнольдса.

График зависимости функции Ψ от отношения турбулентной вязкости к ламинарной приводится на рисунке 31.

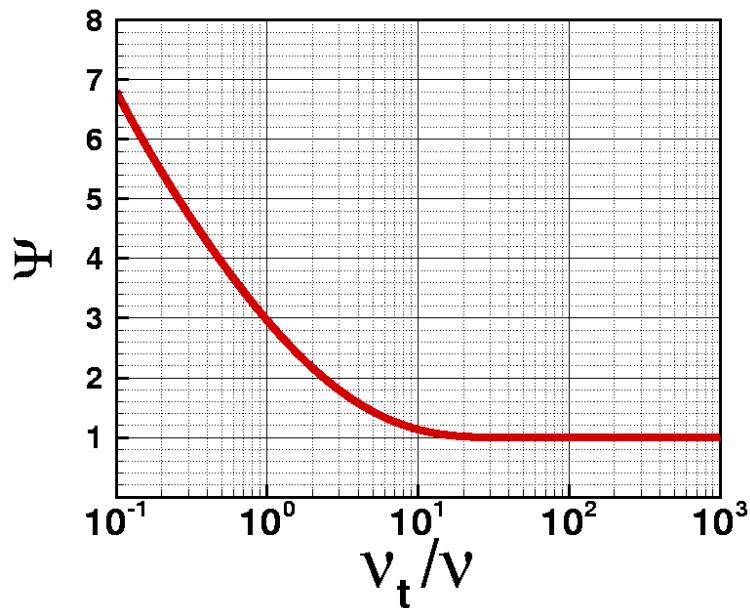


Рис. 31: Зависимость функции Ψ от ν_t/ν [25].

1.6 Усовершенствованный метод моделирования отсоединённых вихрей с отложенным переходом (SA-IDDES)

Данный метод является модификацией метода моделирования отсоединеных вихрей с отложенным переходом DDES (Delayed Detached Eddies Simulation) и одним из наиболее современных методов, появившихся из оригинального метода DES.

Основная цель появления методов DDES и IDDES — предотвращение перехода в LES режим внутри пограничного слоя, что в оригинальном методе гарантировалось только при использовании в пристеночной области сильно анизотропных сеток. Необходимо было снизить зависимость от используемой сетки в RANS области и сдвинуть линию перехода в LES режим дальше от стенки, поэтому данные модификации получили слово «Delayed» в название.

Поскольку работа метода отсоединеных вихрей связана на характерном масштабе, изменению подвергается определение l_{DES} . В соответствии с [74] характерный линейный масштаб для метода IDDES определяется как:

$$l_{IDDES} = \tilde{f}_d (1 + f_e) l_{RANS} + (1 - \tilde{f}_d) l_{LES}, \quad (1.6.1)$$

где $l_{RANS} = d_w$, $l_{LES} = C_{DES} \Delta \Psi$.

Еще одно отличие от классического DES подхода состоит в использовании более сложного выражения для характерного размера фильтра Δ . В рамках метода IDDES он зависит не только от шага сетки, но и от расстояния от рассматриваемой точки до обтекаемой поверхности d_w и определяется как:

$$\Delta = \min [\max (C_w d_w, C_w h_{\max}, h_{wn}), h_{\max}], \quad (1.6.2)$$

где h_{\max} — максимальный шаг сетки в рассматриваемой точке, h_{wn} — шаг сетки по нормали к обтекаемой поверхности, C_w — эмпирическая константа.

На рисунке 32 приведена зависимость размера фильтра от расстояния до стенки в плоском канале для двух выражений, входящих в (1.6.2): $\Delta = C_w d_w$ и $\Delta = h_{wn}$.

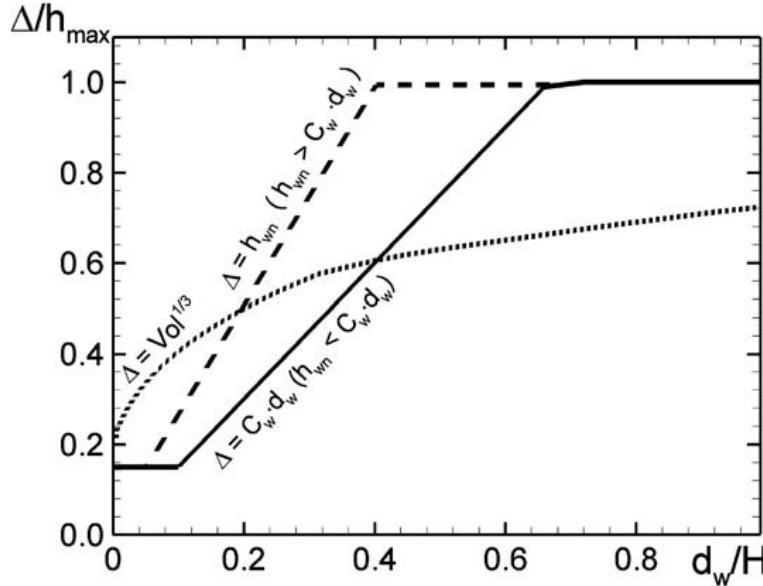


Рис. 32: Зависимость размера фильтра от расстояния до стенки для двух вариантов зависимости [74].

Эмпирические функции \tilde{f}_d и f_e в (1.6.1) предназначены для правильной координации работы RANS и LES ветвей IDDES и построены таким образом, чтобы при расчете течений вблизи твердых стенок модель работала по одному из двух сценариев [25].

- Если в присоединенной части рассматриваемого течения по тем или иным причинам имеются нестационарные турбулентные вихревые структуры, то IDDES должен функционировать как LES с пристеночным моделированием (WMLES), то есть как RANS в очень тонкой пристеночной области пограничного слоя и как LES во всей его остальной части.
- В противном случае, IDDES должен функционировать как DDES, то есть в случае присоединенных течений — как RANS во всей области, а в случае отрывных течений — как RANS в присоединенной и как LES в отрывной областях потока.

Функция \tilde{f}_d определяется как:

$$\tilde{f}_d = \max \{(1 - f_{dt}), f_B\}, \quad (1.6.3)$$

где

$$\begin{aligned} f_{dt} &= 1 - \tanh \left[(C_{d1} r_{dt})^{C_{d2}} \right], \\ r_{dt} &= \frac{\nu_t}{\kappa^2 d_w^2 \max \left\{ [0.5 (S^2 + \Omega^2)]^{1/2}, 10^{-10} \right\}}, \\ f_B &= \min \{2 \exp(-9\alpha^2), 1\}, \quad \alpha = 0.25 - d_w/h_{\max}. \end{aligned} \quad (1.6.4)$$

Функция f_e служит для компенсации резкого снижения уровня турбулентной вязкости в зоне RANS-LES перехода и определяется выражением:

$$f_e = \max (f_{e1} - 1, 0) \Psi f_{e2}, \quad (1.6.5)$$

где

$$f_{e1} = \begin{cases} 2 \exp(-11.09\alpha^2), & \alpha \geq 0 \\ 2 \exp(-9.0\alpha^2), & \alpha < 0 \end{cases}, \quad (1.6.6)$$

$$f_{e2} = 1 - \max (f_t, f_l), \quad (1.6.7)$$

где

$$\begin{aligned} f_l &= \tanh \left[(c_l^2 r_{dl})^{10} \right], \\ f_t &= \tanh \left[(c_t^2 r_{dt})^3 \right], \end{aligned} \quad (1.6.8)$$

а величина r_{dl} в (1.6.8) представляет ламинарный аналог величины r_{dt} :

$$r_{dl} = \frac{\nu}{\kappa^2 d_w^2 \max \left\{ [0.5 (S^2 + \Omega^2)]^{1/2}, 10^{-10} \right\}}. \quad (1.6.9)$$

Графики величин f_B и f_{e1} в зависимости от параметров сетки показаны на рисунке 33.

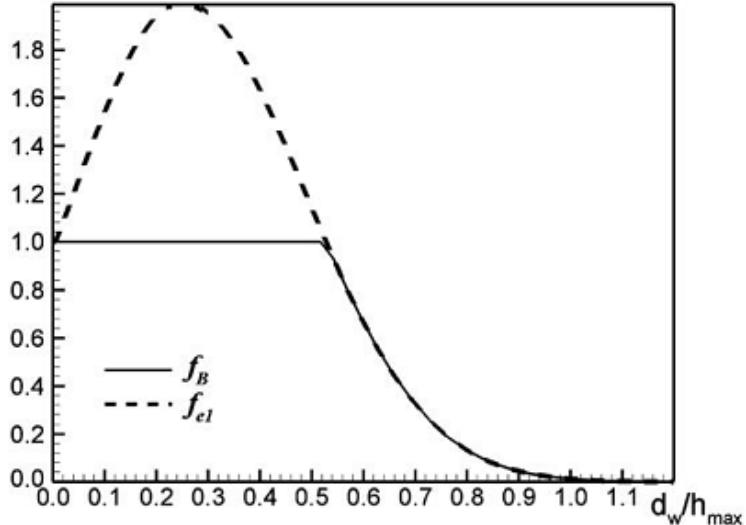


Рис. 33: Зависимость функций f_B и f_{e1} от параметров сетки [74]

Константы, входящие в приведенные выше формулы:

$$C_{d1} = 20, \quad C_{d2} = 3,$$

$$c_l = 3.55, \quad c_t = 1.63.$$

1.7 Общий вид модели высокоскоростного смещения многокомпонентных газовых потоков

Запишем еще раз уравнение (1.4.5), отбросив индексы «DES» у модифицированной турбулентной вязкости:

$$\frac{d\tilde{\nu}}{dt} = P^\nu - D^\nu + \frac{1}{\sigma} \{ \nabla \cdot [(\nu + \tilde{\nu}) \nabla \tilde{\nu}] + c_{b2} [(\nabla \tilde{\nu}) \cdot (\nabla \tilde{\nu})] \} \quad (1.7.1)$$

и представим в виде:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left[(\tilde{\nu} U_x) - \left(\frac{1}{\sigma} (\nu + \tilde{\nu}) \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[(\tilde{\nu} U_y) - \left(\frac{1}{\sigma} (\nu + \tilde{\nu}) \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial y} \right) \right] + \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left[(\tilde{\nu} U_z) - \left(\frac{1}{\sigma} (\nu + \tilde{\nu}) \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial z} \right) \right] = P^\nu - D^\nu + \frac{c_{b2}}{\sigma} [(\nabla \tilde{\nu}) \cdot (\nabla \tilde{\nu})]. \end{aligned} \quad (1.7.2)$$

В общем случае записи (1.7.1) и (1.7.2) не являются эквивалентными так как:

$$\frac{d\tilde{\nu}}{dt} = \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial t} + \vec{U} \cdot \nabla \tilde{\nu} \neq \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial t} + \nabla \left(\vec{U} \tilde{\nu} \right) = \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial t} + \vec{U} \cdot \nabla \tilde{\nu} + \tilde{\nu} \operatorname{div} \vec{U}, \quad (1.7.3)$$

однако в данной работе мы используем несжимаемую вариацию модели Спаларта-Аллмараса и делаем переход от (1.7.1) к (1.7.2), предполагая малость значений $\operatorname{div} \vec{U}$.

Тогда из (1.7.2) получаем запись конвективных и вязких потоков, а также источника для модифицированной вязкости. Расширим вектор \vec{q} , добавив в него модифицированную вязкость $\tilde{\nu}$, и получим модифицированную систему (1.1.1)-(1.1.2) в виде:

$$\frac{\partial \vec{q}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\vec{F}_x - \vec{G}_x) + \frac{\partial}{\partial y} (\vec{F}_y - \vec{G}_y) + \frac{\partial}{\partial z} (\vec{F}_z - \vec{G}_z) = \vec{S}, \quad (1.7.4)$$

где

$$\begin{aligned} \vec{q} &= \left(\rho_1, \dots, \rho_n, \rho U_x, \rho U_y, \rho U_z, \rho E, \tilde{\nu} \right), \\ \vec{F}_x &= \left(\rho_1 U_x, \dots, \rho_n U_x, \rho U_x^2 + p, \rho U_x U_y, \rho U_x U_z, (\rho E + p) U_x, \tilde{\nu} U_x \right), \\ \vec{F}_y &= \left(\rho_1 U_y, \dots, \rho_n U_y, \rho U_x U_y, \rho U_y^2 + p, \rho U_y U_z, (\rho E + p) U_y, \tilde{\nu} U_y \right), \\ \vec{F}_z &= \left(\rho_1 U_z, \dots, \rho_n U_z, \rho U_x U_z, \rho U_y U_z, \rho U_z^2 + p, (\rho E + p) U_z, \tilde{\nu} U_z \right), \\ \vec{G}_x &= \left(-\rho I_{1,x}, \dots, -\rho I_{n,x}, \tau_{xx}, \tau_{xy}, \tau_{xz}, \chi_x - \rho \sum_i H_i I_{i,x}, \frac{1}{\sigma} (\nu + \tilde{\nu}) \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial x} \right), \\ \vec{G}_y &= \left(-\rho I_{1,y}, \dots, -\rho I_{n,y}, \tau_{xy}, \tau_{yy}, \tau_{yz}, \chi_y - \rho \sum_i H_i I_{i,y}, \frac{1}{\sigma} (\nu + \tilde{\nu}) \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial y} \right), \\ \vec{G}_z &= \left(-\rho I_{1,z}, \dots, -\rho I_{n,z}, \tau_{xz}, \tau_{yz}, \tau_{zz}, \chi_z - \rho \sum_i H_i I_{i,z}, \frac{1}{\sigma} (\nu + \tilde{\nu}) \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial z} \right). \end{aligned} \quad (1.7.5)$$

Вектор источников перестает быть нулевым и имеет вид

$$\vec{S} = \left(0, \dots, 0, P^\nu - D^\nu + \frac{c_{b2}}{\sigma} [(\nabla \tilde{\nu}) \cdot (\nabla \tilde{\nu})] \right). \quad (1.7.6)$$

Так как используемая модель Спаларта-Аллмараса не оперирует значением турбулентной кинетической энергии, последним слагаемым для определения $\boldsymbol{\tau}_t$ в (1.1.10) и $\boldsymbol{\tau}_{SGS}$ в (1.3.2) можно пренебречь [28]. Тогда компоненты тензора $\boldsymbol{\tau}$ можно вычислить как

$$\tau_{i,j} = 2(\mu + \mu_{DES}) \left(S_{i,j} - \frac{1}{3} \delta_{i,j} (\nabla \cdot \vec{U}) \right), \quad (1.7.7)$$

где μ — молекулярная вязкость, μ_{DES} — гибридная турбулентная вязкость, являющаяся турбулентной вязкостью в RANS области и подсеточной вязкостью в LES области.

Молекулярная вязкость вычисляется по формуле Сазерленда для многокомпонентной смеси:

$$\mu = \sum_i X_i \mu_{0,i} \frac{T_{0,i} + C_i}{T + C_i} \left(\frac{T}{T_{0,i}} \right)^{3/2}, \quad (1.7.8)$$

где $X_i = \rho_i / m_i$ — мольная доля i -го компонента, μ_0 — вязкость вещества при контрольной температуре T_0 , C — постоянная Сазерленда, T — температура.

Так как перенос вязкости привязан к переносу массы, конвективные потоки для последнего уравнения в системе (1.7.4)-(1.7.5) вычисляются по формуле:

$$F_{\tilde{\nu}} = \frac{\tilde{\nu}}{\rho} F_m, \quad (1.7.9)$$

где F_m — поток массы через грань, $\frac{\tilde{\nu}}{\rho}$ — аппроксимированное на грань значение из той ячейки, в которой поток массы через грань положительный. Отдельное граничное условие для конвективного потока вязкости на стенках не ставится, поскольку там уже стоят условия непротекания.

Вязкие потоки считаются по формулам, приведенным в (1.7.5).

Инициализация поля турбулентной вязкости происходит путем задания интенсивности турбулентности α и характерной длины смешения l_{mix} . Интенсивность турбулентности характеризует максимальную удельную пульсацию величины относительно среднего значения. Тогда кинетическая энергия турбулентности может быть оценена как:

$$k = \frac{(U'_x^2 + U'_y^2 + U'_z^2)}{2} = \frac{\alpha^2 (U_x^2 + U_y^2 + U_z^2)}{2}, \quad (1.7.10)$$

а турбулентная вязкость вычисляется как $\nu_t = \sqrt{k} l_{mix}$. Начальное поле модифицированной турбулентной вязкости определяется по полю турбулентной вязкости путем решения уравнения (1.2.2) методом бикции.

Диффузионные потоки вычисляются по закону Фика:

$$I_{i,x_j} = -D \frac{\partial Y_i}{\partial x_j}, \quad (1.7.11)$$

где $Y_i = \rho_i/\rho$ — концентрация компонента, D — коэффициент диффузии, определяемый из коэффициентов молекулярной и турбулентной вязкости через соответствующие числа Шмидта

$$D = \frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_{DES}}{Sc_t}. \quad (1.7.12)$$

Аналогично ламинарному и турбулентному числам Прандтля, числа Шмидта полагаются постоянными.

Глава 2

Модель химических реакций. Детальный кинетический механизм

2.1 Моделирование химических реакций.

Использование различных кинетических механизмов

С появлением математических моделей, описывающих газодинамические процессы, практически сразу возникла потребность описания химических реакций, протекающих в многокомпонентных газовых смесях. Сложность решения данной задачи заключалась в том, что горение топливно-окислительных смесей в абсолютном большинстве случаев представляет сложный многоступенчатый процесс с появлением большого количества промежуточных химических веществ и возникновением цепных реакций. Полное описание данного процесса может потребовать тысяч химических реакций между сотнями компонентов. Использование таких кинетических механизмов требует огромного количества

вычислительных ресурсов, подчас на порядки больших, чем требуется для работы газодинамической модели, так как размерность системы уравнений химической кинетики определяется общим количеством компонент, участвующих в реакциях. Кроме того, при одних и тех же параметрах газовой смеси (температура, давление, концентрации) скорости различных реакций могут отличаться на несколько порядков. Как следствие, система кинетических уравнений в большинстве случаев является «жесткой», что дополнительно сильно увеличивает вычислительную нагрузку.

С другой стороны, глобальные механизмы, состоящие из одной или нескольких химических реакций, как правило предсказывают правильные значения задержек самовоспламенения и тепловыделения в очень узком диапазоне параметров смеси. При проведении вычислительных экспериментов, условия которых включают сверхзвуковые скорости потоков, а также сильные пространственные градиенты газодинамических параметров, использование глобальных механизмов может приводить к неверным результатам.

Специалистами в области вычислительной химии постоянно ведется работа по редуцированию полных кинетических механизмов для сокращения вычислительных затрат при сохранении универсальности. В настоящее время наиболее используемыми являются детальные химические механизмы, содержащие несколько десятков химических реакций между сравнительно небольшим числом компонент.

Для выбора кинетического механизма была изучена обзорная работа [75] и сделан выбор в пользу кинетического механизма, разработанного А. Керомнесом и опубликованного в работе [76]. Данный кинетический механизм создан для описания горение синтез-газа, однако путем редукции из него выделяется водородно-воздушная кинетика. Данный механизм состоит из 22 обратимых реакций между девятью компонентами, а также учитывает зависимость скоростей протекания некоторых реакций не только от температуры, но и от давления. По результатам сравнительного анализа, проведенного авторами работы [75], дан-

ный кинетический механизм показывает наилучшие результаты в большинстве тестов.

2.2 Описание используемого кинетического механизма и метода моделирования химических реакций

Скорость химических реакций вычисляется по формуле:

$$w_r = \left[K_r^f \prod_s \left(\frac{\rho_s}{m_s} \right)^{f_{s,r}} - K_r^b \prod_s \left(\frac{\rho_s}{m_s} \right)^{b_{s,r}} \right], \quad (2.2.1)$$

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, ρ_s, m_s — плотность и молярная масса s -ого компонента, K_r^f и K_r^b — константы скорости реакции для прямой и обратной реакции соответственно.

Константы скорости реакции вычисляются по закону Аррениуса:

$$K_r^f = A_r^f T^{n_r^f} \exp\left(-\frac{E_r^f}{RT}\right), \quad K_r^b = \frac{K_r^f}{K_r^{eq}(T)}, \quad (2.2.2)$$

где A — предэкспонент реакции, n — показатель степени температуры, E — энергия активации, R — универсальная газовая постоянная, T — температура, $K^{eq}(T)$ — константа равновесной скорости реакции, которая является функцией температуры.

Химические реакции, входящие в механизм [76], а также параметры A_r^f, n_r^f, E_r^f для прямых реакций приведены в таблице А.3 приложения. Параметры обратных реакций A_r^b, n_r^b, E_r^b были вычислены с помощью программного комплекса ChemKin [77].

Три реакции дополнительно к температурной также имеют зависимость от давления. Зависимость вводится в форме Трое [78]. Для реакции задается два

набора параметров: для высокого и низкого давления и вводится гладкая функция смешения между ними

$$K = K_\infty \left(\frac{P_r}{1 + P_r} \right) F, \quad P_r = \frac{K_0 [M]}{K_\infty}, \quad (2.2.3)$$

где K_∞ и K_0 — константы скорости реакции, рассчитанные по набору параметров для высокого и низкого давления соответственно. $[M]$ — мольная концентрация «третьего тела», представляющая сумму мольных концентраций всех компонент с единичным весом, если не указано иное. Веса, отличные от единичных приведены в таблице под буквами ε (см. таблицу А.3 приложения), F — центрирующая функция:

$$\log F = \left[1 + \left[\frac{\log P_r + c}{n - d(\log P_r + c)} \right]^2 \right]^{-1} \log F_{cent},$$

$$c = -0.4 - 0.67 \log F_{cent}, \quad (2.2.4)$$

$$n = 0.75 - 1.27 \log F_{cent},$$

$$d = 0.14,$$

где $F_{cent_9} = 0.67$, $F_{cent_{15}} = 0.43$, $F_{cent_{16}} = 0.51$.

Скорость изменения мольной концентрации компонента определяется суммой скоростей всех реакций, в которых участвует данный компонент. Таким образом, кинетический механизм [76] задается системой из девяти обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ):

$$\frac{dX_s}{dt} = \sum_r (b_{s,r} - f_{s,r}) w_r. \quad (2.2.5)$$

Замыкается система уравнением для температуры, которое отвечает за тепловой эффект от химических реакций

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\sum_s \left(\frac{\partial X_s}{\partial t} (RT - H_s) \right)}{\sum_s (X_s C_{v_s})}, \quad (2.2.6)$$

где $X_s = \rho_s / m_s$ — мольная концентрация s -того компонента, H_s — энталпия компонента, C_{v_s} — теплоемкость компонента при постоянном объеме.

Теплоемкость и энталпия являются зависящими от температуры. Зависимость вводится в виде полиномов

$$\begin{aligned}\frac{C_p}{R} &= a_1 T^{-2} + a_2 T^{-1} + a_3 + a_4 T + a_5 T^2 + a_6 T^3 + a_7 T^4, \\ \frac{H}{RT} &= -a_1 T^{-2} + a_2 T^{-1} \ln(T) + a_3 + \frac{a_4}{2} T + \frac{a_5}{3} T^2 + \frac{a_6}{4} T^3 + \frac{a_7}{5} T^4 + \frac{a_8}{T}.\end{aligned}\quad (2.2.7)$$

Коэффициенты полиномов взяты из базы [79].

2.3 Интеграция химической кинетики в газодинамические уравнения

Блок химической кинетики получает на вход вектор состояния \vec{q}_{before} до вычисления химических реакций, а возвращает вектор \vec{q}_{after} после данной операции. Данные векторы записываются в примитивных переменных $\vec{q} = (\rho_0, \dots, \rho_n, U_x, U_y, U_z, p, \tilde{\nu})$. Внутри блока по компонентам вектора состояния вычисляются компоненты вектора $\vec{y} = (X_1, \dots, X_s, T)$, относительно которого записывается система уравнений химической кинетики (2.2.5)-(2.2.6). После выполнения шага интегрирования получается вектор $\vec{y}' = (X'_1, \dots, X'_s, T')$ с измененными в процессе химических реакций концентрациями и температурой, из которого производится пересчет компонент вектора \vec{q}_{after} .

Взаимодействие газодинамического блока и блока химической кинетики может осуществляться двумя способами. В расчетах, которые выполняются в нестационарном режиме (величина шага по времени Δt конечна) применяется разделение по процессам. То есть сначала выполняется газодинамический шаг алгоритма и в каждой расчетной ячейке находится вектор решения $(\vec{q}_i^{n+1})_{gas}$. Далее данный вектор подается на вход блока химической кинетики, производится расчет химических реакций на шаге Δt с начальными условиями $(\vec{q}_i^{n+1})_{gas}$ и на выходе получается вектор \vec{q}_i^{n+1} , являющийся окончательным решением на $n+1$ -ом шаге алгоритма.

В случае проведения стационарного расчета (один шаг по физическому времени с очень большим значением Δt и большим количеством итераций метода Ньютона), вызов блока химической кинетики выполняется на каждой итерации, а результат его работы используется для формирования вектора источников газодинамической системы. Для этого вектор \vec{q}_{before} запоминается алгоритмом, а вектор \vec{q}_{after} вычисляется путем вызова блока химической кинетики. Далее каждый из векторов $\vec{q}_{before}, \vec{q}_{after}$ переводится в консервативные переменные и вычисляется вектор источников от химических реакций

$$\vec{S}_{chem} = \frac{\vec{q}_{after,c} - \vec{q}_{before,c}}{\Delta t}, \quad (2.3.1)$$

имеющий вид

$$\vec{S}_{chem} = \left(\left(\frac{\partial \rho_0}{\partial t} \right)_{chem}, \dots, \left(\frac{\partial \rho_n}{\partial t} \right)_{chem}, 0, 0, 0, \left(\frac{\partial (\rho E)}{\partial t} \right)_{chem}, 0 \right). \quad (2.3.2)$$

Вектор источников от химической кинетики суммируется с вектором \vec{S} из (1.7.6). Тогда финальный вид решаемой системы представляется как:

$$\frac{\partial \vec{q}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\vec{F}_x - \vec{G}_x) + \frac{\partial}{\partial y} (\vec{F}_y - \vec{G}_y) + \frac{\partial}{\partial z} (\vec{F}_z - \vec{G}_z) = \vec{S}_{full}, \quad (2.3.3)$$

где вектор состояния \vec{q} и вектора потоков \vec{F}_k, \vec{G}_k задаются в соответствии с (1.7.5), а вектор источников \vec{S}_{full} записывается как:

$$\vec{S}_{full} = \left(\begin{array}{c} \left(\frac{\partial \rho_0}{\partial t} \right)_{chem}, \dots, \left(\frac{\partial \rho_n}{\partial t} \right)_{chem}, 0, 0, 0, \\ \left(\frac{\partial (\rho E)}{\partial t} \right)_{chem}, P^\nu - D^\nu + \frac{c_{b2}}{\sigma} [(\nabla \tilde{\nu}) \cdot (\nabla \tilde{\nu})] \end{array} \right). \quad (2.3.4)$$

Глава 3

Используемые численные методы и особенности реализации

3.1 Численный метод для решения основной системы уравнений

Пространственная дискретизация системы уравнений (1.7.4)-(1.7.6) ((2.3.3)-(1.7.5)-(2.3.4) в случае стационарного расчета с химическими реакциями) основана на методе конечных объёмов. Расчетная область разделяется на произвольные непересекающиеся многогранники, каждая грань которых является плоской и характеризуется площадью и единичной внешней нормалью. Для произвольной i -й расчетной ячейки после интегрирования (1.7.4) по объему получаем

$$\frac{\partial \vec{q}}{\partial t} V_i + \iiint_{V_i} \left(\frac{\partial (\vec{F}_x - \vec{G}_x)}{\partial x} + \frac{\partial (\vec{F}_y - \vec{G}_y)}{\partial y} + \frac{\partial (\vec{F}_z - \vec{G}_z)}{\partial z} \right) dx dy dz = \vec{S}_i V_i, \quad (3.1.1)$$

где V_i — объем ячейки.

Переход к поверхностному интегралу переводит (3.1.1) в

$$\frac{\partial \vec{q}}{\partial t} V_i + \sum_{\sigma} \iint_{S_{\sigma}} (\vec{F} - \vec{G}) \cdot \vec{n}_{\sigma} ds = \vec{S} V_i, \quad (3.1.2)$$

где σ обозначает грань ячейки, \vec{n}_{σ} — вектор единичной внешней нормали к грани, $\vec{F} = \{\vec{F}_x, \vec{F}_y, \vec{F}_z\}$, $\vec{G} = \{\vec{G}_x, \vec{G}_y, \vec{G}_z\}$.

Значения конвективных потоков \vec{F} и вязких потоков \vec{G} вычисляются по интерполированным значениям примитивного вектора из центра ячеек на грань σ . Для интерполяции используется алгоритм Ван Лира [80, 81, 82], имеющий 3-й порядок точности на равномерных сетках, обобщенный на неравномерные сетки.

Пусть \vec{q}_i^n — решение на n -ом временном слое, Δt — шаг по времени, $\vec{F}_{\sigma}, \vec{G}_{\sigma}$ — нормальные потоки через грань σ , вычисляемые по формулам:

$$\vec{F}_{\sigma} = \vec{F} \cdot \vec{n}_{\sigma}, \quad \vec{G}_{\sigma} = \vec{G} \cdot \vec{n}_{\sigma}. \quad (3.1.3)$$

Тогда, переходя к разностной аппроксимации производной по времени, получим следующую систему разностных уравнений:

$$\vec{q}_i^{n+1} = \vec{q}_i^n - \frac{\Delta t}{V_i} \sum_{\sigma} s_{\sigma} (\vec{F}_{\sigma} - \vec{G}_{\sigma}) + \vec{S}^n \Delta t, \quad (3.1.4)$$

где s_{σ} — площадь грани σ .

Для преодоления ограничений на временной шаг, связанный с использованием явной схемы, в каждой расчетной ячейке вводится параметр гибридности $\omega \in [0, 1]$, а также промежуточный временной слой, также обозначаемый ω_i , значения на котором вычисляются как

$$\vec{q}_i^{\omega_i} = \vec{q}_i^n + (1 - \omega_i) (\vec{q}_i^{n+1} - \vec{q}_i^n). \quad (3.1.5)$$

Гибридная явно-неявная схема была разработана И. Меньшовым и Й. Накамурой [83] с целью устранения ограничения на шаг по времени. 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 диссиацию при выполнении принципа невозрастания нормы-максимум численного решения. Можно показать, что данное условие выполняется при выборе ω_i по значению локального числа Куранта [83] и модификации стадии предиктора-корректора следующим образом:

$$\begin{aligned}\vec{q}_i^* &= \vec{q}_i^{\omega_i} - \frac{\Delta t}{2V_i} \omega_i \sum_{\sigma} \left(\vec{F}_{\sigma}^{\omega_i} - \vec{G}_{\sigma}^{\omega_i} \right) s_{\sigma} + \omega_i \frac{\Delta t}{2} \vec{S}_i^{\omega_i}, \\ \vec{q}_i^{n+1} &= \vec{q}_i^n - \frac{\Delta t}{V_i} \sum_{\sigma} \left(\vec{F}_{\sigma}^* - \vec{G}_{\sigma}^* \right) s_{\sigma} + \Delta t \vec{S}_i^*.\end{aligned}\quad (3.1.6)$$

Гибридная схема (3.1.6) является неявной во всех случаях кроме случая, когда $\omega = 1$ во всех ячейках расчетной сетки. Поэтому она решается методом установления по псевдовремени на каждом временной шаге. Для этого вводится итерационный параметр τ , называемый «псевдовремя», и решается следующая система [84]:

$$V_i \frac{\partial \vec{q}_i}{\partial \tau} + \vec{R}_{*,i}(\vec{q}_i) = V_i \vec{S}_{*,i}(\vec{q}_i), \quad (3.1.7)$$

где

$$\begin{aligned}\vec{R}_{*,i}(\vec{q}_i) &= V_i \frac{\vec{q}_i}{\Delta t} - V_i \frac{\vec{q}_i^n}{\Delta t} + (1 - \omega_i) \vec{R}_i(\vec{q}_i) + \omega_i \vec{R}_i^n, \\ \vec{S}_{*,i}(\vec{q}_i) &= (1 - \omega_i) \vec{S}_i(\vec{q}_i) + \omega_i \vec{S}_i^n.\end{aligned}\quad (3.1.8)$$

Здесь \vec{q}_i — итерационный вектор решения на $n + 1$ временном слое, меняющийся в течение итерационного процесса, \vec{R}_i — вектор невязки, соответствующий вектору \vec{q}_i .

Для решения (3.1.7) применим неявную схему интегрирования по времени и итерационный метод Ньютона. Переходя к конечным разностям, получим:

$$V_i \frac{\Delta \vec{q}_i^{n+1,m}}{\Delta \tau} + \vec{R}_{*,i}^{n+1,m+1} = V_i \vec{S}_{*,i}^{n+1,m+1}, \quad (3.1.9)$$

где m — псевдовременной слой, $\Delta \vec{q}^{n+1,m} = \vec{q}^{n+1,m+1} - \vec{q}^{n+1,m}$.

Проведем линеаризацию $\vec{R}_*^{n+1,m+1}$ и $\vec{S}_*^{n+1,m+1}$:

$$\begin{aligned}\vec{R}_*^{n+1,m+1} &= \vec{R}_*^{n+1,m} + \frac{\partial \vec{R}_*^{n+1,m}}{\partial \vec{q}} \Delta \vec{q}^{n+1,m}, \\ \vec{S}_*^{n+1,m+1} &= \vec{S}_*^{n+1,m} + \frac{\partial \vec{S}_*^{n+1,m}}{\partial \vec{q}} \Delta \vec{q}^{n+1,m}.\end{aligned}\quad (3.1.10)$$

Далее подставим (3.1.8) в (3.1.10), а затем (3.1.10) в (3.1.9) и получим:

$$\begin{aligned}V_i \frac{\vec{q}_i^{n+1,m+1} - \vec{q}_i^{n+1,m}}{\Delta \tau} + V_i \frac{\vec{q}_i^{n+1,m}}{\Delta t} - V_i \frac{\vec{q}_i^n}{\Delta t} + (1 - \omega_i) \vec{R}_i^{n+1,m} + \\ + \omega_i \vec{R}_i^n + \left(\frac{\partial \vec{R}_{*,i}^{n+1,m}}{\partial \vec{q}_i} - V_i \frac{\partial \vec{S}_{*,i}^{n+1,m}}{\partial \vec{q}_i} \right) (\vec{q}_i^{n+1,m+1} - \vec{q}_i^{n+1,m}) = \\ = (1 - \omega_i) V_i \vec{S}_i^{n+1,m} + \omega_i V_i \vec{S}_i^n.\end{aligned}\quad (3.1.11)$$

Приведем общие слагаемые:

$$\begin{aligned}\left[\frac{V_i}{\Delta \tau} + \frac{\partial \vec{R}_{*,i}^{n+1,m}}{\partial \vec{q}_i} - V_i \frac{\partial \vec{S}_{*,i}^{n+1,m}}{\partial \vec{q}_i} \right] (\vec{q}_i^{n+1,m+1} - \vec{q}_i^{n+1,m}) = -\frac{V_i}{\Delta t} (\vec{q}_i^{n+1,m} - \vec{q}_i^n) + \\ + (1 - \omega_i) (-\vec{R}_i^{n+1,m} + V_i \vec{S}_i^{n+1,m}) + \omega_i (-\vec{R}_i^n + V_i \vec{S}_i^n).\end{aligned}\quad (3.1.12)$$

Из (3.1.8) получаем

$$\begin{aligned}\frac{\partial \vec{R}_{*,i}^{n+1,m}}{\partial \vec{q}_i} &= \frac{V_i}{\Delta t} + (1 - \omega_i) \frac{\partial \vec{R}_i^{n+1,m}}{\partial \vec{q}_i}, \\ \frac{\partial \vec{S}_{*,i}^{n+1,m}}{\partial \vec{q}_i} &= (1 - \omega_i) \frac{\partial \vec{S}_i^{n+1,m}}{\partial \vec{q}}.\end{aligned}\quad (3.1.13)$$

Подставим (3.1.13) в (3.1.12), разделим на $V_i / \Delta t$ и произведем замену $\vec{q}^{n+1,m+1} - \vec{q}^{n+1,m}$ на $\delta \vec{q}^{n+1,m}$. Тогда получим

$$\begin{aligned}\left[\left(1 + \frac{\Delta t}{\Delta \tau} \right) + (1 - \omega_i) \frac{\Delta t}{V_i} \left(\frac{\partial \vec{R}_i^{n+1,m}}{\partial \vec{q}_i} - V_i \frac{\partial \vec{S}_i^{n+1,m}}{\partial \vec{q}_i} \right) \right] \delta \vec{q}_i^{n+1,m} = \\ = -(\vec{q}_i^{n+1,m} - \vec{q}_i^n) - \frac{\Delta t}{V_i} \left((1 - \omega_i) \vec{R}_i^{n+1,m} + \omega_i \vec{R}_i^n \right) + \\ + \Delta t \left((1 - \omega_i) \vec{S}_i^{n+1,m} + \omega_i \vec{S}_i^n \right),\end{aligned}\quad (3.1.14)$$

где

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{R}_i^{n+1,m}}{\partial \vec{q}_i} \delta \vec{q}_i^{n+1,m} &= \sum_{\sigma} s_{\sigma} \left(\frac{\partial \vec{F}_{i,\sigma}^{n+1,m}}{\partial \vec{q}_i} - \frac{\partial \vec{G}_{i,\sigma}^{n+1,m}}{\partial \vec{q}_i} \right) \delta \vec{q}_i^{n+1,m} = \\ &= \sum_{\sigma} s_{\sigma} \left(\delta \vec{F}_{i,\sigma}^{n+1,m} - \delta \vec{G}_{i,\sigma}^{n+1,m} \right). \end{aligned} \quad (3.1.15)$$

Сложность заключается в том, что точная линеаризация приращения потока является вычислительно затратной операцией. В дополнение, функция потока зависит от решения на следующем временном слое, которое заранее не известно. Для преодоления этих трудностей вводятся следующие упрощения: невязкий поток линеаризуется с 1-м порядком точности, параметр гибридности ω принимается постоянным при линеаризации, а вязкие потоки линеаризуются приближенно с использованием диагональной матрицы, мажорирующей Якобиан:

$$\delta \vec{G}_{i,\sigma}^{n+1,m} = \rho_{dis} \frac{\delta \vec{q}_j^{n+1,m} - \delta \vec{q}_i^{n+1,m}}{h_{i,j}}, \quad (3.1.16)$$

где $\rho_{dis} = \max \left(\frac{\mu}{\rho}, \frac{\lambda}{\rho C_v}, \frac{D}{\rho} \right)$, μ, λ, D — коэффициенты вязкости, теплопроводности и диффузии соответственно, ρ — плотность, C_v — теплоемкость при постоянном объеме, j — индекс ячейки, соседней с i -й через грань σ , $h_{i,j}$ — расстояние между центрами соседних ячеек.

Тогда линеаризованные приращения потоков запишутся как:

$$\begin{aligned} \delta \vec{F}_{i,\sigma}^{n+1,m} &= \mathbf{T}_{\sigma}^{-1} \left((1 - \omega_i) \mathbf{A}_i^+ \delta \vec{Q}_i^{n+1,m} + (1 - \omega_j) \mathbf{A}_j^- \delta \vec{Q}_j^{n+1,m} \right), \\ \delta \vec{G}_{i,\sigma}^{n+1,m} &= \bar{\nu}_{\sigma} \left((1 - \omega_j) \delta \vec{q}_j^{n+1,m} - (1 - \omega_i) \delta \vec{q}_i^{n+1,m} \right), \end{aligned} \quad (3.1.17)$$

где $\bar{\nu}_{\sigma} = \rho_{dis}/h_{i,j}$,

$$\mathbf{T}_{\sigma} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & n_x & n_y & n_z & 0 \\ 0 & k_x & k_y & k_z & 0 \\ 0 & l_x & l_y & l_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

\vec{n} — единичная нормаль к грани σ , \vec{k}, \vec{l} — единичные векторы, лежащие в плоскости грани σ и образующие с \vec{n} ортонормированный базис, $\delta\vec{Q}_i = \mathbf{T}_\sigma \delta\vec{q}_{i,\sigma}$, $\vec{q}_{i,\sigma}$ — экстраполированный на грань σ вектор \vec{q}_i .

Матрицы \mathbf{A}_i^+ и \mathbf{A}_j^- в (3.1.17) определяются как

$$\mathbf{A}_i^+ = \mathbf{A}(\vec{Q}_\sigma) \frac{\partial \vec{Q}_\sigma}{\partial \vec{Q}_i}, \quad \mathbf{A}_j^- = \mathbf{A}(\vec{Q}_\sigma) \frac{\partial \vec{Q}_\sigma}{\partial \vec{Q}_j}, \quad (3.1.18)$$

где \mathbf{A} — матрица Якоби локального одномерного потока.

Также для упрощения вклад в аппроксимацию Якобиана считается только от источника уравнения турбулентности то есть от вектора (1.7.6). Дополнительное упрощение заключается в опускании зависимости f_{t2}, f_{v2} и f_w от $\tilde{\nu}$ в уравнениях (1.2.3)-(1.2.4), а также отбрасывании членов, содержащих вторые производные от $\tilde{\nu}$. Тогда

$$\frac{\partial \vec{S}}{\partial \vec{q}} = \left(0, \dots, 0, c_{b1}(1 - f_{t2}) \tilde{\Omega} - 2(c_{w1}f_w - \frac{c_{b1}}{\kappa^2}f_{t2}) \frac{\tilde{\nu}}{l_{DES}^2} \right). \quad (3.1.19)$$

Подставив (3.1.17)-(3.1.19) в (3.1.14) получим линейную систему:

$$\left[\left(1 + \frac{\Delta t}{\Delta \tau} \right) \mathbf{I} + \boldsymbol{\Omega}_i^+ \right] \delta\vec{q}_i^{n+1,m} + \sum_\sigma \boldsymbol{\Omega}_\sigma^- \delta\vec{q}_j^{n+1,m} = -\vec{R}_i, \quad (3.1.20)$$

где

$$\begin{aligned} \vec{R}_i &= \left(\vec{q}_i^{n+1,m} - \vec{q}_i^n \right) + (1 - \omega_i) \left(\vec{R}_i^{n+1,m} - V_i \vec{S}_i^{n+1,m} \right) + \omega_i \left(\vec{R}_i^n - V_i \vec{S}_i^n \right), \\ \boldsymbol{\Omega}_i^+ &= \frac{\Delta t}{V_i} (1 - \omega_i) \left[\sum_\sigma s_\sigma (\mathbf{T}_\sigma^{-1} \mathbf{A}_i^+ \mathbf{T}_\sigma + \bar{\nu}_\sigma \mathbf{I}) - V_i \frac{\partial \vec{S}_i}{\partial \vec{q}_i} \right], \\ \boldsymbol{\Omega}_\sigma^- &= \frac{\Delta t}{V_i} (1 - \omega_j) s_\sigma (\mathbf{T}_\sigma^{-1} \mathbf{A}_j^- \mathbf{T}_\sigma + \bar{\nu}_\sigma \mathbf{I}). \end{aligned} \quad (3.1.21)$$

Матрица системы (3.1.20) является разреженной, и ее прямое обращение является неэффективным. Вместо этого для решения применяется симметричный метод Гаусса-Зейделя с LU разложением. В рамках этого метода матрица левой части заменяется приближенной факторизацией легко обратимых множителей.

Разобьем матрицу, стоящую во втором слагаемом на две суммы:

$$\sum_\sigma \boldsymbol{\Omega}_\sigma^- \delta\vec{q}_j^{n+1,m} = \sum_\sigma \mathbf{L}_\sigma \left(\delta\vec{q}_j^{n+1,m} \right) + \sum_\sigma \mathbf{U}_\sigma \left(\delta\vec{q}_j^{n+1,m} \right), \quad (3.1.22)$$

где

$$\mathbf{L}_\sigma \left(\delta \vec{q}_j^{n+1,m} \right) = \begin{cases} \Omega_\sigma^- \delta \vec{q}_j^{n+1,m}, & i > j \\ 0 & i < j \end{cases}, \quad \mathbf{U}_\sigma \left(\delta \vec{q}_j^{n+1,m} \right) = \begin{cases} \Omega_\sigma^- \delta \vec{q}_j^{n+1,m}, & i < j \\ 0 & i > j \end{cases}. \quad (3.1.23)$$

Тогда систему (3.1.20) можно записать в виде:

$$\left[\left(1 + \frac{\Delta t}{\Delta \tau} \right) \mathbf{I} + \Omega_i^+ + \mathbf{L}_\sigma + \mathbf{U}_\sigma \right] \delta \vec{q}_i^{n+1,m} = -\vec{R}_i. \quad (3.1.24)$$

Перепишем в эквивалентной форме:

$$\begin{aligned} & \left[\left(1 + \frac{\Delta t}{\Delta \tau} \right) \mathbf{I} + \Omega_i^+ + \mathbf{L}_\sigma \right] \left[\left(1 + \frac{\Delta t}{\Delta \tau} \right) \mathbf{I} + \Omega_i^+ \right]^{-1} \times \\ & \times \left[\left(1 + \frac{\Delta t}{\Delta \tau} \right) \mathbf{I} + \Omega_i^+ + \mathbf{U}_\sigma \right] \delta \vec{q}_i^{n+1,m} = \\ & = -\vec{R}_i + \mathbf{L}_\sigma \left[\left(1 + \frac{\Delta t}{\Delta \tau} \right) \mathbf{I} + \Omega_i^+ \right]^{-1} \mathbf{U}_\sigma \delta \vec{q}_i^{n+1,m}. \end{aligned} \quad (3.1.25)$$

Опустим слагаемое пропорциональное Δt^2 , тем самым проведя приближенную факторизацию. Тогда решение системы может быть получено из двух обходов ячеек расчетной сетки — прямого и обратного:

$$\begin{cases} \left[\left(1 + \frac{\Delta t}{\Delta \tau} \right) \mathbf{I} + \Omega_i^+ + \mathbf{L}_\sigma \right] \delta \vec{q}_{i,*}^{n+1,m} = -\vec{R}_i \\ \left[\left(1 + \frac{\Delta t}{\Delta \tau} \right) \mathbf{I} + \Omega_i^+ + \mathbf{U}_\sigma \right] \delta \vec{q}_i^{n+1,m} = \left[\left(1 + \frac{\Delta t}{\Delta \tau} \right) \mathbf{I} + \Omega_i^+ \right] \delta \vec{q}_{i,*}^{n+1,m} \end{cases}. \quad (3.1.26)$$

При решении данной системы уравнений необходимо обращение только блочно-диагональной матрицы, стоящей в правой части системы, решаемой при обратном обходе.

Однако еще большего упрощения можно добиться при приближенной линеаризации приращения потоков. Упрощенная функция потока может быть записана как

$$\vec{f}_\sigma = 0.5 \left[\vec{f}(\vec{Q}_i) + \vec{f}(\vec{Q}_j) - \rho_\sigma (\vec{Q}_j - \vec{Q}_i) \right], \quad (3.1.27)$$

где ρ_σ — спектральный радиус матрицы Якоби, а $\vec{f}(\vec{Q})$ — функция одномерного потока через грань.

Тогда матрицы \mathbf{A}_i^+ и \mathbf{A}_j^- представляются как

$$\begin{aligned}\mathbf{A}_i^+ &= 0.5 \left[\mathbf{A} \left(\vec{Q}_i \right) + \rho_\sigma \mathbf{I} \right], \\ \mathbf{A}_j^- &= 0.5 \left[\mathbf{A} \left(\vec{Q}_j \right) - \rho_\sigma \mathbf{I} \right],\end{aligned}\quad (3.1.28)$$

а матрица $\boldsymbol{\Omega}_i^+$ в свою очередь принимает вид:

$$\boldsymbol{\Omega}_i^+ = d_i \mathbf{I} + 0.5 \frac{\Delta t}{V_i} (1 - \omega_i) \sum_{\sigma} s_{\sigma} \mathbf{T}_{\sigma}^{-1} \mathbf{A} \left(\vec{Q}_{\sigma} \right) \mathbf{T}_{\sigma}, \quad (3.1.29)$$

где

$$d_i \mathbf{I} = 0.5 \frac{\Delta t}{V_i} (1 - \omega_i) \left[\sum_{\sigma} s_{\sigma} (\rho_{\sigma} + 2\bar{\nu}_{\sigma}) - V_i \frac{\partial \vec{S}}{\partial \vec{q}} \right]. \quad (3.1.30)$$

Так как матрица Якоби обладает консервативным свойством, которое гласит, что для любого постоянного вектора решения \vec{q} и любой замкнутой поверхности $S \subset \mathbb{R}^3$ выполняется

$$\oint_S \mathbf{T}_{\sigma}^{-1} \mathbf{A} \left(\vec{Q}_{\sigma} \right) \mathbf{T}_{\sigma} ds = 0, \quad (3.1.31)$$

где $\vec{Q} = \mathbf{T}_{\sigma} \vec{q}$.

Следовательно, второе слагаемое в выражении для $\boldsymbol{\Omega}_i^+$ обращается в ноль и блочно-диагональная матрица $(1 + \frac{\delta t}{\delta \tau}) \mathbf{I} + \boldsymbol{\Omega}_i^+$ приобретает полностью диагональный вид, что исключает обращение матриц.

Введя еще одно упрощение можно полностью исключить работу с матрицами в процессе решения системы. Так как в системе (3.1.26) матрицы фигурируют только внутри матричных операторов \mathbf{L}_{σ} и \mathbf{U}_{σ} в произведении матрицы Якоби на приращение. Данная операция может быть заменена вычислением приращения одномерного потока. Тогда

$$\begin{aligned}\mathbf{L}_{\sigma} \left(\delta \vec{q}_j^{n+1,m} \right) &= 0.5 \frac{\Delta t}{V_i} \sum_{j < i} s_{\sigma} (1 - \omega_j) \left[\mathbf{T}_j^{-1} \delta \vec{f}_j^{n+1,m} - (\rho_{\sigma} + 2\bar{\nu}_{\sigma}) \delta \vec{q}_j^{n+1,m} \right], \\ \mathbf{U}_{\sigma} \left(\delta \vec{q}_j^{n+1,m} \right) &= 0.5 \frac{\Delta t}{V_i} \sum_{j > i} s_{\sigma} (1 - \omega_j) \left[\mathbf{T}_j^{-1} \delta \vec{f}_j^{n+1,m} - (\rho_{\sigma} + 2\bar{\nu}_{\sigma}) \delta \vec{q}_j^{n+1,m} \right],\end{aligned}\quad (3.1.32)$$

где $\delta \vec{f}_j^{n+1,m} = \vec{f}\left(\vec{Q}_j^{n+1,m+1}\right) - \vec{f}\left(\vec{Q}_j^{n+1,m}\right)$

Что приводит к окончательной безматричной записи системы уравнений [85, 86]:

$$\begin{cases} \delta \vec{q}_{i,*}^{n+1,m} = -\frac{\left[\vec{R}_i + \sum_{j < i} \vec{G}_\sigma \left(\delta \vec{q}_j^{n+1,m} \right) \right]}{\left(1 + \frac{\Delta t}{\Delta \tau} \right) + d_i}, \\ \delta \vec{q}_i^{n+1,m} = \delta \vec{q}_{i,*}^{n+1,m} - \frac{\left[\sum_{j > i} \vec{G}_\sigma \left(\delta \vec{q}_j^{n+1,m} \right) \right]}{\left(1 + \frac{\Delta t}{\Delta \tau} \right) + d_i} \end{cases}, \quad (3.1.33)$$

где

$$\vec{G}_\sigma \left(\delta \vec{q}^{n+1,m} \right) = 0.5 \frac{\Delta t}{V_i} s_\sigma (1 - \omega_j) \left[\mathbf{T}_j^{-1} \delta \vec{f}_j^{n+1,m} - (\rho_\sigma + 2\bar{\nu}_\sigma) \delta \vec{q}_j^{n+1,m} \right]. \quad (3.1.34)$$

С учетом всех приведенных упрощений данный метод не требует ни оценки матриц Якоби, ни хранения каких-либо матриц вообще, что позволяет существенно сократить вычислительные затраты.

3.2 Численный метод для решения системы уравнений химической кинетики

Как уже упоминалось выше, решение системы уравнений химической кинетики представляет сложную вычислительную задачу, так как при использовании детальных кинетических механизмов система имеет большую размерность и, как правило, является «жесткой» ввиду большой разницы в скоростях протекания химических реакций. Для максимально эффективного решения используется программа DLSODE [87] (Double Livermore Solver for Ordinary Differential Equations), которая реализует так называемые методы Гира.

Методы Гира являются подклассом линейных многошаговых методов, основанных на разностных формулах дифференцирования назад (ФДН-методами).

Общий вид записи ФДН–методов [88, 89]:

$$\vec{q}^{n+1} + \sum_{j=1}^k \alpha_j \vec{q}^{n+1-j} = h\beta \vec{f}^{n+1}, \quad (3.2.1)$$

где \vec{q} — вектор решения, h — величина шага по времени, k — количество точек в шаблоне ФДН–метода и его порядок аппроксимации, α, β — коэффициенты метода.

Преимущество ФДН–методов перед методами типа Рунге–Кутты состоит в том, что при использовании ФДН–методов нелинейная система алгебраических уравнений для определения \vec{q}^{n+1} имеет меньшую размерность, а следовательно, требуется меньшее число операций для нахождения решения.

ФДН–методы с порядком аппроксимации выше шестого являются безусловно неустойчивыми, поэтому $k = 6$ является максимальным. Коэффициенты методов Гира, представленных в виде (3.2.1), приведены в таблице А.1 приложения. При $k = 1$ метод Гира совпадает с неявным методом Эйлера. Методы Гира первого и второго порядков являются А–устойчивыми.

Наряду с преимуществами в виде высокого порядка аппроксимации при малой размерности нелинейной системы уравнений, ФДН–методы имеют недостатки, такие как необходимость наличия разгонного участка и сложность автоматического выбора шага интегрирования.

Для преодоления данных недостатков используется представление Нордсика. Рассмотрим ФДН–метод в представлении Нордсика для модельной задачи

$$\dot{q} = f(t, q), \quad q(0) = q_0 \quad (3.2.2)$$

и введем вектор Нордсика в форме

$$\vec{z}^n = \left(q^n \quad h\dot{q}^n \quad \frac{h^2}{2}\ddot{q}^n \quad \dots \quad \frac{h^m}{m!}q^{n,(m)} \right)^T. \quad (3.2.3)$$

В данный вектор включены искомое значение функции и приближенные значения первых m производных в узлах сетки. Здесь и в дальнейшем в рамках

данного раздела выражение вида $q^{n,(m)}$ означает производную m -го порядка от q^n .

Для того чтобы осуществить переход к значению \vec{z}^{n+1} на следующем временном слое необходимо задать правила вычисления компонентов вектора \vec{z} по данным в текущий момент времени. Рассмотрим случай $m = 3$. Для этого разложим (3.2.2) в ряд Тейлора в окрестности x_n с использованием остаточного члена в форме Лагранжа:

$$q^{n+1} = q^n + h\dot{q}^n + \frac{h^2}{2}\ddot{q}^n + \frac{h^3}{3!}q^{n,(3)} + \frac{h^4}{4!}q^{(4)}(\xi). \quad (3.2.4)$$

Тогда, продифференцировав данное разложение несколько раз, получим

$$\begin{aligned} h\dot{q}^{n+1} &= h\dot{q}^n + 2\frac{h^2}{2}\ddot{q}^n + 3\frac{h^3}{3!}q^{n,(3)} + 4\frac{h^4}{4!}q^{(4)}(\xi), \\ \frac{h^2}{2}\ddot{q}^{n+1} &= \frac{h^2}{2}\ddot{q}^n + 3\frac{h^3}{6}q^{n,(3)} + 6\frac{h^4}{4!}q^{(4)}(\xi), \\ \frac{h^3}{6}q^{n+1,(3)} &= \frac{h^3}{6}q^{n,(3)} + 4\frac{h^4}{4!}q^{(4)}(\xi). \end{aligned} \quad (3.2.5)$$

Апроксимация остаточного члена может быть выбрано из условий аппроксимации (3.2.2)

$$\dot{q}^{n+1} = f(t^{n+1}, q^{n+1}). \quad (3.2.6)$$

Подставим (3.2.6) в последнее равенство (3.2.5), тогда

$$4\frac{h^4}{4!}q^{(4)}(\xi) = h(f^{n+1} - f_n^q), \quad (3.2.7)$$

где f_n^q записывается через компоненты вектора Нордсика

$$f_n^q = \dot{q}^n + h\ddot{q}^n + \frac{h^2}{2}q^{n,(3)}. \quad (3.2.8)$$

Если мы подставим (3.2.7) в (3.2.4)-(3.2.5), то полученный метод будет неустойчивым, но при этом будет иметь четвертый порядок аппроксимации. Суть представления Нордсика заключается в некотором ухудшении порядка аппроксимации для обеспечения устойчивости.

Представление Нордсика может быть записано в следующем виде:

$$\vec{z}^{n+1} = \vec{z}^n \mathbf{P} + \vec{l}(hf^{n+1} - \vec{e}_1^T \vec{z}^n \mathbf{P}), \quad (3.2.9)$$

где \mathbf{P} — матрица Паскаля, определяемая как

$$\mathbf{P}_{ij} = \begin{cases} C_i^j, & 0 \leq i \leq j \leq m, \\ 0, & \text{иначе} \end{cases}, \quad (3.2.10)$$

C_i^j — биномиальный коэффициент, $\vec{e}_1 = (0, 1, 0, \dots, 0)$, $\vec{l} = (l_0, 1, l_2, \dots, l_k)$ — вектор коэффициентов метода. Коэффициенты для методов Гира в представлении Нордсика приведены в таблице А.2 приложения. $l_0 = \beta$, значение $l_1 = 1$ выбирается из условий нормировки. Система (3.2.9) является нелинейной относительно первого компонента вектора Нордсика q^{n+1} и линейной относительно других компонент.

Метод Гира в представлении Нордсика является самостоятельно стартующим, то есть не требующим дополнительных вычислений перед запуском. Если положить $\vec{z}^0 = (q^0, 0, 0, \dots, 0)$, то можно запустить расчет сразу с использованием метода Гира. Однако стоит учитывать, что на первом шаге данный метод будет иметь первый порядок. Многозначный вариант метода Гира обладает переменным порядком аппроксимации, стартуя с первого и стремясь к максимальному порядку.

Программа DLSODE [87] реализует многозначный метод Гира, способный менять порядок аппроксимации от 1 до 5, однако при проведении расчетов устанавливалось ограничение на использование порядка аппроксимации не выше второго. Данное ограничение связано с тем, что основной численный метод, описанный в предыдущем разделе, имеет второй порядок по времени, что делает расчет химической кинетики с большей точностью нецелесообразным. В интеграторе используется матрица Нордсика размерами $N \times (m + 1)$, где N — размерность решаемой системы ОДУ, m — порядок метода.

Матрица содержит решение \vec{q}^n в точке t^n и нормированные производные до порядка m в виде $\frac{(h^{n+1})^j}{j!} \vec{q}^{n,(j)}$, где $h^{n+1} = t^{n+1} - t^n$, $\vec{q}^{n,(j)}$ — производная j -го порядка от \vec{q}^n .

Алгоритм DLSODE работает по схеме «предиктор-корректор», общая схема которого выглядит следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} \vec{q}^{n+1,0} &= \vec{\psi}^{*,n+1} \\ h^{n+1} \dot{\vec{q}}^{n+1,0} &= \frac{\vec{q}^{n+1,0} - \vec{\psi}^{n+1}}{\beta_0} \end{aligned} \right\}, \quad (3.2.11)$$

$$\vec{\psi}^{n+1} = \sum_{j=1}^q \alpha_j \vec{q}^{n-j+1} \quad \vec{\psi}^{*,n+1} = h^{n+1} \beta_0^* \dot{\vec{q}}^{n-j+1} + \sum_{j=1}^q \alpha_j^* \vec{q}^{n-j+1}$$

$$\left. \begin{aligned} \vec{g}(\vec{q}^{n+1,s}) &= h^{n+1} \vec{f}(\vec{q}^{n+1,s}) - h^{n+1} \dot{\vec{q}}^{n+1,s} \\ \vec{q}^{n+1,s+1} &= \vec{q}^{n+1,s} + \beta_0 \mathbf{P}^{-1} \vec{g}(\vec{q}^{n+1,s}) \\ h^{n+1} \dot{\vec{q}}^{n+1,s+1} &= h^{n+1} \dot{\vec{q}}^{n+1,s} + \mathbf{P}^{-1} \vec{g}(\vec{q}^{n+1,s}) \end{aligned} \right\} s = 0, 1 \dots S-1, \quad (3.2.12)$$

$$\left. \begin{aligned} \vec{q}^{n+1} &= \vec{q}^{n+1,S} \\ h^{n+1} \dot{\vec{q}}^{n+1} &= h^{n+1} \dot{\vec{q}}^{n+1,S} \end{aligned} \right\}$$

где (3.2.11), (3.2.12) — предиктор и корректор соответственно. Коэффициенты α_j^*, β_0^* выбираются так, чтобы уравнение $\vec{q}^{n+1,0} = \vec{\psi}^{*,n+1}$ было тождеством если решением задачи Коши является полином степени m или ниже. $\mathbf{P} = \mathbf{I} - h^{n+1} \beta_0 \mathbf{J}$, \mathbf{I} — единичная диагональная матрица, $h^{n+1} = t^{n+1} - t^n$, \mathbf{J} — матрица Якоби системы, s — итерация корректора.

Для вычисления \vec{q}^{n+1} и $h^{n+1} \dot{\vec{q}}^{n+1}$ с помощью схемы «предиктор-корректор» нужно хранить векторы $\vec{q}^n, \vec{q}^{n-1}, \vec{q}^{n-2}, \dots, \vec{q}^{n-m+1}$ и вектор $h^{n+1} \dot{\vec{q}}^n$ для ФДН-метода порядка m .

Введем так называемые матрицы истории:

$$\begin{aligned} \mathbf{w}^n &= \left(\vec{q}^n, h^{n+1} \dot{\vec{q}}^n, \vec{q}^{n-1}, \dots, \vec{q}^{n-m+1} \right), \\ \mathbf{w}^{n+1} &= \left(\vec{q}^{n+1}, h^{n+1} \dot{\vec{q}}^{n+1}, \vec{q}^n, \dots, \vec{q}^{n-m+2} \right), \\ \mathbf{w}^{n+1,0} &= \left(\vec{q}^{n+1,0}, h^{n+1} \dot{\vec{q}}^{n+1,0}, \vec{q}^n, \dots, \vec{q}^{n-m+2} \right). \end{aligned} \quad (3.2.13)$$

В данной форме данные матрицы практически не используются. Вместо этого берется матрица

$$\mathbf{z}^n = \mathbf{w}^n \mathbf{Q}, \quad (3.2.14)$$

где матрица \mathbf{Q} имеет такую форму, чтобы матрица \mathbf{z}^n имела форму Нордсика:

$$\mathbf{z}^n = \begin{pmatrix} q_1^n & h^{n+1} \dot{q}_1^n & \dots & \frac{h^{m-n+1}}{m!} q_1^{n,(m)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q_N^n & h^{n+1} \dot{q}_N^n & \dots & \frac{h^{m-n+1}}{m!} q_N^{n,(m)} \end{pmatrix}. \quad (3.2.15)$$

Так как $\mathbf{w}^{n+1,0} = \mathbf{w}^n \mathbf{B}$, где

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} \alpha_1^* & \frac{\alpha_1^* - \alpha_1}{\beta_0} & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \beta_1^* & \frac{\beta_1^*}{\beta_0} & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \alpha_2^* & \frac{\alpha_2^* - \alpha_2}{\beta_0} & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \alpha_{q-1}^* & \frac{\alpha_{q-1}^* - \alpha_{q-1}}{\beta_0} & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ \alpha_q^* & \frac{\alpha_q^* - \alpha_q}{\beta_0} & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.2.16)$$

что следует из выражения $\vec{q}^{n+1} = \vec{\psi}^{n+1} + h^{n+1} \beta_0 \vec{f}(\vec{q}^{n+1})$, для матрицы Нордсика получим

$$\mathbf{z}^{n+1,0} = \mathbf{w}^{n+1,0} \mathbf{Q} = \mathbf{w}^n \mathbf{B} \mathbf{Q} = \mathbf{z}^n \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{B} \mathbf{Q} = \mathbf{z}^n \mathbf{A}, \quad (3.2.17)$$

где

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & \dots & & & 0 \\ 1 & 2 & 1 & \dots & & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & m-2 & \frac{(m-2)(m-3)}{2!} & \dots & 1 & & \\ 1 & m-1 & \frac{(m-1)(m-2)}{2!} & \dots & & 1 & \\ 1 & m & \frac{m(m-1)}{2!} & \dots & \frac{m(m-1)}{2!} & m & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.2.18)$$

Ввиду свойств биномиальных коэффициентов вычисление произведения $\mathbf{z} \mathbf{A}$ происходит по следующему алгоритму:

```

For (k = 1; k < m; k++)
    For (j = q; j > k; j--)
        For (i = 1; i <= N; i++)
            
$$z_{i,j-1} = z_{i,j} + z_{i,j-1}$$


```

Также матрица Нордсика легко меняется в случае смены длины шага. Если длина шага изменилась в γ раз, то матрица \mathbf{z} преобразуется как

$$\mathbf{z}_n \rightarrow \mathbf{z}_n \mathbf{C}, \quad (3.2.19)$$

где

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 1 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \gamma & & & \vdots \\ \vdots & & \gamma^2 & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \gamma^m \end{pmatrix}. \quad (3.2.20)$$

Тогда итерации корректора вычисляются следующим образом:

$$\mathbf{z}^{n+1,s+1} = \mathbf{w}^{n+1,s+1} \mathbf{Q} = \mathbf{w}^{n+1,s} \mathbf{Q} + \mathbf{P}^{-1} \vec{g}(\vec{q}^{n+1,s}) \vec{k} \mathbf{Q} = \mathbf{z}^{n+1,s} + \mathbf{P}^{-1} \vec{g}(\vec{q}^{n+1,s}) \vec{l}. \quad (3.2.21)$$

Если записать тождество

$$\mathbf{z}^{n+1,s+1} = \mathbf{z}^{n+1,0} + \sum_{j=0}^s (\mathbf{z}^{n+1,j+1} - \mathbf{z}^{n+1,j}), \quad (3.2.22)$$

то из (3.2.21) и (3.2.22) получим

$$\mathbf{z}^{n+1,s+1} = \mathbf{z}^{n+1,0} + \sum_{j=0}^s \mathbf{P}^{-1} \vec{g}(\vec{q}^{n+1,j}) \vec{l} = \mathbf{z}^{n+1,0} + \vec{e}^{n+1,s+1} \vec{l}, \quad (3.2.23)$$

где

$$\vec{e}^{n+1,s+1} = \sum_{j=0}^s \mathbf{P}^{-1} \vec{g}(\vec{q}^{n+1,j}). \quad (3.2.24)$$

Вектор $\vec{g}(\vec{q}^{n+1,s})$ в свою очередь может быть записан как

$$\vec{g}(\vec{q}^{n+1,s}) = h^{n+1} \vec{f}(\vec{q}^{n+1,s}) - h^{n+1} \dot{\vec{q}}^{n+1,0} - \vec{e}^{n+1,s}. \quad (3.2.25)$$

Окончательный вид метода «предиктор-корректор» , реализованный в интеграторе DLSODE записывается как:

$$\left. \begin{array}{l} \mathbf{z}^{n+1,0} = \mathbf{z}^n \mathbf{A} \\ \vec{e}^{n+1,0} = 0 \end{array} \right\}, \quad (3.2.26)$$

$$\left. \begin{array}{l} \vec{g}(\vec{q}^{n+1,s}) = h^{n+1} \vec{f}(\vec{q}^{n+1,s}) - h^{n+1} \dot{\vec{q}}^{n+1,0} - \vec{e}^{n+1,s} \\ \vec{e}^{n+1,s+1} = \vec{e}^{n+1,s} + \mathbf{P}^{-1} \vec{g}(\vec{q}^{n+1,s}) \\ \vec{q}^{n+1,s+1} = \vec{q}^{n+1,0} + \vec{e}^{n+1,s+1} l_0 \\ \vec{e}^{n+1} = \vec{e}^{n+1,S} \\ \mathbf{z}^{n+1} = \mathbf{z}^{n+1,0} + \vec{e}^{n+1} \vec{l} \end{array} \right\}, \quad s = 0, 1, \dots, S-1, \quad (3.2.27)$$

где (3.2.26) и (3.2.27) — предиктор и корректор соответственно.

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

Перепишем (3.2.1) в виде

$$\vec{R}(\vec{q}^{n+1}) = \vec{q}^{n+1} + \vec{\psi}^{n+1} - h^{n+1} \beta \vec{f}(\vec{q}^{n+1}) = 0, \quad (3.2.28)$$

где

$$\vec{\psi}^{n+1} = \sum_{j=1}^m \alpha_j \vec{q}^{n-j+1}. \quad (3.2.29)$$

Тогда решение исходного уравнения будет эквивалентно нахождению нуля невязки R .

Пусть $R(\vec{q}^{n+1,s})$ — невязка для s -го приближения. Тогда для вычисления $s+1$ -го приближения разложим R в ряд Тейлора до первых производных в окрестности $\vec{q}^{n+1,s}$ и примем $\vec{R}(\vec{q}^{n+1,s+1}) = 0$.

Тогда

$$\mathbf{P}(\vec{q}^{n+1,s+1} - \vec{q}^{n+1,s}) = -\vec{R}(\vec{q}^{n+1,s}) = h^{n+1} \beta \vec{f}(\vec{q}^{n+1,s}) - \vec{q}^{n+1,s} - \vec{\psi}^{n+1}. \quad (3.2.30)$$

Из того, что

$$\vec{g}(\vec{q}) = h \vec{f}(\vec{q}) + \frac{\vec{\psi} + \vec{q}}{\beta} \quad (3.2.31)$$

и уравнения (3.2.28) следует, что

$$\vec{R}(\vec{q}) = -\beta \vec{g}(\vec{q}). \quad (3.2.32)$$

Тогда уравнение (3.2.30) переписывается как

$$\vec{q}^{n+1,s+1} = \vec{q}^{n+1,s} + \beta \mathbf{P}^{-1} \vec{g}(\vec{q}^{n+1,s}), \quad (3.2.33)$$

что приводит к итерационному процессу Ньютона-Рафсона для $h^{n+1}\dot{\vec{q}}^{n+1}$ вида

$$h^{n+1}\dot{\vec{q}}^{n+1,s+1} = h^{n+1}\dot{\vec{q}}^{n+1,s} + \mathbf{P}^{-1} \vec{g}(\vec{q}^{n+1,s}). \quad (3.2.34)$$

Линеаризованная система решается путем разложения матрицы \mathbf{P} на две треугольные и нахождения решения с помощью явного метода Гаусса.

3.3 Особенности реализации и используемые программные решения

В качестве основного метода для вычисления конвективных потоков в (3.1.1) используется метод Годунова [90], основанный на точном решении задачи Римана для интерполированных на грань значений. В случае необходимости проведения расчетов, требующих низкого уровня схемной вязкости, может быть использован гибридный поток, вычисляемый по формуле

$$f = \varphi f_R + (1 - \varphi) f_{CD}, \quad (3.3.1)$$

где f_G — поток, вычисляемый по методу Русанова, а f_{CD} — поток, вычисляемый по методу центральных разностей, $\varphi \in [0, 1]$ — коэффициент гибридизации потока.

Можно поддерживать как постоянное значение φ во всей области, так и динамическое определение, позволяющее снижать численную вязкость до минимума в областях гладкого течения и переходить на метод Русанова там, где возникают относительно сильные вариации параметров течения, чтобы избежать

возникновения численных неустойчивостей. Критерий динамического определения φ основан на градиенте давления [91]:

$$\varphi = \min (\max (\varphi_{\min}, \varphi(\text{grad}(P))), 1.0), \quad (3.3.2)$$

где φ_{\min} — минимальное пороговое значение коэффициента гибридизации, которое обеспечивает устойчивый расчет. Величина $\varphi(\text{grad}(P))$ в свою очередь определяется как:

$$\begin{aligned} \varphi(\text{grad}(P)) &= k_{\varphi} \max (\varphi_i, \varphi_j), \\ \varphi_i &= \frac{\left| \sum_{\sigma(i)} (p_{\sigma,j} - p_{\sigma,i}) \right|}{\left| \sum_{\sigma(i)} (p_{\sigma,j} + p_{\sigma,i}) \right|}, \\ \varphi_j &= \frac{\left| \sum_{\sigma(j)} (p_{\sigma,i} - p_{\sigma,j}) \right|}{\left| \sum_{\sigma(i)} (p_{\sigma,i} + p_{\sigma,j}) \right|}, \end{aligned} \quad (3.3.3)$$

где i и j — ячейки, разделяемые гранью σ так, что нормаль к грани направлена из ячейки i в ячейку j , $\sigma(i)$ и $\sigma(j)$ — наборы граней ячеек i и j соответственно, k_{φ} — константа схемы, регулирующая скорость роста диссипации в области больших градиентов. Члены φ_i и φ_j контролируют относительный уровень диссипации, используя оценку градиента давления.

Вязкие потоки определяются с помощью обобщенного метода центральных разностей. Второй порядок по пространству обеспечивается использованием основанной на MUSCL (monotonic upwind scheme for conservation laws) интерполяционной схемы, дающей третий порядок на равномерных сетках и второй на неравномерных [81, 82, 80]. Для устранения нефизичных осцилляций в окрестности сильного разрыва при интерполяции на грань используются ограничители MINMOD [92] и ALBADA2 [93]. При расчете течений без ударных волн ограничители могут быть заменены на корректор, основанный на использовании функции median [94], выбирающей из трех значений то, что лежит между

двумя другими:

$$q_\sigma = \text{median} (q_\sigma, q_i, q_j), \quad (3.3.4)$$

Как уже указывалось в разделе 3.1, используемая численная схема имеет второй порядок аппроксимации по времени только в явной моде во всех расчетных ячейках ($\omega_i = 1$). При переходе на неявную компоненту порядок гибридной схемы формально опускается до первого. Для получения второго порядка по времени предусмотрена возможность перестройки схемы в схему Кранка-Николсон путем использования $\omega_i = 0.5$ в (3.1.14) и отключения работы предиктора. Однако использование схемы Кранка-Николсон вблизи стенок, где шаг по критерию устойчивости является очень малым, может приводить к возникновению численной неустойчивости. Для предотвращения этого, вблизи стенок схема переходит в неявную схему первого порядка, то есть в неявную схему Эйлера. Для этого перехода используется дополнительная функция θ [56].

Запишем классический вид схемы Кранка-Николсон:

$$V \frac{\bar{q}^{n+1} - \bar{q}^n}{\Delta t} = \frac{1}{2} R(\bar{q}^{n+1}) + \frac{1}{2} R(\bar{q}^n) = 0. \quad (3.3.5)$$

Тогда после модификации она перейдет в

$$V \frac{\bar{q}^{n+1} - \bar{q}^n}{\Delta t} = \frac{1}{2} (1 + \theta) R(\bar{q}^{n+1}) + \frac{1}{2} (1 - \theta) R(\bar{q}^n) = 0, \quad (3.3.6)$$

где

$$\theta = \frac{1}{2} \left(1 - \tanh \left(\frac{d_w - d_t}{0.2d_t} \right) \right). \quad (3.3.7)$$

Здесь d_w — расстояние от стенки, константа d_t используется для фиксации расстояния от стенки, на котором реализуется переход на схему Кранка-Николсон. Система (3.1.33) преобразуется аналогично (3.3.6)

Для улучшения сходимости можно также применить комбинированный метод GMRES-LU-SGS [84]. В этом случае матрица, полученная путем приближенной факторизации системы методом LU-SGS, описанным в разделе 3.1, может быть использована в качестве предобуславливателя для обобщенного ме-

тода наименьших невязок (Generalized Minimal RESidual). Использование данного метода улучшает сходимость, однако требует больших затрат по памяти и вычислительному времени. Тем не менее, чаще всего использование комбинированного метода оправдано, так как прирост скорости сходимости, а следовательно, снижение числа итераций по псевдовремени превосходит увеличение удельных затрат на один шаг алгоритма.

Как альтернатива, применяется также алгоритм сглаживания невязки. Данний алгоритм основан на использовании сглаживающего оператора Лапласа

$$\bar{R}_i = R_i + \varepsilon \sum_j (\bar{R}_j - \bar{R}_i), \quad (3.3.8)$$

где R_i — несглаженная невязка в i -й ячейке, \bar{R} — сглаженная невязка, ε — параметр сглаживания.

Суммирование выполняется по соседям i -й ячейки. Уравнение (3.3.8) может быть решено с помощью итерационного метода Якоби

$$\bar{R}_i^m = \frac{R_i + \varepsilon \sum_j^N \bar{R}_j^{m-1}}{1 + \varepsilon N}, \quad (3.3.9)$$

где m — итерация сглаживания невязки, N — количество соседей ячейки.

Применение данного алгоритма также позволяет в некоторых случаях повысить скорость сходимости, однако, как и в случае использования GMRES вычислительные затраты на расчетную итерацию повышаются.

Описанные выше численные методы реализованы в программном комплексе, предназначенном для проведения расчетов на высокопроизводительных много-процессорных вычислительных системах. Параллельная реализация основывается на декомпозиции расчетной области (сетки) и обеспечении параллельной работы функции и взаимодействия между процессорами. Для декомпозиции используется пакет PARMETIS [95], а для параллельной реализации вычислений применяется MPI (Message Passing Interface). Подробности реализации программного комплекса могут быть найдены в [96, 97].

Для быстрого расчета расстояния от центров расчетных ячеек до стенки, а также для решения задач, связанных с интерполяцией по ближайшим соседям, используется библиотека ANN (Approximate Nearest Neighbor) [98], где поиск основывается на построении kd -деревьев (kd – сокращение от k -мерное, kd -дерево — дерево для хранения точек из \mathbb{R}^k).

Глава 4

Верификация и валидация разработанной модели

4.1 Валидация кинетического механизма

Для тестирования модели кинетики химических реакций рассматриваются две модельные задачи, в которых химические процессы в газовой смеси играют определяющую роль, и имеются данные для сравнительного анализа.

Моделирование воспламенения водородно-воздушной смеси

Для верификации реализации детального кинетического механизма [76], используемого в настоящей работе, были проведены две серии расчетов в нульмерной постановке (т.е. в отсутствии движения среды) при различных начальных параметрах смеси (давления, температуры, коэффициента избытка топлива) с целью определения задержки воспламенения.

В первой серии расчетов использовалась смесь водорода с кислородом с коэффициентом избытка топлива $\phi = 0.5$, разбавленная азотом в пропорции 1:5. Расчет проводился для давлений 1, 4 и 16 бар в диапазоне температур 1000–2000 К. Задержкой воспламенения считалась точка максимальной концентрации радикала OH на временной шкале.

Результаты расчетов сравнивались с данными об измеренных задержках воспламенения, полученных в DLR (Германия) и приведённых в работе [76]. Результаты сравнения приводятся на рисунке 34.

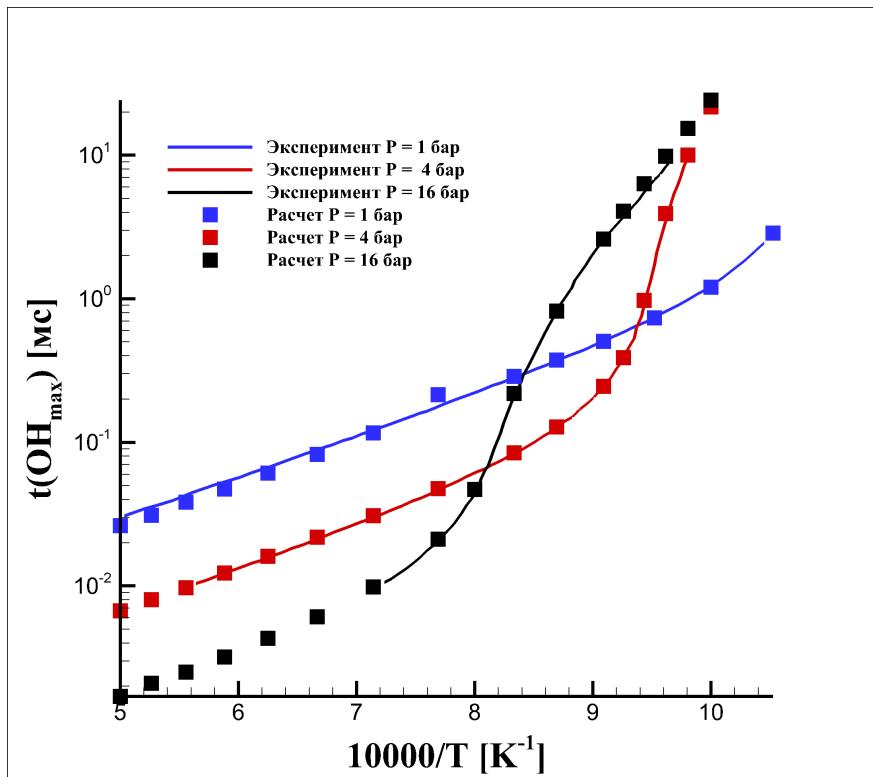


Рис. 34: Величина задержки воспламенения в зависимости от температуры и давления для смеси водород-кислород с коэффициентом избытка топлива $\phi = 0.5$, разбавленной азотом в пропорции 1:5.

По результатам сравнения можно говорить об очень хорошем совпадении результатов моделирования с экспериментальными данными во всем исследованном диапазоне давлений и температур.

Вторая серия расчетов была выполнена для стехиометрической смеси ($\phi = 1$) при давлениях 1 и 2 атм. Температура варьировалась в диапазоне 910–1250 К. Результаты сравнивались с экспериментальными данными и расчетами с использованием кинетического механизма А.М. Старика из работы [99]. Результаты сравнения приводятся ниже на рисунках 35–36:

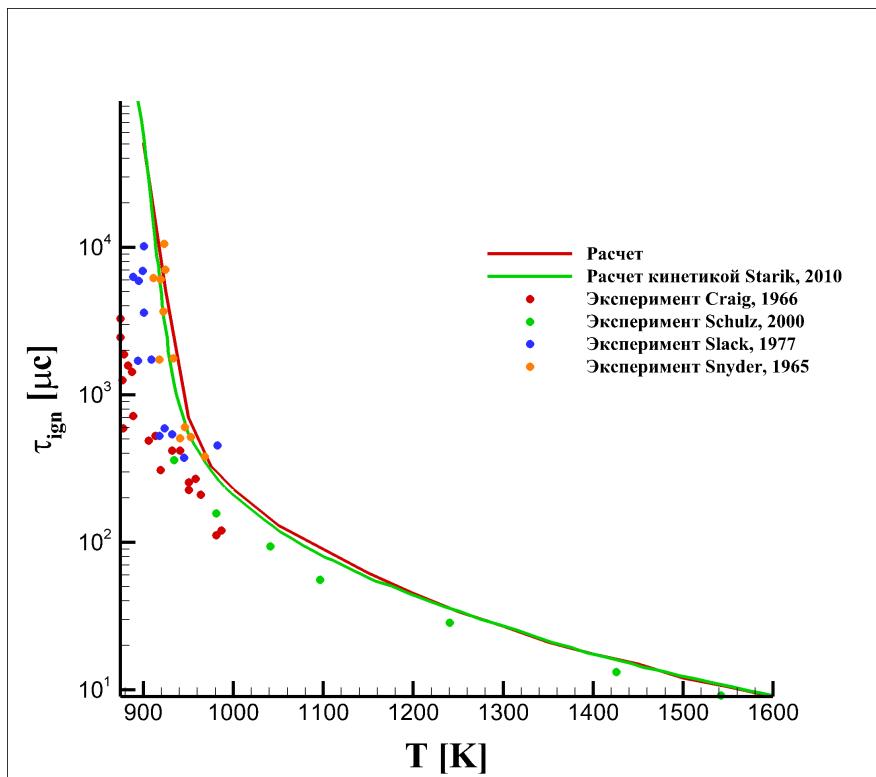


Рис. 35: Величина задержки воспламенения в зависимости от температуры стехиометрической водородно-воздушной смеси для давления 1 атм.

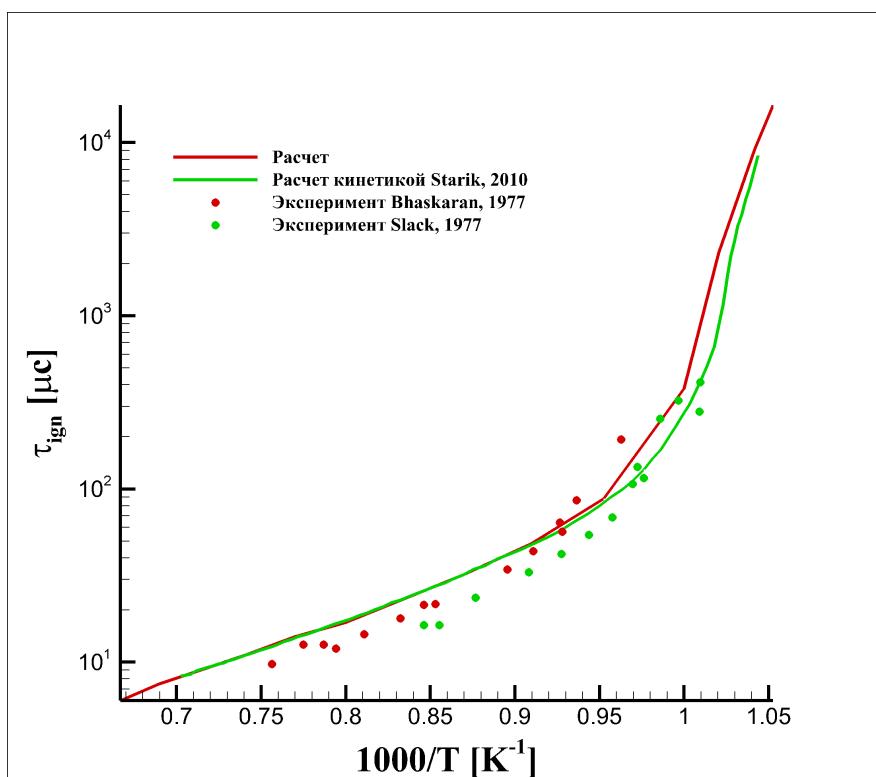


Рис. 36: Величина задержки воспламенения в зависимости от температуры стехиометрической смеси для давления 2 атм.

Данная серия расчетов также показала хорошее согласие между полученными результатами, экспериментальными и расчетными данными [99] в рассмотренном диапазоне температур.

Моделирование структуры одномерной детонационной волны с использованием ЗНД модели

Далее был проведен вычислительный эксперимент по моделированию структуры одномерной детонационной волны в водородно-воздушной смеси с использованием ЗНД модели. Начальное давление в смеси составляло 1 бар, начальная температура — 295 К. Коэффициент избытка топлива ϕ варьировался от 0.3 до 4.5. На рисунках 37 и 38 показаны результаты сравнения зависимости скорости детонационной волны и ширины зоны полупревращения (расстояние от фронта детонационной волны на котором концентрация реагентов достигает 50% от начальной) от коэффициента избытка топлива с результатами расчётов с использованием кинетических механизмов Коннова и Тана. Результаты расчетов по данным кинетическим механизмам взяты из [100].

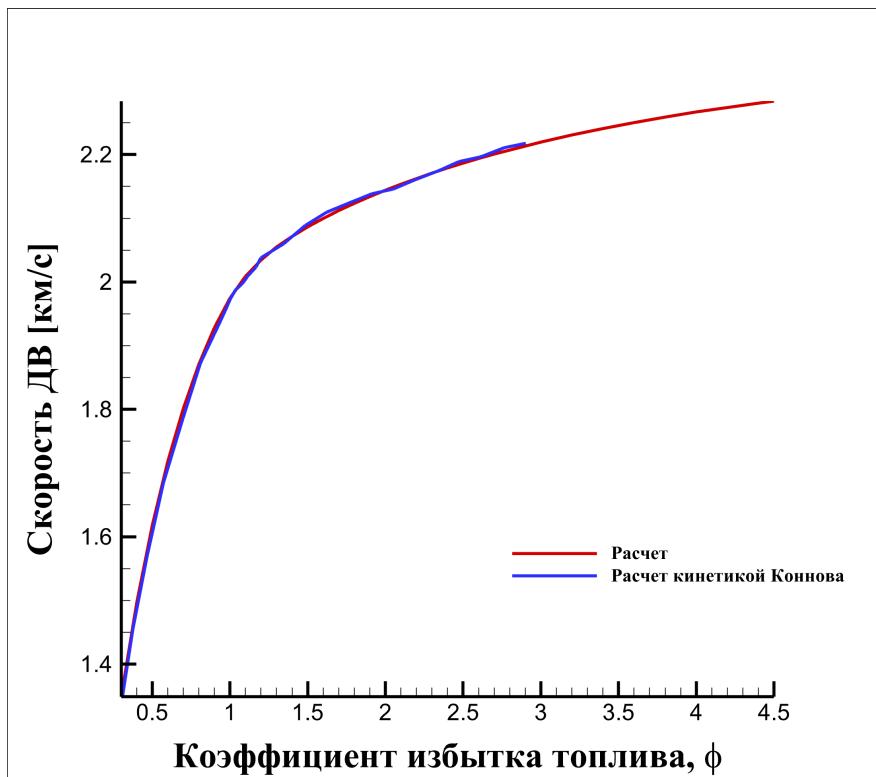


Рис. 37: Скорость детонационной волны в зависимости от коэффициента избытка топлива.

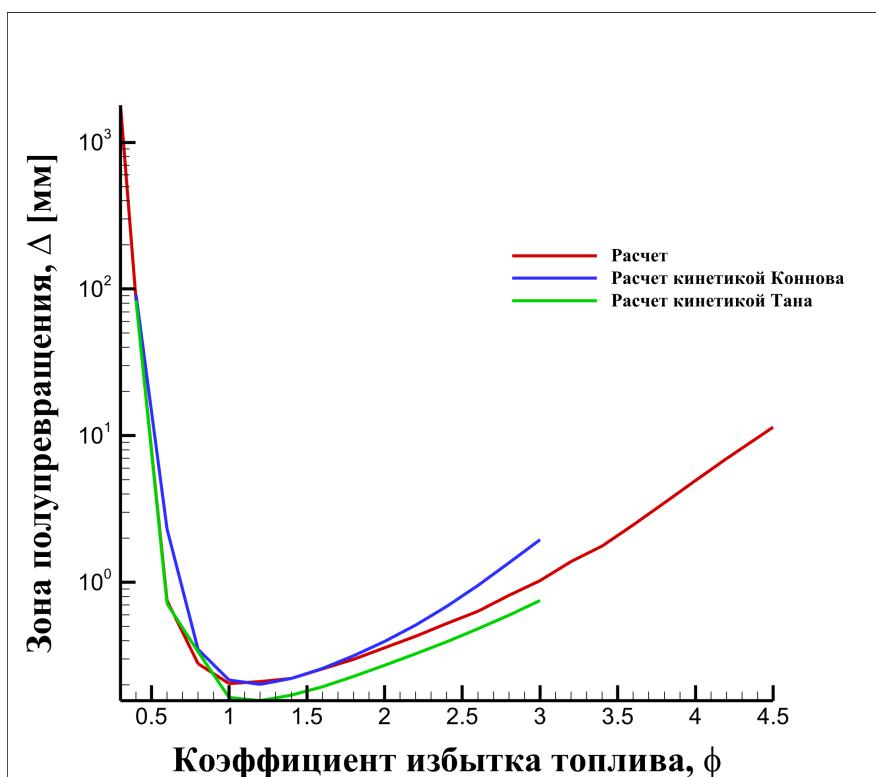


Рис. 38: Ширина зоны полупревращения за ударной волной в зависимости от коэффициента избытка топлива.

По результатам сравнения можно сделать вывод о правильной реализации кинетического механизма. Данные, приведенные на рисунках 35-36, свидетельствуют о высоком уровне точности работы механизма по предсказанию величины задержек воспламенения в широком диапазоне давлений и температур, а данные с рисунков 37-38 показывают возможность корректной работы кинетического механизма как в сильно бедных, так и в сильно богатых смесях. Как уже отмечалось ранее, корректная работа кинетического механизма в широком спектре параметров газовой смеси очень важна для проведения моделирования высокоскоростного горения и детонационных процессов в неоднородных смесях, где присутствуют резкие пространственные градиенты.

4.2 Моделирование стационарного турбулентного пограничного слоя на плоской пластине

Разработанная модель и численная реализация RANS подхода на основе SA модели турбулентности валидировались на решении модельных задач. Одна из них — 2D турбулентное течение на плоской пластине. Данная задача рассматривалась автором в работе [63]. Решение искалось в рамках стационарного расчета с использованием расчетных сеток различной разрешающей способности с размерами первой пристеночной ячейки $y^+ = 3, 22, 335$ в переменных «закона стенки» .

Переменные закона стенки:

$$u^+ = \frac{|\vec{V}_\tau|}{u_\tau}, \quad y^+ = \frac{y}{l_\tau}, \quad (4.2.1)$$

где y — координата вдоль нормали к твердой стенке, $\vec{V}_\tau = \vec{V} - (\vec{V}, \vec{n}) \cdot \vec{n}$ — проекция вектора скорости на плоскость, касательную к стенке в точке $y = 0$.

$u_\tau = \sqrt{\frac{|\tau_w|}{\rho_w}}$, $l_\tau = \frac{\mu_w}{\rho_w u_\tau}$; τ_w — касательное напряжение на стенке, ρ_w — плотность на стенке, μ_w — молекулярная динамическая вязкость на стенке.

Постановка задачи была взята из [45]. Давление и температура газа примерно соответствовали нормальным условиям: $P = 1$ атм., $T = 300$ К. Скорость потока составляла 68 м/с, что соответствует числу Маха $M = 0.2$. Пластина считалась адиабатической, на входной границе задавался массовый расход $8.18 \text{ г/см}^2/\text{с}$, на выходной границе — постоянное давление.

Параметры турбулентности задавались следующими: интенсивность турбулентности — 5%, характерная длина смешения — $1.4 \cdot 10^{-5}$ м.

Интегрирование по времени выполнялось с использованием гибридной явно-неявной схемы в стационарном приближении. Выполнялся один шаг по физическому времени с $dt \approx 10^{25}$ с, на котором выполнялся итерационный цикл до достижения сходимости. Применяемый численный метод — GMRES+LU-SGS с размерностью пространства Крылова 3. Конвективные потоки вычисляются с помощью метода Годунова. Аппроксимация значений на грань с использованием ограничителя van Albada 2.

Для подробной сетки $y^+ = 3$ были построены профили скорости в переменных стенки. Профили были построены в трех сечениях вдоль пластины, соответствующих $Re_x = 2.7 \cdot 10^6$, $5.0 \cdot 10^6$, 10^7 , где

$$Re_x = \frac{\rho_\infty U_\infty x}{\mu_\infty}. \quad (4.2.2)$$

Сравнение производилось с результатами расчетов с использованием $k - \varepsilon$ модели, приведенными в [45], а также с автомодельным профилем стенки [101]:

$$\begin{cases} y^+ = u^+ + e^{-2.2} \left(e^{\kappa u^+} - 1 - \kappa u^+ - \frac{1}{2} (\kappa u^+)^2 - \right. \\ \left. - \frac{1}{6} (\kappa u^+)^3 - \frac{1}{24} (\kappa u^+)^4 \right), & y^+ < 30 \\ u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln(y^+) + 5, & y^+ \geq 30 \end{cases}. \quad (4.2.3)$$

Результаты сравнения представлены на рисунке 39:

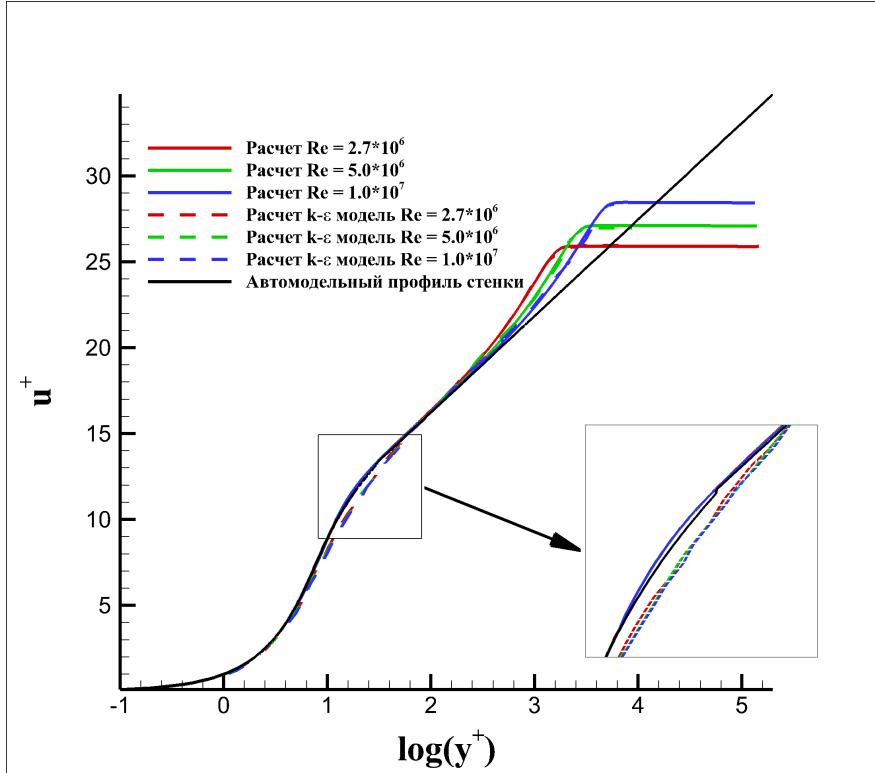


Рис. 39: Безразмерные профили скорости на плоской пластине в переменных «закона стенки» в трех сечениях для сетки $y^+ = 3$.

Результаты сравнения показывают хорошее совпадение с профилями из [45] практически по всей толщине пограничного слоя. Исключение составляет буферная зона $y^+ = 10 - 100$, различия в которой могут быть объяснены использованием разных моделей турбулентности. Стоит отметить, что результаты, полученные с применением реализованной модели, лучше совпадают с автомодельным профилем в данной зоне, так как модель Спаларта-Аллмараса создавалась с целью максимально точного воспроизведения профиля Спaldinga [101].

Далее были построены профили коэффициента трения вдоль пластины для используемых сеток. Полученные результаты сравнивались с результатами расчетов кодом CFL3D, приведенными в [102], а также аналитическим решением Кармана-Шонхерра (K-S теория) [103]. Профили строились в переменных Re_θ ,

c_f , где

$$\begin{aligned} \text{Re}_\theta &= \frac{\rho_\infty U_\infty \theta}{\mu_\infty}, \\ \theta &= \int_0^\infty \frac{\rho}{\rho_\infty} \frac{u}{U_\infty} \left(1 - \frac{u}{U_\infty}\right) dy, \\ c_f &= \frac{\tau_w}{0.5 \cdot \rho_\infty U_\infty}, \end{aligned} \quad (4.2.4)$$

и приводятся на рисунке 40.

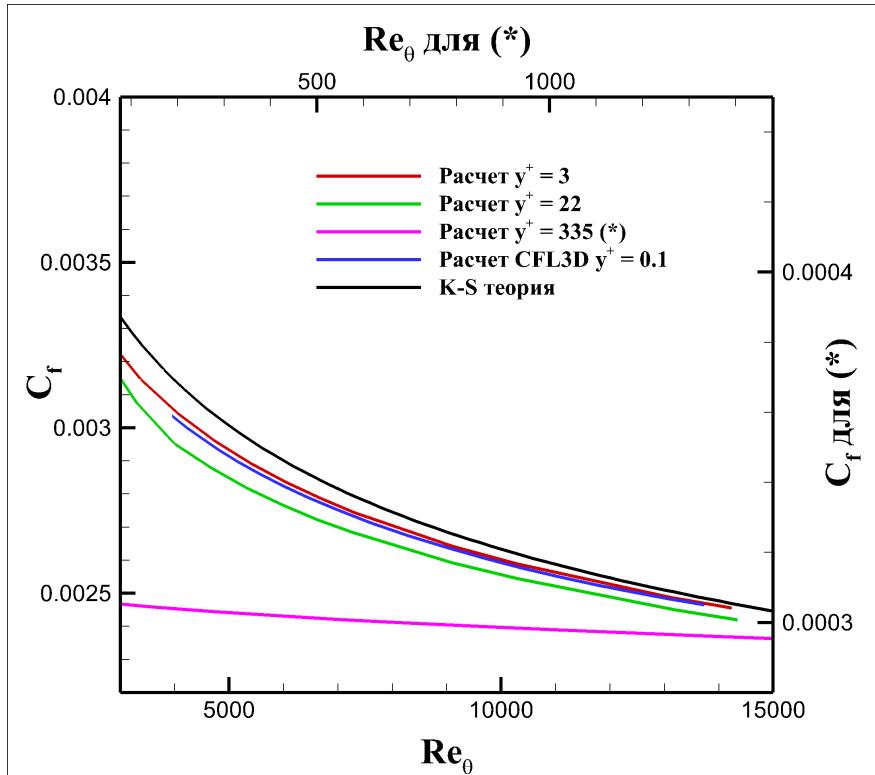


Рис. 40: Сравнение распределения коэффициента трения на пластине для различных сеток.

Расчёт на сетке с $y^+ = 3$ дает правильные коэффициент трения на пластине, который совпадает с данными, полученными в расчете кодом CFL3D на сетке с $y^+ = 0.1$ [102] и достаточно близок к аналитическому решению. Расчеты на сетках с $y^+ = 22$ и 335 в свою очередь занижают коэффициент трения, причем в случае сетки с $y^+ = 335$ коэффициент трения отличается на порядок от результатов, полученных на сетке с $y^+ = 3$. Исходя из вышесказанного, можно сделать вывод, реализованная модель хорошо работает на сетках, обеспечиваю-

щих разрешение пограничного слоя в то время как использование грубых сеток сильно снижает качество получаемых результатов.

Для данных расчетов также были построены безразмерные профили скорости в переменных «закона стенки» в сечении соответствующем $Re_\theta = 10000$, которые также сравнивались с профилями, приведенными в [102].

Результаты сравнения представлены на рисунке 41.

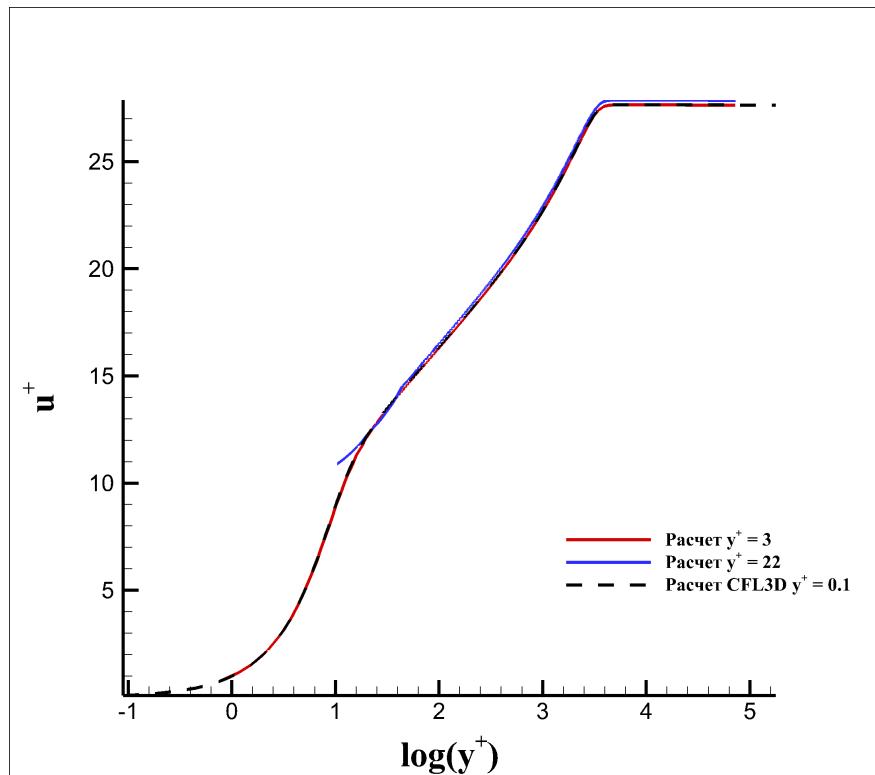


Рис. 41: Сравнение безразмерных профилей скорости для различных сеток.

Полученные результаты подтверждают выводы, сделанные ранее. Расчет на сетке, разрешающей пограничный слой, очень хорошо совпадает с расчетными результатами из [102]. Для сетки с $y^+ = 22$ расчет удовлетворительно воспроизводит профиль, однако имеет неправильные значения в первой ячейке, что свидетельствует о неправильном расчете напряжения на стенке. Расчет на сетке $y^+ = 335$ показывает полностью неправильный профиль скорости внутри пограничного слоя, поэтому на графике не приводится.

4.3 Моделирование стационарного течения в ассиметричном диффузоре Оби

Далее решалась задача по моделированию установившегося течения воздушного потока в модельном ассиметричном диффузоре Оби [45, 30]. Данная задача также является широко используемой для валидации турбулентных моделей, применяемых в рамках RANS подхода. Так же, как и в случае с пластиною постановка является двумерной, однако в отличие от предыдущей задачи течение в диффузоре является более сложным. В расширении происходит отрыв потока, и образуется рециркуляционная зона, геометрия которой также должна быть правильно описана разрабатываемой моделью.

Параметры воздушного потока соответствовали нормальным условиям ($P = 1$ атм, $T = 293$ К). Скорость потока — 20.6 м/с, что соответствует числу Маха $M = 0.06$. Аналогично задаче о формировании пограничного слоя на плоской пластине интенсивность турбулентности и характерная длина смешения составляли 5% и $1.4 \cdot 10^{-5}$ м соответственно.

Верхняя и нижняя стенки диффузора считались адиабатическими, на входе также как и в задаче о течении над пластиною задавался массовый расход, а на выходе — постоянное давление.

Интегрирование по времени также производилось с использованием гибридной явно-неявной схемы. Величина шага по времени: $dt = 1$ с. Величина итерационного параметра вычислялась из локального шага по явной схеме, получаемого из критерия устойчивости, а также глобального для всей области числа $cfl = 100$. Численный метод также GMRES+LU-SGS с размерностью пространства Крылова 3. Для расчета конвективных потоков применяется метод Годунова. Аппроксимация значений на грань с использованием ограничителя van Albada 2.

Расчеты проводились на двух сетках, имеющих различную разрешающую способность в вертикальном направлении: 35 (грубая сетка) и 140 ячеек (подробная сетка).

Результаты моделирования опубликованы автором в работе [63]. На рисунке 42 и рисунке 43 показано распределение продольной компоненты скорости [км/с] и турбулентной вязкости [Па· с] соответственно в диффузоре после установления течения.

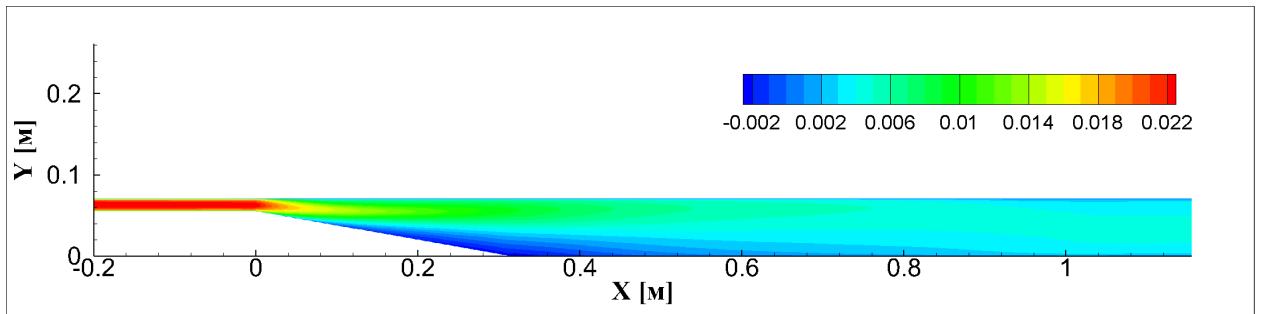


Рис. 42: Распределение продольной компоненты скорости в диффузоре Оби.

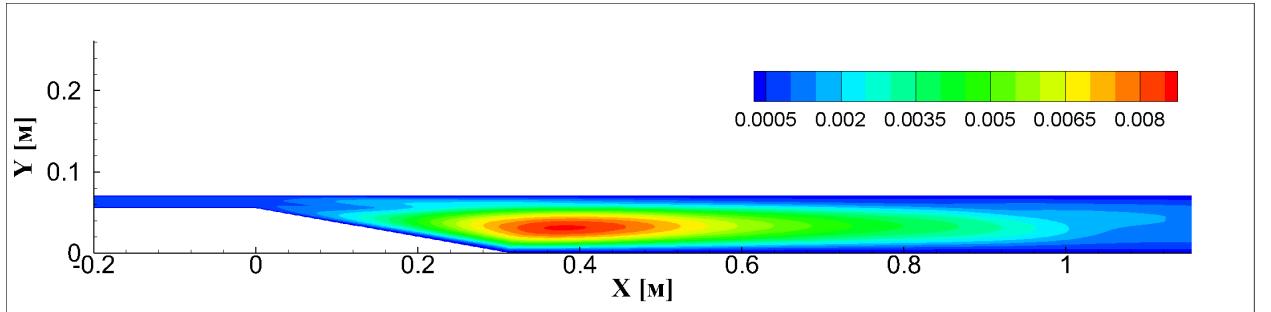


Рис. 43: Распределение турбулентной вязкости в диффузоре Оби.

Для обеих расчетных сеток были построены безразмерные профили скорости в нескольких сечениях вдоль диффузора и проведено сравнение с экспериментальными данными из [45]. Обезразмеривание осуществлялось на величины $h = 1.5$ см — высоту изолятора диффузора и $U_b = 20.6$ м/с — скорость потока. Результаты сравнения представлены на рисунке 44.

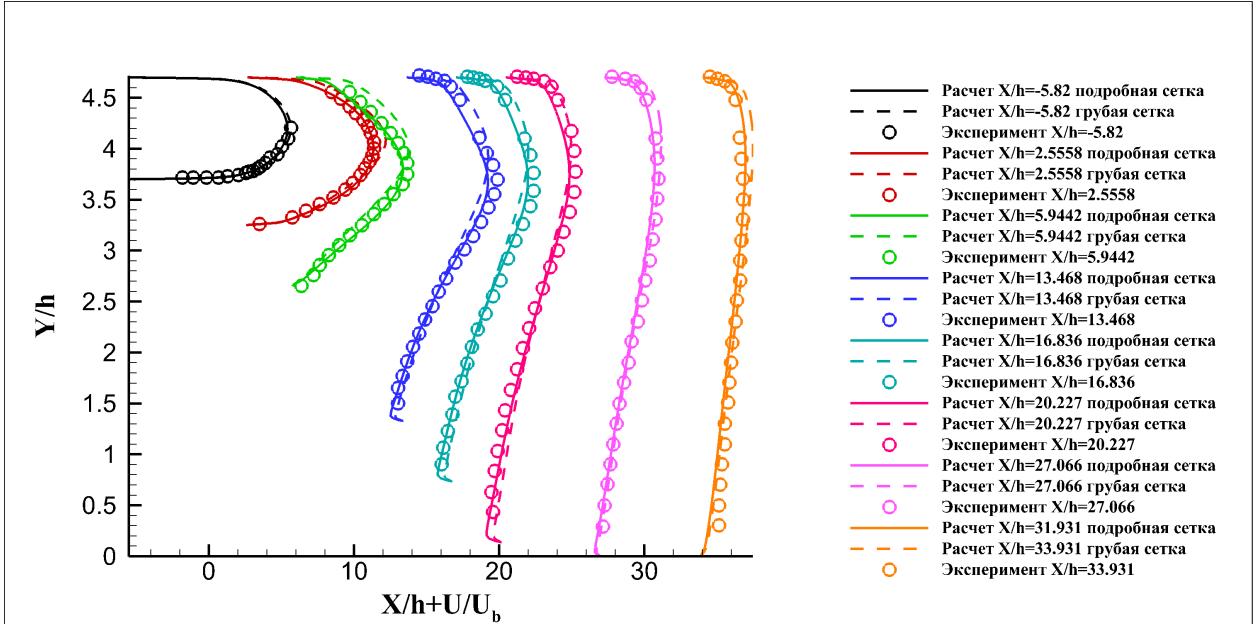


Рис. 44: Безразмерные профили скорости в расширении диффузора Оби.

Полученные профили показывают хорошее соответствие экспериментальным данным, однако на грубой сетке корреляция несколько хуже. Это обусловлено тем, что данная сетка имеет недостаточное разрешение для правильного описания вертикального переноса импульса, который очень важен при формировании профиля скорости. В случае же использования сетки с большим разрешением, совпадение с экспериментальными точками улучшается.

4.4 Моделирование стационарного турбулентного слоя смешения

В разрабатываемой модели одной из важнейших составляющих является механизм турбулентного смешения потоков. Для его валидации была решена задача по моделированию слоя смешения между параллельными воздушными потоками, движущимися с разной скоростью [45].

На входе потоки разделены плоской пластиной, на которой формируются пограничные слои, а затем пластина заканчивается и начинается формирование слоя смешения. Задача также решалась в 2D постановке.

Скорость потоков: 41.54 м/с сверху и 22.4 м/с снизу, соответственно. Воздух находится при нормальных условиях: $P = 1$ атм, $T = 293$ К. Интенсивность турбулентности в данной задаче составляла 0.3%.

Сетка, покрывающая расчетную область, состояла из трех областей: верхнего канала, нижнего канала и камеры смешения. На верхней и нижней и нижней стенках ставились условия проскальзывания, на разделяющей пластине — адиабатическая стенка с прилипанием.

Аналогично двум предыдущим задачам, задача о моделировании турбулентного слоя смешения рассматривалась автором в работе [63].

В качестве численного метода также используется комбинация гибридной явно-неявной схемы интегрирования по времени и GMRES3+LU-SGS. Расчет конвективных потоков и пространственная дискретизация также с использованием базового метода. Аналогично задаче о течении над пластиной задача решалась в стационарном приближении.

На рисунке 45 и рисунке 46 приводятся распределения продольной компоненты скорости [км/с] и турбулентной вязкости [Па· с] соответственно.

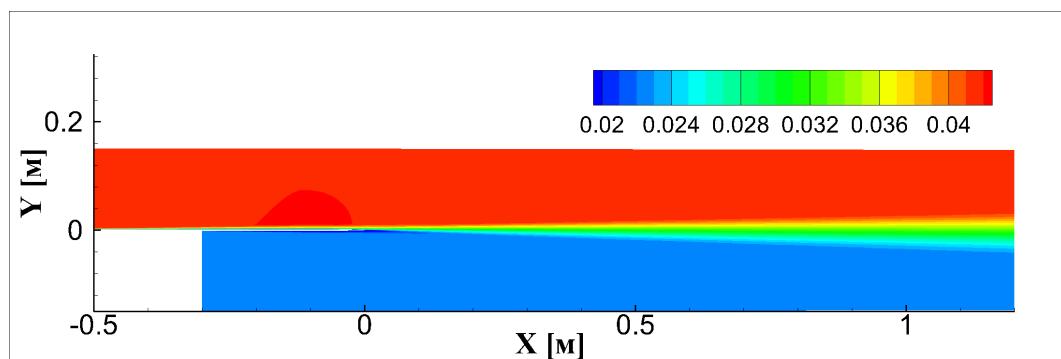


Рис. 45: Распределение продольной компоненты скорости в слое смешения.

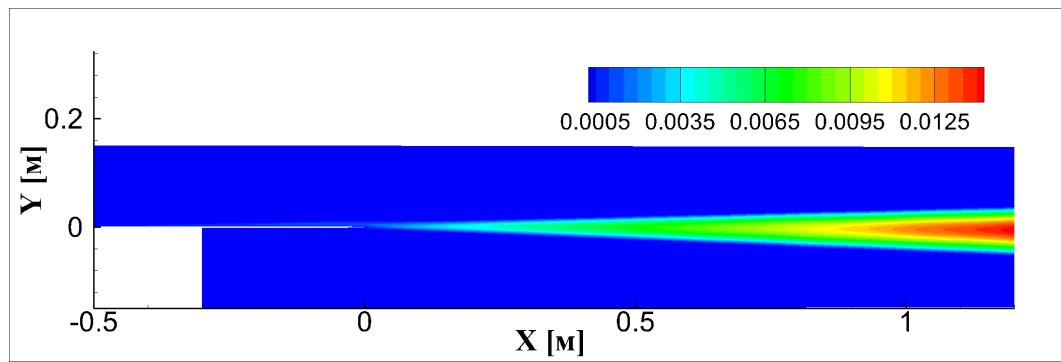


Рис. 46: Распределение турбулентной вязкости в слое смешения.

Для слоя смешения были также построены профили скорости в нескольких сечениях вдоль области смешения. Профили строились как в размерных, так и в безразмерных переменных. Сравнение проводилось с экспериментальными данными из [102]. Значение $x = 0$ соответствовало окончанию разделяющей пластины.

Результаты сравнения представлены на рисунках 47-48.

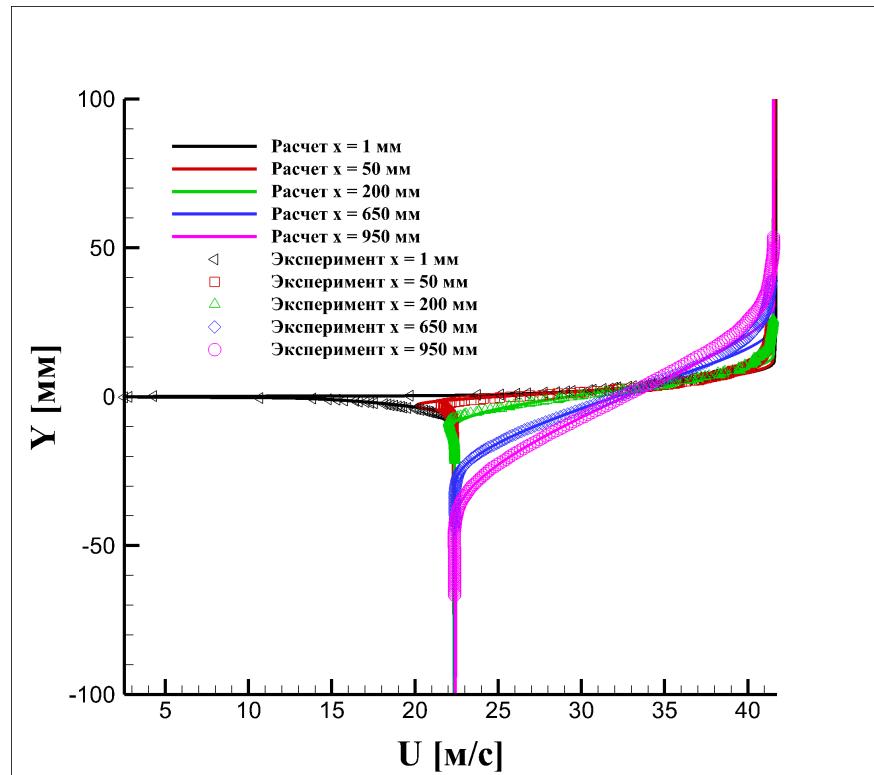


Рис. 47: Размерные профили скорости в слое смешения.

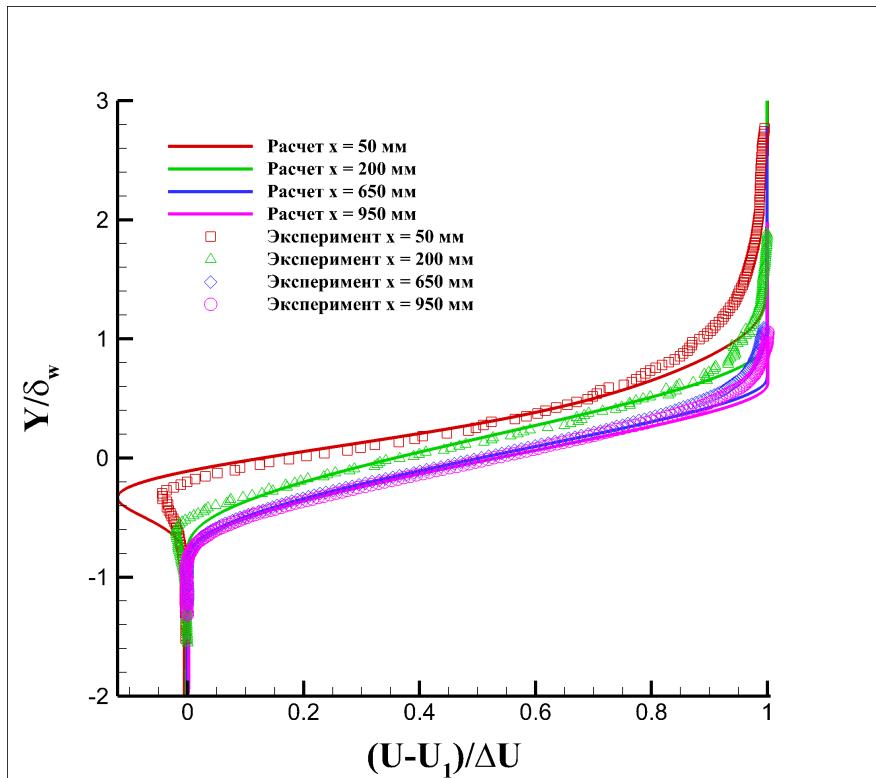


Рис. 48: Безразмерные профили скорости в слое смешения.

На рисунке 48 $U_1 = 22.4$ м/с — скорость нижнего потока, $\Delta U = 19.14$ — разность скоростей потоков, δ_w — оценочная полутолщина слоя смешения на расстоянии x от точки соединения потоков [102], приведенная в таблице:

Таблица 1: Оценочная полутолщина слоя смешения на разном расстоянии от точки соединения потоков.

x [мм]	δ_w [мм]
50	8.8583
200	13.771
650	35.894
950	50.543

По результатам сравнения можно судить об удовлетворительном соответствии полученных профилей экспериментальным точкам.

4.5 Сравнение производительности методов LU-SGS и GMRES-LU-SGS

Как было отмечено в разделе 3.3, применение комбинированного метода GMRES-LU-SGS позволяет существенно увеличить скорость сходимости, однако повышает вычислительные затраты. Для определения целесообразности использования более трудоемкого метода при проведении расчетов, был проведен численный эксперимент по расчету задачи о стационарном пограничном слое над плоской пластиной из раздела 4.2 с вариацией используемого численного метода. Начальные и граничные условия соответствовали описанным в [45] и разделе 4.2. Для расчетов была выбрана самая подробная сетка с размером первой пристеночной ячейки, соответствующей $y^+ = 3$.

Задача решалась с использованием численных методов LU-SGS, GMRES-LU-SGS с различной размерностью пространства Крылова, а также применением алгоритма сглаживания невязки (3.3.8). Критерием быстродействия считалось количество итераций за которое относительная невязка достигала заданного значения и общее время выполнения расчета. Конвективные потоки рассчитывались по методу Годунова, при интерполяции на грань использовался лимитер MINMOD. Все расчеты выполнялись в однопроцессорном режиме.

На рисунках 49-51 представлены графики относительной невязки до достижения ее значений 0.1, 0.01 и 0.001 соответственно. Буквами RS (residual smoothing) обозначается применение алгоритма сглаживания невязки. После идут параметры алгоритма в формате (n_{iter}, ε) , то есть RS(2; 0.5) означает две итерации сглаживания невязки с параметром $\varepsilon = 0.5$.

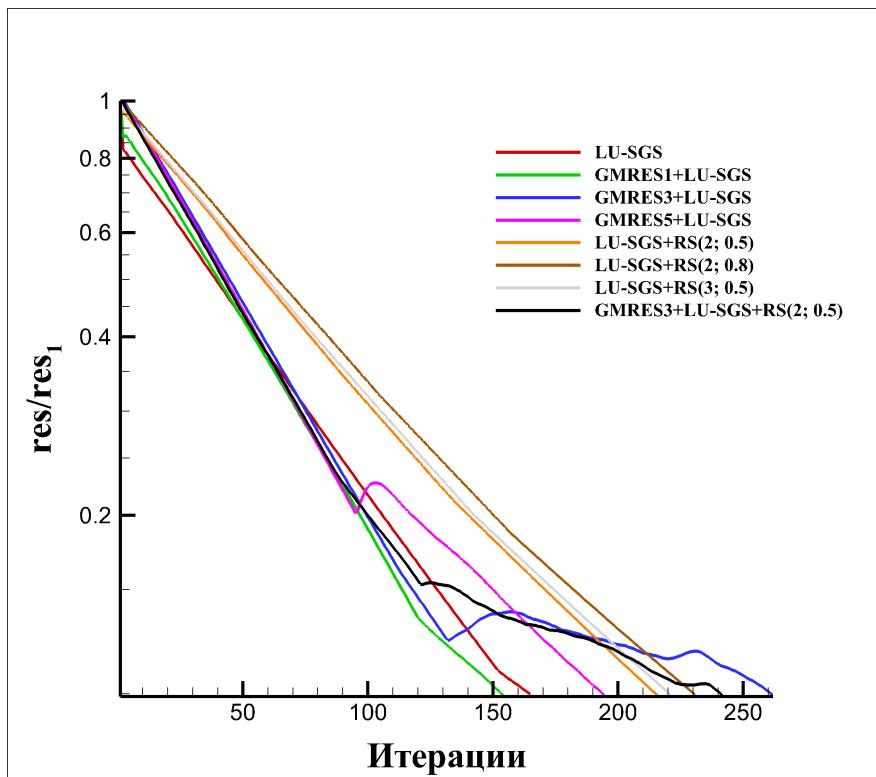


Рис. 49: Профили относительной невязки для различных схем до значения 0.1.

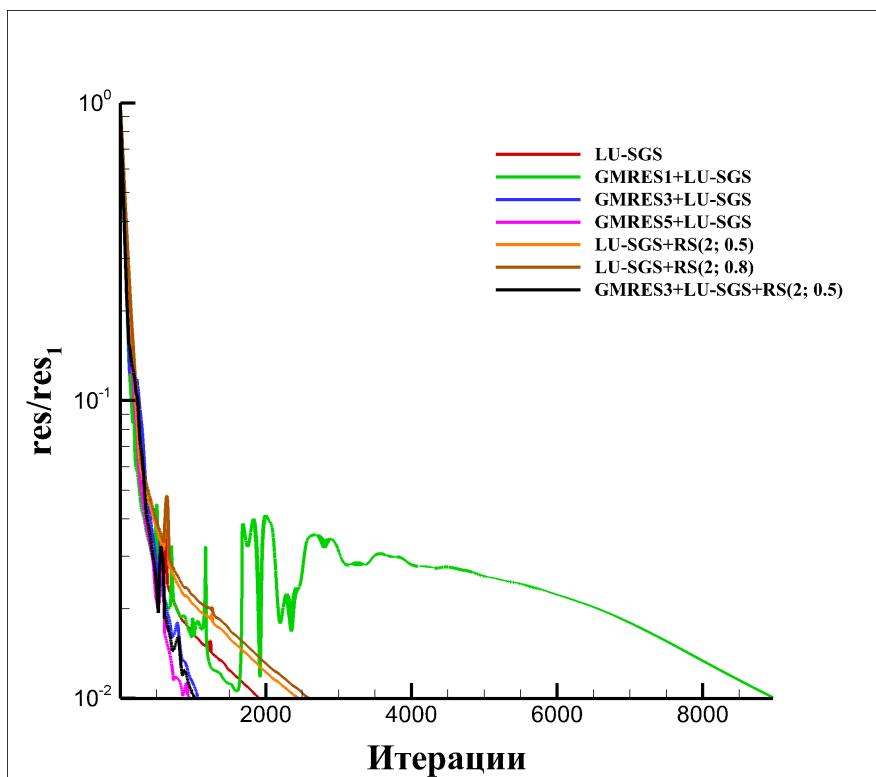


Рис. 50: Профили относительной невязки для различных схем до значения 0.01.

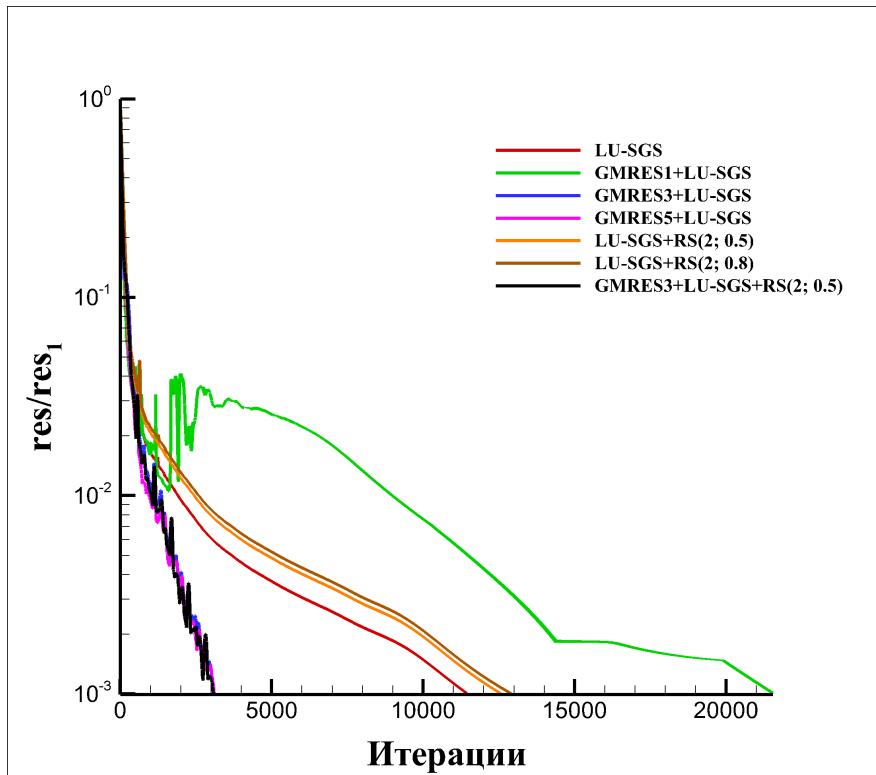


Рис. 51: Профили относительной невязки для различных схем до значения 0.001.

На рисунках 49 и 51 отсутствует график для схемы LU-SGS+RS(3; 0.5) так как в определенный момент расчет резко становился неустойчивым, что приводило к резкому росту невязки и дальнейшему падению расчета.

Далее в таблице представлена информация о времени расчета и количестве итераций, необходимых для достижения вышеописанных значений относительной невязки

Таблица 2: Время выполнения расчетов и необходимое количество итераций.

Используемая схема	$res_{rel} = 0.1$		$res_{rel} = 0.01$		$res_{rel} = 0.001$	
	N_{iter}	t_{calc} [сек]	N_{iter}	t_{calc} [сек]	N_{iter}	t_{calc} [сек]
LU-SGS	165	7.65	1912	83.5	11472	483.4
GMRES1+LU-SGS	154	12.8	8966	662	21555	1494
GMRES3+LU-SGS	262	31.9	1071	130.6	3084	376.7
GMRES5+LU-SGS	195	34.8	953	164.7	3105	534.6
LU-SGS+RS(2; 0.5)	216	10.6	2450	110.2	12589	574.5
LU-SGS+RS(2; 0.8)	231	11	2595	121.1	12928	601.8
LU-SGS+RS(3; 0.5)	221	10.8	-	-	-	-
GMRES3+LU-SGS +RS(2; 0.5)	242	32.5	1026	137.3	3080	399.3

По результатам исследования можно сделать 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. В остальных случаях возрастающая трудоемкость каждой расчетной итерации «компенсирует» уменьшение их количества. Использование метода GMRES+LU-SGS с размерностью пространства Крылова 1 является нецелесообразным, так как данная схема показывает наихудшую скорость сходимости. Однако, с другой стороны, использование слишком большой размерности существенно увеличивает вычислительные затраты, но не приводит к пропорциональному сокращению количества итераций.

Использование в данной задаче алгоритма слаживания невязки также не приводит к существенному приросту быстродействия так как для схемы LU-SGS профиль невязки является гладким и необходимости в этом нет, а для комбинированного метода GMRES+LU-SGS небольшое сокращение количества

итераций не компенсирует возрастающую трудоемкость и не приводит к ускорению.

4.6 Тест Shu-Osher о взаимодействии ударной волны со сверхзвуковой средой

Для проведения нестационарных расчетов с использованием вихреразрешающих подходов необходимо использование численных методов, обладающих низким уровнем численной вязкости. От диссипативных свойств схемы в основном зависит качество получаемого решения. В то же время численный метод должен обладать достаточной устойчивостью и не допускать образования нефизических осцилляций в окрестности сильного разрыва решения. Для сравнения вышеописанных свойств разработанных в работе численных методов был выбран тест Shu-Osher [104]. Данный тест, наряду с тестом Сода, используется для исследования диссипативных свойств численных схем. Постановка является одномерной, что позволяет проводить большое количество тестовых расчетов с вариацией параметров.

Рассматривается область $X \in [-5, 5]$. В соответствии с [104] в области выставляются следующие начальные условия, соответствующие взаимодействию ударной волны $M = 3$ со средой, имеющей синусоидальное распределение плотности:

$$\begin{cases} \rho = 3.857143, u = 2.629369, P = 10.3333 & \text{для } x < -4 \\ \rho = 1 + 0.2 \sin(5x), u = 0.0, P = 1.0 & \text{для } x \geq -4 \end{cases}. \quad (4.6.1)$$

На правой границе устанавливается граничное условие стенки, на левой — сверхзвуковое входное условие с параметрами, соответствующими $x < -4$. Решение рассматривалось на момент времени $t = 1.8$. Размерности величин: ρ — кг/м³, u — км/с, P — МПа, t — мс. Сначала на подробной сетке, состоящей из 400 тыс. равномерно распределенных ячеек были проведены два кон-

трольных расчета: схемой первого порядка по пространству и времени, что было достигнуто отключением предиктора и интерполяции из центров ячеек на грань, а также схемой повышенного порядка, обеспечивающей работой схемой предиктор-корректор в явной области на равномерной сетке. При интерполяции на грань использовался корректор потока (3.3.4). Данная схема обладает вторым порядком аппроксимации по времени и третьим по пространству в области отключения корректора. В обоих случаях конвективные потоки считались по методу Годунова.

Далее было проведено сравнение полученных решений с решением, представленным в [104] для определения местоположения и амплитуды физических осцилляций на профиле плотности. Условия задачи предполагают возникновение осцилляций за ударной волной, и, ввиду отсутствия аналитического решения, данный анализ необходим для дальнейшего выявления «паразитных» осцилляций, порождённых неустойчивостью схемы. Результат сравнения приводится на рисунке 52.

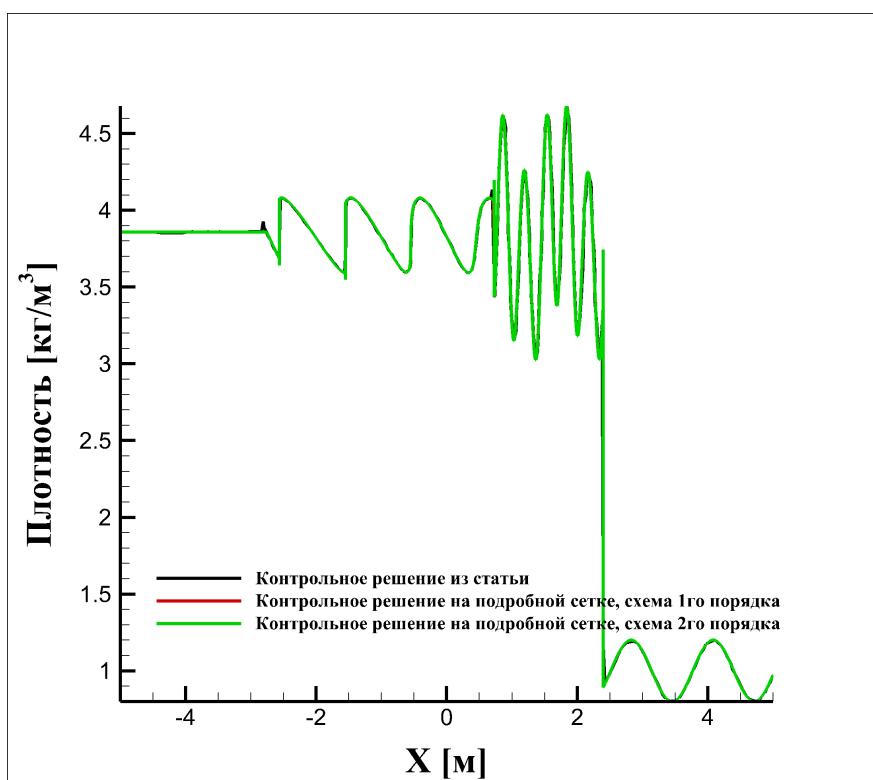


Рис. 52: Профили плотности для контрольных расчетов.

Можно видеть, что все три контрольные расчета хорошо совпадают между собой, однако при увеличении области непосредственно за ударной волной ($x \approx 2.4\text{м}$) можно видеть высокочастотные осцилляции плотности на профиле для схемы 2го порядка, связанные с использованием корректора значений вместо ограничителя производных в области за ударной волной. Область за ударной волной показана на рисунке 53.

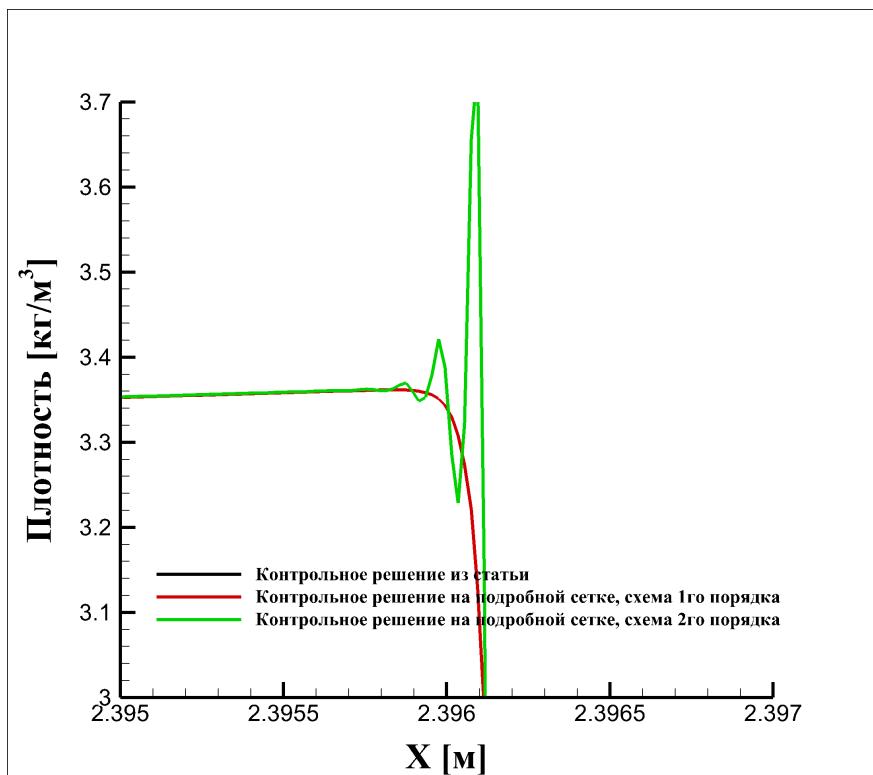


Рис. 53: Зона за ударной волной на профиле плотности.

Исходя из этого, далее будем принимать решение, полученное схемой первого порядка на подробной сетке, за точное.

Все последующие вычисления проводились на сетке, размером 400 ячеек с использованием различных схем расчета конвективных потоков и лимитирования интерполированных значений. В расчетах использовалась схема предиктор-корректор и шаг по времени $dt = 1$ мкс, что соответствовало явной схеме и второму порядку аппроксимации по времени.

На рисунках 54 и 55 представлены профили плотности и давления соответственно для расчетов с использованием метода Годунова для расчета конвективных потоков.

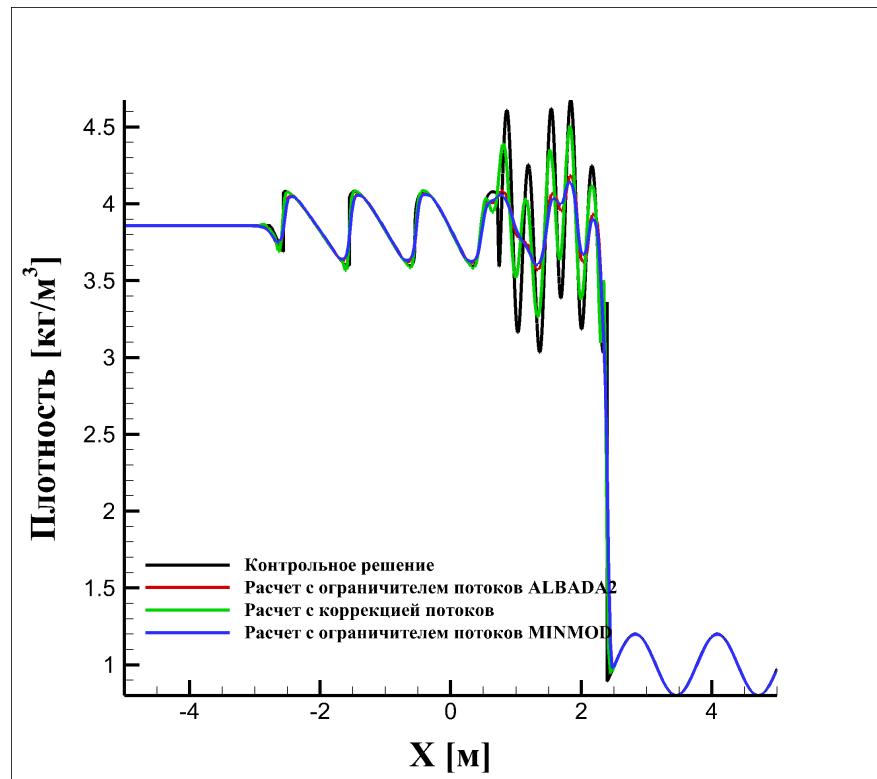


Рис. 54: Профили плотности в расчетах с использованием метода Годунова.

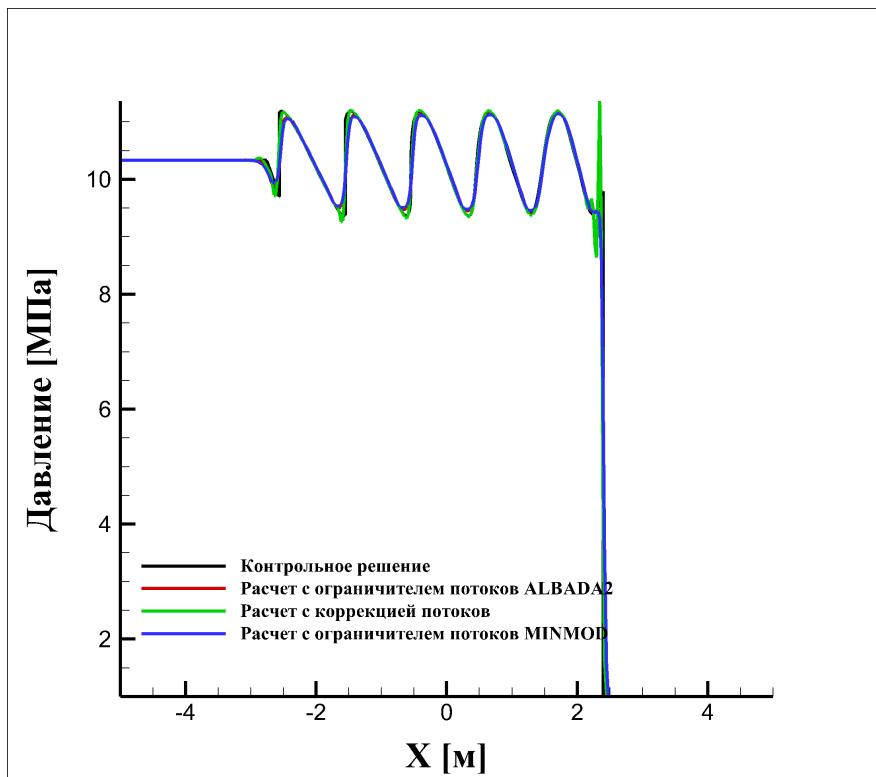


Рис. 55: Профили давления в расчетах с использованием метода Годунова.

Как можно видеть на рисунке 54 использование ограничителей производных при интерполяции на грань приводит к существенному смазыванию и уменьшению амплитуды физических осцилляций, в то время как расчет с коррекцией значений показывает достаточно низкий уровень схемной вязкости. В то же время расчет с использованием коррекции значений приводит к возникновению неустойчивости по давлению за ударной волной, которая, однако, не распространяется далее.

На рисунках 56 и 57 представлены аналогичные графики, однако вместо метода Годунова для вычисления конвективных потоков здесь используется метод Рusanova. Также рисунок 56 содержит профиль для расчета по методу Годунова с коррекцией значений для сравнения свойств.

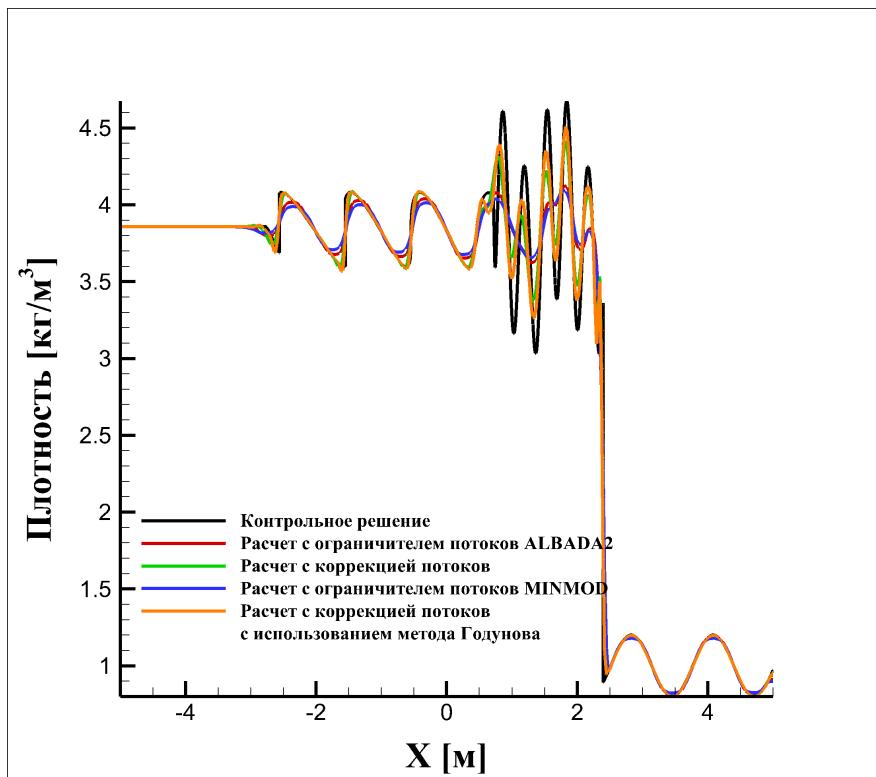


Рис. 56: Профили плотности в расчетах с использованием метода Русанова.

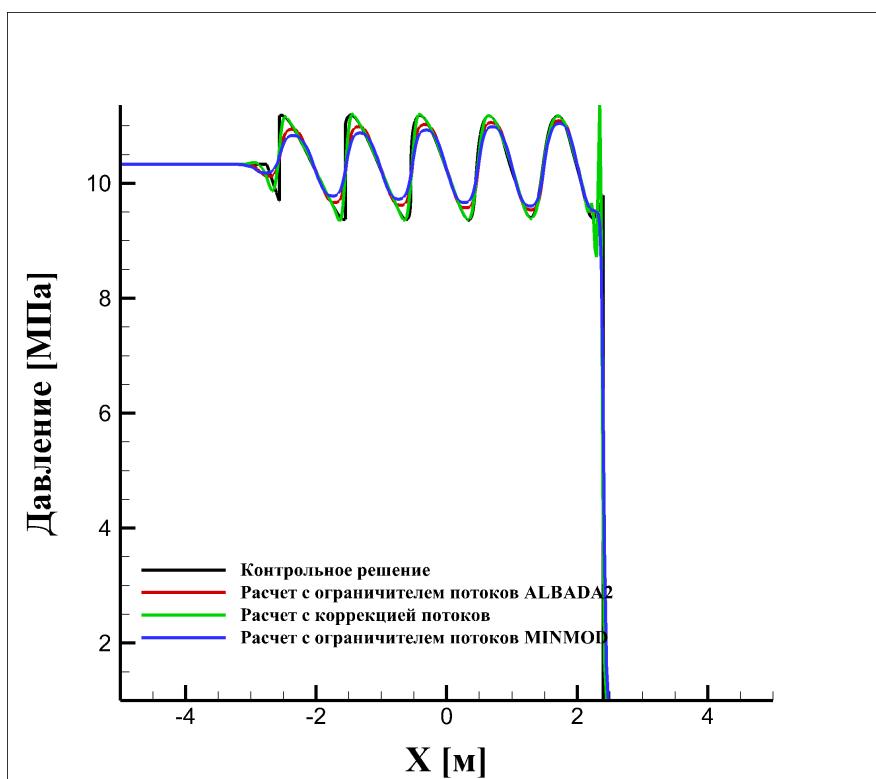


Рис. 57: Профили давления в расчетах с использованием метода Русанова.

Результаты показывают, что расчеты с использованием метода Русанова хуже воспроизводят контрольное решение, так как метод Русанова является гораздо более диссипативным, чем метод Годунова. По рисунку 57 видно, что при расчете с использованием коррекции значений за фронтом ударной волны также возникает неустойчивость, которая далее затухает. Так как одним из основных критериев отбора численных схем для последующего применения для нестационарных турбулентных расчётов, является низкий уровень численной диссипации, использование метода Русанова не обосновано.

Далее на рисунках 58-59 приводятся результаты расчетов с вычислением конвективных потоков с помощью гибридного метода (3.3.1)-(3.3.3) с параметрами $\varphi_{\min} = 0.2$, $k_\varphi = 50$. Кроме расчетов с использованием ограничителей производных ALBADA2 и MINMOD, а также расчета с коррекцией значений на рисунках представлен расчет с использованием ограничителя производных ALBADA2 только в узкой области в окрестности головной ударной волны и его заменой на корректор потоков вне данной области.

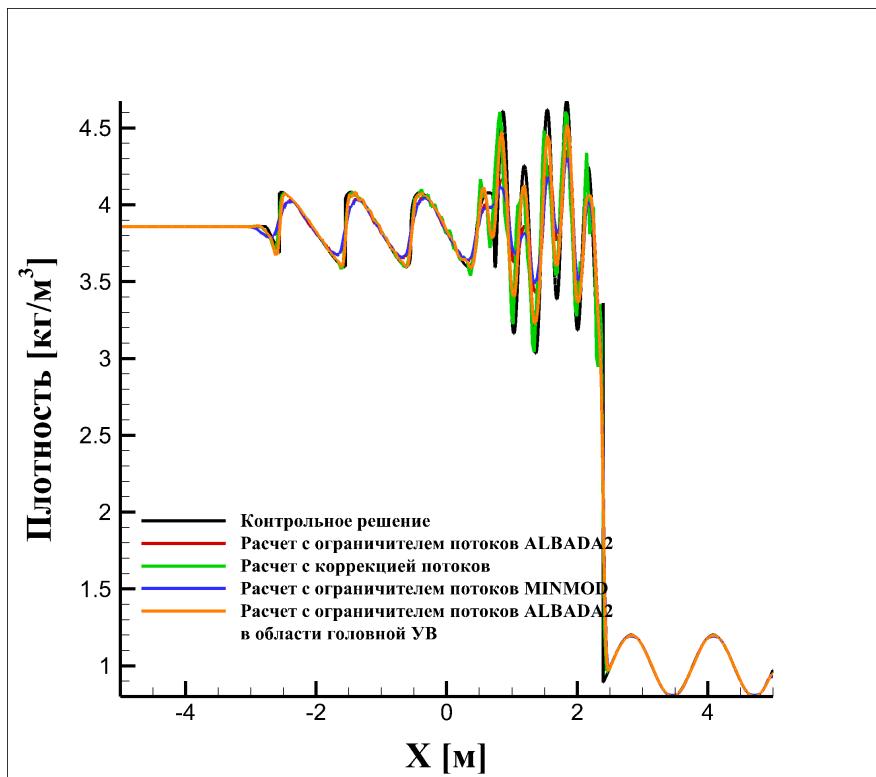


Рис. 58: Профили плотности в расчетах с использованием гибридного метода расчета потоков.

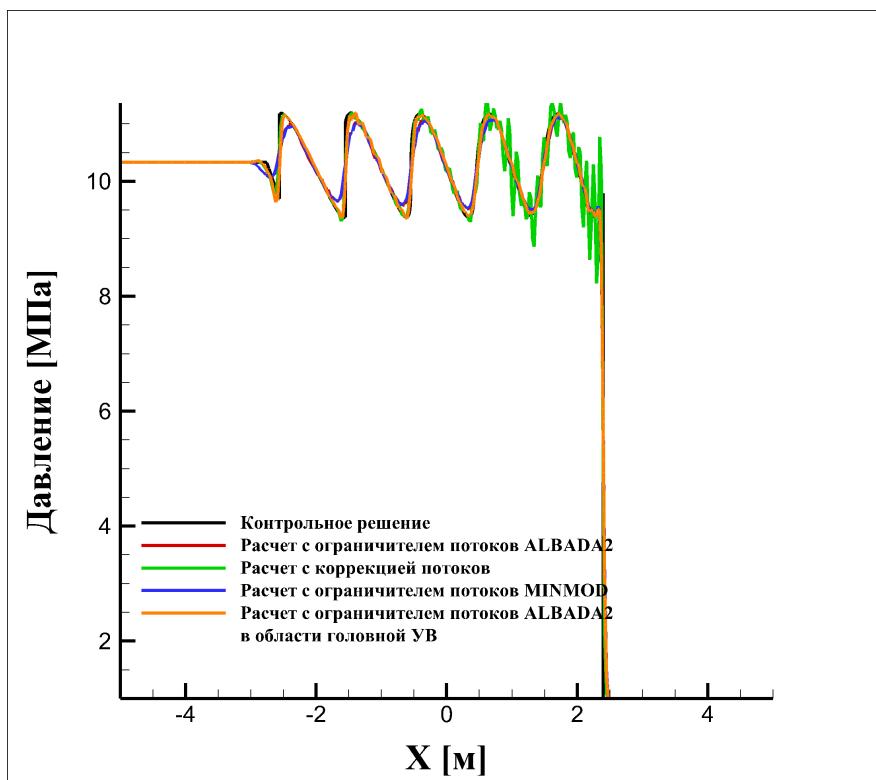


Рис. 59: Профили давления в расчетах с использованием гибридного метода расчета потоков.

Из рисунков видно, что наилучшие диссипативные свойства показывают расчет с использованием коррекции значений и расчет с использованием ограничителя производных в окрестности ударной волны. Однако в случае расчета с коррекцией неустойчивость, возникающая за фронтом ударной волны, не подавляется и на профиле давления возникают высокочастотные осцилляции. Применение же ограничителя на фронте приводит к предотвращению возникновения неустойчивости. Однако далее неустойчивость все же возникает на вторичном разрыве ($x \approx -1.5$ м) так как на нем не используется ограничитель производных, а работает только коррекция значений. Данная проблема может быть устранена путем использования алгоритма выделения ударных волн и использования ограничителя в области выделения.

Наконец, на рисунке 60 представлено сравнение профилей плотности для расчета по методу Годунова с использованием коррекции значений и расчета с использованием гибридного метода расчета и ограничителя производных ALBADA2 в окрестности фронта ударной волны.

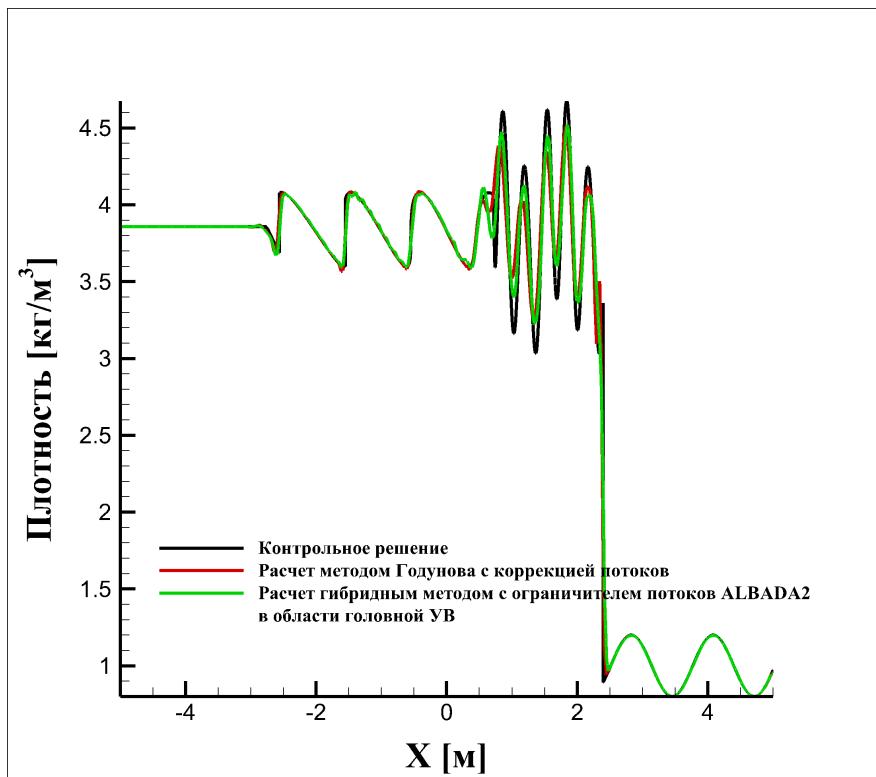


Рис. 60: Профили плотности для расчетов с использованием метода Годунова и гибридного метода расчета потоков.

Можно видеть, что расчет с использованием метода Годунова не уступает второму расчету в точности, но при этом, как было показано выше, является более устойчивым. Исходя из этого, для проведения турбулентных расчетов с использованием вихреразрешающих подходов было решено использовать метод Годунова с нелимитированной интерполяцией икоррекцией интерполированных значений.

4.7 Моделирование сверхзвукового нестационарного течения в прямоугольном периодическом канале

Верификация и валидация реализованных алгоритмов гибридного подхода IDDES выполнялась путем проведения вычислительного эксперимента по мо-

делированию нестационарного турбулентного сверхзвукового течения в прямоугольном периодическом канале. Поперечные размеры канала (высота 8.9 см, ширина 5 см) соответствовали изолятору модельной камеры сгорания Барроуса-Куркова [8]. Длина канала равнялась 10 см.

Данная задача рассматривалась автором в работе [68].

Параметры потока также были взяты из задачи о смешении водорода с инертным газом в камере сгорания Барроуса-Куркова [8]. Состав: $H_2 - 0.5\%$, $O_2 - 5.09\%$, $H_2O - 21.62\%$, $N_2 - 73.24\%$. Давление Пито в центре канала равнялось 740 кПа, полная температура — 2207 К. Данные величины вычислялись по следующим формулам:

$$\frac{P_{Pitot}}{P} = \begin{cases} \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2\right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}}, & M \leq 1 \\ \left(\frac{(\gamma + 1)^2 M^2}{4\gamma M^2 - 2(\gamma - 1)}\right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} \left(\frac{(1 - \gamma) + 2\gamma M^2}{\gamma + 1}\right) P, & M > 1 \end{cases}, \quad (4.7.1)$$

$$\frac{T_{tot}}{T} = \left(1 + \sqrt{\text{Pr}} \frac{\gamma - 1}{2} M^2\right),$$

где P — статическое давление, T — статическая температура, M — локальное число Маха, γ — показатель адиабаты.

Скорость газа в центре канала соответствовала числу Маха $M = 2.44$, что обеспечивало значение числа Рейнольдса Re_τ , вычисленного по скорости на нижней стенке u_τ около 10000.

Число Re_τ связано с числом Рейнольдса Re_H следующим образом:

$$\text{Re}_\tau = \frac{u_\tau \cdot h}{v}, \quad \text{Re}_H = \frac{U_b \cdot H}{\nu}, \quad \text{Re}_H \approx 14.64(\text{Re}_\tau)^{8/7}, \quad (4.7.2)$$

где H — высота канала, $h = 0.5H$, U_b — скорость потока, ν — ламинарная динамическая вязкость.

Все стенки в расчете считались адиабатическими, входная и выходная граница замыкались периодическими граничными условиями.

Количество ячеек в сетке — около 3 млн. Размер по направлению нормали первой ячейки от стенки составлял 5 мкм, что соответствует $y^+ = 2$.

Для компенсации потерь на трение и обеспечения постоянной толщины погранслоя в канале использовался дополнительный объемный источник в форме градиента давления величиной -55.0 [кПа/м]. Величина данного источника подбиралась на решении задачи в рамках RANS подхода до тех пор, пока стационарный профиль скорости в размерных и безразмерных переменных не начал соответствовать условиям задачи.

Результат RANS расчета использовался в качестве начальных данных для нестационарного расчета с использованием IDDES подхода. На поперечные компоненты скорости накладывались дополнительные возмущения вида:

$$\begin{aligned} v' &= u_0 \cdot \sin\left(4.0 \frac{2\pi x}{H}\right) \cdot \sin\left(15.0 \frac{2\pi y}{H}\right) \cdot \sin\left(15.0 \frac{2\pi z}{H}\right), \\ w' &= u_0 \cdot \sin\left(4.0 \frac{2\pi x}{H}\right) \cdot \cos\left(15.0 \frac{2\pi y}{H}\right) \cdot \cos\left(15.0 \frac{2\pi z}{H}\right), \end{aligned} \quad (4.7.3)$$

где $u_0 = 300$ м/с, $H = 0.089$ м.

Задача решалась с использованием обеих реализованных схем интегрирования по времени. Применяемый численный метод — LU-SGS, дополненный двумя итерациями слаживания невязки с параметром $\varepsilon = 0.5$. 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. В свою очередь параметр d_t функции θ для гибридной схемы К-Н выбирался таким, чтобы на расстоянии 0.5 мм от стенки происходил переход на классическую схему К-Н второго порядка. Основная константа метода C_{DES} , регулирующая переход между RANS и LES областями равнялась 0.6. Зона перехода начиналась на расстоянии ~ 1 мм от стенки. На рисунке 61 приводятся профили функций перехода для схем интегрирования по времени и IDDES подхода: параметра гибридности ω для явно-неявной схемы (3.1.5), функции θ для схемы К-Н (3.3.7) и функции гибридизации IDDES подхода \tilde{f}_d , отвечающей за RANS/LES переход (1.6.3).

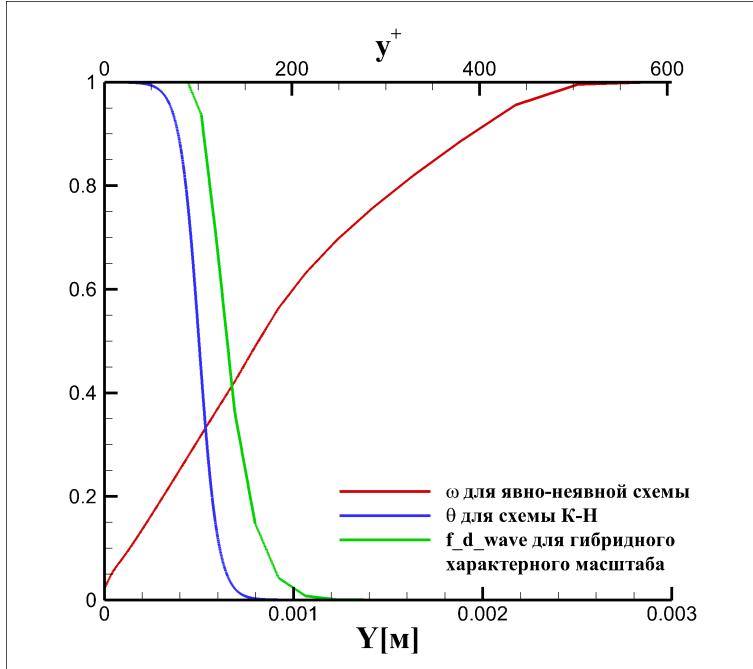


Рис. 61: Профили параметров гибридизации.

Расчет с применением гибридной явно-неявной схемы выполнялся до момента времени 6.15 мс, что соответствует примерно 110 продувкам канала.

На рисунках 62-63 показано распределение мгновенной продольной скорости [км/с] и отношения турбулентной вязкости к ламинарной в плоскостях $X = 0.05$ м и $X = 0.025$ м. На рисунках 64-65 в свою очередь демонстрируется вихревая структура течения с помощью Q-критерия:

$$Q = \frac{1}{2} \left(\|\boldsymbol{\Omega}\|^2 - \|\mathbf{S}\|^2 \right), \quad (4.7.4)$$

где $\boldsymbol{\Omega}$, \mathbf{S} — тензоры завихренности и скоростей деформации соответственно.

На рисунке 64 приводится распределение Q-критерия в центральной продольной и трех поперечных плоскостях, а на рисунке 65 — изоповерхность Q-критерия $Q = 1$, на которую цветом нанесена мгновенная продольная скорость.

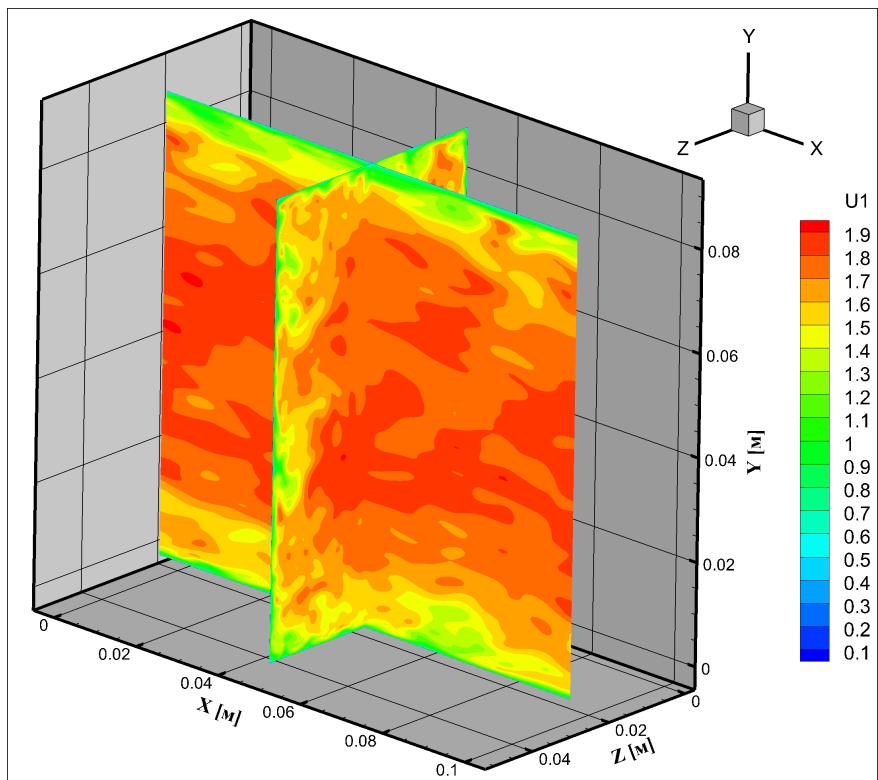


Рис. 62: Распределение мгновенной продольной скорости [км/с] в расчете с использованием гибридной явно-неявной схемы интегрирования.

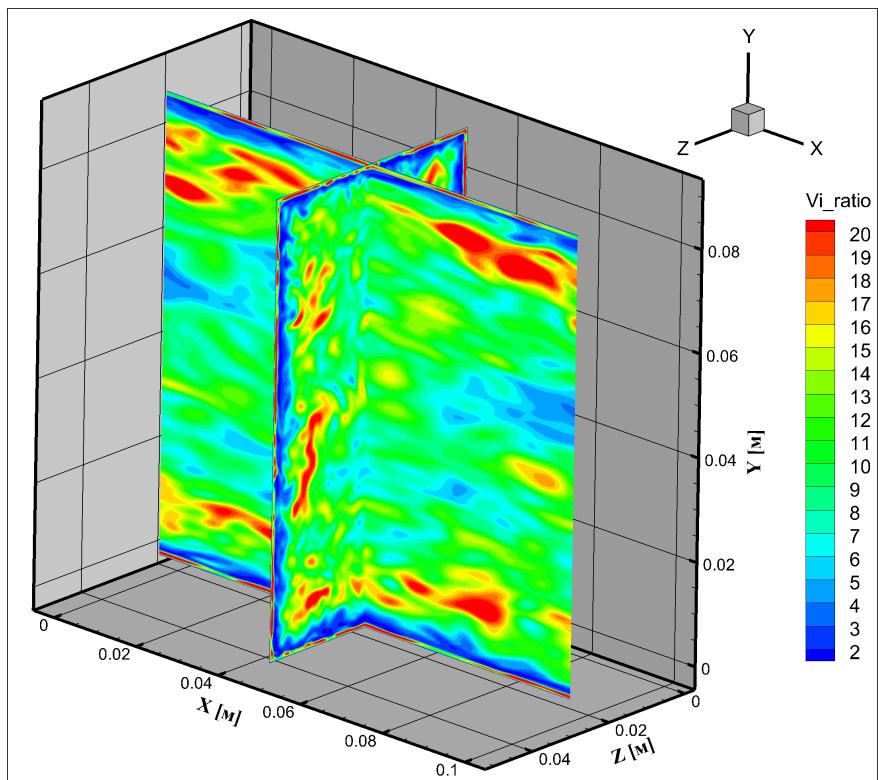


Рис. 63: Распределение мгновенного отношения турбулентной вязкости к ламинарной в расчете с использованием гибридной явно-неявной схемы интегрирования.

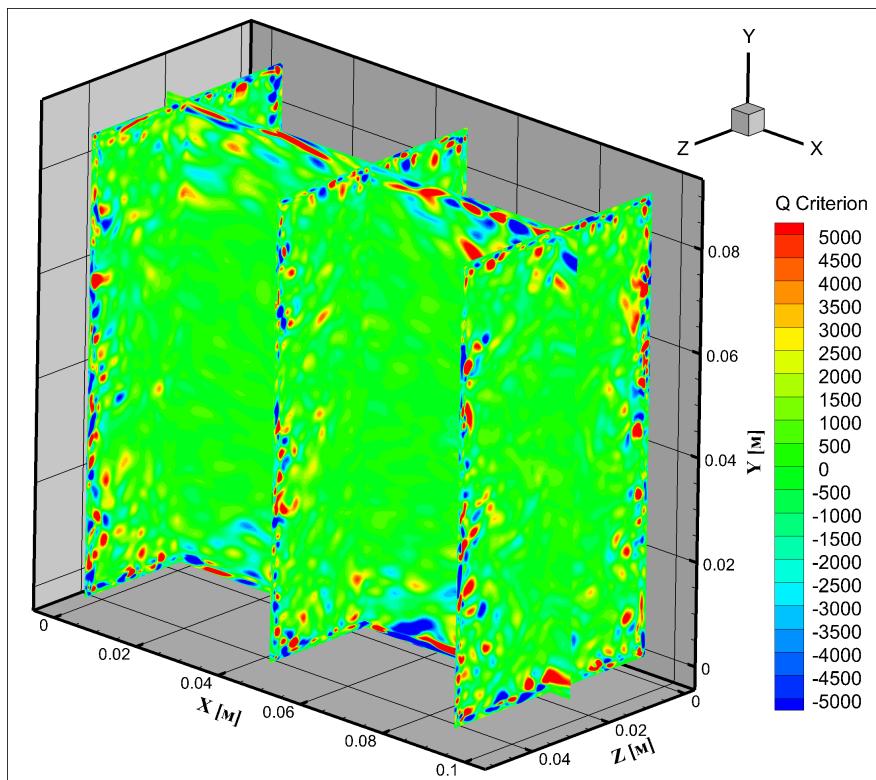


Рис. 64: Визуализация вихревой структуры как распределения Q-критерия в расчете с использованием гибридной явно-неявной схемы интегрирования.

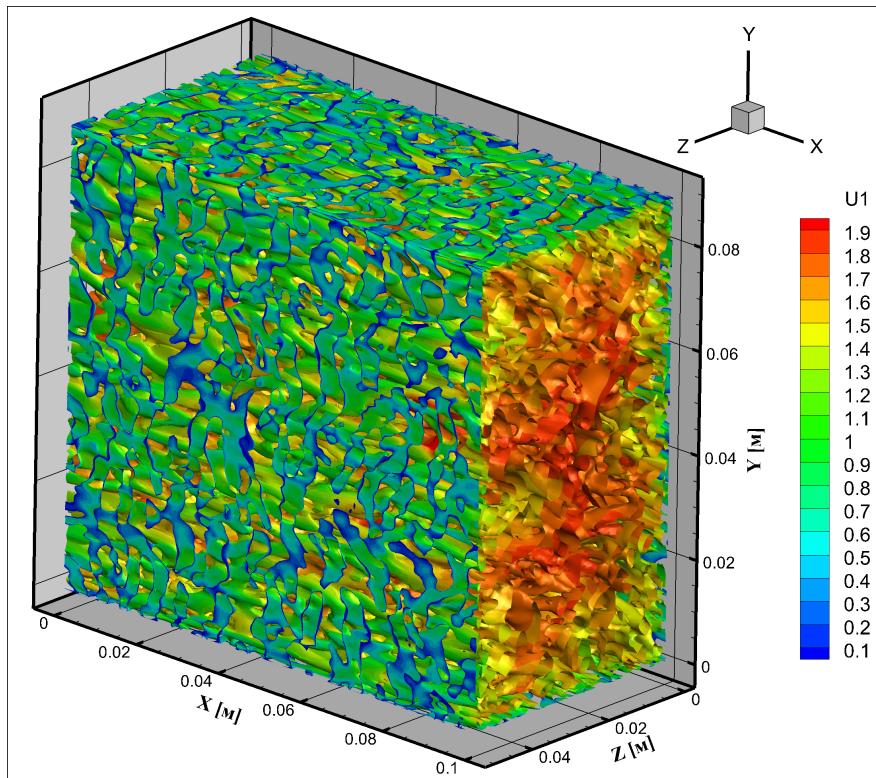


Рис. 65: Визуализация вихревой структуры с помощью изоповерхности Q-критерия в расчете с использованием гибридной явно-неявной схемы интегрирования. Продольная скорость в [км/с].

Расчет с использованием гибридной схемы К-Н проводился до момента 5.6 мс, что примерно равнялось 100 продувкам канала. Для данного расчета также были построены распределения мгновенной продольной скорости, отношения турбулентной вязкости к ламинарной и визуализация вихревой структуры с помощью распределения Q-критерия в сечениях, а также изоповерхности $Q = 1$, которые представлены на рисунках 66-69 соответственно.

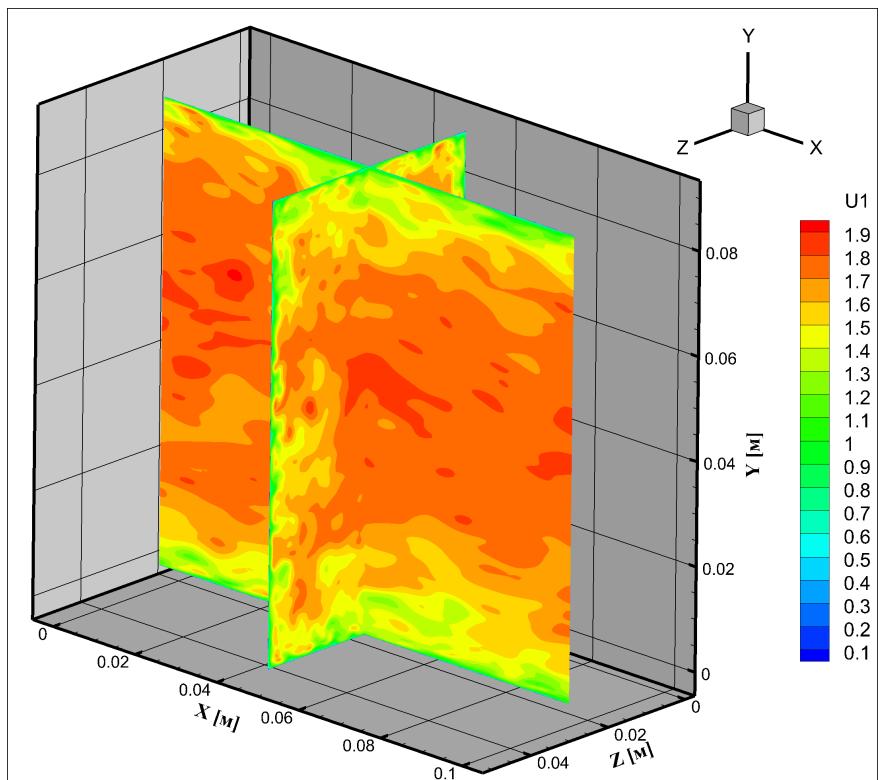


Рис. 66: Распределение мгновенной продольной скорости [$\text{км}/\text{с}$] в расчете с использованием гибридной схемы интегрирования К-Н.

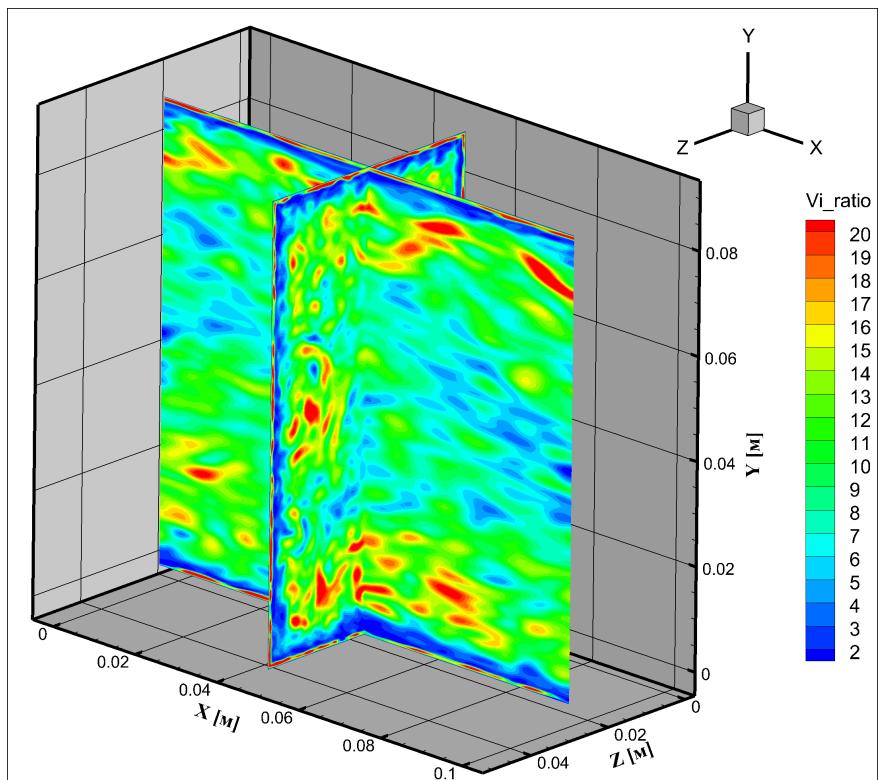


Рис. 67: Распределение мгновенного отношения турбулентной вязкости к ламинарной в расчете с использованием гибридной схемы интегрирования К-Н.

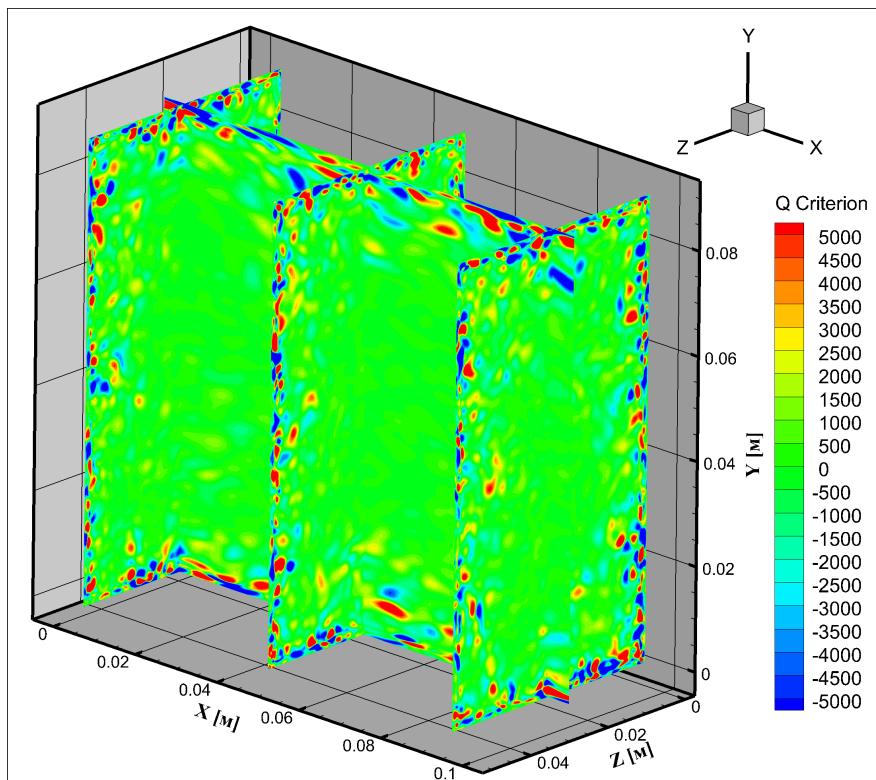


Рис. 68: Визуализация вихревой структуры как распределение Q-критерия в расчете с использованием гибридной схемы интегрирования К-Н.

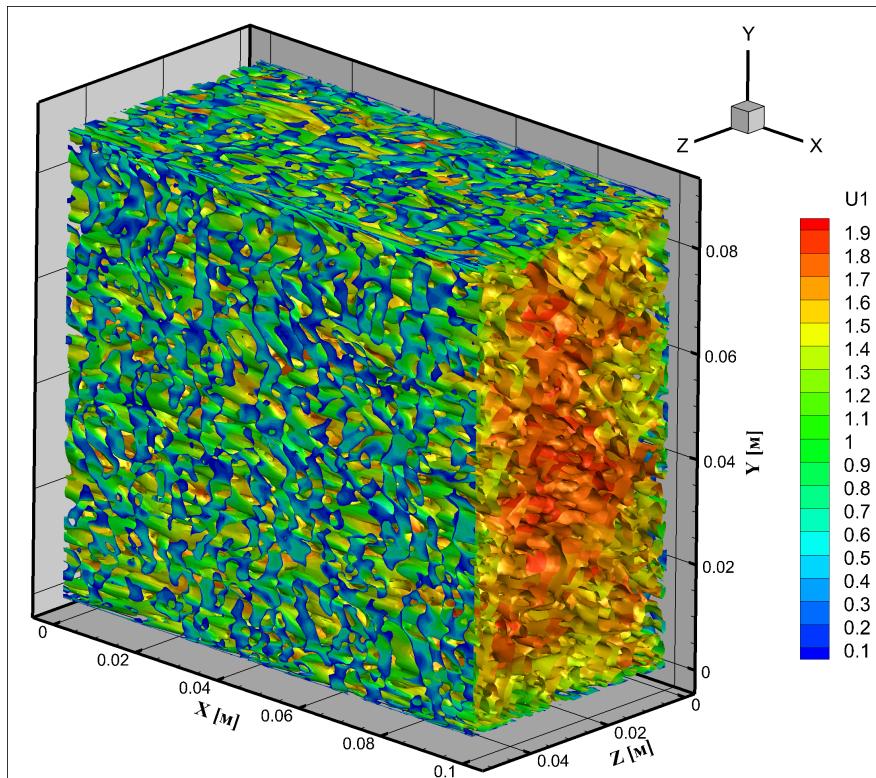


Рис. 69: Визуализация вихревой структуры с помощью изоповерхности Q-критерия в расчете с использованием гибридной схемы интегрирования К-Н. Продольная скорость в [км/с].

Расчеты демонстрируют очень близкие результаты в ядре течения в канале, что объясняется вторым порядком аппроксимации схемы в данной области в обоих случаях. Для обоих расчетов было выполнено осреднение параметров по времени за период ~ 1 мс, а также вдоль оси X. Процедура осреднения по времени строилась на вычислении мгновенного среднего.

Для плотности и давления выполнялось прямое осреднение. Пусть f_{av}^n — среднее значение величины f за n шагов алгоритма, а $t^n = \sum_{i=1}^n \Delta t^i$ — время, прошедшее с начала процедуры осреднения. Тогда среднее на следующем шаге вычисляется как:

$$f_{av}^{n+1} = \frac{f_{av}^n \cdot t^n + f^{n+1} \cdot \Delta t^{n+1}}{t^n + \Delta t^{n+1}}. \quad (4.7.5)$$

Для остальных величин применяется аналог осреднения по Фавру (1.1.7). Тогда на $n+1$ -ом шаге алгоритма значение осредненной величины (кроме плот-

ности и давления) вычисляется как:

$$f_{av}^{n+1} = \frac{f_{av}^n \cdot t^n \cdot \rho_{av}^n + f^{n+1} \cdot \Delta t^{n+1} \cdot \rho^{n+1}}{(t^n + \Delta t^{n+1}) \rho_{av}^{n+1}}. \quad (4.7.6)$$

Качество решения оценивалось путем построения профилей осредненной продольной скорости в размерных переменных, а также в переменных «закона стенки», которые сравнивались с аналогичными профилями для RANS решения. На рисунках 70-71 приводятся результаты сравнения профилей для нижней и боковой стенок канала.

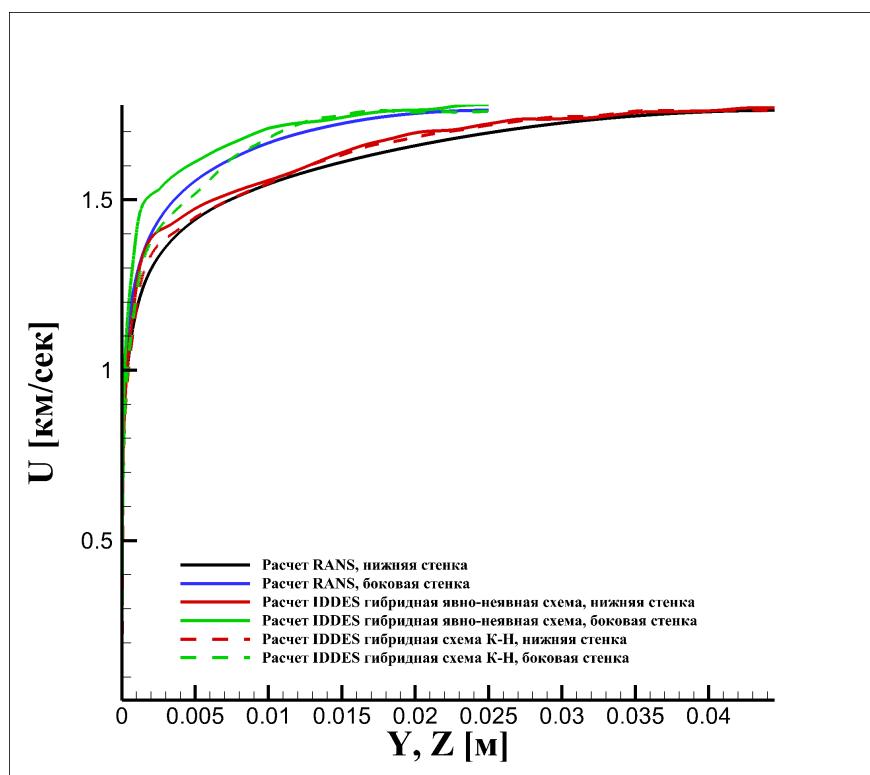


Рис. 70: Профили продольной и осредненной продольной скорости для решений, полученных в рамках RANS и IDDES подходов соответственно.

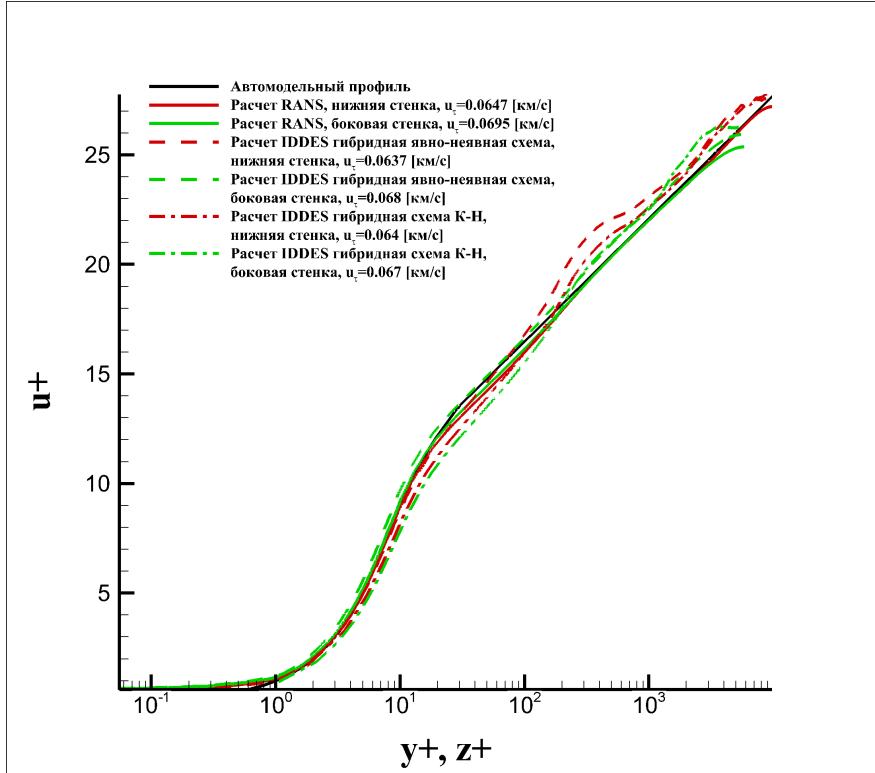


Рис. 71: Безразмерный профиль скорости в переменных «закона стенки» для решений, полученных в рамках RANS и IDDES подходов.

Преимущество схемы К-Н состоит в обеспечении 2-го порядка аппроксимации в неявной области, что позволяет повысить шаг интегрирования не теряя точности. 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.

На основе качественного сравнения рисунков 63 и 67, а также рисунков 64 и 68 можно отметить, что использование гибридной схемы К-Н позволяет получить более развитую вихревую структуру вблизи стенок канала. Данное различие может быть объяснено тем, что в случае расчета по гибридной схеме К-Н переход в зону LES осуществляется в области работы схемы 2-го порядка, в то время как при расчете гибридной явно-неявной схемой переход происходит в области $\omega < 1$, где работает схема 1-го порядка (см. рис. 61).

По результатам сравнения можно отметить хорошее соответствие профилей скорости между решениями, полученными при использовании RANS и IDDES подходов, что говорит о правильном функционировании IDDES модели. По рисунку 69 можно отметить, что вблизи стенки (до 5 мм) расчет по гибридной схеме К-Н показывает скорость ниже, чем расчет по гибридной явно-неявной схеме, что является более близким к профилю, полученному в расчете с использованием RANS. Безразмерные профили скорости в переменных «закона стенки» для решений, полученных с использованием IDDES подхода и гибридных схем интегрирования по времени, представленные на рисунке 70, также хорошо соответствуют автомодельному профилю и профилю RANS решения.

На рисунке 72 показано сравнение осреднённых профилей отношения турбулентной вязкости к ламинарной для расчетов по двум схемам. По рисунку видно, что гибридная явно-неявная схема и гибридная схема К-Н показали практически идентичный результат.

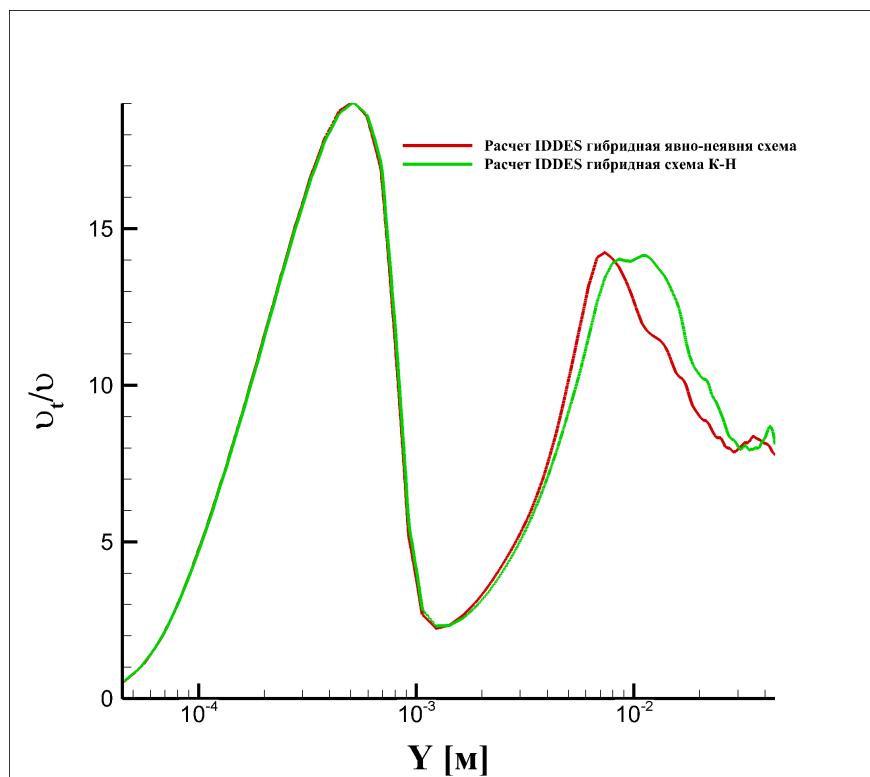


Рис. 72: Профили отношения турбулентной вязкости к ламинарной для расчетов течения в периодическом канале в рамках IDDES подхода.

Учитывая приведенные выше результаты, можно заключить, что разработанные вычислительные модели гибридного подхода к моделированию турбулентности IDDES работают правильно и позволяют получать результаты, хорошо коррелирующие с референсными данными.

Глава 5

Моделирование процессов

смешения и горения в

модельной камере сгорания

Барроуса-Куркова

Камера сгорания Барроуса-Куркова имеет длину 14 дюймов (35.6 см), ширину 5 см, а высота увеличивается с 8.9 см на входе до 10.5 см в выходном сечении. Камера является прямоточной, через нее продувается сверхзвуковой поток газа со скоростью, соответствующей числу Маха ($M = 2.44$).

Вдоль стенки в камеру из форсунки подается водород на трансзвуковой скорости ($M = 1$). Высота форсунки — 0.4 см. От камеры форсунка отделяется стенкой толщиной 0.076 см. Геометрия камеры приводится на рисунке 73, взятом из [8].



Рис. 73: Геометрия камеры сгорания [8].

В расчетную область, кроме непосредственно камеры сгорания был включен отрезок изолятора длиной 17.24 см и часть водородной форсунки длиной 1.5 см.

В соответствие с представленными в [8] экспериментами, задача решалась в двух постановках, которые отличались составом сверхзвукового потока. 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 технический воздух (*vitiated air*), то есть воздух, подающийся из подогревателя, в котором часть кислорода замещена водяным паром. Каждая из постановок рассматривалась в рамках подходов 2D RANS, 3D RANS и 3D IDDES. В 2D RANS расчете рассматривались верхняя и нижняя стенки, боковые стенки с проскальзыванием. В случае 3D RANS учитывались все боковые стенки. Расчет с применением вихреразрешающего подхода 3D IDDES являлся самым трудоемким, поэтому в нем учитывалась только нижняя стенка изолятора и камеры, а также верхняя и нижняя стенки водородной форсунки. Верхняя стенка камеры в IDDES расчетах бралась с проскальзыванием, а на боковых стенках устанавливались периодические условия.

Размер пристеночной ячейки составлял $5 \cdot 10^{-6}$ м, что соответствовало $y^+ = 2$. Размер сетки для RANS расчетов составлял 83000 и 8.8 млн ячеек в 2D и

3D соответственно. На толщину нижнего пограничного слоя в изоляторе приходилось 50 ячеек, верхнего и боковых — 30 ячеек. Разрешение зоны смешения/горения — 100 ячеек. IDDES расчеты выполнялись на сетке в 11.2 млн ячеек. По осям OX и OZ использовалась равномерная сетка с $\Delta X^+ = 200$, $\Delta Z^+ = 100$. Размер ячеек по оси OY $\Delta Y^+ = 2 \div 150$. На толщину нижнего пограничного слоя в изоляторе в вертикальном направлении приходится 60 ячеек, на ширину зоны смешения/горения — 110. В зону RANS-LES перехода укладывается 4 ячейки.

Интегрирование по времени выполнялось с использованием гибридной явно-неявной схемы. RANS расчеты велись в квазистационарном приближении. Устанавливался большой шаг по времени $\Delta t \approx 10^{25}$ с и на каждом шаге выполнялось 250 итераций метода Ньютона. Шаги выполнялись до сходимости решения. Для IDDES расчета был выбран шаг в 15 нс. Данный размер шага обеспечивал расчет по явной схеме во всей LES области и зоне перехода.

При аппроксимации на грань в RANS расчетах использовался ограничитель производных van Albada 2, в IDDES — корректор значений (3.3.4).

5.1 Смешение водорода с инертным газом

Состав сверхзвукового потока в массовых долях: $H_2 - 0.005$, $O_2 - 0.0509$, $H_2O - 0.2162$, $N_2 - 0.7324$. Давление Пито и полная температура для сверхзвукового потока — 740 кПа, полная температура — 2207 К. Аналогичные величины для потока водорода — 216.675 кПа и 314 К соответственно.

Стенки камеры сгорания считались изотермическими и имеющими температуру 298 К. Выходное граничное условие задавалось характеристическим, зависящим от локального числа Маха. В дозвуковой области на выходе фиксировалось давление, а в сверхзвуковой выполнялась экстраполяция из внутренних точек области. В качестве входного граничного условия для водорода задавался массовый расход, а для сверхзвукового потока — профиль параметров, получен-

ный при решении дополнительной задачи о продувке канала прямоугольного сечения длиной 1 м. Поперечные размеры канала совпадали с размерами для изолятора. Задача о течении в канале решалась в рамках RANS подхода.

Результаты моделирования задачи о смешении водорода с инертным газом в камере сгорания Барроуса-Куркова с использованием RANS подхода были представлены в работах [64, 65].

На рисунке 74 представлено распределение продольной компоненты скорости [км/с] в центральной продольной плоскости камеры в 3D RANS расчете. По распределению скорости можно судить о толщине пограничных слоев, образующихся на стенках. Она составляет 12-13 мм и безусловно оказывает критическое влияние на протекание процесса смешения.

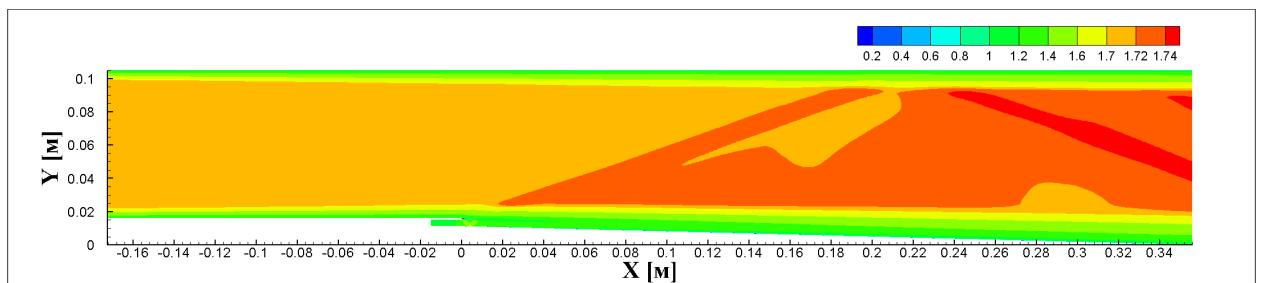


Рис. 74: Распределение продольной компоненты скорости [км/с] в центральной продольной плоскости камеры сгорания. 3D RANS.

Рисунки 75-76 демонстрируют распределение массовой доли водорода в центральном продольном сечении камеры для 3D RANS и 3D IDDES расчетов. Для нестационарного расчета показан момент времени $t = 2.5$ мс. Данное распределение визуализирует полученную структуру слоя смешения.

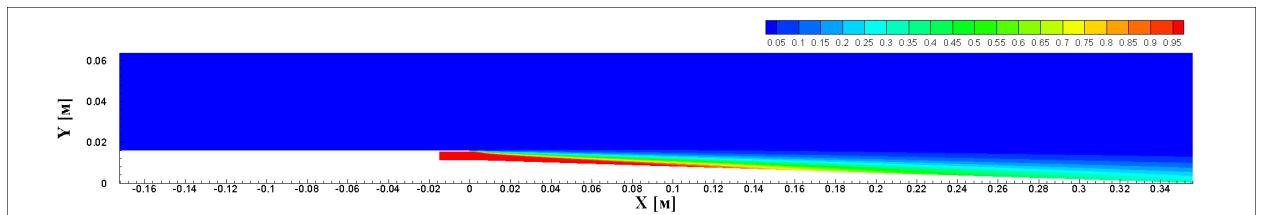


Рис. 75: Распределение массовой доли водорода в центральной продольной плоскости камеры сгорания. 3D RANS.

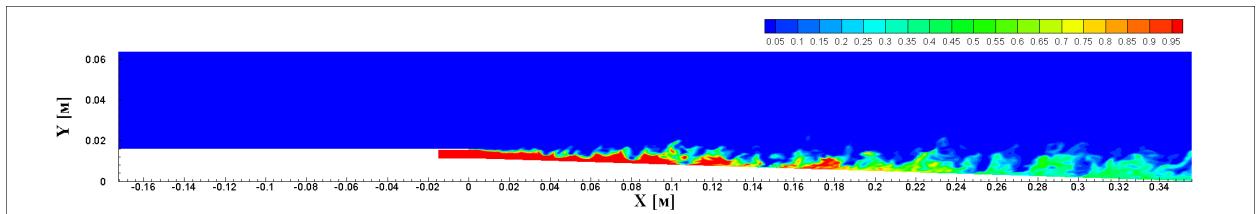


Рис. 76: Распределение массовой доли водорода в центральной продольной плоскости камеры сгорания. 3D IDDES.

Для проведения анализа эволюции параметров вдоль потока были построены поперечные срезы во входном и выходном сечениях камеры сгорания, для решения полученного в 3D RANS расчете. В данных срезах строились распределения продольной скорости [км/с], массовой доли водорода, турбулентной вязкости [Па · с] и статической температуры [К]. Ввиду неинформативности картины распределения массовой доли водорода на входе в камеру сгорания первый срез для данной величины был построен на 10 см ниже по потоку от точки впрыска водорода. Распределения величин приводятся на рисунках 77-80.

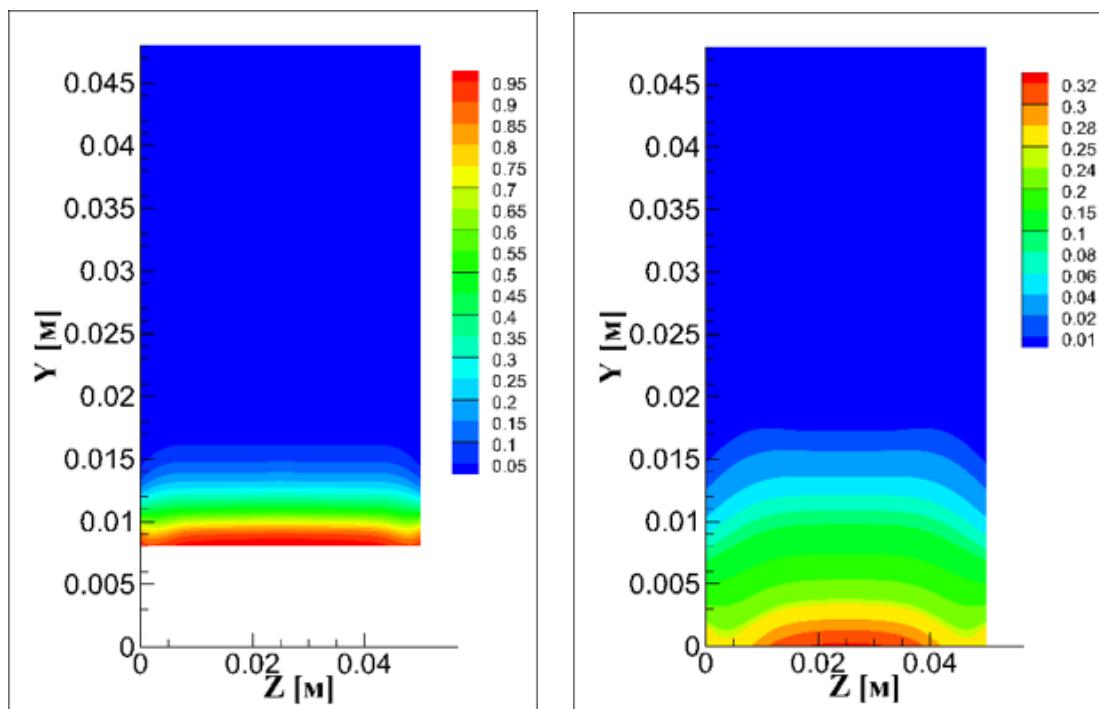


Рис. 77: Распределение массовой доли водорода в 10 см ниже по потоку от места подачи водорода (слева) и в выходном сечении камеры (справа). 3D RANS.

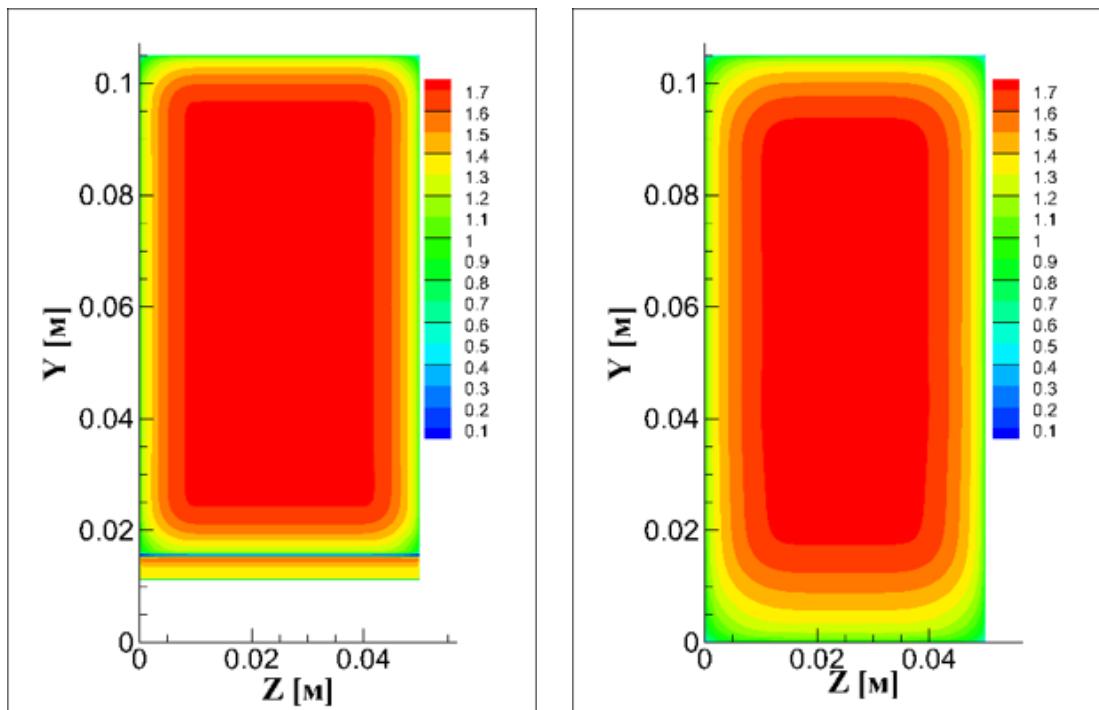


Рис. 78: Распределение продольной компоненты скорости во входном (слева) и выходном (справа) сечениях камеры. 3D RANS.

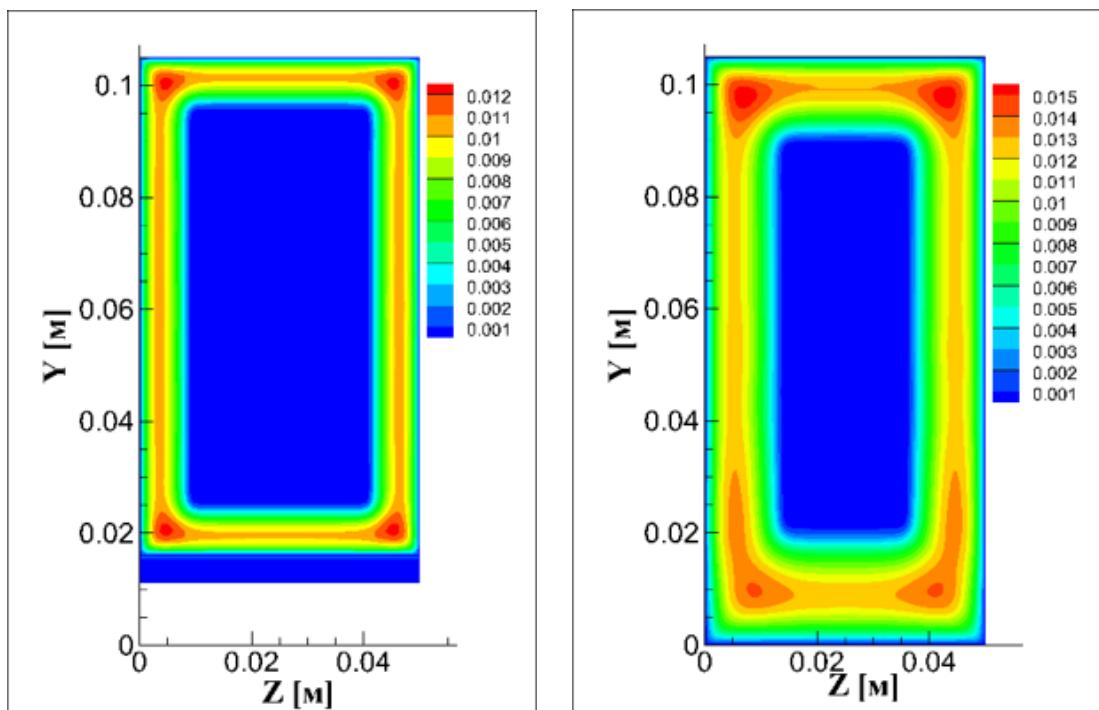


Рис. 79: Распределение турбулентной вязкости во входном (слева) и выходном (справа) сечениях камеры сгорания. 3D RANS.

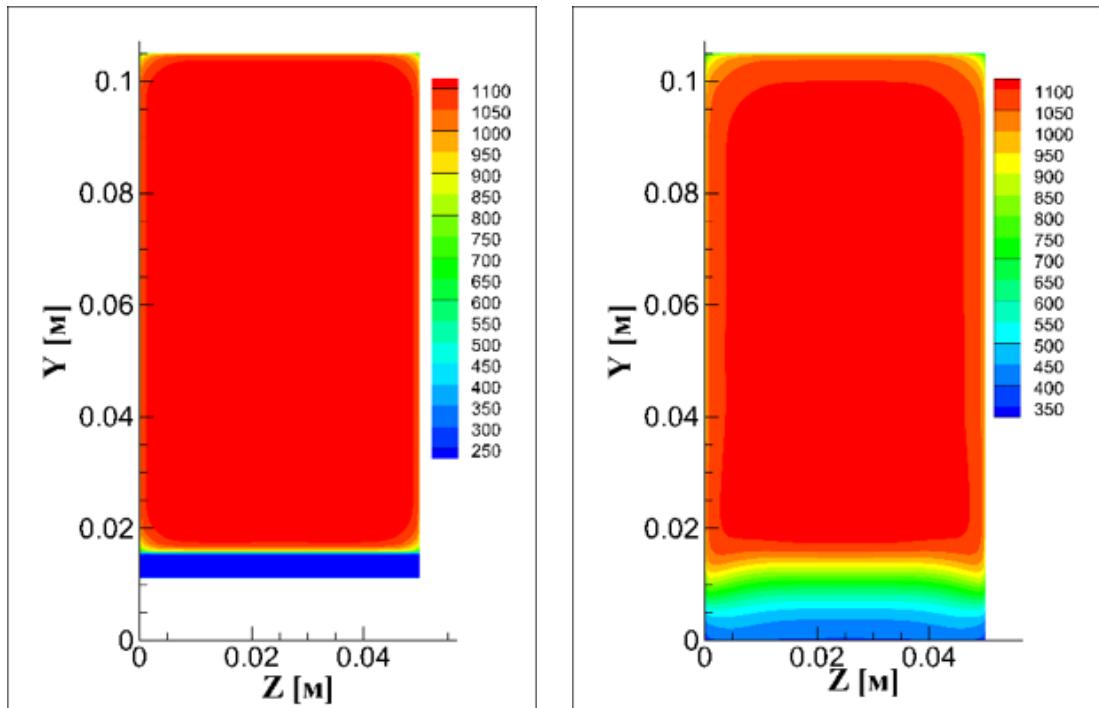


Рис. 80: Распределение статической температуры во входном (слева) и выходном (справа) сечениях камеры сгорания. 3D RANS.

По данным рисунков 78-79 можно видеть, что вязкие пограничные слои продолжают нарастать вдоль стенок камеры, но в центре при этом остается невязкое ядро. Рисунок 80 свидетельствует о том, что внутри боковых пограничных слоев, где скорость газа падает, смешение идет лучше. Лучшее смешение способствует тому, что вблизи стенок температура также снижается ввиду охлаждения потока холодным водородом. Кроме того, нельзя не отметить, что в большей степени процесс смешения обусловлен взаимодействием потока водорода именно с пограничным течением, сходящим с пластины, разделяющей потоки.

Распределения параметров в IDDES расчете носят существенно нестационарный характер, поэтому срезы строились в большем количестве поперечных сечений. Для визуализации были выбраны распределения массовой доли водорода и отношения турбулентной вязкости к ламинарной, которые приводятся на рисунках 81-82 соответственно. Рассматриваемый момент времени также $t = 2.5$ мс.

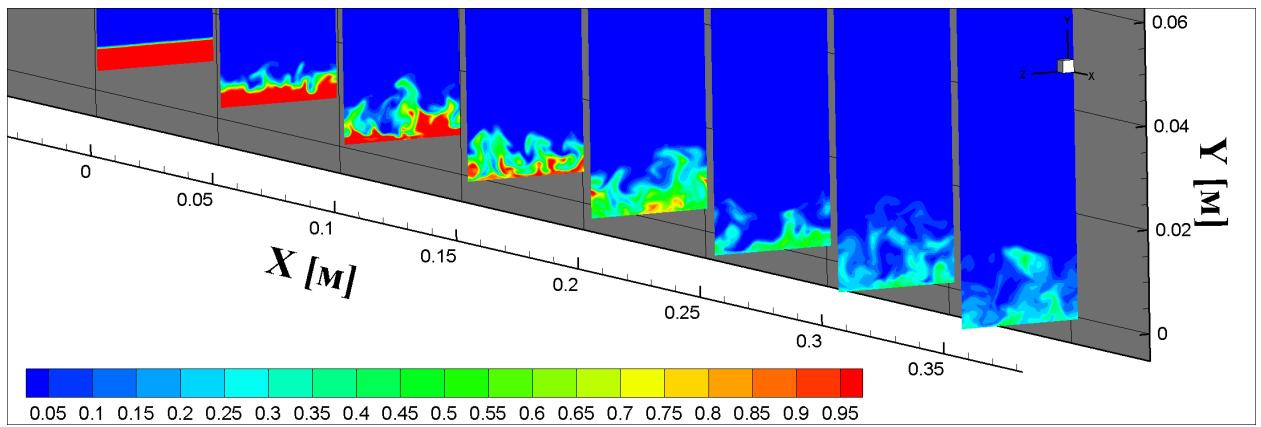


Рис. 81: Распределение массовой доли водорода в поперечных сечениях камеры. 3D IDDES.

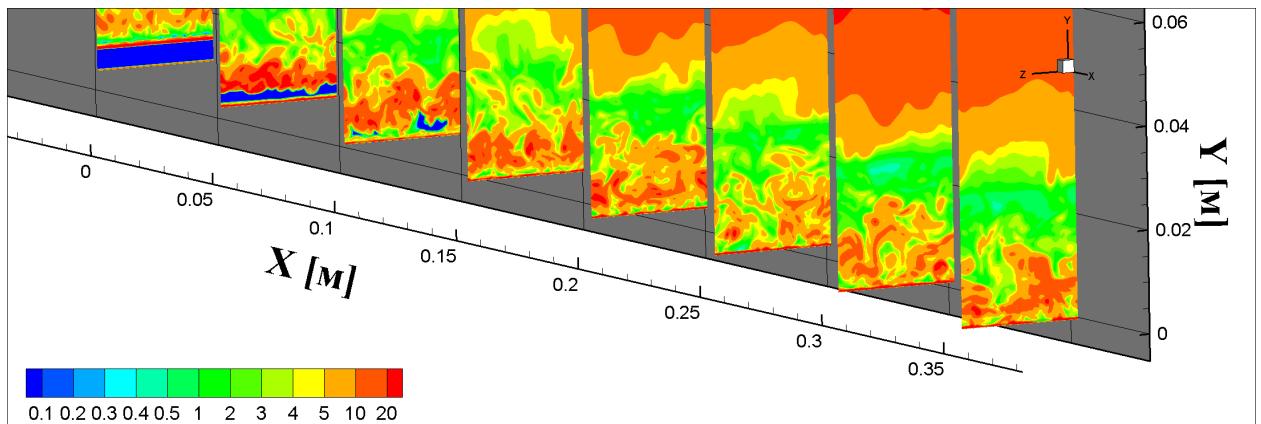


Рис. 82: Распределение отношения турбулентной вязкости к ламинарной в поперечных сечениях камеры. 3D IDDES.

Далее показана визуализация турбулентных структур в IDDES расчете при помощи Q-критерия по аналогии с задачей о нестационарном пограничном слое в канале, рассмотренной в разделе 4.7. На рисунке 83 приводится изоповерхность значения $Q=2500$, цветом отмечено распределение температуры.

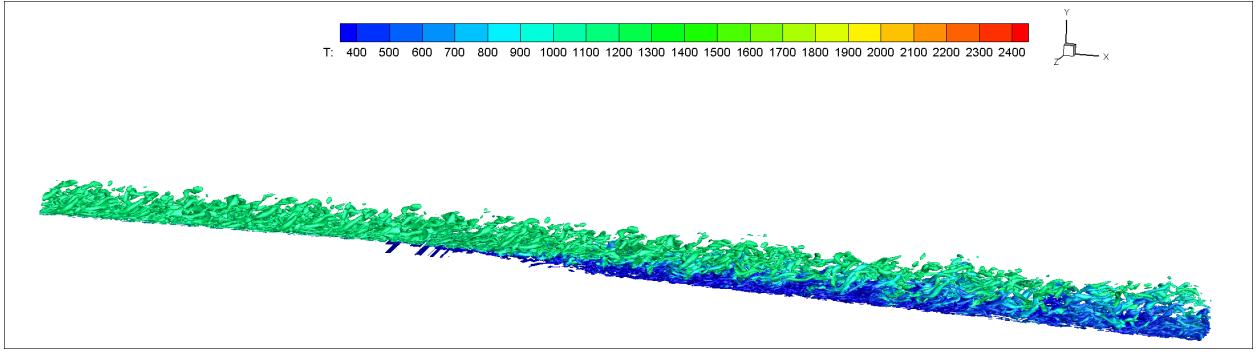


Рис. 83: Визуализация вихревых структур в задаче о смешении с помощью Q-критерия.

Во входном и выходном сечениях камеры были построены профили давления Пито и полной температуры и проведено сравнение с экспериментальными [7] и расчетными [56, 57] данными. Ввиду того, что в работах [56, 57] приводятся данные только для RANS-LES расчета, RANS результаты сравнивались только с экспериментальными точками. Для трехмерных расчетов профили строились вдоль центрального сечения камеры. Осреднение по времени профилей параметров для IDDES расчета выполнялось за период 1.5 мс. Профили обезразмеривались на значения давления Пито и полной температуры в баке-накопителе, из которого запускался газовый поток в эксперименте $P_{Pitot,ref} = 18.5 \cdot 10^5$ Па, $T_{tot,ref} = 2276$ К. На горизонтальной оси отложено расстояние от нижней стенки камеры. Результаты приводятся на рисунках 84-87

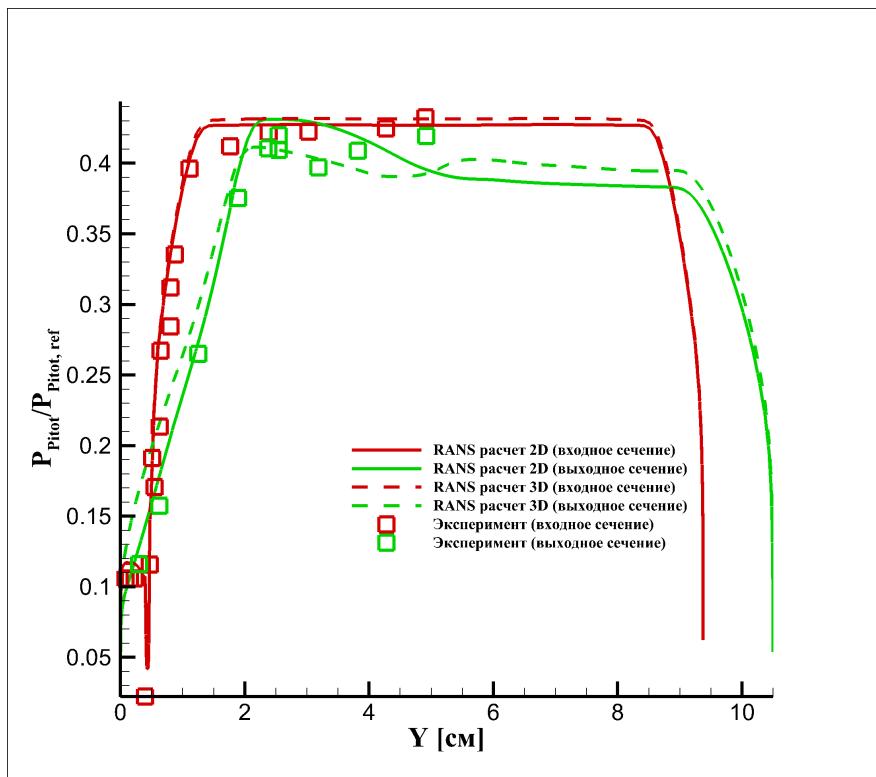


Рис. 84: Профили давления Пито во входном и выходном сечениях камеры в сравнении с экспериментальными и расчетными данными. RANS расчеты.

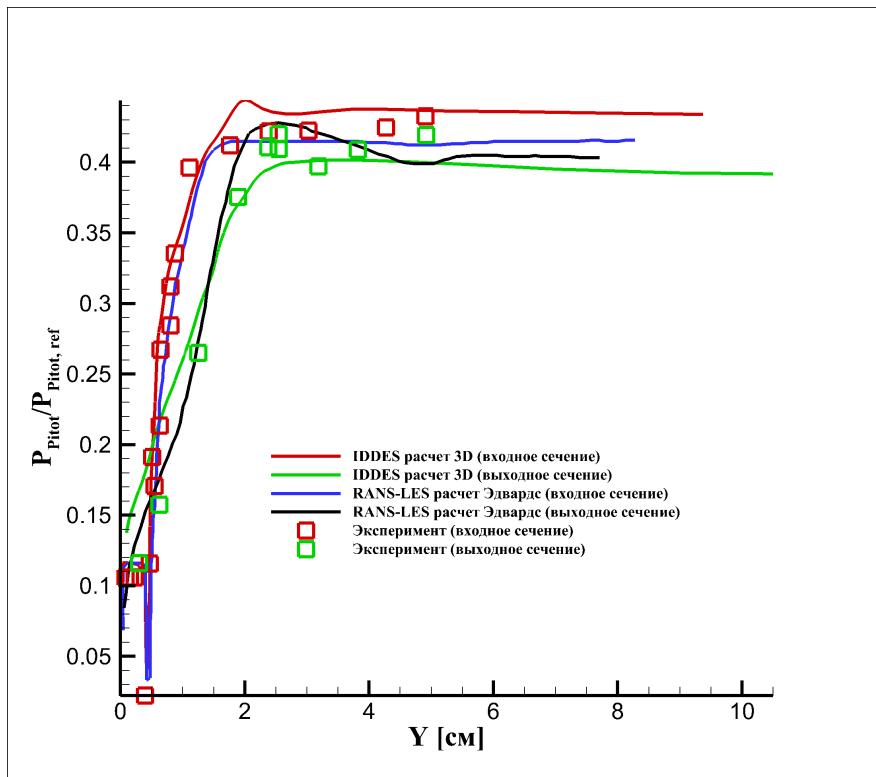


Рис. 85: Профили давления Пито во входном и выходном сечениях камеры в сравнении с экспериментальными и расчетными данными. RANS-LES расчеты.

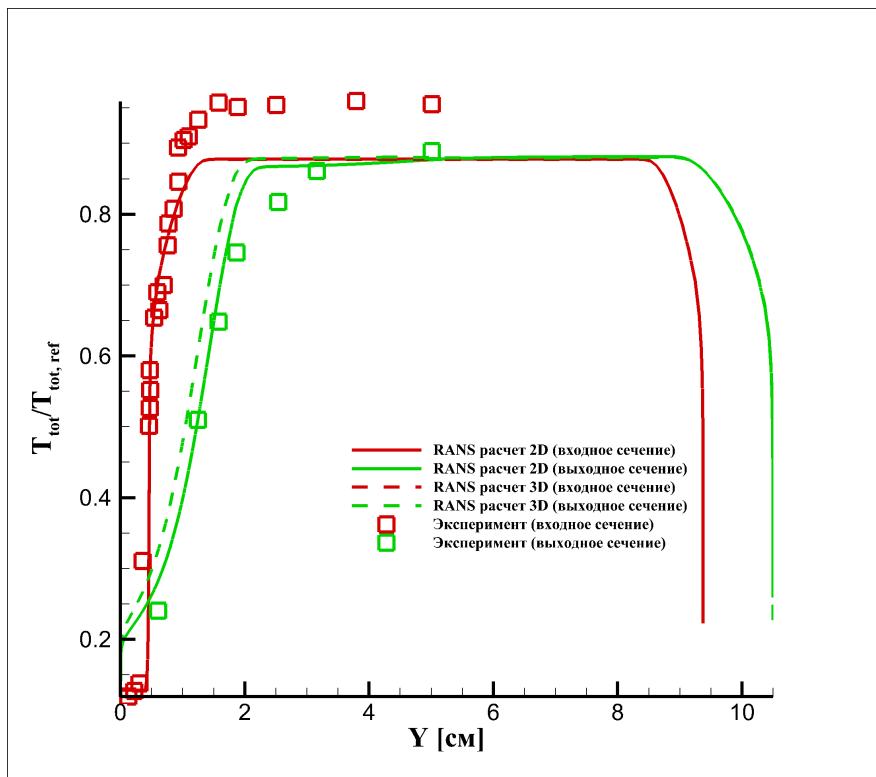


Рис. 86: Профили полной температуры во входном и выходном сечениях камеры в сравнении с экспериментальными и расчетными данными. RANS расчеты.

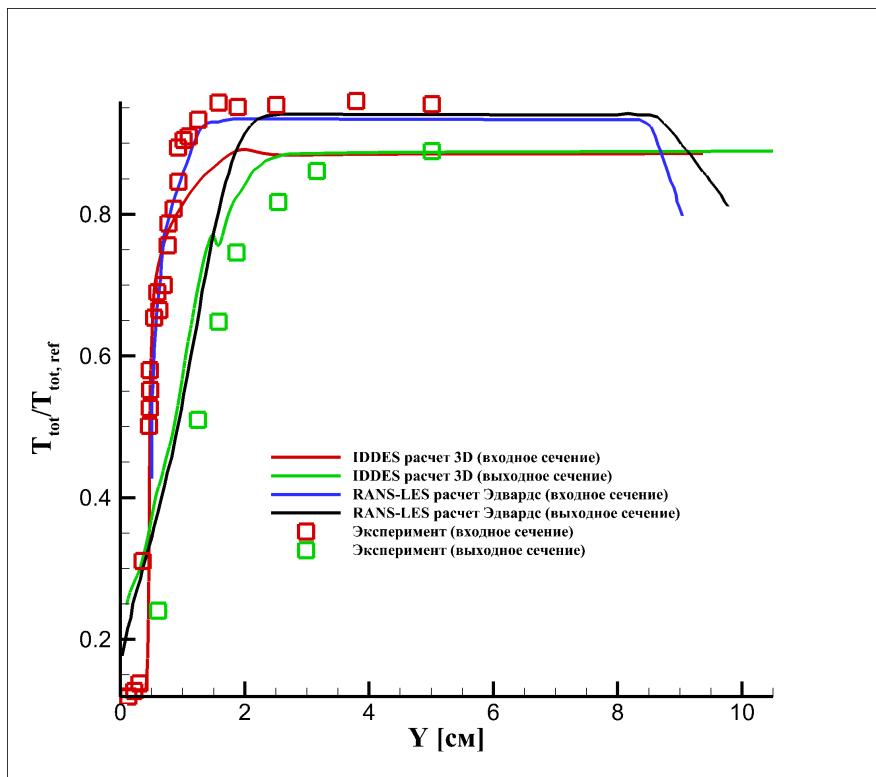


Рис. 87: Профили полной температуры во входном и выходном сечениях камеры в сравнении с экспериментальными и расчетными данными. RANS-LES расчеты.

Также в выходном сечении были построены профили мольных концентраций компонентов и проведено аналогичное сравнение. Результат сравнения показан на рисунках 88-89.

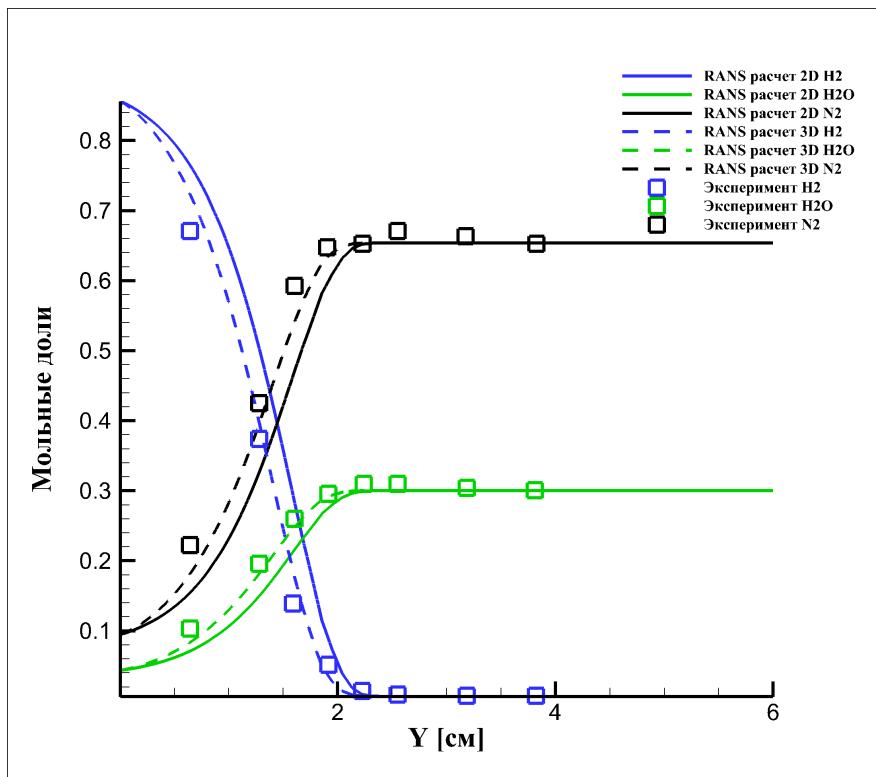


Рис. 88: Профили мольных концентраций в выходном сечении камеры в сравнении с экспериментальными и расчетными данными. RANS расчеты.

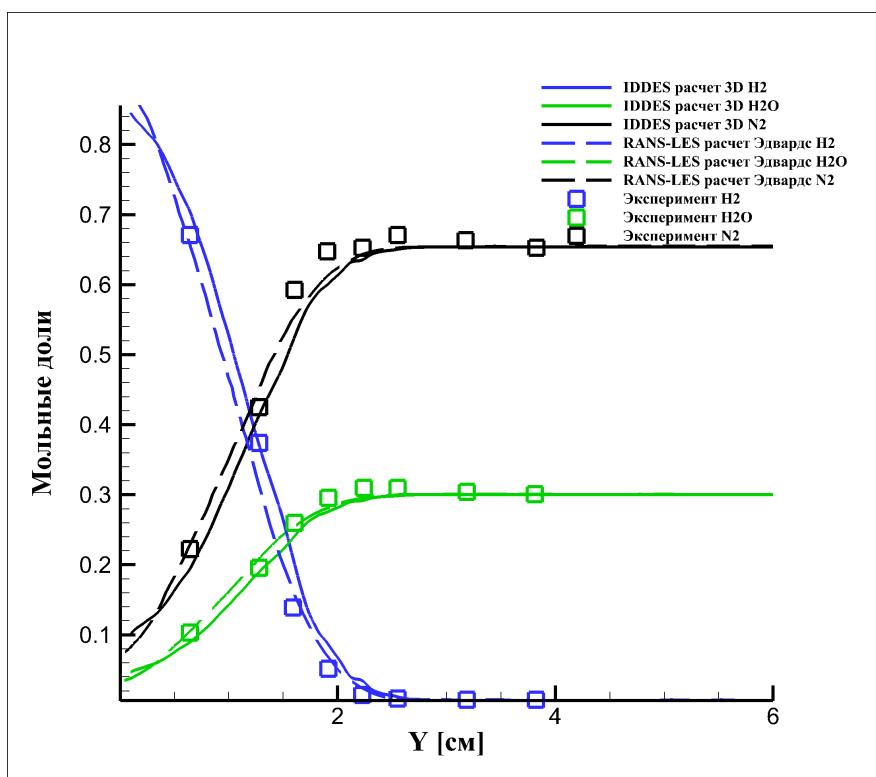


Рис. 89: Профили мольных концентраций в выходном сечении камеры в сравнении с экспериментальными и расчетными данными. RANS-LES расчеты.

Сравнение показывает, что двумерный и трехмерный RANS расчеты дают сходные результаты, однако 3D расчет показывает несколько лучшую корреляцию с экспериментальными данными. Учет боковых пограничных слоев в 3D расчете приводит к смещению точки отражения скачка от верхней стенки камеры ближе ко входу, что в свою очередь ведет к изменению положения точки пересечения отраженного скачка с выходным сечением. Он смещается к нижней стенке камеры. Рисунок 84 показывает, что в этом случае распределение давления Пито на выходе лучше соответствует эксперименту. Профили, полученные в IDDES расчете также показывают хорошую корреляцию с экспериментальными и расчетными данными как во входном, так и в выходном сечениях (рис. 85).

Профили мольных долей компонент, приведенные на рисунке 88, также лучше совпадают с экспериментом в случае учета боковых пограничных слоев в RANS расчете. Несмотря на то, что в нестационарном (IDDES) расчете отсутствует учет боковых пограничных слоев, профили мольных долей также находятся в очень хорошем соответствии с экспериментальными точками (рис. 89), а также коррелируют с результатами RANS-LES расчета из работы [56], что свидетельствует о правильно подобранной расчетной сетке и численном методе.

Дополнительно в выходном сечении были построены профили числа Маха и статической температуры. Профили приводятся на рисунках 90-91. Сравнение производилось с экспериментальными данными из [7], а также для температуры с расчетными данными [51].

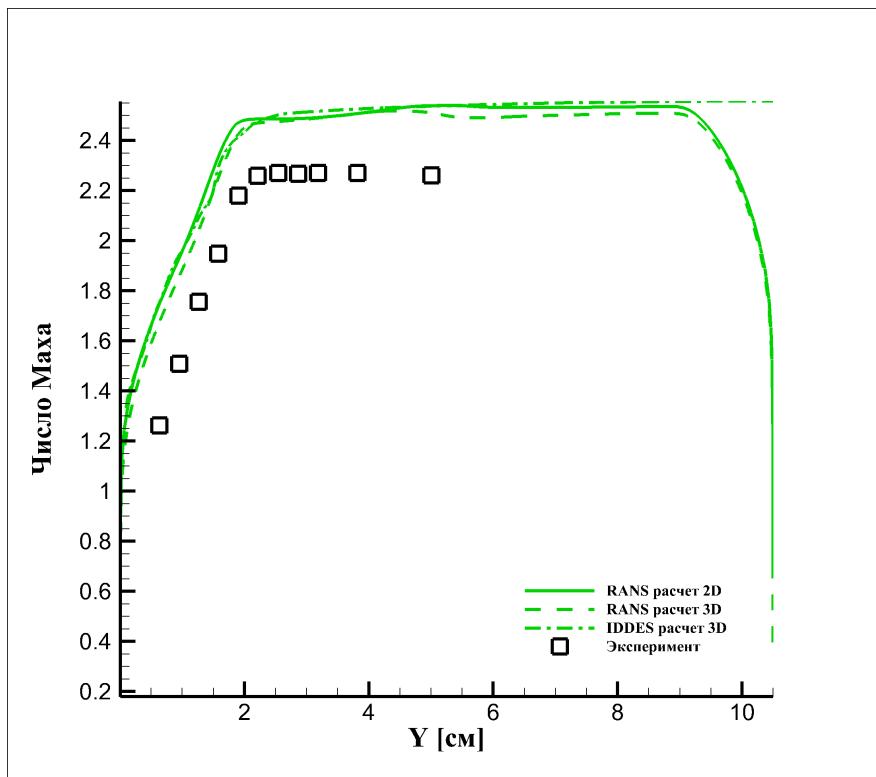


Рис. 90: Профили числа Маха в выходном сечении камеры в сравнении с экспериментальными данными.

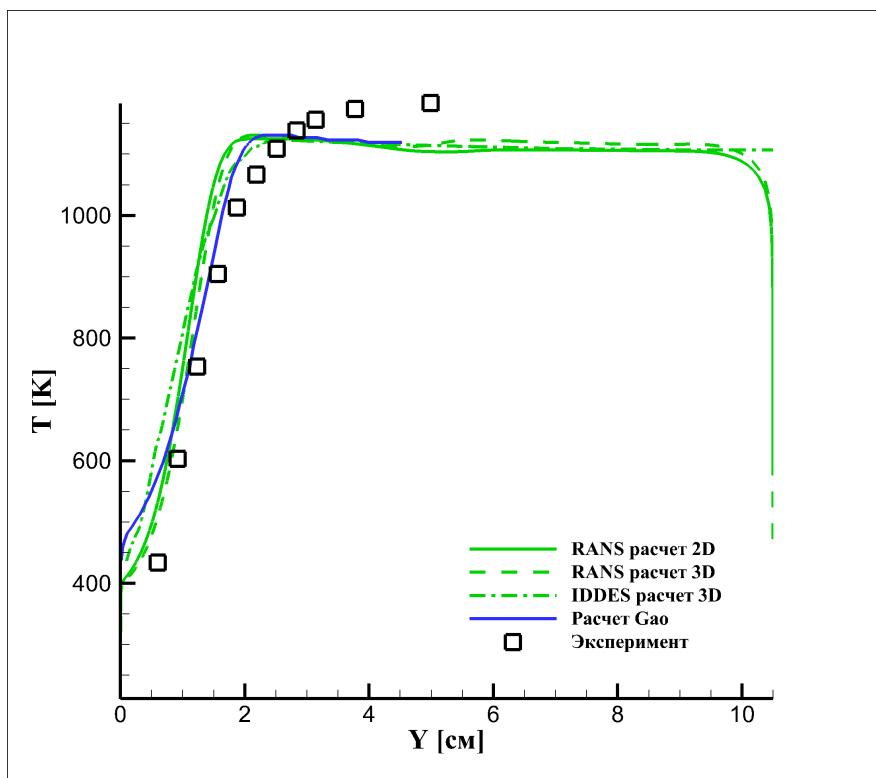


Рис. 91: Профили статической температуры в выходном сечении камеры в сравнении с экспериментальными и расчетными данными.

По рисунку 90 можно видеть, что получившееся число Маха выше, чем в эксперименте, что может быть объяснено погрешностью датчиков, а также различием в термодинамических параметрах, используемых для вычисления экспериментальных значений числа Маха. Профиль статической температуры хорошо соответствует экспериментальным данным вблизи нижней стенки, но в то же время лежит ниже экспериментальных точек в ядре канала. Тем не менее, скорость в ядре канала совпадает с расчетными данными из [51].

5.2 Смешение с горением водорода и технического воздуха

Данная постановка задачи о физико-химических процессах внутри модельной камеры сгорания Барроуса-Куркова предполагает протекание химических реакций между газовыми потоками. Водород впрыскивается в сверхзвуковой поток технического воздуха (*vitiated air*), происходит смешение и последующее воспламенение смеси. Состав сверхзвукового потока в массовых долях в соответствии с [8]: $O_2 - 0.258$, $H_2O - 0.256$, $N_2 - 0.486$.

Давление Пито и полная температура сверхзвукового потока составляли 700 кПа и 2160 К соответственно. Для водорода — 181 кПа и 302 К соответственно.

Входные и выходные граничные условия были взяты аналогичные используемым в первой постановке за исключением того, что для стенок камеры теперь учитывался прогрев. Стенки считались сделанными из меди (как в экспериментальной установке) и способными прогреваться на глубину до 0.017 м. Такая глубина соответствует глубине прогрева меди за 2.5 с проведения эксперимента. Вспомогательная задача по расчету формирования пограничных слоев в прямоугольном канале была пересчитана с новыми газодинамическими параметрами.

Данная постановка рассматривалась автором в рамках RANS подхода в работах [66, 67].

На рисунках 92-93 приводятся распределения статической температуры для 2D и 3D RANS расчетов соответственно. Для двумерного расчета показано распределение температуры вдоль камеры, а для трехмерного — изоповерхность температуры 2250 К, являющаяся условной границей зоны пламени.

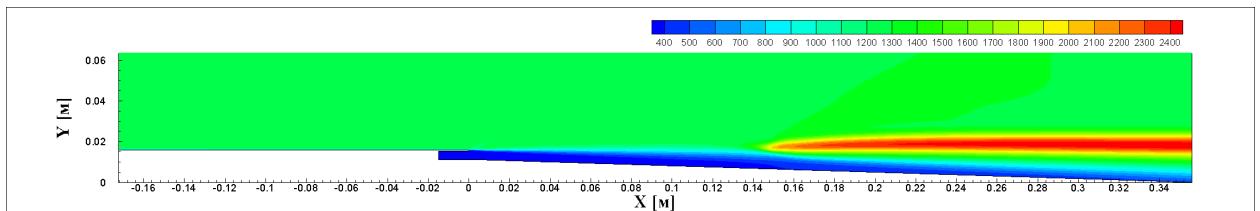


Рис. 92: Распределение статической температуры в камере для 2D RANS расчета.

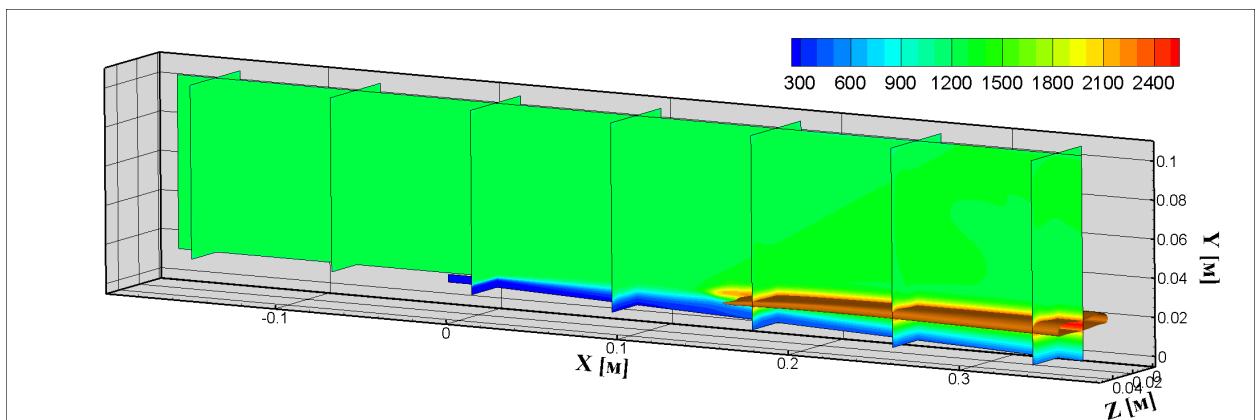


Рис. 93: Изоповерхность статической температуры 2250 К для 3D RANS расчета.

Аналогичные распределения температуры, полученные в 3D IDDES расчете, показаны на рисунках 94-95. Распределение вдоль камеры приводится в центральном продольном сечении. Здесь и далее рисунки для IDDES расчета приводятся на момент $t = 3.0$ мс, если не сказано иного.

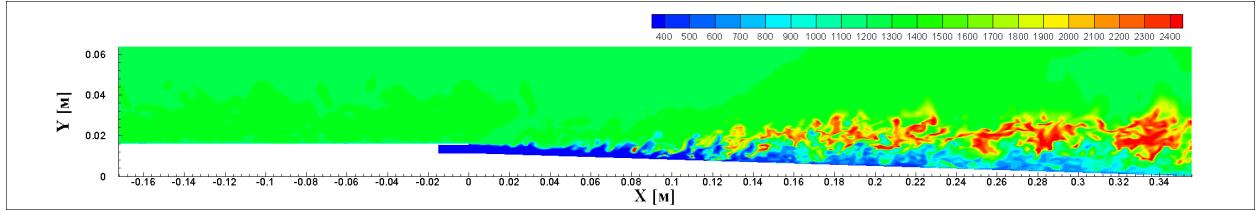


Рис. 94: Распределение статической температуры в центральном продольном сечении камеры для 3D IDDES расчета.

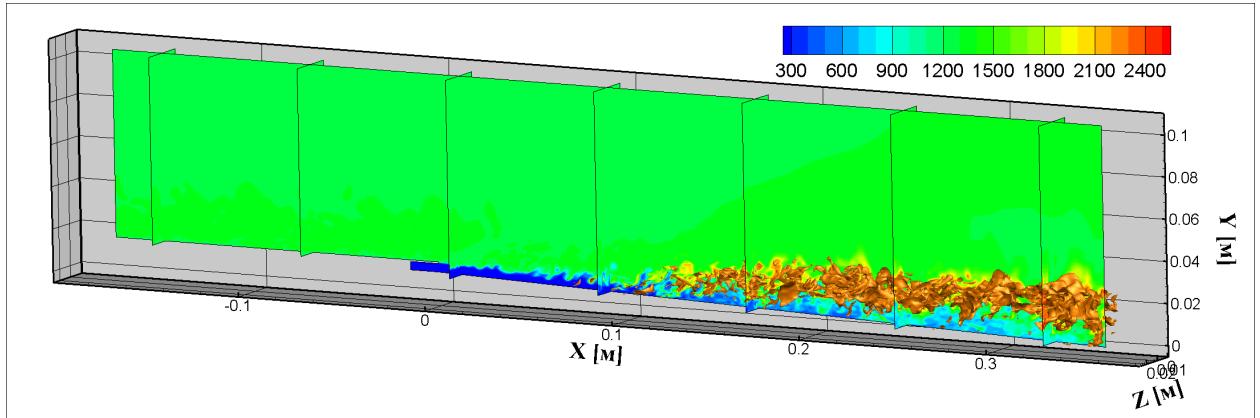


Рис. 95: Изоповерхность статической температуры 2250 К для 3D IDDES расчета.

Далее на рисунке 96 приводятся распределения модуля градиента плотности для RANS расчетов. Для 3D расчета было взято центральное сечение камеры. Красная линия отмечает положение точки отражения скачка от верхней стенки для 2D расчета. Можно наблюдать, что для трехмерного расчета точка отражения сдвигается к началу канала, а точка пересечения отраженного скачка и выходного сечения камеры — вниз. Данный эффект уже отмечался при рассмотрении задачи о смешении без реакций.

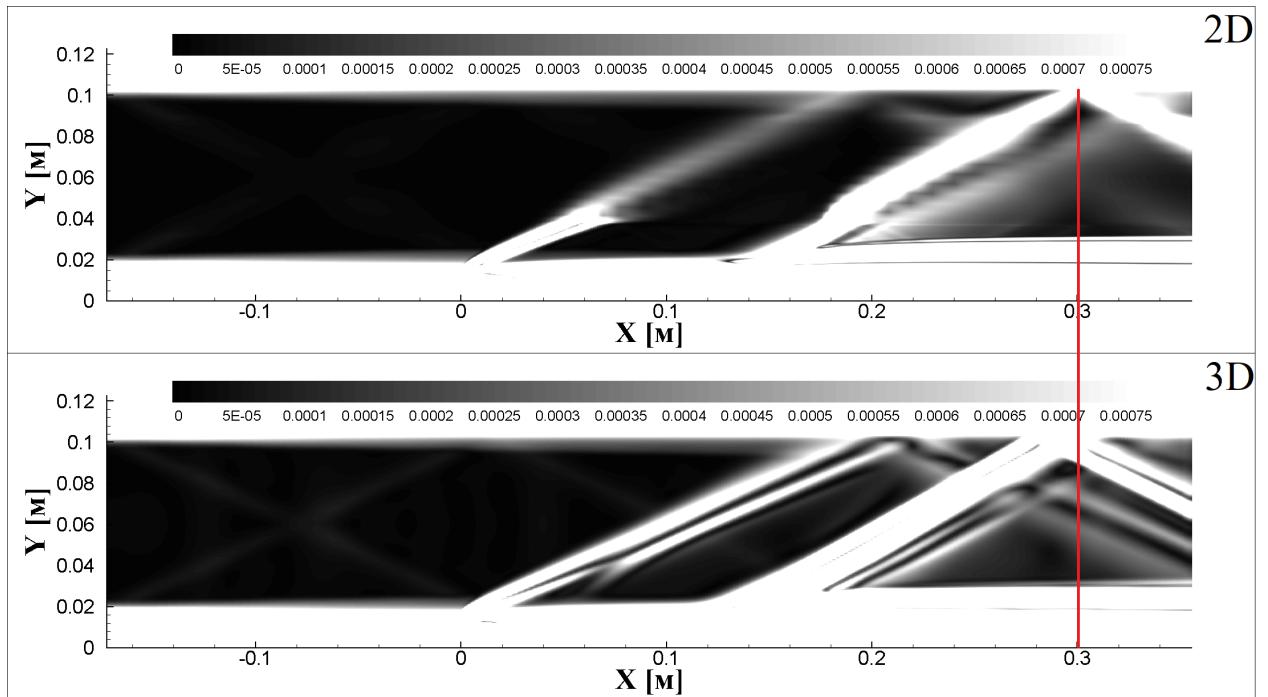


Рис. 96: Распределение модуля градиента плотности для 2D RANS и 3D RANS расчетов.

Для сравнения на рисунке 97 приводится распределение модуля градиента плотности в продольном сечении для IDDES расчета. Из-за использования более мелкой расчетной сетки, полученные градиенты больше по модулю, ввиду чего количественное сравнение RANS и IDDES расчетов затруднительно. Качественно можно отметить, что на рисунке 97 также можно видеть два скачка уплотнения — на входе в камеру и в начале зоны пламени, однако выражены они слабее чем в RANS расчетах. Также хороша видна нестационарная структура пограничного слоя в изоляторе и зона пламени в камере, выраженные повышенным модулем градиента плотности.

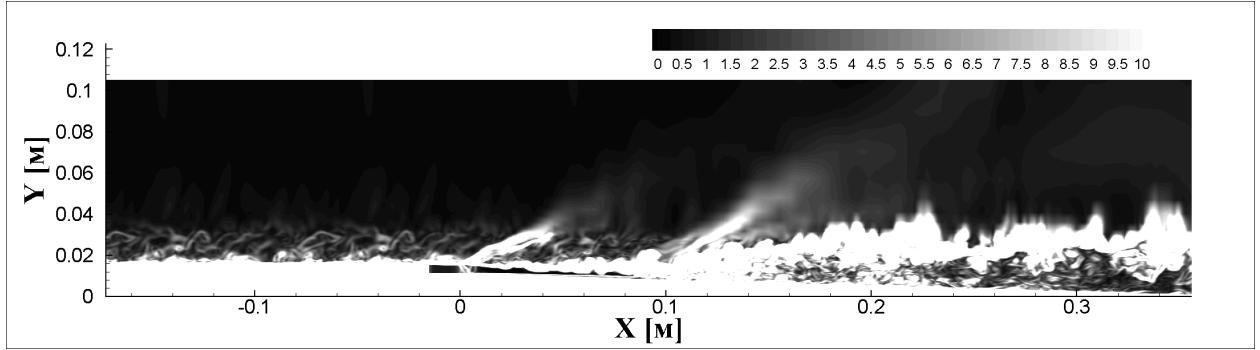


Рис. 97: Распределение модуля градиента плотности для 3D IDDES расчета.

Также для проведения анализа процессов, протекающих в камере, для 3D расчетов были построены распределения индекса пламени G_f и числа Дамкёлера Da , которые вычисляются по следующим формулам:

$$G_f = \frac{(\nabla Y_{O_2} \cdot \nabla Y_{H_2})}{|\nabla Y_{O_2} \cdot \nabla Y_{H_2}|}$$

$$Da = \frac{\dot{\omega}_s}{\left| \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial Y_s}{\partial x_j} \right) \right|}, \quad s = H_2O \quad (5.2.1)$$

где Y — массовая доля, $\dot{\omega}$ — изменение доли компонента в результате химических реакций, D — коэффициент диффузии.

Индекс пламени показывает реализуемый режим горения. Он стремится к -1 в случае неперемешанной смеси, и к 1 в случае перемешанной смеси. Число Дамкёлера в свою очередь показывает соотношение между скоростью изменения концентрации компонента за счет химических реакций и диффузии. Чем выше Da , тем выше влияние химических реакций.

Соответствующие распределения приводятся на рисунках 98-101. Значение индекса пламени на рисунках 98-99 выводилось в зоне где тепловыделение в RANS расчете превышало 0.1% от максимального. Также на распределения нанесены изолинии $T = 2250 K$

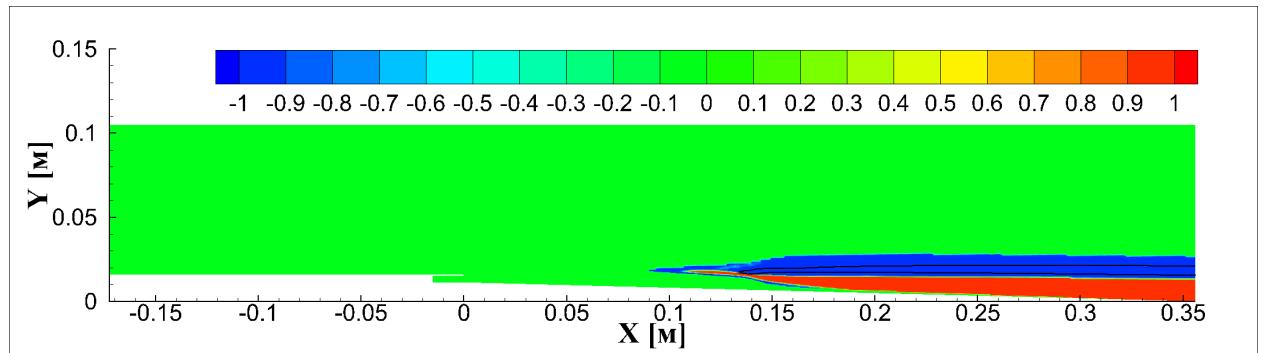


Рис. 98: Распределение индекса пламени вдоль центрального сечения для 3D RANS расчета.

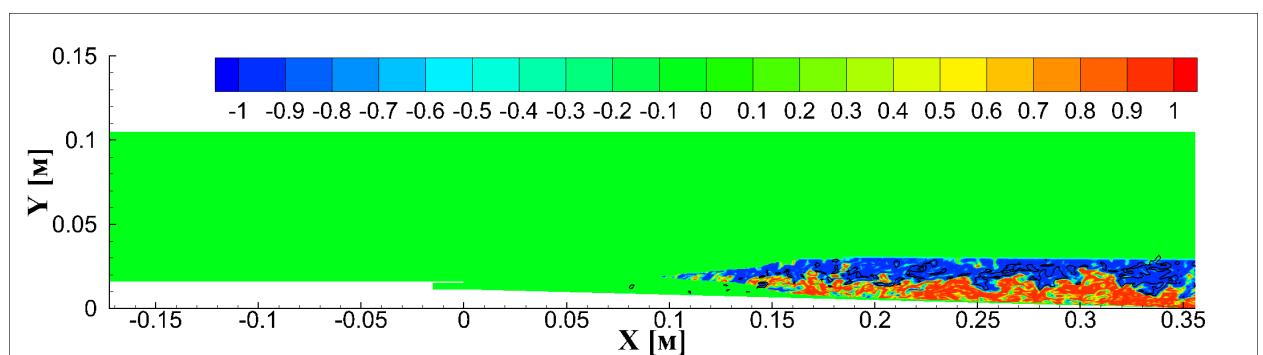


Рис. 99: Распределение индекса пламени вдоль центрального сечения для 3D IDDES расчета.

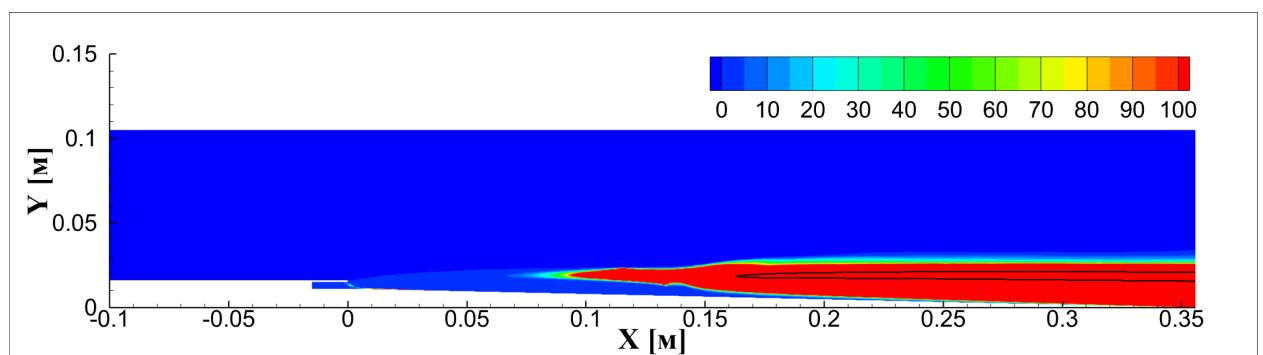


Рис. 100: Распределение числа Дамкёлера вдоль центрального сечения для 3D RANS расчета.

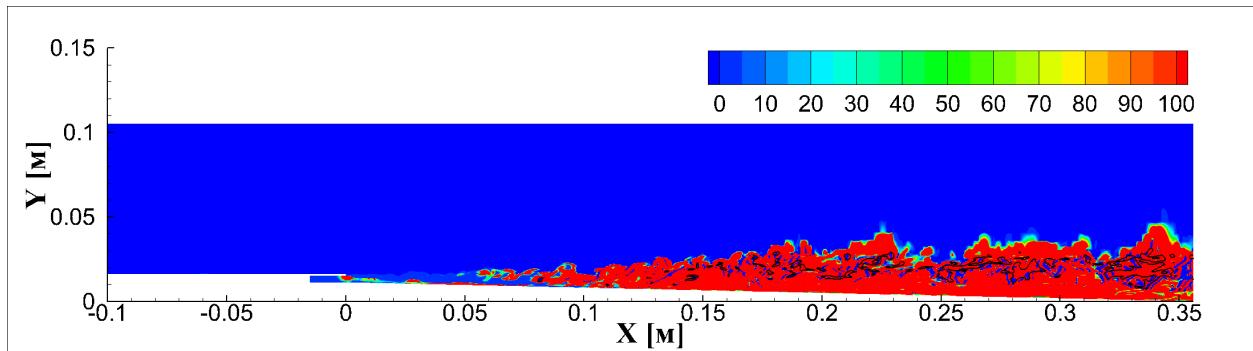


Рис. 101: Распределение числа Дамкёлера вдоль центрального сечения для 3D IDDES расчета.

Аналогично задаче о смешении была исследована эволюция параметров вдоль потока. Для этого в поперечных срезах (плоскость YZ) были построены распределения массовой доли водорода, продольной скорости [$\text{км}/\text{с}$], турбулентной вязкости [$\text{Па} \cdot \text{с}$] и статической температуры [К]. Распределения величин для задачи о смешении с горением приводятся на рисунке 102-105.

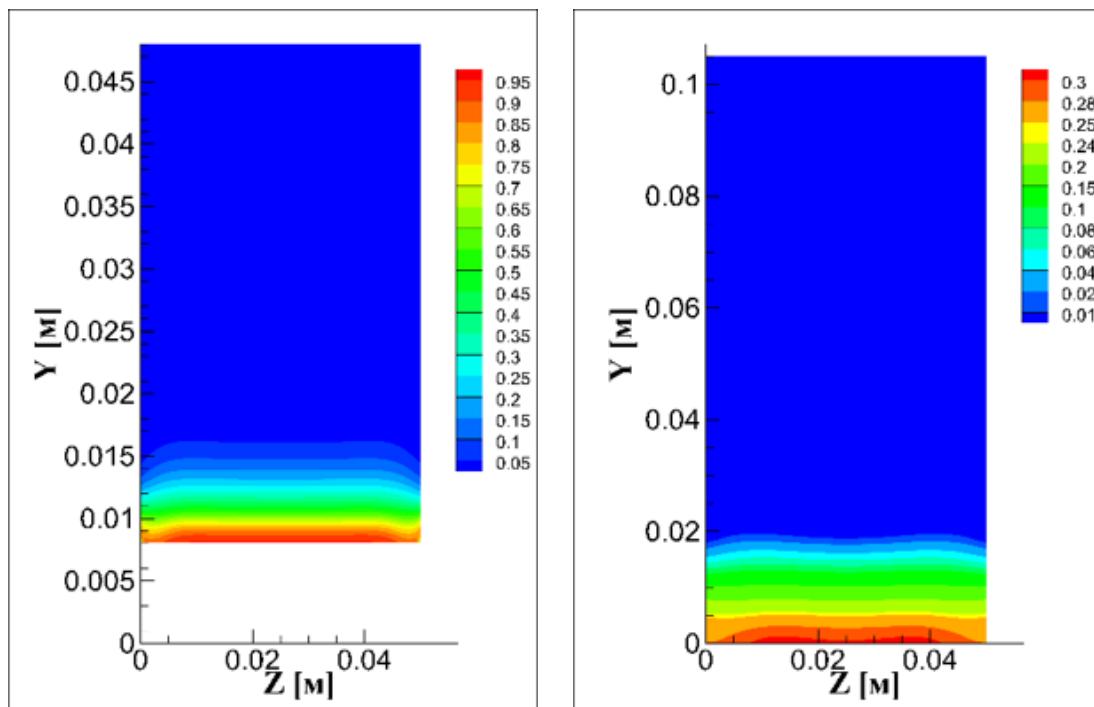


Рис. 102: Распределение массовой доли водорода для задачи с горением в 10 см ниже по потоку от места подачи водорода (слева) и в выходном сечении камеры (справа). 3D RANS.

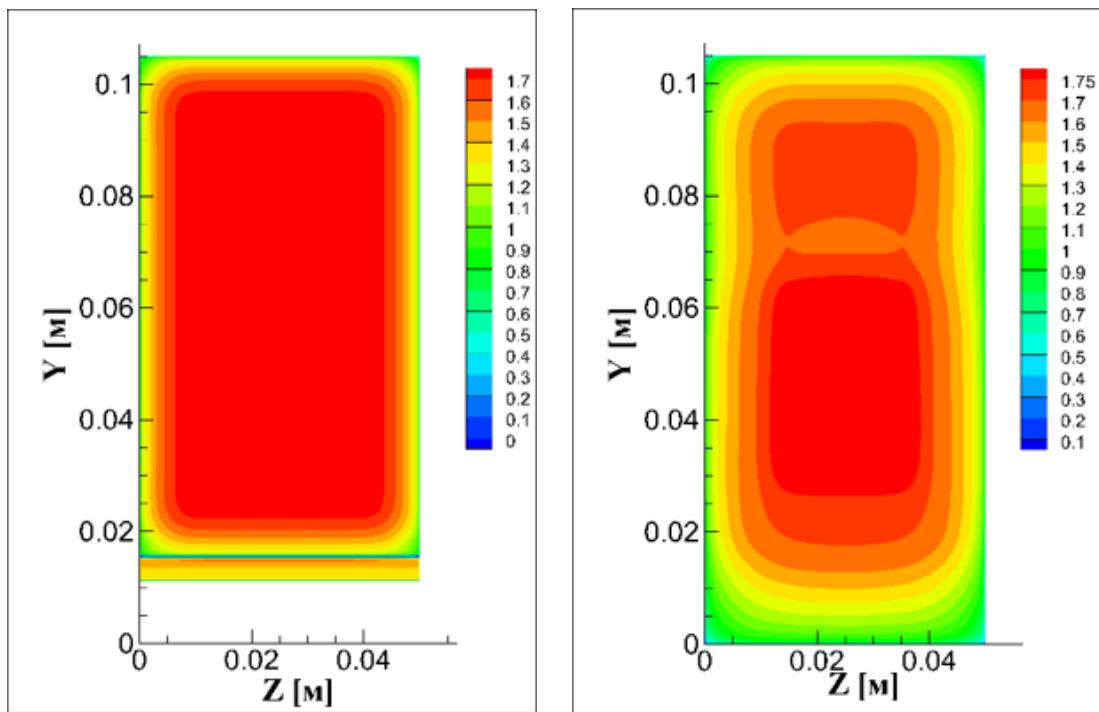


Рис. 103: Распределение продольной компоненты скорости для задачи с горением во входном (слева) и выходном (справа) сечениях камеры. 3D RANS.

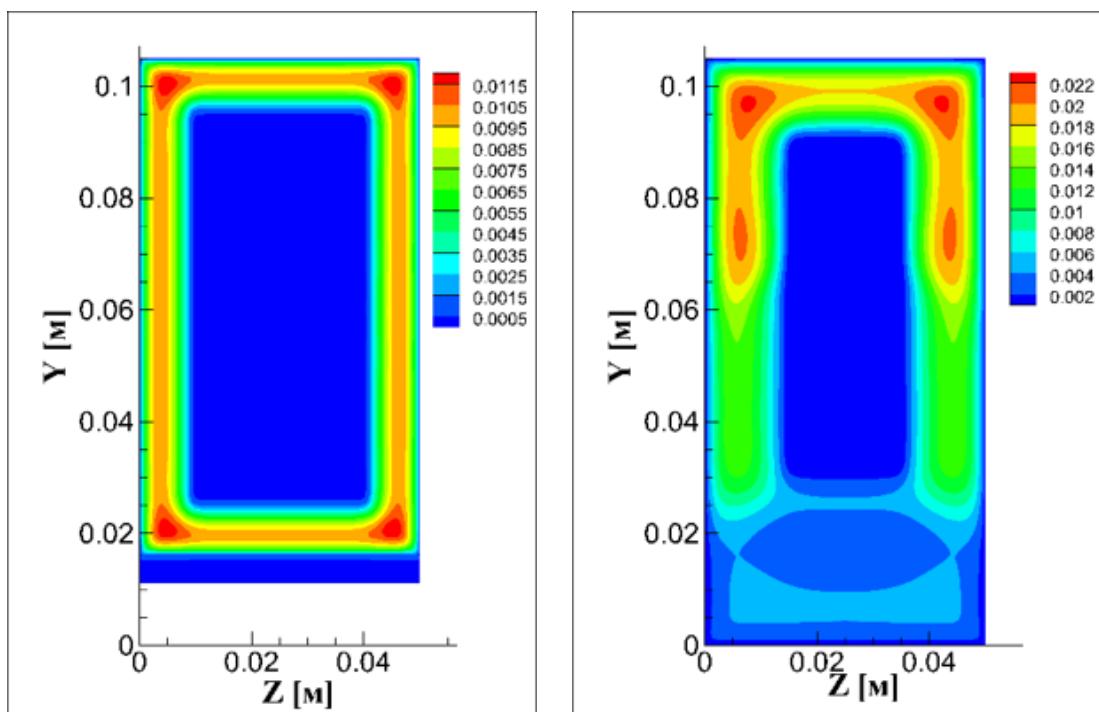


Рис. 104: Распределение турбулентной вязкости для задачи с горением во входном (слева) и выходном (справа) сечениях камеры сгорания. 3D RANS.

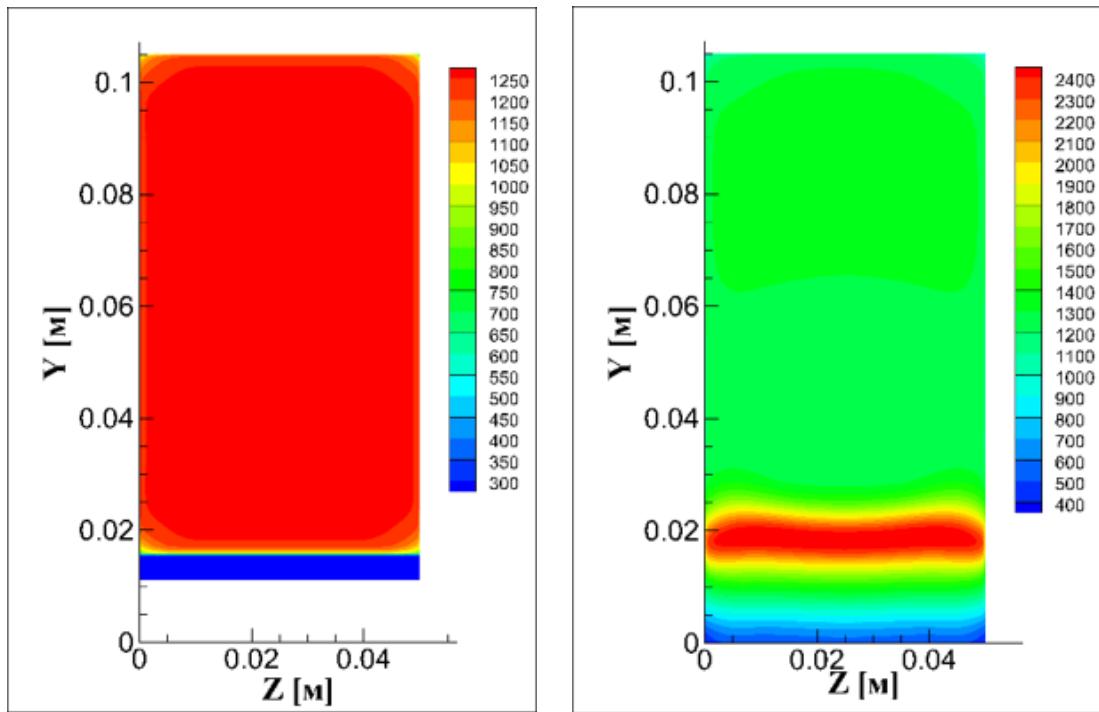


Рис. 105: Распределение статической температуры для задачи с горением во входном (слева) и выходном (справа) сечениях камеры сгорания. 3D RANS.

По данным, представленным на рисунках, можно сделать следующие заключения: так же, как и в задаче о чистом смешении, толщина пограничных слоев нарастает вдоль стенок камеры и вблизи выходного сечения область погранслоев занимает существенную часть площади поперечного сечения, оказывая критическое влияние на ход процессов смешения и, как следствие, горения. Рисунок 105 показывает, что зона пламени имеет сложную форму. Вблизи боковых стенок зона пламени становится уже ввиду оттока тепла в стенки, далее в области боковых пограничных слоев зона пламени расширяется так как в погранслоях процесс смешения протекает эффективнее. В ядре потока толщина зоны пламени снова падает из-за возросшей скорости потока и ухудшения смешения. В дополнение можно отметить, что в зоне пламени происходит размытие турбулентной вязкости.

Для IDDES расчета также были построены распределения в поперечных сечениях вдоль камеры. Визуализировали распределения статической температуры, а также отношения турбулентной вязкости к ламинарной, аналогично

рисунку 82 для задачи о смешении. Распределения представлены на рисунках 106-107 соответственно.

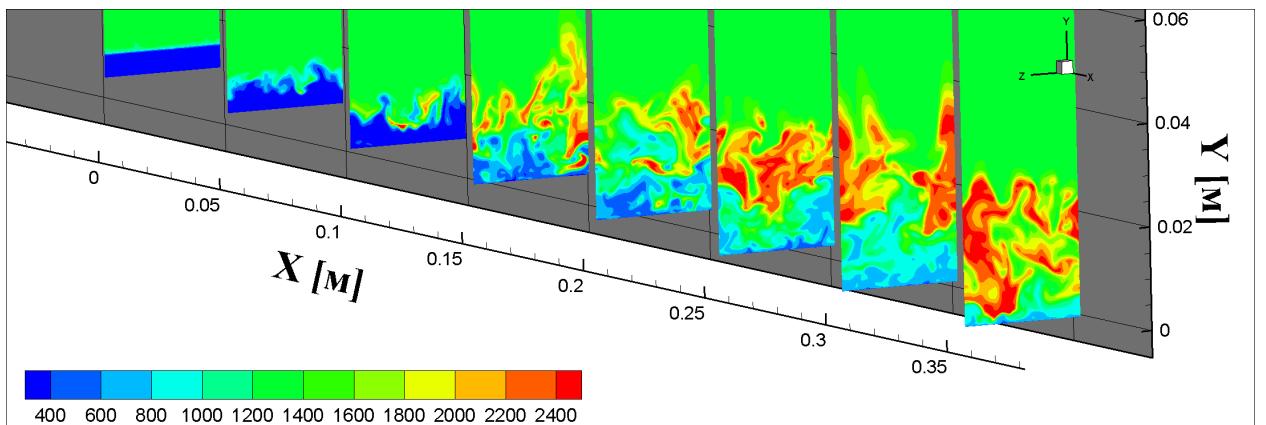


Рис. 106: Распределение статической температуры в поперечных сечениях камеры. 3D IDDES.

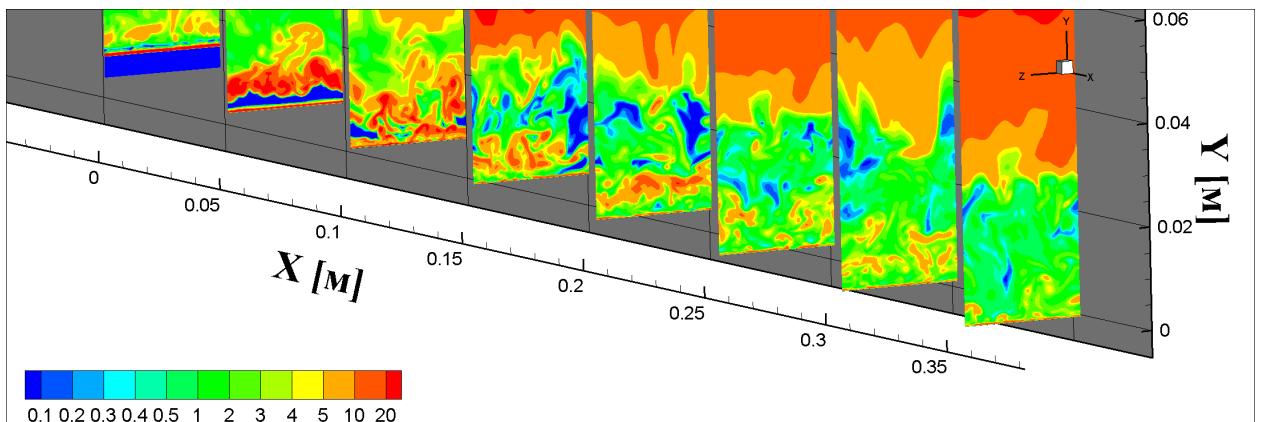


Рис. 107: Распределение отношения турбулентной вязкости к ламинарной в поперечных сечениях камеры для задачи о смешении с горением. 3D IDDES.

На рисунке 108 приводится визуализация турбулентных структур в IDDES расчете при помощи Q-критерия. Так же как в задаче о смешении изоповерхность соответствует значению $Q=2500$, а цветом отмечено распределение температуры.

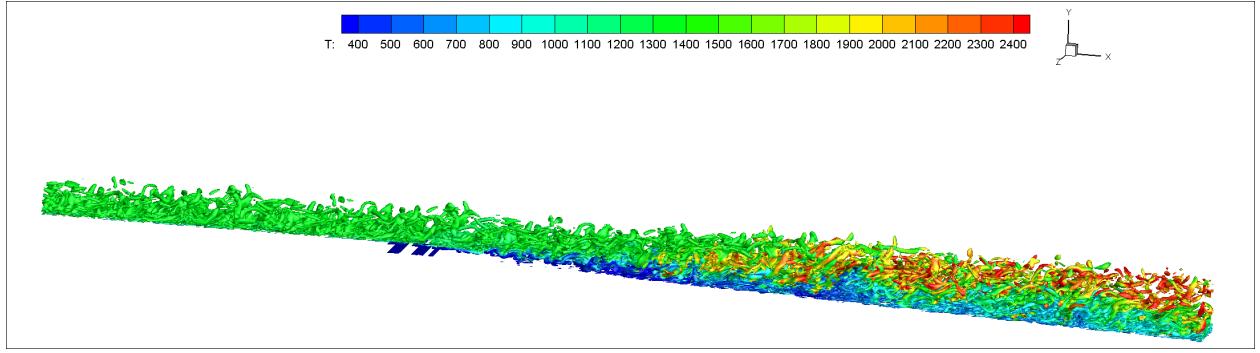


Рис. 108: Визуализация вихревых структур в задаче о смешении с горением с помощью Q-критерия.

Для данной постановки также были построены профили давления Пито и полной температуры во входном и выходном сечениях камеры для сравнения с экспериментальными [8] и расчетными [56, 57] данными. Для трехмерных расчетов профили строились вдоль центрального сечения камеры. Для получения средних по времени профилей параметров для IDDES расчета, выполнялось осреднение за период 2.0 мс. Образование выполнялось на величины $P_{Pitot,ref} = 17.1 \cdot 10^5$ Па и $T_{tot,ref} = 2276$ К. По горизонтальной оси откладывалось расстояние от нижней стенки камеры. Результаты сравнения приводятся на рисунках 109-112.

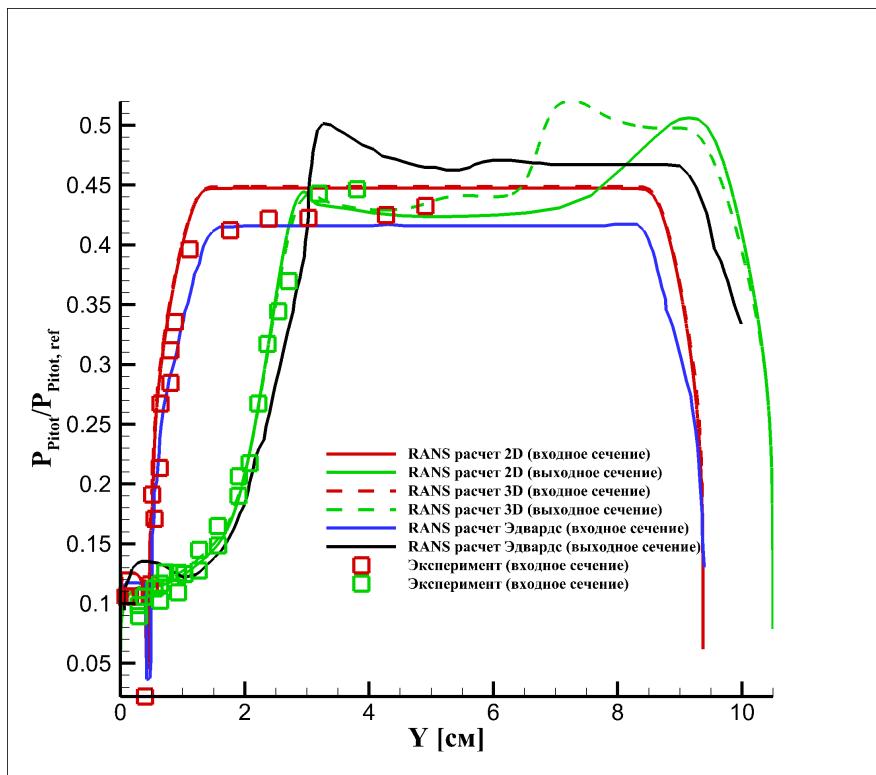


Рис. 109: Профили давления Пито во входном и выходном сечениях камеры для задачи с горением в сравнении с экспериментальными и расчетными данными. RANS расчеты.

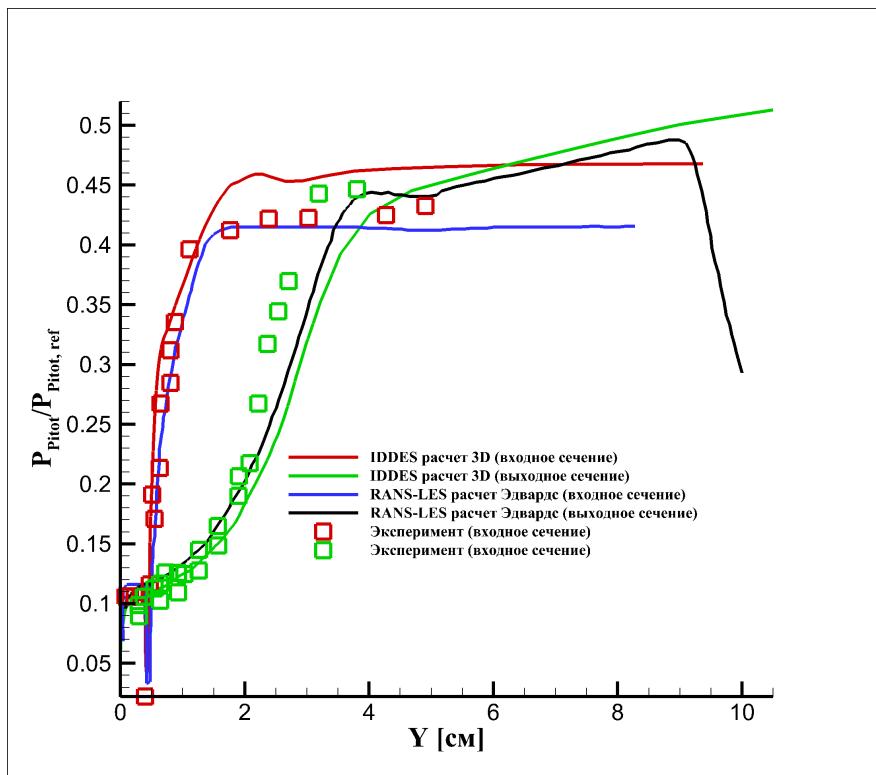


Рис. 110: Профили давления Пито во входном и выходном сечениях камеры для задачи с горением в сравнении с экспериментальными и расчетными данными. RANS-LES расчеты.

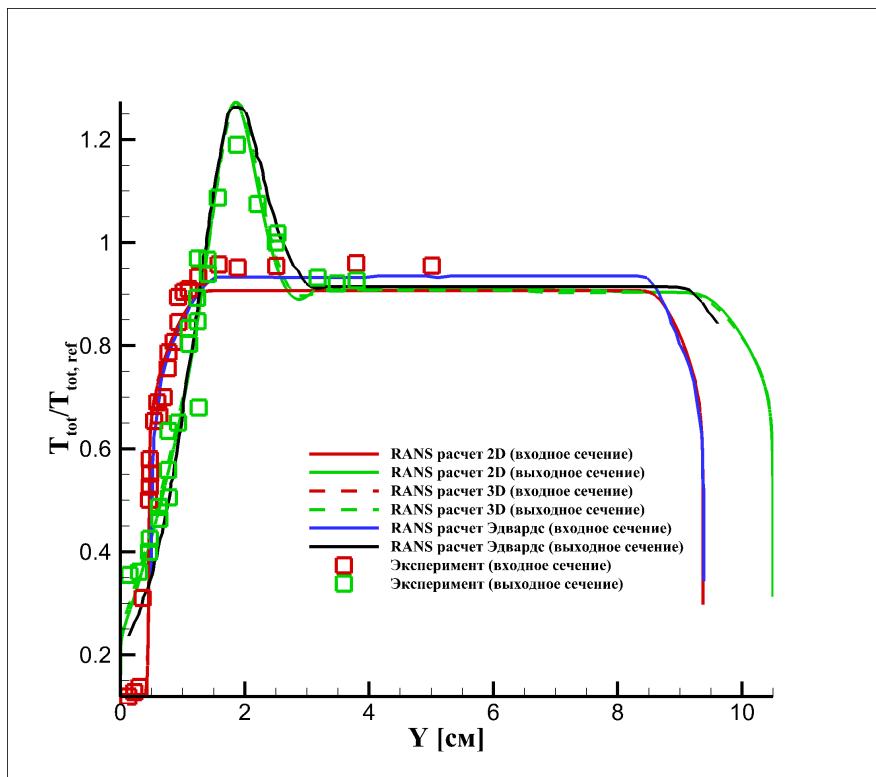


Рис. 111: Профили полной температуры во входном и выходном сечениях камеры для задачи с горением в сравнении с экспериментальными и расчетными данными. RANS расчеты.

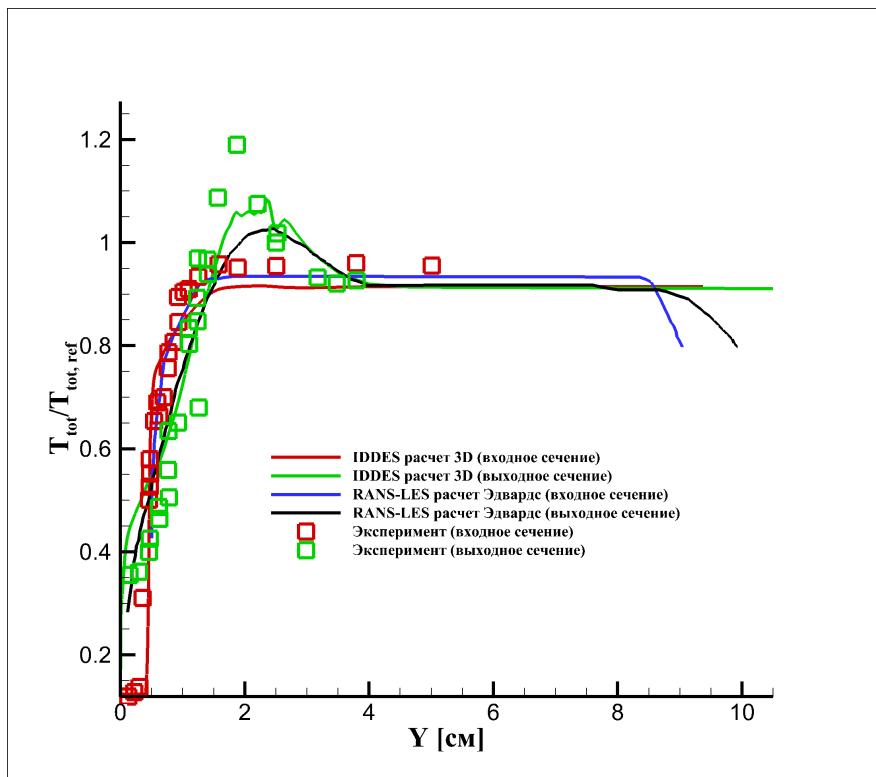


Рис. 112: Профили полной температуры во входном и выходном сечениях камеры для задачи с горением в сравнении с экспериментальными и расчетными данными. RANS-LES расчеты.

В выходном сечении аналогично первой постановке были построены профили мольных концентраций водорода и водяного пара в зоне смешения и зоне пламени. Сравнение с экспериментальными и расчетными данными показано на рисунках 113-114.

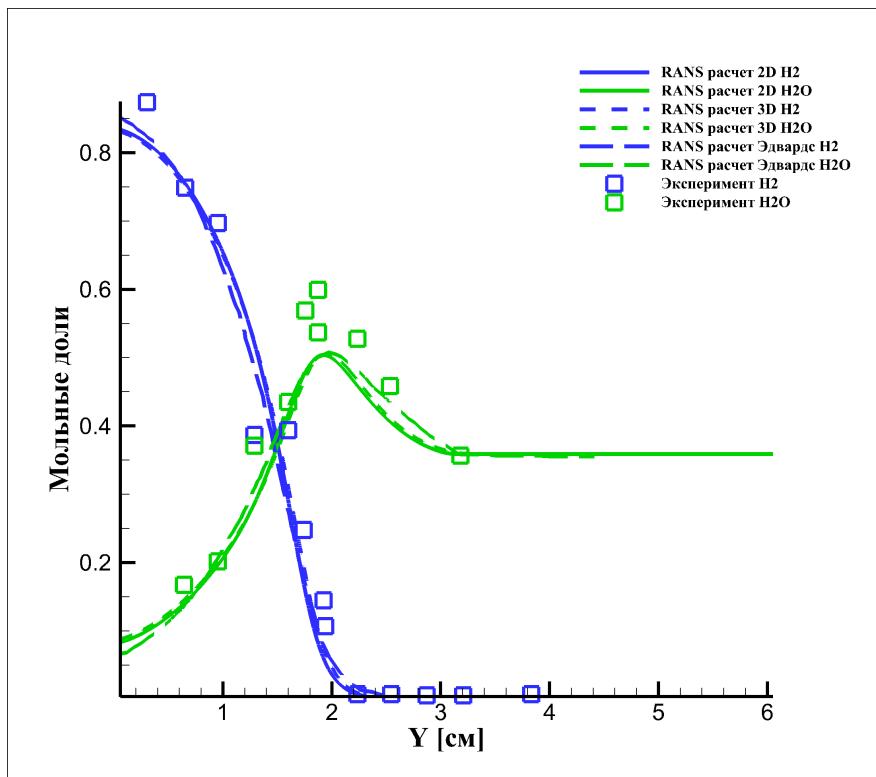


Рис. 113: Профили мольных долей в выходном сечении камеры для задачи с горением в сравнении с экспериментальными и расчетными данными. RANS расчеты.

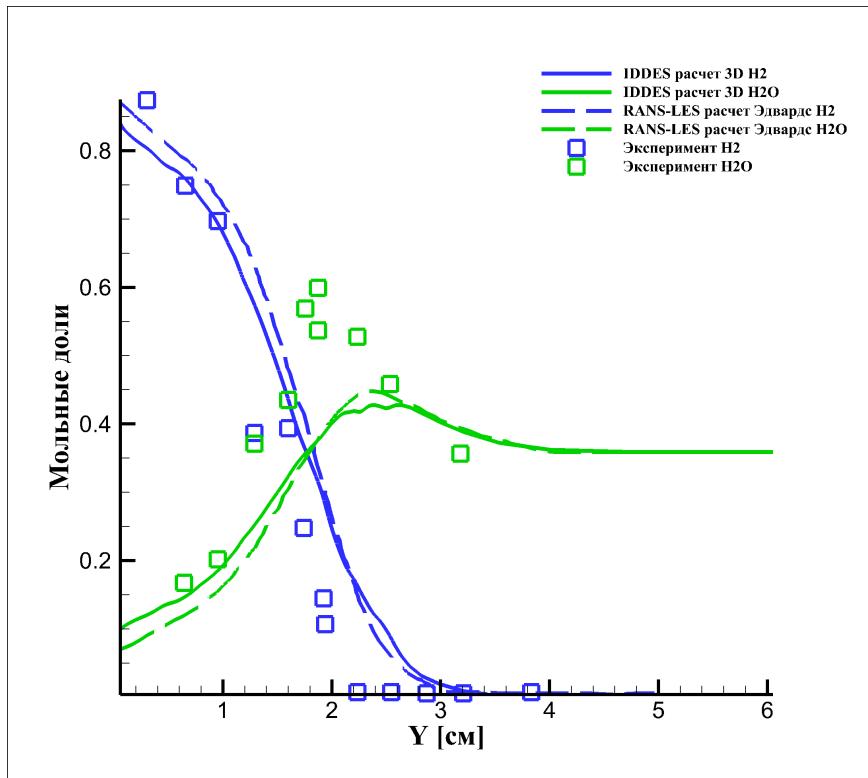


Рис. 114: Профили мольных долей в выходном сечении камеры для задачи с горением в сравнении с экспериментальными и расчетными данными.
 RANS-LES расчеты.

По результатам сравнения можно сделать заключение о хорошей корреляции полученных результатов с экспериментальными и расчетными данными. На рисунках 109-110 видно, что происходит некоторое завышение давления Пито в ядре канала на входе, что наблюдается как в RANS, так и в RANS-LES расчетах. В то же время на выходе из камеры получено хорошее соответствие эксперименту по всей высоте профиля для RANS расчетов. В RANS расчете [56] в свою очередь присутствует завышение давления Пито на выходе и имеется немонотонность вблизи нижней стенки. Так же, как и в случае задачи с чистым смешением, профили давления Пито для 2D и 3D RANS расчетов имеют небольшое различие в ядре течения, что обусловлено разным положением скачка (см. рисунок 96). В случае RANS-LES расчетов (110) расчетные профили несколько хуже соответствуют экспериментальным точкам, но хорошо коррелируют между собой. Профили полной температуры, полученные в RANS расчетах

и приведенные на рисунке 111, хорошо соответствуют как расчетам Эдвардса, так и экспериментальным точкам, однако, в полученных результатах пик в зоне пламени имеет меньшую ширину, а также область падения полной температуры над зоной пламени. Данное различие предположительно может быть определено различием в используемых расчетных сетках в области пламении, как следствие, особенностями процессов переноса. В гибридных расчетах (см. рис. 112) происходит занижение пика полной температуры в зоне пламени, что может свидетельствовать о сниженной полноте сгорания. Это подтверждается также сниженным пиком мольной концентрации водяного пара на рисунке 114.

Можно отметить, что результаты, полученные с использованием IDDES подхода, находятся в хорошем соответствии с расчетными результатами из [56, 57], что позволяет говорить о работе разработанной вычислительной модели в сверхзвуковом потоке неподготовленной смеси реагирующих газов на современном уровне.

Необходимо еще раз отметить, что для 3D расчетов профили приводятся вдоль центрального сечения камеры. Аналогичные профили, построенные вблизи стенок, будут отличаться от представленных. Для сравнения на рисунке 115 и рисунке 116 приводятся профили мольной доли водяного пара и температуры соответственно в трех вертикальных сечениях для 3D RANS расчета:

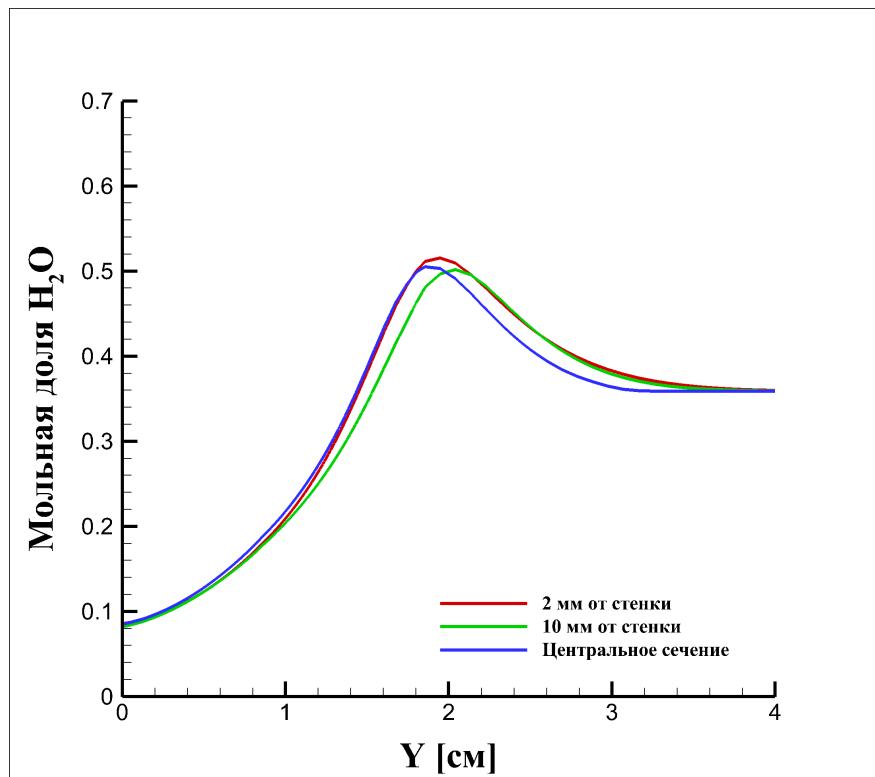


Рис. 115: Профили мольной доли водяного пара в выходном сечении на различном расстоянии от стенки для 3D RANS расчета.

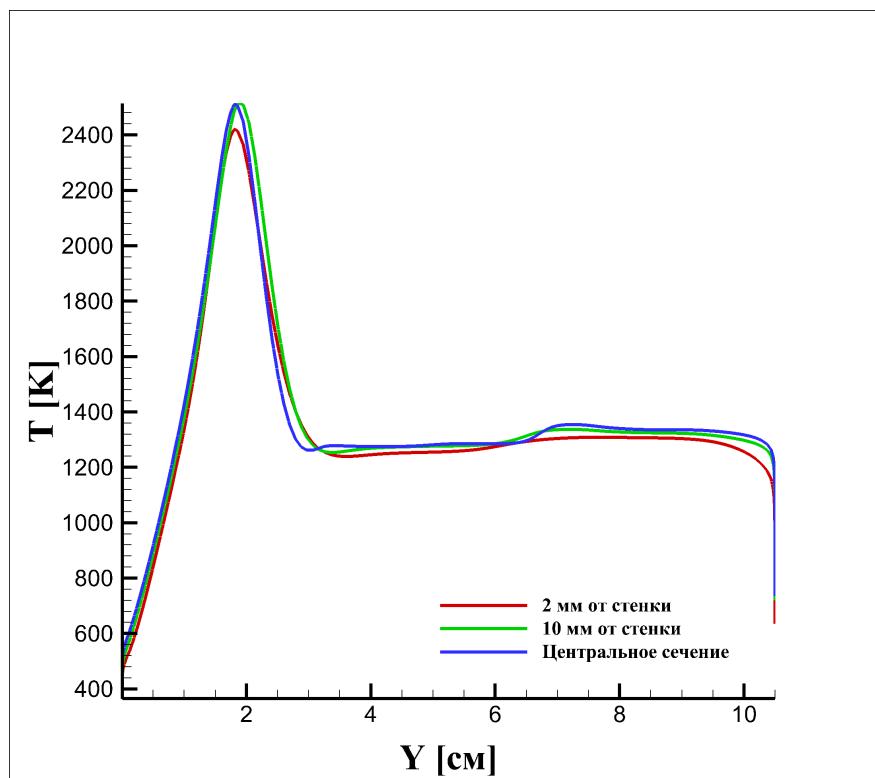


Рис. 116: Профили статической температуры в выходном сечении на различном расстоянии от стенки для 3D RANS расчета.

Для дополнительного анализа параметров потока были построены профили числа Маха и статической температуры в выходном сечении камеры и проведено сравнение с экспериментальными данными [8]. Результаты представлены на рисунках 117-118.

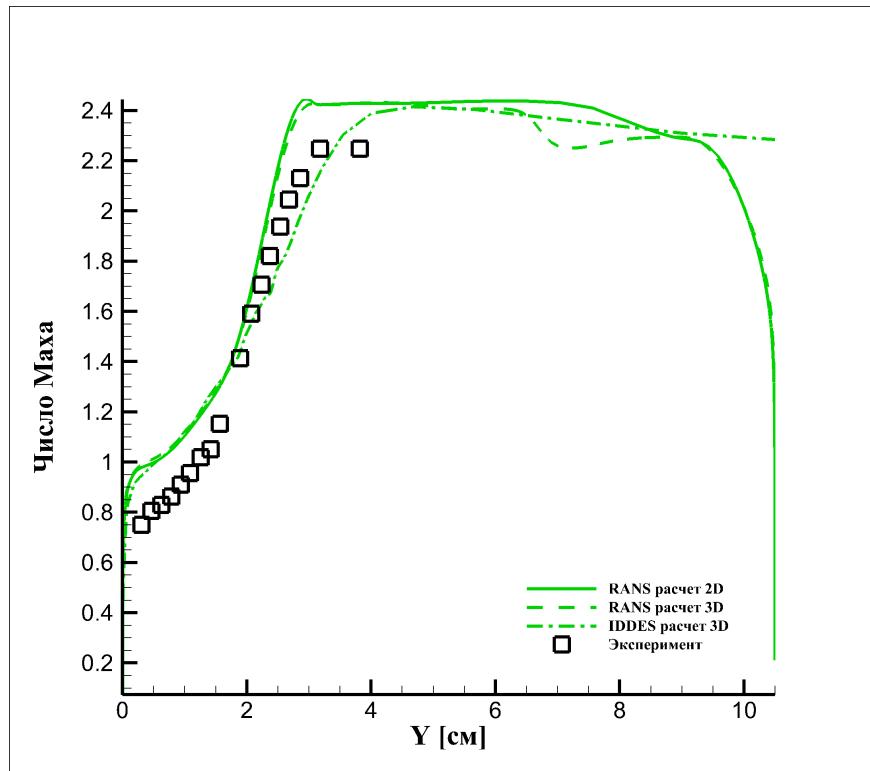


Рис. 117: Профили числа Маха в выходном сечении камеры в сравнении с экспериментальными данными.

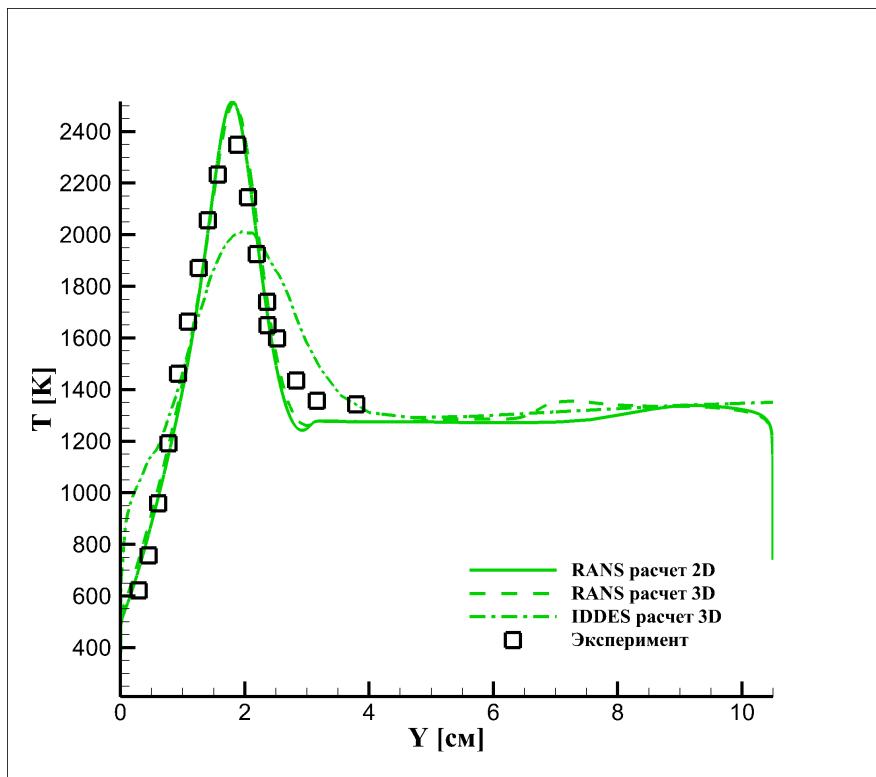


Рис. 118: Профиль статической температуры в выходном сечении камеры в сравнении с экспериментальными данными.

Как и в расчетах задачи о чистом смешении, число Маха превышает экспериментальные значения для всех расчетов, однако профиль статической температуры для RANS расчетов дает очень хорошее соответствие эксперименту. Высокая точность воспроизведения температурных профилей при моделировании подтверждает важность использования детального кинетического механизма, учитывающего возникновение промежуточных компонент и цепных реакций и верифицированного в широком диапазоне параметров газовой смеси. Сниженный пик профиля температуры для IDDES расчета также является следствием сниженной полноты сгорания, проявляющейся при LES расчетах на недостаточно подробных сетках.

По результатам вычислительного эксперимента по моделированию физико-химических процессов в камере сгорания Барроуса-Куркова можно сделать вывод, что предложенная вычислительная модель пригодна для моделирования смешения и горения в сверхзвуковых потоках и показывает хорошее совпадение

ние основных характеристик потока с экспериментальными и расчетными данными других авторов, при использовании RANS подхода. Несмотря на простоту устройства, модель турбулентности Спаларта-Аллмараса (SA) обеспечивает высокую точность результатов при расчете задач внутреннего обтекания, в частности при расчете течений внутри камер сгорания.

Заключение

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 давлений, температур и коэффициентов избытка топлива, что очень важно при моделировании реакций в предварительно неперемешанных смесях.
- Разработанная модель была реализована в виде вычислительных алгоритмов и программных модулей, которые были интегрированы в параллельный программный комплекс для моделирования пространственных течений по-

токов 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 походов 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 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.

Список литературы

- [1] Seleznev, R.K., S.T. Surzhikov, J.S. Shang. A review of the scramjet experimental data base // Progress in Aerospace Sciences. Vol 106. 2019. Pp. 43-70.
- [2] Cohen, L., R. Guile. Measurements in free jet mixing/combustion flows // 5th Propulsion Joint Specialist. AIAA-1969-538. 1969. 14 p.
- [3] Cohen, L., R. Guile. Measurements in free jet mixing/combustion flows // AIAA Journal 8. 1970. Pp. 1053-1061.
- [4] Evans, J., C. Schexnayder, H. Beach. Application of a Two-Dimensional Parabolic Computer Program to Prediction of Turbulent Reacting Flows // NASA Technical Paper 1169. 1978. 56 p.
- [5] Beach, H.L. A Study of Reacting Free and Ducted Hydrogen/Air Jets // NASA Technical Memorandum X-72678. 1975. 45 p.
- [6] Eggers, J.M. Turbulent Mixing of Coaxial Compressible Hydrogen-Air Jets // NASA TN D-6487. 1971. 57 p.
- [7] Burrows, M.C., and A.P. Kurkov. Supersonic Combustion of Hydrogen in a Vitiated Air Stream Using Stepped-wall Injection // NASA-TM-67840. 1971. 15 p.

- [8] Burrows, 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.
- [9] Cheng, T.S., J.A. Wehrmeyer, R.W. Pitz, O. Jarret jr., and G.B. Northam. Raman Measurement of Mixing and Finite-Rate Chemistry in a Supersonic Hydrogen-Air Diffusion Flame // Combustion and Flame 99. 1994. Pp. 157-173.
- [10] Cutler, A.D., A.A. Carty, S.E. Doerner, G.S. Diskin, J.P. Drummond. Supersonic Coaxial Jet Experiment for CFD Code Validation // AIAA Paper 99-3588. 1999. 13 p.
- [11] Cutler, A.D., G.S. Diskin, J.P. Drummond, J.A. White. Supersonic Coaxial Jet Experiment for Computer Fluid Dynamics Code Validation // AIAA Journal. Vol 44. № 3. 2006. Pp. 585-592.
- [12] Albegov, R.V., V.A. Vinogradov, G.G. Zhadan, S.A. Kobyzhskii. Experimental investigation of hydrogen combustion and supersonic cooling in an annular channel // Combust. Explos. Shock Waves 27. 1991. Pp. 24-29.
- [13] Vereschagin, K.A., V.V. Smirnov, O.M. Stelmakh, V.I. Fabelinsky, V.A. Sabelnikov, V.V. Ivanov, W. Clauss, M. Oschwald. Temperature measurements by coherent anti-Stokes Raman spectroscopy in hydrogen-fuelled scramjet combustor // Aero. Sci. Technol. 5. 2001. Pp. 347-355.
- [14] Волощенко, О.В., С.А. Зосимов, А.А. Николаев. Экспериментальное исследование процесса горения жидкого углеводородного топлива в плоском канале при сверхзвуковой скорости потока на входе // Модели и методы аэродинамики. М.: МЦНМО. 2002. 75 с.

- [15] ЦИАМ представил на МАКС-2015 «гиперэкспонат». [электронный ресурс]. URL: <http://www.ciam.ru/press-center/news/ciam-presented-at-the-maks-2015-hyperextend/>.
- [16] Steelant J., R. Varvill, C. Walton, S. Defoort, K. Hannemann, M. Marini. Achievements obtained for sustained hypersonic flight within the LAPCAT-II project // 20th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference. 2015. AIAA Paper 2015-2578. 15 p.
- [17] Talyzin, V.A., V.V. Vlasenko, O.V. Voloshenko, M.A. Ivakin. Experimental and 2.5D numerical investigation of the high-speed combustion chamber within the international HEXAFLY-INT project // 21st AIAA International Space Planes and Hypersonic Technologies Conference. 2017. P. 2326.
- [18] Ширяева, А.А. Моделирование высокоскоростных течений со смешанными режимами турбулентного горения на основе трехмерных уравнений Рейнольдса // Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. 2018. 217 с.
- [19] Frolov, S.M., V.S. Aksenov, V.S. Ivanov, I.O. Smamshin, A.E. Zangiev. Air-breathing pulsed detonation thrust module: Numerical simulations and firing tests // Aerospace Science and Technology. Vol 89. 2019. Pp. 275-287.
- [20] Фролов, С.М., В.С. Аксёнов, В.С. Иванов, И.О. Шамшин, С.А. Набатников. Бросковые испытания беспилотного летательного аппарата с прямоточным воздушно-реактивным импульсно-детонационным двигателем // Горение и взрыв. Т 12. № 1. 2019. С. 63-72.
- [21] Frolov, S.M., V.I. Zvegintsev, V.S. Ivanov, V.S. Aksenov, I.O. Shamshin, D.A. Vnuchkov, D.G. Nalivaichenko, A.A. Berlin, and V.M. Fomin. Continuous Detonation Combustion of Hydrogen: Results of Wind Tunnel Experiments // Fizika Gorenija i Vzryva. Vol 54. № 3. 2018. Pp. 116-123.

- [22] Ivanov, V.S., S.M. Frolov, A.E. Zangiev, V.I. Zvegintsev, I.O. Shamshin. Hydrogen fueled detonation ramjet: Conceptual design and test fires at Mach 1.5 and 2.0 // Aerospace Science and Technology. Vol 109. 106459. 2021. 12 p.
- [23] Сметанюк, В.А., И.А. Садыков, А.С. Силантьев, С.М. Фролов. Циклическая газодетонационная штамповка плоских корпусных деталей // VII Международная конференция «Лазерные, плазменные исследования и технологии» ЛаПлаз-2021: Сборник научных трудов. Ч 1. М.: НИЯУ МИФИ. 2021. С. 430-431.
- [24] Фролов, С.М. Газификация органических отходов ультраперегретым водяным паром и диоксидом углерода // Горение и взрыв. Т 14. № 3. 2021. С. 74–97.
- [25] Гарбарук, А.В., М.Х. Стрелец, А.К. Травин, М.Л. Шур. Современные подходы к моделированию турбулентности // Учебное пособие. Издательство Политехнического Института, Санкт-Петербург. 2016. 234 с.
- [26] Ishihara, T., Y. Kaneda, and J.C.R. Hunt. Thin Shear Layers in High Reynolds Number Turbulence – DNS Results // Springer 91. 2013. Pp. 895-929.
- [27] Рейнольдс, О. Динамическая теория движения несжимаемой жидкости и определение критерия // Проблемы турбулентности. - М.;Л.:ОНТИ. 1936. С. 135-227.
- [28] Spalart, P.R., and S.R. Allmaras. A one-equation turbulence model for aerodynamic flows // AIAA Paper 1992-0439. 1992. 22 p.
- [29] Menter, F.R., M. Kuntz, and R. Langtry. Ten Years of Industrial Experience with the SST Turbulence Model // Turbulence, Heat and Mass Transfer 4. ed: K. Hanjalic, Y. Nagano, and M. Tummers, Begell House, Inc. 2003. Pp. 625-632.

- [30] Buice, C.U., and J.K. Eaton. Experimental investigation of flow through an asymmetric plane diffuser // Center for Turbulence Research Annual Research Briefs. 1995. Pp. 117-120.
- [31] Garnier, E., N. Adams, and P. Sagaut. Large eddy simulation for compressible flows // Springer. 2009. 276 p.
- [32] Spalart, P.R., W.H. Jou, M.Kh. Strelets, S.R. Allmaras. Comments on the feasibility of LES for wings, and on a hybryd RANS/LES approach // Procedings of first AFOSR international conference in DNS/LES. 1997.
- [33] Baurle, R., S. Girimaji. Assumed PDF turbulence-chemistry closure with temperature-composition correlations // Combust. Flame 134. 2003. Pp. 131-148.
- [34] Deepu, M.N., S.S. Gokhale, S. Jayaraj. Numerical simulation of supersonic combustion using unstructured point implicit finite volume method // J. Combust. Soc. Jpn. 48. 2006. Pp. 187–197.
- [35] Wang, H., N. Qin, M. Sun, H. Wu, Z. Wang. A hybrid LES (Large Eddy Simulation)/assumed sub-grid PDF (Probability Density Function) model for supersonic turbulent combustion // Sci. China Technol. Sci. 54. 2011. Pp. 2694–2707.
- [36] Boivin, P., A. Dauptain, C. Jiménez, B. Cuenot. Simulation of a supersonic hydrogen-air autoignition-stabilized flame using reduced chemistry // Combust. Flame 159. 2012. Pp. 1779-1790.
- [37] Bouheraoua, L., P. Domingo, G. Ribert. Large-eddy simulation of a supersonic lifted jet flame: Analysis of the turbulent flame base // Combust. Flame 179. 2017. Pp. 199-218.

- [38] Gerlinger, P., H. Möbus , D. Brüggemann. An implicit multigrid method for turbulent combustion // J. Comput. Phys. 167. 2001. Pp. 247-276 .
- [39] Ebrahimi, H.B. CFD Validation For Scramjet Combustor and Nozzle Flows, Part I // AIAA-1993-1840. 1993. 17 p.
- [40] Choi, J., K.H. Kim, S.-H. Han. High resolution numerical study on the coaxial supersonic turbulent flame structures // 50th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference. AIAA-2014-3745. 2014. 10 p.
- [41] Evans, J.S., C.J. Schexnayder, Influence of chemical kinetics and unmixedness on burning in supersonic hydrogen flames // AIAA Journal 18. 1980. Pp. 188–193.
- [42] Ebrahimi, H.B. CFD Validation and Evaluation for Combustor and Nozzle Flow, Part II // AIAA-1994-0025. 1994. 16p.
- [43] Lankford, D.W., and C.C. Nelson. Application of the Wind Flow Solver to Chemically Reacting Flows // 40th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. Reno, NV. 2002. 10 p.
- [44] Engblom, W., Frate, F., and C. Nelson. Progress in Validation of Wind-US for Ramjet/Scramjet Combustion // AIAA-2005-1000. 2005. 18 p.
- [45] NRARC Alliance Verification and Validation Archive [электронный ресурс]. URL: <https://www.grc.nasa.gov/WWW/wind/valid/archive.html> (дата обращения 13.07.2022).
- [46] Keistler, P.G., R.L. Gaffney Jr., X. Xiao, and H.A. Hassan. Turbulence Modeling for Scramjet Applications // 35th AIAA Fluid Dynamics Conference and Exhibit. Toronto. 2005. 11 p.
- [47] Deepu, M.N., S.S. Gokhale, S. Jayaraj. Numerical modelling of scramjet combustor // Defence Science Journal. Vol 57. № 4. 2007. Pp. 367-379.

- [48] Xiao, X., H.A. Hassan, and R.A. Baurle. Modeling Scramjet Flows with Variable Turbulent Prandtl and Schmidt Numbers // AIAA Journal. Vol 45. № 6. 2007. 9 p.
- [49] Chandra Murty, M.S.R., R.D. Mishal and D. Chakraborty. Numerical Simulation of Supersonic Combustion with Parallel Injection of Hydrogen Fuel // Defence Science Journal. Vol 60. № 5. Pp. 465-475.
- [50] Surzhikov, S., R. Seleznev, P. Tretjakov, V. Zabaykin. Unsteady thermogasdynamic processes in scramjet combustion chamber with periodical input of cold air // 50th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference. 2014. 25 p.
- [51] Gao, Z., Ch. Jiang and Ch.-H. Lee. On the laminar finite rate model and flamelet model for supersonic turbulent combustion flows // International journal of hydrogen energy, 41. 2016. Pp. 13238-13253.
- [52] Hoste, J.J.O.E., S. Fechter, S.Karl, K. Hannemann. Study of a supersonic reacting wall jet with a variable turbulent Prandtl and Schmidt number approach // Aerospace Science and Technology. Vol 106. 106070. 2020. 12 p.
- [53] Surzhikov, S. О двумерном численном моделировании экспериментальных данных Берроуза-Куркова по горению водорода в сверхзвуковом потоке воздуха с использованием уравнений Навье-Стокса // Физико-Химическая кинетика в газовой динамике. Vol 22. № 4. 2021. 21 p.
- [54] Baurle, R.A., G.A. Alexopoulos, and H.A. Hassan. Assumed Joint Probability Density Function Approach for Supersonic Turbulent Combustion // Journal of Propulsion and Power. Vol 10. № 4. 1994. 13 p.
- [55] Vyasaprasath, K., Oh, S., Kim, K.-S., and J.-Y. Choi. Numerical Studies of Supersonic Planar Mixing and Turbulent Combustion using a Detached Eddy

Simulation (DES) Model // Int. J. Aeronautical and Space science. 16. 2015.
Pp. 560-570.

- [56] Edwards, 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.
- [57] Edwards, J.R., J.A. Boles, and R.A. Baurle. Large-eddy/ Reynolds-averaged Navier-Stokes simulation of a supersonic reacting wall jet // Combust. Flame 159. 2012. Pp. 1127-1138.
- [58] Choi, J., J.R. Edwards, and R.A. Baurle. Compressible Boundary Layer Predictions at High Reynolds Number using Hybrid LES/RANS Methods // AIAA Paper-2008-4175. 2009. 17 p.
- [59] Zhang, J-C., M. Sun, Z. Wang, H. Wang, C. Liu. Stabilization mechanisms of lifted flames in a supersonic stepped-wall jet combustor // Zhejiang Univ-Sci A (Appl Phys & Eng). Vol 22. № 4. 2021. Pp. 314-330.
- [60] Власенко, Б.Б., О.В. Волощенко, А.А. Николаев. Развитие течения в высокоскоростной камере сгорания при разных значениях коэффициента избытка воздуха // Горение и взрыв. Т 9. № 3. 2016. с. 47-56.
- [61] Jachimowski, C.J. An Analytical Study of the Hydrogen-Air Mechanism with Application to Scramjet Combustion // NASA Technical Paper 2791. 1988. 17 p.
- [62] Jachimowski, C.J. An analysis of combustion studies in shock expansion tunnels and reflected shock tunnels //NASA Technical Paper 3224. 1992. 14 p.
- [63] 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.

- [64] Соломатин Р.С., И.В. Семенов. Численное моделирование сверхзвукового смешения в камере сгорания Барроуса-Куркова с использование SA-RANS модели // Горение и взрыв, Т. 12. № 3. 2019. С. 69-77.
- [65] Соломатин Р.С., И.В. Семенов. Моделирование сверхзвукового смешения в камере сгорания Барроуса-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.
- [66] 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, no. 2. 2021. Pp. 101-115.
- [67] 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
- [68] 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.
- [69] 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.
- [70] Favre, A.J. The equations of compressible turbulent gases // Marceille Univercity Institute de Meanique Statustue de la Turbulence. 1965.
- [71] Allmaras, 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.

- [72] Smagorinsky J. General circulation experiments with the primitive equations. I. The basic experiment // Monthly Weather Review. v. 91. 1963. Pp 99-164.
- [73] Spalart, 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.
- [74] Shur, 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.
- [75] Zsély, I. Gy. et al. Comparison of the performance of several recent hydrogen combustion mechanisms // Proceedings of the European Combustion Meeting. 2013. 5 p.
- [76] Keromnes, 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.
- [77] Ansys ChemKin-Pro. Chemistry Simulation Software [электронный ресурс]: URL: <https://www.ansys.com/products/fluids/ansys-chemkin-pro>
- [78] Troe, J. The thermal dissociation/ recombination reaction of hydrogen peroxide. Analysis and representation of the temperature and pressure dependence over wide ranges // Combustion and Flame № 158. 2011. Pp. 594-601.
- [79] Burcat, A. and B. Ruscic. Third Millennium Ideal Gas and Condensed Phase Thermochemical Database for Combustion with updates from Active Thermochemical Tables. ANL-05/20 and TAE 960 Technion-IIT. Aerospace Engineering, and Argonne National Laboratory, Chemistry Division. 2005.

- [80] Van 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.
- [81] Anderson, W.K., J.L. Thomas and B. Van Leer. Comparison of Finite Volume Flux Vector Splittings for the Euler Equations. *AIAA Journal*, vol. 24, № 9. 1986. Pp. 1453–1460.
- [82] Van Leer, B., and Nishikawa H. Towards the Ultimate Understanding of MUSCL: Pitfalls in Achieving Third-Order Accuracy // *J. Computational Phys.* 2021. 30 p.
- [83] Men’shov, I.S., and Y. Nakamura. Hybrid explicit-implicit, unconditionally stable scheme for unsteady compressible flows // *AIAA Journal*, 42(3). 2004. Pp. 551-559.
- [84] Luo, H., J.D. Baum, and R. Lohner. An accurate, fast, matrix-free implicit method for computing unsteady flows on unstructured grids // *Computers and Fluids* 30. 2001. Pp. 137-159.
- [85] Men’shov, I.S., and Y. Nakamura. Implementation of the LU-SGS method for an arbitrary finite volume discretization // Proc. of 9th Conference on CFD. Tokyo. 1995. p. 123.
- [86] Men’shov, I.S., and Y. Nakamura. On implicit Godunov’s method with exactly linearized numerical flux // *Computers & Fluids* 29. 2000. Pp. 595-616.
- [87] Radhakrishnan, 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.
- [88] Хайпер, Э., и Г. Ваннер. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежёсткие задачи // Москва, издательство «Мир», 1990. 512 с.

- [89] Национальный открытый институт ИНТУИТ. Курс «Введение в вычислительную математику», лекция 10 «Численные методы решения жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений» [электронный ресурс]. URL: <https://intuit.ru/studies/courses/1012/168/lecture/4606?page=8>.
- [90] Годунов, С.К., А.В. Забродин, М.Я. Иванов и др. Численное решение многомерных задач газовой динамики // М.: Наука. 1976. 400 с.
- [91] Дерюгин, Ю.Н., Я.В. Емельянова, Р.Н. Жучков, А.А. Уткина. Применение схемы с гибридной диссипацией в решении задач вычислительной аэроакустики // Журнал вычислительной математики и математической физики. Т 58. № 9. 2018. С. 1426-1434.
- [92] Roe, P.L. Characteristic-based schemes for the Euler equations // Annu. Rev. Fluid Mech., 18. 1986. Pp. 337–365.
- [93] Kermani, M.J., A.G. Gerber and J.M. Stockie. Thermodynamically Based Moisture Prediction Using Roe's Scheme // 4th Conference of Iranian AeroSpace Society, Amir Kabir University of Technology, Tehran, Iran, January 27-29. 2003.
- [94] Huynh, H.T. Accurate upwind methods for the Euler equations // SIAM J. Numer. Anal. V. 32 No.5. 1995. Pp. 1565–1619.
- [95] LaSalle, D. and G. Karypis. Multi-Threaded Graph Partitioning. 27th IEEE International Parallel & Distributed processing Symposium. 2013. 12 p.
- [96] Semenov, I.V., and I. Akhmedyanov. Development of parallel LU-SGS algorithm for solution of multidimensional gas dynamics problems [in Russian] // Proceedings of 4th Siberian workshop for parallel and high-performance calculations (Tomsk, 9-11 October, 2007), edited by Prof. A.V. Strachenko. Tomsk: Deltaplan. 2008. Pp. 122-129.

- [97] Semenov, I. V., I. Akhmedyanov, A. Lebedeva, and P. Utkin. Three-dimensional numerical simulation of shock and detonation simulation waves propagation in tubes with curved walls // Sci. Tech. Energ. Mat. 72. 2011. Pp 116-122.
- [98] Mount, D.M., and S. Arya. ANN: A Library for Approximate Nearest Neighbor Searching [Электронный ресурс]. 2010. URL: <http://www.cs.umd.edu/~mount/ANN/> (дата обращения 13.07.2022).
- [99] Bezgin, L.V., V.I. Kopchenov, A.S. Sharipov, N.S. Titova and A.M. Starik. Evaluation of Prediction Ability of Detailed Reaction Mechanisms in the Combustion Performance in Hydrogen/Air Supersonic Flows // Combustion Science and Technology, 185:1, 2013. Pp. 62-94.
- [100] Schultz, E. and J. Shepherd. Validation of Detailed Reaction mechanisms for Detonation Simulation // Explosion Dynamics Laboratory report FM99-5, Graduate Aeronautical Laboratories, California Institute of Technology, Pasadena, CA 91125. 2000. 242 p.
- [101] Spalding, D.B. A single formula for the law of the wall // J. Appl. Mech. Vol. 28. 1961. Pp. 455-457.
- [102] Turbulence Modelling Resource of Langley Research Center [Электронный ресурс]. URL: <https://turbmodels.larc.nasa.gov> (дата обращения 13.07.2022).
- [103] Schoenherr, K. E. Resistance of flat surfaces moving through a fluid // Trans. SNAME. 40. 1932. Pp. 279-313.
- [104] Shu, C.-W. and S. Osher. Efficient Implementation of Essentially Non-oscillatory Shock-Capturing Schemes, II // J. Comput. Phys. 83. 1989. Pp. 32-78.

Приложение А

Таблица А.1: Коэффициенты методов Гира.

k	β	α_1	α_2	α_3	α_4	α_5	α_6
1	1	-1					
2	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{3}$	$-\frac{4}{3}$				
3	$\frac{6}{11}$	$-\frac{2}{11}$	$\frac{9}{11}$	$-\frac{18}{11}$			
4	$\frac{12}{25}$	$-\frac{3}{25}$	$\frac{16}{25}$	$-\frac{36}{25}$	$\frac{48}{25}$		
5	$\frac{60}{137}$	$-\frac{12}{137}$	$\frac{75}{137}$	$-\frac{20}{137}$	$\frac{300}{137}$	$-\frac{300}{137}$	
6	$\frac{600}{147}$	$\frac{10}{147}$	$-\frac{72}{147}$	$\frac{225}{147}$	$-\frac{400}{147}$	$\frac{450}{147}$	$-\frac{360}{147}$

Таблица А.2: Коэффициенты методов Гира в форме Нордсика.

m	l_0	l_1	l_2	l_3	l_4	l_5	l_6
1	1	1					
2	$\frac{2}{3}$	$\frac{3}{3}$	$\frac{1}{3}$				
3	$\frac{6}{11}$	$\frac{11}{11}$	$\frac{6}{11}$	$\frac{1}{11}$			
4	$\frac{24}{50}$	$\frac{50}{50}$	$\frac{35}{50}$	$\frac{10}{50}$	$\frac{1}{50}$		
5	$\frac{120}{274}$	$\frac{274}{274}$	$\frac{225}{274}$	$\frac{85}{274}$	$\frac{15}{274}$	$\frac{1}{274}$	
6	$\frac{720}{1764}$	$\frac{1764}{1764}$	$\frac{1624}{1764}$	$\frac{735}{1764}$	$\frac{175}{1764}$	$\frac{21}{1764}$	$\frac{1}{1764}$

Таблица A.3: Используемый детальный кинетический механизм.

#	Реакция	$A \left[(\text{см}^3/\text{моль})^{m-1} \text{ сек}^{-1} \right] *$	n	$E_a [\text{кал}/\text{моль}]$
1	$H + O_2 = O + OH$	$1.040e^{14}$	0.0	$1.529e^4$
2	$O + H_2 = H + OH$	$5.080e^4$	2.67	$6.292e^3$
3	$OH + H_2 = H + H_2O$	$4.380e^{13}$	0.0	$6.990e^3$
4	$O + H_2O = OH + OH$	$2.970e^6$	2.02	$1.340e^4$
5	$H_2 + M = H + H + M$ $\varepsilon_{H_2} = 2.5, \varepsilon_{H_2O} = 12$	$4.577e^{19}$	-1.4	$1.044e^5$
6	$O + O + M = O_2 + M$ $\varepsilon_{H_2} = 2.5, \varepsilon_{H_2O} = 12$	$6.165e^{15}$	-0.5	0.0
7	$H + O + M = OH + M$ $\varepsilon_{H_2} = 2.5, \varepsilon_{H_2O} = 12$	$4.714e^{18}$	-1.0	0.0
8	$H + OH + M = H_2O + M$ $\varepsilon_{H_2} = 0.73, \varepsilon_{H_2O} = 3.65$	$3.500e^{22}$	-2.0	0.0
9	$H + O_2(+M) = HO_2(+M)$ low pressure limit $\varepsilon_{H_2} = 1.3, \varepsilon_{H_2O} = 10$	$4.650e^{12}$ $1.737e^{19}$	0.44 -1.23	0.0 0.0
10	$H_2 + O_2 = H + HO_2$	$5.176e^5$	2.43	$5.350e^4$

11	$HO_2 + H = OH + OH$		$7.079e^{13}$	0.0	$2.950e^2$
12	$HO_2 + O = OH + O_2$		$3.250e^{13}$	0.0	0.0
13	$HO_2 + OH = H_2O + O_2$		$2.456e^{13}$	0.0	$-4.970e^2$
14	$HO_2 + HO_2 = H_2O_2 + O_2$		$1.300e^{11}$	0.0	$-1.630e^3$
15	$HO_2 + HO_2 = H_2O_2 + O_2$		$3.658e^{14}$	0.0	$1.200e^4$
16	$H_2O_2(+M) = OH + OH(+M)$ low pressure limit $\varepsilon_{H_2} = 3.7, \varepsilon_{N_2} = 1.5, \varepsilon_{O_2} = 1.2$ $\varepsilon_{H_2O_2} = 7.7$		$2.000e^{12}$ $2.490e^{24}$	0.9 -2.3	$4.875e^4$ $4.875e^4$
17	$H_2O_2(+H_2O) = OH + OH(+H_2O)$ low pressure limit		$2.000e^{12}$ $1.865e^{25}$	0.9 -2.3	$4.875e^4$ $4.875e^4$
18	$H_2O_2 + H = H_2O + OH$		$2.410e^{13}$	0.0	$3.970e^3$
19	$H_2O_2 + H = H_2 + HO_2$		$2.150e^{10}$	1.0	$6.000e^3$
20	$H_2O_2 + O = OH + HO_2$		$9.550e^6$	2.0	$3.970e^3$
21	$H_2O_2 + OH = H_2O + HO_2$		$1.740e^{12}$	0.0	$3.180e^2$
22	$H_2O_2 + OH = H_2O + HO_2$		$7.590e^{13}$	0.0	$7.269e^3$

*Размерность предэкспонента A зависит от порядка реакции m .