

ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА СВЕРХЗВУКОВЫХ ТУРБУЛЕНТНЫХ ТЕЧЕНИЙ С ХИМИЧЕСКИМИ РЕАКЦИЯМИ

БЫКОВ Леонид Владимирович, заведующий учебной лабораторией Московского авиационного института (государственного технического университета).
Тел. 8-903-132-19-09, e-mail: kowl@mail.ru

BYKOV L.V., Moscow Aviation Institute (State University of Aerospace Technologies), Head of University Laboratory.
Tel. 8-903-132-19-09, e-mail: kowl@mail.ru

МОЛЧАНОВ Александр Михайлович, доцент Московского авиационного института (государственного технического университета).
Тел. 8-916-455-5942, e-mail: alexmol_2000@mail.ru

MOLCHANOV A.M, PhD - Moscow Aviation Institute (State University of Aerospace Technologies), associate professor.
Tel. 8-916-455-5942, e-mail: alexmol_2000@mail.ru

ЯНЫШЕВ Дмитрий Сергеевич, студент Московского авиационного института (государственного технического университета).
E-mail: dyanishev@list.ru

YANYSHEV D.S. Moscow Aviation Institute (State University of Aerospace Technologies), student.
E-mail: dyanishev@list.ru

Разработан численный метод для расчета высокоскоростных турбулентных течений газа, в котором протекают неравновесные химические реакции. Используется полная система уравнений Навье–Стокса (Рейнольдса—Фавра). При численном моделировании используется неявная схема и решается полностью связанная система, включающая все уравнения переноса. Для представления конвективных потоков используется модифицированное расщепление Стегера—Уорминга. Источники в уравнениях химических компонентов представлены в неявной форме.

The numerical method for high-speed turbulent gas flows with non-equilibrium chemical reactions has been developed. The full Navier–Stokes system (with Reynolds–Favre averaging) is being used. The system is solved using the fully-coupled implicit numerical approach. The modified Steger–Warming split method is used for convective flux treatment. Sources in the reaction equations are presented in the implicit form.

Ключевые слова: численные методы, динамика жидкости и газа, сверхзвуковые скорости, химические реакции.

Key words: numerical methods, fluid dynamics, supersonic flow, chemical reactions.

1. Введение

Необходимость разработки эффективных численных методов для расчета химически реагирующих сверхзвуковых течений объясняется актуальностью большого круга задач авиационной и ракетно-космической техники. Вот далеко не полный список таких задач: описание течения в прямооточных двигателях со сверхзвуковым горением; взаимодействие выхлопных струй ракетных двигателей с атмосферой воздуха; процессы в камере сгорания и сопле ракетного двигателя; натекание высокоскоростного потока на переднюю часть летательного аппарата при входе в атмосферу.

Численное моделирование этих течений представляет весьма сложную проблему. Наряду с волновыми процессами, скачками уплотнения, вязкими эффектами и процессами смешения, они включают сложную химическую кинетику, диффузионные процессы, процессы существенного тепловыделения за счет химических реакций. При больших скоростях потока характерное газодинамическое время может иметь такой же порядок, как характерное время химических реакций. Это приводит к неравновесности химических реакций и к необходимости решать все уравнения, описывающие тече-

ние, совместно. При численном решении системы уравнений, описывающих течение химически реагирующей смеси газов, возникает серьезная проблема — жесткость системы, связанная с тем, что характерные времена различных химических реакций могут на много порядков отличаться друг от друга и, соответственно, от характерного газодинамического времени.

Решение возникающей системы связано с многократным обращением матриц очень большого размера и требует огромных компьютерных ресурсов.

Например, при описании горения углеводородов в самом простом случае число уравнений переноса равно 12. Если число ячеек по продольной оси равно N_x , а по поперечной оси — N_y , то размер матрицы системы составит

$$(12 \times N_x \times N_y) \times (12 \times N_x \times N_y).$$

Решение такой системы на каждом шаге по времени представляет собой весьма ресурсоемкую задачу.

В данной работе решается полностью связанная система уравнений (fully coupled equation set). Используется метод факторизации, описанный в работах Маккормака—Пуллиама [7] и Бардина—Ломбарда [8], который позволяет заменить решение большой системы повторным обращением блочных трехдиагональных матриц. Конвективные и диффузионные потоки, а также химические источники представлены в неявной форме, что позволяет избежать проблемы жесткости и получить устойчивое решение при очень больших шагах по времени. При использовании метода векторной прогонки для обращения матриц используется дополнительное разложение на блоки.

2. Система уравнений двумерного турбулентного течения химически реагирующего газа

Система осредненных по Фавру уравнений с разделением на конвективные и вязкие потоки:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F_C}{\partial x} + \frac{\partial G_C}{\partial y} + \frac{\omega}{y} H_C + \frac{\partial F_V}{\partial x} + \frac{\partial G_V}{\partial y} + \frac{\omega}{y} H_V = S, \quad (2.1)$$

где $\omega = 0$ в случае плоского течения в декартовой системе координат (x, y) , $\omega = 1$ в случае осесимметричного течения в цилиндрической системе координат (x, y) ;

$$U = [\rho, \rho u, \rho v, \rho E, \rho Y_1, \rho Y_2, \dots, \rho Y_{Nc-1}]^T; \quad (2.2)$$

$$F_C = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ u(\rho E + p) \\ \rho u Y_1 \\ \rho u Y_2 \\ \vdots \\ \rho u Y_{Nc-1} \end{bmatrix}; \quad G_C = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho v^2 + p \\ \rho v u \\ v(\rho E + p) \\ \rho v Y_1 \\ \rho v Y_2 \\ \vdots \\ \rho v Y_{Nc-1} \end{bmatrix}; \quad H_C = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 \\ v(\rho E + p) \\ \rho v Y_1 \\ \rho v Y_2 \\ \vdots \\ \rho v Y_{Nc-1} \end{bmatrix}. \quad (2.3)$$

$$F_V = \begin{bmatrix} 0 \\ -T_{xx} \\ -T_{yx} \\ Q_x - uT_{xx} - vT_{yx} \\ J_{1,x} \\ J_{2,x} \\ \vdots \\ J_{Nc-1,x} \end{bmatrix}; \quad G_V = \begin{bmatrix} 0 \\ -T_{yx} \\ -T_{yy} \\ Q_y - uT_{yx} - vT_{yy} \\ J_{1,y} \\ J_{2,y} \\ \vdots \\ J_{Nc-1,y} \end{bmatrix}; \quad (2.4)$$

$$H_V = \begin{bmatrix} 0 \\ -T_{yx} \\ -T_{yy} + T_{\theta\theta} \\ Q_y - uT_{yx} - vT_{yy} \\ J_{1,y} \\ J_{2,y} \\ \vdots \\ J_{Nc-1,y} \end{bmatrix}.$$

Вязкие (диффузионные) потоки моделируются следующим образом:

$$\begin{aligned} T_{xx} &\equiv \tau_{xx} - \overline{\rho u'^2} = \\ &= \frac{2\mu_{ef}}{3} \left[2 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\omega}{y} v \right] - \frac{2}{3} \rho K, \\ T_{yy} &\equiv \tau_{yy} - \overline{\rho v'^2} = \\ &= \frac{2\mu_{ef}}{3} \left[-\frac{\partial u}{\partial x} + 2 \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\omega}{y} v \right] - \frac{2}{3} \rho K, \\ T_{xy} &\equiv \tau_{xy} - \overline{\rho u'v'} = \mu_{ef} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \\ T_{\theta\theta} &\equiv \tau_{\theta\theta} - \overline{\rho w'^2} = \\ &= \frac{2}{3} \mu_{ef} \left(-\frac{\partial u}{\partial x} + 2 \frac{\omega}{y} v - \frac{\partial v}{\partial y} \right) - \frac{2}{3} \rho K, \end{aligned} \quad (2.5)$$

$$Q_x \equiv q_x + \overline{\rho u'' h''} = -\frac{\mu_{ef}}{\text{Pr}_{ef}} \frac{\partial h}{\partial x};$$

$$Q_y \equiv q_y + \overline{\rho v'' h''} = -\frac{\mu_{ef}}{\text{Pr}_{ef}} \frac{\partial h}{\partial y}; \quad (2.6)$$

$$J_{I,x} \equiv j_{I,x} + \overline{\rho u'' Y_I''} = -\frac{\mu_{ef}}{\text{Pr}_{ef}} \frac{\partial Y_I}{\partial x};$$

$$J_{I,y} \equiv j_{I,y} + \overline{\rho v'' Y_I''} = -\frac{\mu_{ef}}{\text{Pr}_{ef}} \frac{\partial Y_I}{\partial y}. \quad (2.7)$$

Предполагается, что $Sc_{ef} = \text{Pr}_{ef}$.

Используются следующие обозначения: ρ — плотность, $\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$; u, v — компоненты скорости, $\frac{\text{м}}{\text{с}}$;

E — полная внутренняя энергия, $\frac{\text{МДж}}{\text{кг}}$; p — статическое давление, Па; Y_I — массовая доля компонента I ; N_C — число компонентов газовой смеси;

S_I — скорость образования компонента I , $\frac{\text{кг}}{\text{м}^3 \cdot \text{с}}$.

Компонент N_C определяется из соотношения

$$\sum_1^{N_C} Y_I = 1. \quad (2.8)$$

Полная внутренняя энергия и полная энтальпия определяются соотношениями:

$$E = H - \frac{p}{\rho}; \quad (2.9)$$

$$H = \sum_{I=1}^{N_C} h_I Y_I + \frac{1}{2}(u^2 + v^2). \quad (2.10)$$

Рассматривается термически совершенный газ, для которого принимается, что все моды внутренней энергии молекулы находятся в равновесии. Для такого газа уравнение состояния имеет вид

$$p = \rho R_\Sigma T, \quad (2.11)$$

где T — температура газовой смеси; R_Σ — газовая постоянная смеси:

$$R_\Sigma = R_{un} \sum_{I=1}^{N_C} \frac{Y_I}{W_I}, \quad (2.12)$$

$R_{un} = 8314,41 \frac{\text{Дж}}{\text{кмоль} \cdot \text{К}}$ — универсальная газовая

постоянная; W_I — молекулярная масса компонента I , $\frac{\text{кг}}{\text{кмоль}}$.

Внутренняя энергия e и энтальпия h газовой смеси могут быть выражены через энтальпии компонентов:

$$e = E - \frac{1}{2}(u^2 + v^2) = \sum_{I=1}^{N_C} h_I Y_I - R_{un} \sum_{I=1}^{N_C} \frac{Y_I}{W_I} T = \sum_{I=1}^{N_C} \left(h_I - \frac{R_{un} T}{W_I} \right) Y_I; \quad (2.13)$$

$$h = H - \frac{1}{2}(u^2 + v^2) = \sum_{I=1}^{N_C} h_I Y_I. \quad (2.14)$$

Для термически совершенного газа теплоемкости при постоянном давлении и при постоянном объеме являются функциями температуры. Для расчета энтальпий компонентов используются формулы вида

$$h_I = \frac{R_{un}}{W_I} \times \left(a_{1,I} T + \frac{a_{2,I}}{2} T^2 + \frac{a_{3,I}}{3} T^3 + \frac{a_{4,I}}{4} T^4 + \frac{a_{5,I}}{5} T^5 + a_{6,I} \right), \quad (2.15)$$

где $a_{k,I}$ — табличные коэффициенты [1].

Значения переносных характеристик определяются формулами

$$\mu_{ef} = \mu + \mu_T, \quad \frac{\mu_{ef}}{\text{Pr}_{ef}} = \frac{\mu}{\text{Pr}} + \frac{\mu_T}{\text{Pr}_T}, \quad (2.16)$$

где μ, Pr — коэффициент динамической вязкости и число Прандтля соответственно;

μ_T, Pr_T — коэффициент турбулентной вязкости и турбулентное число Прандтля соответственно.

Для моделирования турбулентных характеристик использовалась модель [2], в которой учитываются поправки на высокоскоростную сжимаемость.

3. Преобразование координат

Введем новые координаты:

$$\begin{aligned} \xi &= \xi(x, y); \\ \eta &= \eta(x, y). \end{aligned} \quad (3.1)$$

Якобиан преобразования равен

$$J = \det \begin{pmatrix} \frac{\partial(\xi, \eta)}{\partial(x, y)} \end{pmatrix} = \begin{vmatrix} \frac{\partial \xi}{\partial x} & \frac{\partial \xi}{\partial y} \\ \frac{\partial \eta}{\partial x} & \frac{\partial \eta}{\partial y} \end{vmatrix} = \xi_x \eta_y - \xi_y \eta_x =$$

$$= \left[\det \begin{pmatrix} \frac{\partial(x, y)}{\partial(\xi, \eta)} \end{pmatrix} \right]^{-1} = \frac{1}{x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi}. \quad (3.2)$$

Если для упрощения записи соединить конвективные и диффузионные потоки

$$F = F_C + F_V; \quad G = G_C + G_V; \quad H = H_C + H_V, \quad (3.3)$$

то в новой системе координат система имеет вид

$$\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{F}}{\partial \xi} + \frac{\partial \bar{G}}{\partial \eta} + \frac{\omega}{y} \bar{H} = \bar{S}, \quad (3.4)$$

где

$$\bar{U} = J^{-1}U; \quad \bar{F} = J^{-1}(\xi_x F + \xi_y G);$$

$$\bar{G} = J^{-1}(\eta_x F + \eta_y G); \quad \bar{H} = J^{-1}H; \quad \bar{S} = J^{-1}S. \quad (3.5)$$

4. Конечно-объемная аппроксимация

Основная система уравнений может быть записана в интегральной форме для любого контрольного объема V с поверхностью S :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V U dV + \int_S \bar{F} \cdot \bar{n} dS = \int_V D dV, \quad (4.1)$$

где \bar{n} — единичный вектор, направленный наружу по нормали к поверхности к контрольному объему; $\bar{n} dS$ — векторный элемент поверхности с нормалью \bar{n} ; \bar{F} — вектор вязких и невязких потоков консервативной величины U , проходящих через поверхность контрольного объема; D — источники всех типов.

В данной работе и декартова, и цилиндрическая системы преобразованы в прямоугольную систему координат (ξ, η) и в качестве контрольного объема рассматривается ячейка прямоугольной формы $(\Delta \xi, \Delta \eta)$. Интегрирование уравнения по такому объему дает следующее:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint \bar{U} dV + \iint (\bar{F}_{i+1/2} - \bar{F}_{i-1/2}) \Delta \eta +$$

$$+ \iint (\bar{G}_{j+1/2} - \bar{G}_{j-1/2}) \Delta \xi + \iiint \frac{\omega}{y} \bar{H} dV = \iiint \bar{S} dV. \quad (4.2)$$

Индексы i, j нумеруют ячейку по осям ξ и η

соответственно. Векторы \bar{U} , $\frac{\omega}{y} \bar{H}$ и \bar{S} задаются в центре ячейки, а потоки — на соответствующих границах ячейки, поэтому они имеют нецелочисленные индексы. При этом считается, что каждый поток постоянен по всей грани. В этом случае уравнение принимает вид

$$\left(\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} \right)_{i,j} + \frac{\bar{F}_{i+1/2,j} - \bar{F}_{i-1/2,j}}{\Delta \xi} +$$

$$+ \frac{\bar{G}_{i,j+1/2} - \bar{G}_{i,j-1/2}}{\Delta \eta} + \frac{\omega}{y} \bar{H}_{i,j} = \bar{S}_{i,j}. \quad (4.3)$$

Это уравнение является основой для методов численного решения уравнений Навье—Стокса.

Обозначим через $\delta \bar{U}^{n+1}$ приращения вектора \bar{U} при переходе от n -го шага по времени к $(n+1)$ -му шагу:

$$\delta \bar{U}^{n+1} = \bar{U}^{n+1} - \bar{U}^n. \quad (4.4)$$

Необходимо определить \bar{U}^{n+1} по известным значениям \bar{U}^n .

Входящие в уравнение потоки представляются в неявной форме:

$$\bar{F} = \alpha \bar{F}^{n+1} + (1 - \alpha) \bar{F}^n; \quad \bar{G} = \alpha \bar{G}^{n+1} + (1 - \alpha) \bar{G}^n;$$

$$\bar{H} = \alpha \bar{H}^{n+1} + (1 - \alpha) \bar{H}^n. \quad (4.5)$$

Здесь α — параметр, характеризующий порядок точности представления производной по времени. Если $\alpha = 0,5$, порядок равен 2 и схема подобна схеме Кранка—Николсона; при $\alpha = 1$ схема получается чисто неявная; значение $\alpha > 1$ дает завышенную релаксацию, но это может улучшать сходимость метода.

С помощью разложения Тейлора выражаем потоки на $(n+1)$ -м шаге через потоки на n -м шаге и приращение $\delta \bar{U}^{n+1}$:

$$\bar{F}^{n+1} = \bar{F}^n + \left(\frac{\partial \bar{F}}{\partial \bar{U}} \right)^n \delta \bar{U}^{n+1};$$

$$\bar{G}^{n+1} = \bar{G}^n + \left(\frac{\partial \bar{G}}{\partial \bar{U}} \right)^n \delta \bar{U}^{n+1};$$

$$\bar{H}^{n+1} = \bar{H}^n + \left(\frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{U}} \right)^n \delta \bar{U}^{n+1}; \quad (4.6)$$

$$\bar{S}^{n+1} = \bar{S}^n + \left(\frac{\partial \bar{S}}{\partial \bar{U}} \right)^n \delta \bar{U}^{n+1}.$$

Матрицы, входящие в (4.6), имеет смысл моделировать отдельно для конвекции и диффузии.

Введем обозначения:

$$A = \left(\frac{\partial \overline{F_C}}{\partial \overline{U}} \right)^n; \quad B = \left(\frac{\partial \overline{G_C}}{\partial \overline{U}} \right)^n; \quad C = \left(\frac{\partial \overline{H_C}}{\partial \overline{U}} \right)^n. \quad (4.7)$$

Как известно, простое представление конвективных на границах контрольных объемов потоков как среднеарифметического от значений в соседних ячейках не всегда обеспечивает физически реальное поведение решения [3]. Точки, лежащие ниже по сверхзвуковому потоку, не могут воздействовать на точки, находящиеся выше по потоку. Например, если $u > a$, то на значение $\overline{F_{C_{i+1/2,j}}}$ никак не могут влиять параметры в точке $(i+1, j)$. Тут лучше использовать схемы с разностями против потока.

Для решения этой проблемы на границах ячеек (например, для $\overline{F_{C_{i+1/2,j}}}$) используется модифицированное расщепление потоков Стегера—Уорминга [4]:

$$\overline{F_{C_{i+1/2}}} = \overline{A_{+i+1/2}} \overline{U}_L + \overline{A_{-i+1/2}} \overline{U}_R, \quad (4.8)$$

где

$$\overline{A_{+i+1/2}} = \overline{A}(\overline{U}_{LR}); \quad \overline{U}_{LR} = \frac{\overline{U}_L + \overline{U}_R}{2}. \quad (4.9)$$

$$S_\eta^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{1}{2a^2} & \frac{1}{2a^2} & 0 & \dots & 0 \\ u & \frac{\rho a \eta_y}{g} & \frac{u}{2a^2} + \frac{\eta_x}{2g} & \frac{u}{2a^2} - \frac{\eta_x}{2g} & 0 & \dots & 0 \\ v & -\frac{\rho a \eta_x}{g} & \frac{v}{2a^2} + \frac{\eta_y}{2g} & \frac{v}{2a^2} - \frac{\eta_y}{2g} & 0 & \dots & 0 \\ E - \frac{p}{\beta\rho} & \frac{\rho a}{g} (\eta_y u - \eta_x v) & \frac{E - \frac{p}{\beta\rho}}{2a^2} + \frac{\bar{v}}{2g} + \frac{1}{2\beta} & \frac{E - \frac{p}{\beta\rho}}{2a^2} - \frac{\bar{v}}{2g} + \frac{1}{2\beta} & \frac{\rho(\beta \widetilde{e}_1 - T \widetilde{R}_1)}{\beta} & \dots & \frac{\rho(\beta \widetilde{e}_{Nc-1} - T \widetilde{R}_{Nc-1})}{\beta} \\ Y_1 & 0 & \frac{Y_1}{2a^2} & \frac{Y_1}{2a^2} & \rho & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ Y_{Nc-1} & 0 & \frac{Y_{Nc-1}}{2a^2} & \frac{Y_{Nc-1}}{2a^2} & 0 & \dots & \rho \end{pmatrix}, \quad (4.15)$$

где

$$\widetilde{e}_I = e_I - e_{Nc};$$

$$\widetilde{R}_I = R_{in} \left(\frac{1}{W_I} - \frac{1}{W_{Nc}} \right), \quad I = 1, 2, \dots, Nc - 1. \quad (4.16)$$

При этом учитывается направление воздействия с помощью собственных значений матриц Якоби A и B в зависимости от их знака.

Для понимания членов, входящих в (4.8), пред-

ставим матрицы Якоби $A = \frac{\partial \overline{F_C}}{\partial \overline{U}}$ и $B = \frac{\partial \overline{G_C}}{\partial \overline{U}}$ в виде

$$A = S_\xi^{-1} \Lambda_A S_\xi; \quad B = S_\eta^{-1} \Lambda_B S_\eta, \quad (4.10)$$

где Λ_A, Λ_B — диагональные матрицы, состоящие из собственных значений матриц A, B ; матрицы S_ξ^{-1}, S_η^{-1} состоят из соответствующих собственных векторов. Из-за ограничений по объему статьи приведем только часть выражений для этих матриц.

Например, диагональная матрица собственных значений равна

$$\Lambda_B = \text{DIAG}(\bar{v}, \bar{v}, \bar{v} + g, \bar{v} - g, \bar{v}, \dots, \bar{v}), \quad (4.11)$$

где

$$g = a \sqrt{\eta_x^2 + \eta_y^2}; \quad (4.12)$$

$$a = \sqrt{\frac{\gamma p}{\rho}} \text{ — скорость звука;} \quad (4.13)$$

$$\bar{v} = \eta_x u + \eta_y v. \quad (4.14)$$

Матрица S_η^{-1} имеет вид

Необходимо обратить внимание, что по сравнению с расчетом идеального газа в 4-й строке матрицы появляются члены, учитывающие отличие внутренних энергий компонентов друг от друга.

Для химически реагирующих течений пренебрежение этими членами приводит к потере устойчивости. Эти члены отвечают за выделение (поглощение) тепла в процессе химических реакций.

Остальные матрицы строятся по аналогии и тоже содержат подобные элементы.

Для представления членов, входящих в формулу Стегера—Уорминга, используются аппроксимации первого порядка против потока:

$$\bar{U}_L = \bar{U}_i; \quad \bar{U}_R = \bar{U}_{i+1}. \quad (4.17)$$

Вязкие (диффузионные) потоки зависят, в основном, не от самого вектора \bar{U} , а от его простран-

ственных производных $\frac{\partial \bar{U}}{\partial \xi}$, $\frac{\partial \bar{U}}{\partial \eta}$. Используя допущение о «тонком слое» [5], пренебрегаем смешанными производными и получаем следующие выражения для потоков:

$$\begin{aligned} \bar{F}_V &= M_F \frac{\partial V}{\partial U} \frac{\partial \bar{U}}{\partial \xi}; & \bar{G}_V &= M_G \frac{\partial V}{\partial U} \frac{\partial \bar{U}}{\partial \eta}; \\ \bar{H}_V &= M_H \frac{\partial V}{\partial U} \frac{\partial \bar{U}}{\partial \eta}, \end{aligned} \quad (4.18)$$

где

$$M_F = -\mu_{ef} \times \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{4}{3}\xi_x^2 + \xi_y^2 & \frac{1}{3}\xi_x\xi_y & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{3}\xi_x\xi_y & \xi_x^2 + \frac{4}{3}\xi_y^2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & u\left(\frac{4}{3}\xi_x^2 + \xi_y^2\right) + \frac{1}{3}v\xi_x\xi_y & \frac{1}{3}u\xi_x\xi_y + v\left(\xi_x^2 + \frac{4}{3}\xi_y^2\right) & \frac{1}{Pr_{ef}}(\xi_x^2 + \xi_y^2) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{Pr_{ef}}(\xi_x^2 + \xi_y^2) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \frac{1}{Pr_{ef}}(\xi_x^2 + \xi_y^2) \end{pmatrix}. \quad (4.19)$$

$$\frac{\partial V}{\partial U} = \frac{1}{\rho} \begin{pmatrix} \rho & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -u & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -v & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \gamma(u^2 + v^2 - E) & -\gamma u & -\gamma v & \gamma & \widetilde{R}_1 T - \beta \widetilde{e}_1 & \dots & \widetilde{R}_{Nc-1} T - \beta \widetilde{e}_{Nc-1} \\ +\beta \sum_{I=1}^{Nc-1} Y_I \widetilde{e}_I - T \sum_{I=1}^{Nc-1} Y_I \widetilde{R}_I & & & & & & \\ -Y_1 & 0 & 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -Y_{Nc-1} & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.20)$$

Введем обозначения:

$$L = \frac{\partial \bar{F}_V}{\partial \bar{U}_\xi}; \quad N = \frac{\partial \bar{G}_V}{\partial \bar{U}_\eta}; \quad M = \frac{\partial \bar{H}_V}{\partial \bar{U}_\eta}. \quad (4.21)$$

Тогда с учетом вышеприведенных выкладок конечно-объемная аппроксимация основного уравнения имеет вид

$$\begin{aligned} &\mathbf{A}_{i,j} \delta \bar{U}_{i,j}^{n+1} + \mathbf{B}_{i,j} \delta \bar{U}_{i,j+1}^{n+1} + \mathbf{C}_{i,j} \delta \bar{U}_{i,j-1}^{n+1} \\ &+ \mathbf{D}_{i,j} \delta \bar{U}_{i+1,j}^{n+1} + \mathbf{E}_{i,j} \delta \bar{U}_{i-1,j}^{n+1} = \Delta \bar{U}_{i,j}^n, \end{aligned} \quad (4.22)$$

где

$$A_{i,j} = I + \alpha \Delta t \left(\frac{(A_+)^n_{i+1/2,j} - (A_-)^n_{i-1/2,j}}{\Delta \xi} + \frac{(B_+)^n_{i,j+1/2} - (B_-)^n_{i,j-1/2}}{\Delta \eta} - \frac{2}{\Delta \xi^2} L_{i,j}^n - \frac{2}{\Delta \eta^2} N_{i,j}^n + \frac{\omega}{y} C_{i,j}^n - \left(\frac{\partial \bar{S}}{\partial \bar{U}} \right)_{i,j}^n \right);$$

$$B_{i,j} = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta \eta} \left((B_-)^n_{i,j+1/2} + \frac{N_{i,j+1}^n}{\Delta \eta} + \frac{\omega M_{i,j+1}^n}{y} \right);$$

$$C_{i,j} = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta \eta} \left(-(B_+)^n_{i,j-1/2} + \frac{N_{i,j-1}^n}{\Delta \eta} - \frac{\omega M_{i,j-1}^n}{y} \right);$$

$$D_{i,j} = \alpha \frac{\Delta t}{\Delta \xi} \left((A_-)^n_{i+1/2,j} + \frac{L_{i+1,j}^n}{\Delta \xi} \right), \quad E_{i,j} = \alpha \frac{\Delta t}{\Delta \xi} \left(-(A_+)^n_{i-1/2,j} + \frac{L_{i-1,j}^n}{\Delta \xi} \right);$$

$$\Delta \bar{U}_{i,j}^n = \Delta t \bar{S}_{i,j}^n - \frac{\Delta t}{\Delta \xi} (\bar{F}_{i+1/2,j}^n - \bar{F}_{i-1/2,j}^n) - \frac{\Delta t}{\Delta \eta} (\bar{G}_{i,j+1/2}^n - \bar{G}_{i,j-1/2}^n) - \Delta t \frac{\omega}{y} \bar{H}_{i,j}^n. \quad (4.24)$$

I — единичная матрица.

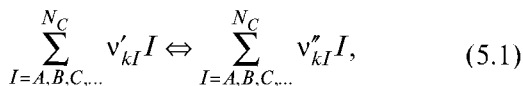
5. Химическая кинетика

В формуле присутствует источник S -вектор

скоростей образования компонентов, $\frac{\text{кг}}{\text{м}^3 \cdot \text{с}}$.

Если в химически реагирующей системе протекают реакции, число которых равно K , то скорость образования компонента I складывается из скоростей всех реакций, в которых он участвует.

Обычно химическую реакцию под номером k представляют в виде



где N_C — число компонентов; ν'_{kI} — стехиометрический коэффициент компонента I в k -й прямой реакции (слева направо); ν''_{kI} — стехиометрический коэффициент компонента I в k -й обратной реакции (справа налево).

Скорость химической реакции R_k определяется как изменение мольной (молярной) концентрации одного из реагирующих веществ за единицу времени, т.е. R_k выражается в кмоль·м⁻³·с⁻¹.

Пусть $[I]$ — мольная концентрация компонента I , т.е. количество молей (киломолей) данного вещества в единице объема. Чаще всего используется единица кмоль·м⁻³.

Очевидно, что

$$[I] = \frac{\rho_I}{W_I} = \frac{\rho Y_I}{W_I}. \quad (5.2)$$

С учетом этого массовая скорость образования компонента I определяется по формуле

$$S_I = W_I \sum_{k=1}^K (\nu'_{kI} - \nu''_{kI}) R_k. \quad (5.3)$$

Для элементарных реакций показатель степени при значении концентрации каждого вещества равен его стехиометрическому коэффициенту, для более сложных реакций это правило не соблюдается.

$$R_k = \left(F_k \prod_{I=A,B,\dots}^{N_C} [I]^{\nu'_{kI}} - B_k \prod_{I=A,B,\dots}^{N_C} [I]^{\nu''_{kI}} \right), \quad (5.4)$$

где F_k и B_k — коэффициенты скоростей прямой и обратной реакции k соответственно,

$$\left(\frac{\text{м}^3}{\text{кмоль}} \right)^{n-1} \cdot \frac{1}{\text{с}}; \quad n — \text{порядок реакции.}$$

Коэффициенты скоростей реакций рассчитываются по формулам:

$$F_k = A_k T^{\beta_k} \exp\left(-\frac{T_k}{T}\right); \quad B_k = A_k T^{\beta_k} \exp\left(-\frac{T_k}{T}\right), \quad (5.5)$$

где A_k — предэкспоненциальный множитель; β_k — безразмерный температурный показатель степени; T_k — температура активации; T — температура.

Константы A_k , β_k , T_k имеют разное значение для прямой и обратной реакций.

В формулу (4.23) входит матрица $\frac{\partial \bar{S}}{\partial \bar{U}}$, которую можно получить численно или аналитически.

В данной работе использовался аналитический способ получения компонент этой матрицы. При этом учитывалась зависимость скоростей образования химических компонентов от всех компонент вектора \bar{U} .

Производные скоростей реакций по температуре рассчитываются с использованием следующей формулы:

$$\frac{\partial F}{\partial T} = A\beta T^{\beta-1} \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right) + AT^{\beta} \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right) \left(\frac{T_a}{T^2}\right) = F \left(\beta + \frac{T_a}{T}\right) \frac{1}{T}. \quad (5.6)$$

Производные скоростей реакций по плотности равны

$$\frac{\partial R_k}{\partial \rho} = F_k \prod_{I=A,B,\dots}^{N_C} \left(\frac{\rho Y_I}{W_I}\right)^{v_{kI}'} \times \frac{1}{\rho} \sum_{I=1}^{N_C} v_{kI}' - B_k \prod_{I=A,B,\dots}^{N_C} \left(\frac{\rho Y_I}{W_I}\right)^{v_{kI}''} \times \frac{1}{\rho} \sum_{I=1}^{N_C} v_{kI}'' \quad (5.7)$$

Производные скоростей реакций по массовым концентрациям рассчитываются обычным образом:

$$\frac{\partial R_k}{\partial Y_J} = \frac{\partial R_k}{\partial [J]} \frac{\partial [J]}{\partial Y_J} = \frac{\rho}{W_J} \frac{\partial R_k}{\partial [J]}. \quad (5.8)$$

Соответственно, производные источника равны

$$\frac{\partial S_I}{\partial Y_J} = W_I \sum_{k=1}^K (v_{kI}'' - v_{kI}') \frac{\partial R_k}{\partial Y_J} = \frac{\rho W_I}{W_J} \sum_{k=1}^K (v_{kI}'' - v_{kI}') \frac{\partial R_k}{\partial [J]}. \quad (5.9)$$

Выбор набора элементарных реакций зависит от конкретной задачи. Например, для горения водорода в воздухе использовалась следующая система реакций:

1. $H + O_2 = OH + O$
2. $O + H_2 = OH + H$
3. $OH + H_2 = H_2O + H$
4. $2 OH = H_2O + O$
5. $2 H + M = H_2 + M$
6. $H + OH + M = H_2O + M$
7. $2 O + M = O_2 + M$

Практика показывает, что такая схема приемлема для задач развитого горения. Когда важны проблемы воспламенения и срыва горения, указан-

ную систему реакций необходимо расширить, в частности добавить реакции, включающие такие компоненты, как H_2O_2 и HO_2 [6].

6. Метод решения

Система представляет собой блочную пентадиagonalную матрицу. Если сетка имеет размер $N_X \times N_Y$, то размер этой матрицы равен $(N_X \times N_Y) \times (N_X \times N_Y)$.

Каждый элемент матрицы сам по себе является матрицей размером $(N_C + 3) \times (N_C + 3)$, а при совместном решении основной системы с уравнениями для турбулентных характеристик — матрицей размером $(N_C + 5) \times (N_C + 5)$.

Решение такой системы прямыми методами не представляется возможным, поэтому необходимо применить методы факторизации системы.

Таких методов существует достаточно много.

В данной работе использовался метод, описанный в [7] и представляющий модификацию метода Бардина—Ломбарда [8]. Смысл этого метода состоит в том, что решение системы, которую можно представить в виде

$$M \cdot [\delta U] = [\Delta U], \quad (6.1)$$

заменяется факторизованной системой

$$M_{\xi}' \cdot D^{-1} \cdot M_{\eta}' \cdot [\delta U] = [\Delta U], \quad (6.2)$$

где

$$M_{\xi}' = \begin{pmatrix} x & . & x & . & . & . & . \\ . & x & . & x & . & . & . \\ x & . & x & . & x & . & . \\ . & \mathbf{D} & . & \mathbf{A} & . & \mathbf{E} & . \\ . & . & x & . & x & . & x \\ . & . & . & x & . & x & . \\ . & . & . & . & x & . & x \end{pmatrix};$$

$$M_{\eta}' = \begin{pmatrix} x & x & . & . & . & . & . \\ x & x & x & . & . & . & . \\ . & x & x & x & . & . & . \\ . & . & \mathbf{B} & \mathbf{A} & \mathbf{C} & . & . \\ . & . & . & x & x & x & . \\ . & . & . & . & x & x & x \\ . & . & . & . & . & x & x \end{pmatrix}; \quad (6.3)$$

$$D = \begin{pmatrix} x & & & & & & \\ & x & & & & & \\ & & x & & & & \\ & & & A & & & \\ & & & & x & & \\ & & & & & x & \\ & & & & & & x \end{pmatrix}$$

В отличие от M , которая, как уже говорилось, является блочной пентадиагональной матрицей, матрицы M'_ξ и M'_η являются блочными трехдиагональными и достаточно легко обращаются методом векторной прогонки. Обращение матрицы D^{-1} тривиально.

Использованный метод показал быструю сходимость и высокую устойчивость при высоких значениях числа Куранта—Фридрихса—Леви.

Лучшие результаты получаются при модификации этого метода с помощью итеративного устранения ошибки разбиения — MAFk Algorithm [7].

При использовании векторной прогонки необходимо обращать матрицы, размер которых равен размерности вектора \bar{U} . При отсутствии реакций эта размерность невелика, и можно использовать метод Гаусса. При расчете химически реагирующих течений размерность матрицы, как указывалось выше, равна $(N_C + 3) \times (N_C + 3)$, и метод Гаусса становится неэффективным. Для обращения таких матриц использовался следующий подход.

Все рассматриваемые матрицы имеют вид

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}, \quad (6.4)$$

где A_{11} — квадратная матрица размера (4×4) — обычно вся заполненная.

Для обращения матрицы A используется формула

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11}^{-1} + A_{11}^{-1} A_{12} \Delta^{-1} A_{21} A_{11}^{-1} & -A_{11}^{-1} A_{12} \Delta^{-1} \\ -\Delta^{-1} A_{21} A_{11}^{-1} & \Delta^{-1} \end{pmatrix}, \quad (6.5)$$

где

$$\Delta = A_{22} - A_{21} A_{11}^{-1} A_{12}. \quad (6.6)$$

Матрица Δ имеет преобладающие диагональные элементы и обращается методом верхней релаксации. Для обращения 4-мерной матрицы A_{11} используется метод Гаусса.

7. Результаты расчета

Для проверки методики были проведены расчеты сверхзвуковой водородной горелки [9] (рис. 1).

Горючее истекает через внутреннее звуковое сопло в спутный сверхзвуковой поток, который создается внешним сверхзвуковым соплом.

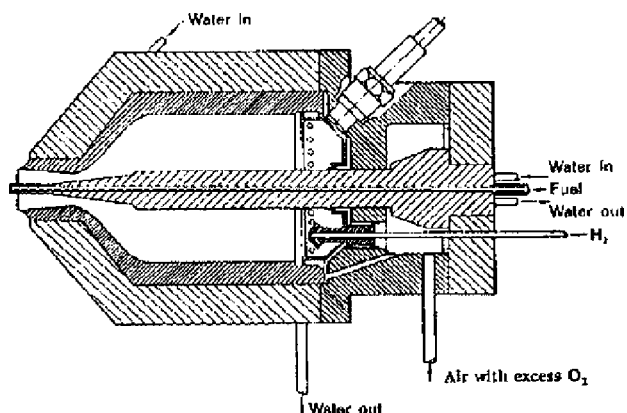


Рис. 1. Схема сверхзвуковой горелки

Параметры горелки: внутренний диаметр инжектора горючего $D = 2,36$ мм; наружный диаметр инжектора горючего $D_H = 3,81$ мм; внутренний диаметр среза сверхзвукового сопла $D_a = 17,78$ мм.

Параметры горючего: давление $p = 1,12 \cdot 10^5$ Па; температура $T = 545$ К; скорость $u = 1780$ м/с; число Маха $M = 1$; состав, массовые доли $Y_{H_2} = 1$.

Параметры сверхзвукового спутного потока: давление $p = 1,07 \cdot 10^5$ Па; температура $T = 1250$ К; скорость $u = 1417$ м/с; число Маха $M = 2$; состав, массовые доли:

$$Y_{O_2} = 0,245; \quad Y_{H_2O} = 0,175; \quad Y_{N_2} = 0,58.$$

Сечения, в которых проводились измерения:

$$x/D = 10,8; \quad x/D = 21,5; \quad x/D = 32,3;$$

$$x/D = 43,1; \quad x/D = 64,7; \quad x/D = 86,1.$$

На рис. 2—6 представлены поперечные профили параметров в этих сечениях потока — температуры T и мольных долей наиболее важных химических компонентов H_2O , H_2 , OH , N_2 .

Сопоставление результатов расчета с экспериментальными данными показало удовлетворительное совпадение даже для такого малого компонента, как OH .

Время расчета одного варианта на компьютере (Intel® Core™2 CPU 2.67GHz, 3.00GB, 64bit) составляло 7—9 мин.

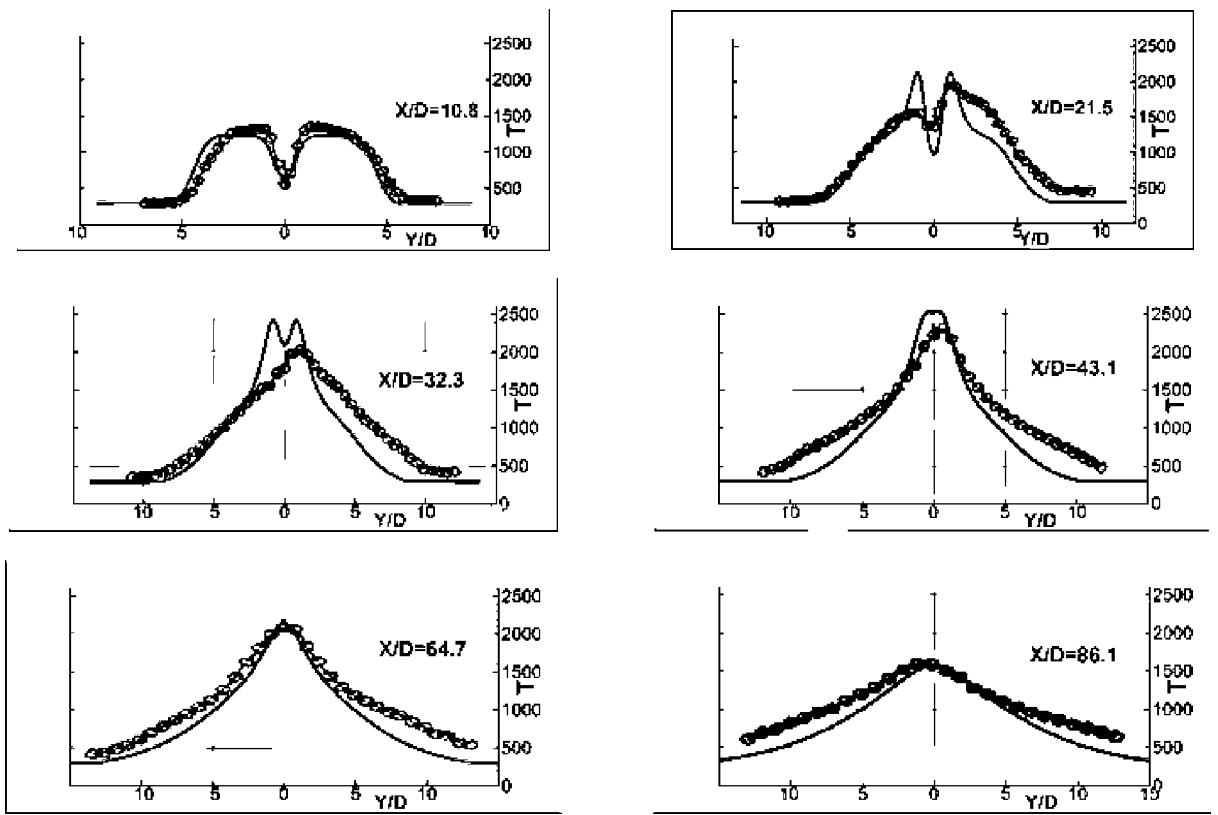


Рис. 2. Поперечные профили температуры в различных сечениях потока. Сравнение результатов расчета (сплошные линии) с экспериментальными данными [9] (обозначены кружками)

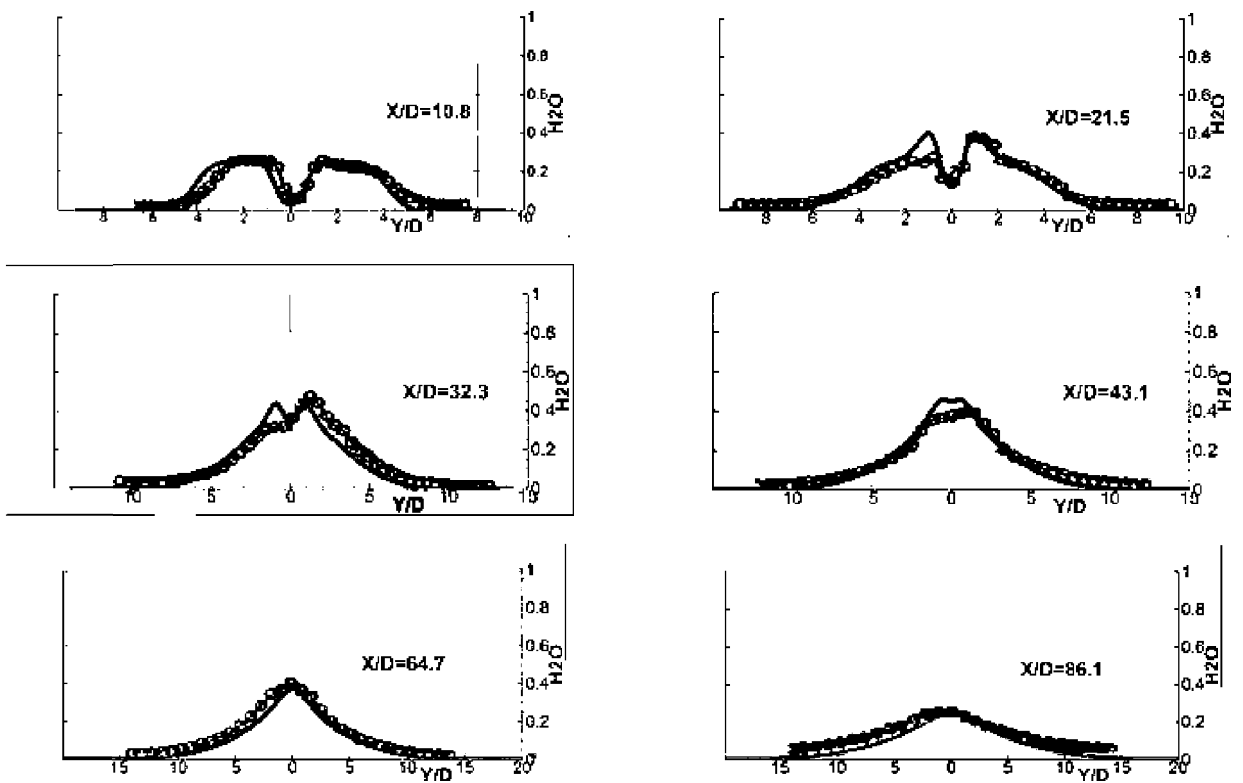


Рис. 3. Поперечные профили мольной доли воды H_2O в различных сечениях потока. Сравнение результатов расчета (сплошные линии) с экспериментальными данными [9] (обозначены кружками)

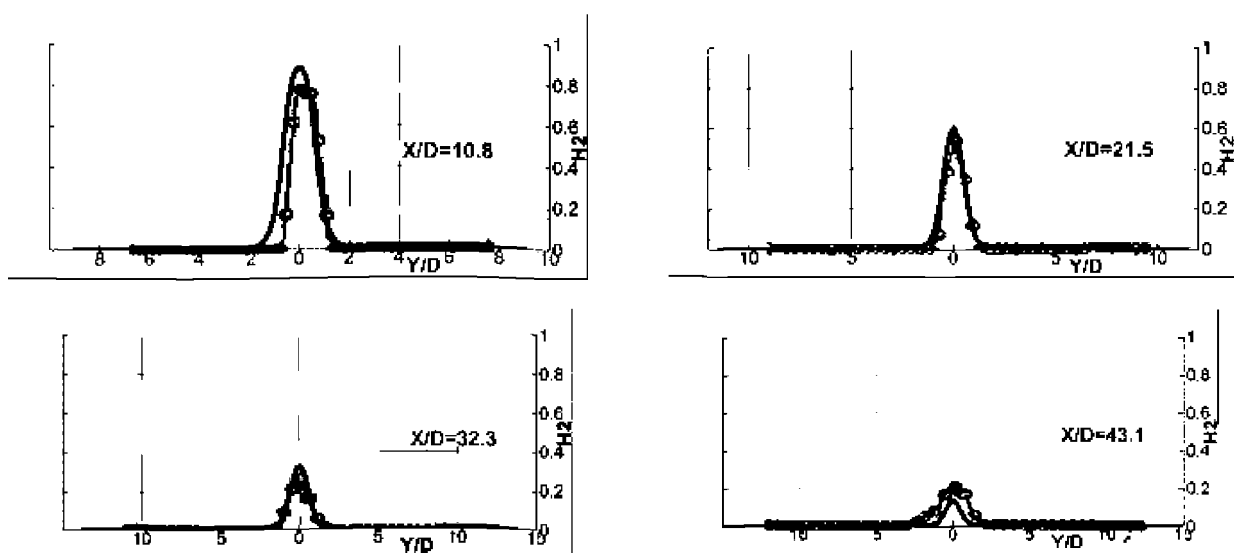


Рис. 4. Поперечные профили мольной доли водорода H_2 в различных сечениях потока. Сравнение результатов расчета (сплошные линии) с экспериментальными данными [9] (обозначены кружками)

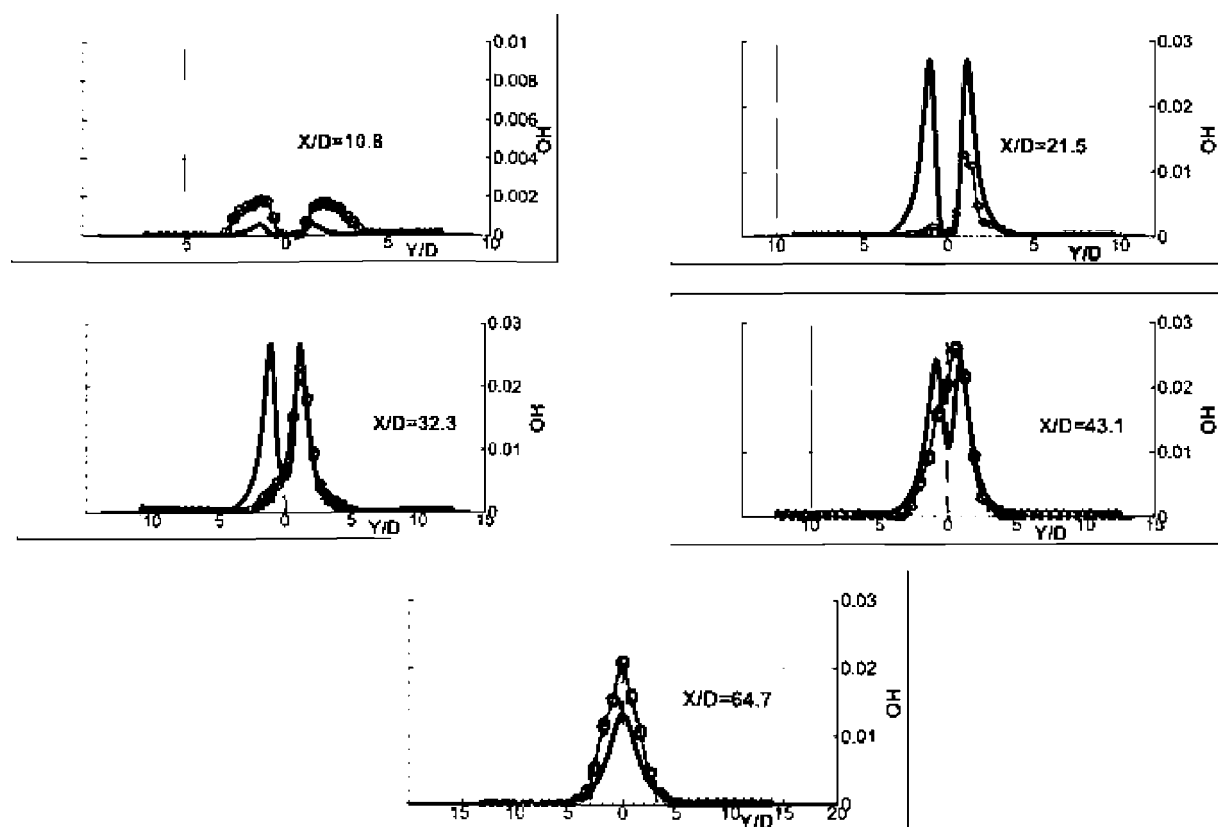


Рис. 5. Поперечные профили мольной доли OH в различных сечениях потока. Сравнение результатов расчета (сплошные линии) с экспериментальными данными [9] (обозначены кружками)

Выводы

Разработан численный метод расчета двумерных сверхзвуковых течений с неравновесными химическими реакциями. Высокая скорость сходимости

решения обеспечивается тем, что конвективные и диффузионные потоки, а также химические источники представлены в неявной форме, что позволяет избежать проблемы жесткости и получить ус-

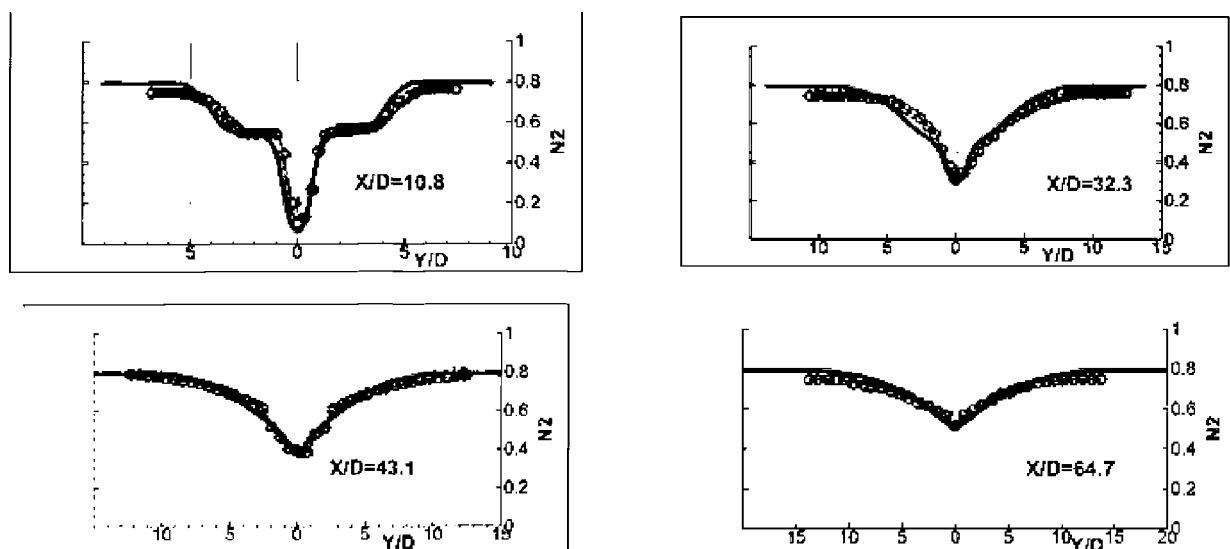


Рис. 6. Поперечные профили мольной доли азота N_2 в различных сечениях потока. Сравнение результатов расчета (сплошные линии) с экспериментальными данными [9] (обозначены кружками)

стойчивое решение при очень больших шагах по времени. Для решения системы уравнений использовался модифицированный метод факторизации Маккормака, а для ускорения векторной прогонки при обращении матриц используется дополнительное разложение на блоки.

Применение алгоритма к расчету течения в сверхзвуковой водородной горелке показало хорошую сходимость решения и удовлетворительное совпадение результатов расчета с экспериментальными данными.

Библиографический список

1. NASA polynomials. http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/data/nasa_plnm.html
2. Молчанов А.М. Расчет сверхзвуковых неизобарических струй с поправками на сжимаемость в модели турбулентности // Вестник Московского авиационного института. 2009. №1. Т. 16. С.38—48.
3. Патанкар С. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. — М.: Энергоатомиздат, 1984.

4. Steger, J. and Warming, R.F. Flux Vector Splitting of the Inviscid Gasdynamics Equations with Application to Finite Difference Methods // NASA TN-78605, 1979.

5. Tysinger, T. and Caughey, D. Implicit Multigrid Algorithm for the Navier-Stokes Equations // AIAA Paper 91-0242, Jan. 1991.

6. Химия горения / Ред. У. Гардинер. — М.: Мир, 1988.

7. MacCormack, R.W. and Pulliam, T. Assessment Of A New Numerical Procedure For Fluid Dynamics, AIAA paper 98-2821 Presented at the 29th AIAA Fluid Dynamics Conference, Albuquerque, New Mexico, June 15-18, 1998

8. Bardina J. and O.K. Lombard. Three Dimensional Hypersonic Flow Simulations with the CSCM Implicit Upwind Navier-Stokes Method,» AIAA Paper No. 87-1114, 1987.

9. Cheng, T. S., Wehrmeyer, J. A., Pitz, R. W., Jarret, O., Northam, J. B. Finite-Rate Chemistry Effects in a Mach 2 Reacting Flow // AIAA paper 91-2320 (1991), 16p.