

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
МОСКОВСКИЙ АВИАЦИОННЫЙ ИНСТИТУТ  
(НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)**

На правах рукописи



**Тушканов Алексей Сергеевич**

**ТЕРМИЧЕСКИ И ХИМИЧЕСКИ НЕРАВНОВЕСНЫЕ ПРОЦЕССЫ В  
ФАКЕЛЕ МАРШЕВОГО ДВИГАТЕЛЯ ТВЕРДОГО ТОПЛИВА**

Специальность

01.04.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника

**ДИССЕРТАЦИЯ**

на соискание ученой степени

кандидата технических наук

Научный руководитель:

доктор технических наук, доцент

Молчанов Александр Михайлович

Москва – 2019

## Оглавление

Введение.....	6
1. Обзор литературы по тематике.....	10
1.1. Развитие моделей, учитывающих влияние турбулентности на скорости химических реакций.....	10
1.2. «Фронтные» модели.....	14
1.3. Модели основанные на теории реактора частичного перемешивания.....	16
1.4. Статистические модели расчета взаимодействия турбулентности и горения.....	26
1.5. Влияние переменных чисел Прандтля и Шмидта на турбулентную струю. Влияние сжимаемости. ....	33
2. Математическая модель высокоскоростных химически неравновесных турбулентных течений.....	37
2.1. Основные дифференциальные уравнения сохранения.....	37
2.2. Альтернативные формы записи основной системы уравнений.....	38
2.3. Уравнения состояния.....	39
2.4. Вязкие напряжения, тепловые/диффузионные потоки.....	40
2.5. Переносные свойства.....	41
2.6. Дополнительные уравнения для термически неравновесного газа.....	43
2.6.1. Уравнение колебательной энергии.....	43
2.6.2. Механизмы колебательного энергетического обмена.....	45
2.6.3. Скорости колебательных энергетических переходов.....	46
2.7. Химическая кинетика.....	47
2.7.1. Общие положения.....	47
2.7.2. Химические реакции диссоциации воздуха.....	50

2.7.3. Химические реакции горения водорода и окиси углерода в воздухе....	51
2.7.4. Система газофазных химических реакций в пламени твердотопливного двигателя .....	54
2.7.5. Реакции горения метана .....	55
2.7.6. Упрощенная схема горения керосина .....	56
2.8. Моделирование турбулентности в высокоскоростных потоках .....	57
2.8.1. Осреднение основных уравнений.....	57
2.8.2. Коэффициент турбулентной вязкости .....	60
2.8.3. Модель напряжений Рейнольдса .....	62
2.8.4. К-ε модель турбулентности .....	65
2.8.5. К-ω модель Уилкокса .....	66
2.8.6. SST модель.....	67
2.8.7. Модификация SST модели для высокоскоростных течений. Учет влияния сжимаемости.....	70
2.9. Турбулентные потоки скалярных величин в химически реагирующих течениях.....	71
2.9.1. Уравнение для потока скалярной величины .....	71
2.9.2. Уравнения для дисперсии пульсаций инертной скалярной величины и ее диссипации .....	77
2.9.3. Уравнения для корреляций пульсаций концентраций компонентов и соответствующей скорости диссипации.....	78
2.9.4. Уравнения для среднеквадратичной дисперсии пульсаций термодинамической энтальпии и соответствующей скорости диссипации ...	81
2.9.5. Уравнения для среднеквадратичной дисперсии пульсаций скалярных величин и скалярной скорости диссипации в постановке SST модели.....	83
2.10. Модель учета влияния турбулентности на скорости химических реакций	84

2.10.1. Функция распределения плотности вероятностей .....	84
2.10.2. ФРПВ для температуры.....	86
2.10.3. ФРПВ для концентраций компонентов .....	88
2.10.4. Осредненные скорости реакций, скорости образования компонентов	89
2.10.4. Формулы для дисперсий температуры и концентраций .....	92
2.10.5. Программа расчета осредненных параметров, включающих пульсации температуры.....	92
2.11. Многофазные течения.....	93
3. Результаты расчетов.....	97
3.1. Модель турбулентности, учитывающая сжимаемость, для струйных течений .....	97
Тест 1. Затопленные расчетные сверхзвуковые нагретые струи .....	97
Тест 2. Химически реагирующие звуковые недорасширенные струи при высокой степени нерасчетности $p_a / p_e$ .....	100
3.2. Моделирование турбулентных тепловых и диффузионных потоков в химически реагирующих течениях с переменными значениями чисел Прандтля/Шмидта .....	105
Тест 1. Сверхзвуковая струя кислорода, истекающая в высокотемпературное окружающее пространство.....	105
Тест 2. Сверхзвуковая водородная струя в сверхзвуковом спутном потоке горячего воздуха.....	109
3.3. Модель учета влияния турбулентности на скорости химических реакций на основе использовании функций распределения плотности вероятностей .....	111
Тест 1. Сверхзвуковая водородная струя в сверхзвуковом спутном потоке горячего воздуха.....	112
Тест 2. Эксперимент Барроуса и Куркова .....	113

3.4. Срыв догорания в выхлопной струе ЖРД .....	116
3.5. Камера сгорания прямоточного двухрежимного двигателя .....	124
Выводы по разделу 3 .....	128
4. Параметрическое исследование типичных ракетных двигателей .....	129
4.1. Параметрическое исследование типичного ЖРД .....	129
4.2. Параметрическое исследование типичного РДТТ .....	135
Выводы по разделу 4 .....	153
Заключение .....	154
Список литературы .....	156

## Введение

**Актуальность темы диссертации** заключается в том, что проблемы разработки современных высокоскоростных летательных аппаратов ставят перед учеными и инженерами задачу создания новых расчетных методик адекватно описывающих процессы, происходящих, например, при гиперзвуковом полете в плотных слоях атмосферы, догорания в факеле ракетного двигателя, в ударной волне, возникающей при входе в плотные слои атмосферы, при выборе точки подачи горючего в высокоскоростных прямоточных двигателях и других, аналогичных задач.

Эмпирические или полуэмпирические методики, широко применяемые в настоящее время, создаются для ограниченного набора ситуаций, ввиду невозможности воссоздать реальные условия полета. Зачастую попытка экстраполировать эти методики на экстремальные условия, возникающие, например, при гиперзвуковых течениях может вызывать ошибки, приводящие к завышению некоторых параметров, на порядок.

Аналитические методики, построенные на основе методов математического моделирования, за последнее время получившие серьезное развитие, а так же большой рост вычислительных мощностей компьютерной техники, позволяют моделировать практически любые процессы, происходящие в технике. Недостатком аналитических методик является их «оторванность» от реальных условий, и необходимость их экспериментального подтверждения.

Существующее сейчас коммерческое программное обеспечение, массово применяемое для проведения инженерных расчетов, не всегда возможно использовать для расчетов перспективных изделий, например гиперзвуковых прямоточных воздушно-реактивных двигателей. Но представленные в них модели являются аналитическими с коррекцией констант, входящих в основные уравнения, сравнением с экспериментальными данными. Ввиду невозможности

проведения эксперимента или получения значений конкретных параметров коррекция констант в этих моделях представляет собой проблемную задачу. К тому же, в коммерческом ПО, зачастую невозможно серьезно изменить уравнения входящие в математическую модель, либо добавить новые уравнения в систему.

**Степень разработанности темы.** На данный момент существует разные модели, описывающие процессы, протекающие в высокоскоростных турбулентных струях. Модели влияния турбулентности на скорости химических реакций, представленные в коммерческих вычислительных пакетах, требуют больших вычислительных ресурсов. При этом в коммерческих пакетах, не реализуются модели влияния химических реакций на процессы турбулентного переноса.

**Целью** работы являлось численное моделирование процессов тепло и массообмена в высокоскоростных, химически активных турбулентных струях.

**Задачи работы:**

- учет влияния сжимаемости на процессы турбулентного переноса массы и энергии;
- учет влияния турбулентных пульсаций на скорости химических реакций;
- учет влияния химических реакций на процессы турбулентного переноса массы и энергии;
- написание программы на языке программирования Фортран 95.

**Научная новизна** диссертации заключается в следующем:

1. Разработан и реализован метод расчета высокоскоростных струй с неравновесными химическими и термическими реакциями.
2. Реализован метод влияния горения на турбулентность, путем решения дополнительных уравнений переноса дисперсий концентраций и энтальпии.

3. Предложена модификация SST модели турбулентности с учетом влияния высокоскоростной сжимаемости.

5. Обнаружено, что влияние турбулентности проявляется, преимущественно в задачах воспламенения и срыва горения.

6. Проанализирован характер движения частиц твердой фазы в факелах РДТТ на высотах полета от 30 до 100 км, для различных размеров частиц от 1 до 6 мкм.

### **Теоретическая и практическая значимость работы.**

Теоретическая значимость работы заключается в том, что разработанная модель течения высокоскоростного реагирующего потока реализована в программном коде, и может быть применена при расчете химически реагирующих, турбулентных струй.

Практическая ценность результатов заключается в том, что они могут быть применены при проектировании высокоскоростных прямоточных двигателей, ракетных двигателей, выдачи рекомендаций при выборе точки подачи горючего, расчета теплозащитного покрытия донной области ракеты, при расчете заметности ракет.

**Методы исследования** основаны на численном решении осредненной по Рейнольдсу системы уравнений Навье-Стокса, с использованием неявного метода Мак-Кормака. При моделировании средней скорости реакции использовалась заранее выбранная функция распределения плотности вероятности. Для преодоления проблемы жесткости системы уравнений применяется метод расщепления по физическим процессам.

### **Положения, выносимые на защиту.**

1. Модификация SST модели для высокоскоростных течений. Учет влияния сжимаемости.

2. Моделирование турбулентных тепловых и диффузионных потоков в химически реагирующих течениях с переменными значениями чисел



Прандтля/Шмидта на основе решения дополнительных уравнений для скалярных дисперсий и диссипаций.

3. Модель учета влияния турбулентности на скорости химических реакций на основе использования функций распределения плотности вероятностей.

**Достоверность научных положений** была подтверждена использованием классических уравнений газовой динамики и тепломассообмена, проверенных методов численного моделирования, а так же сравнением полученных результатов численного эксперимента с экспериментальными данными других авторов, опубликованных в открытой печати.

#### **Апробация работы.**

Результаты работы прошли апробацию на 1 отраслевой конференции:

Видеосеминар по аэромеханике ЦАГИ-ИТПМ СО РАН-СПбПУ-НИИМ МГУ-ОИВТ РАН, 5 сентября 2017.

#### **Публикации по теме диссертации.**

По теме диссертации автором опубликовано 3 работы, из них в рецензируемых научных изданиях опубликовано 2 работы.

## 1. Обзор литературы по тематике.

### 1.1. Развитие моделей, учитывающих влияние турбулентности на скорости химических реакций.

Создание высокоскоростных ЛА невозможно, без развития теоретической и экспериментальной методик невозможно. Причем, с ростом скорости сильно возрастает и роль летных испытаний, ввиду сложности получения максимально приближенных к реальности условий эксперимента. Наземные тесты, при моделировании гиперзвуковых течений, не способны дать намного большее количество информации, в отличие от летного эксперимента. Ввиду большой погрешности, возникающей при попытке воссоздать натурные условия на земле, можно получить неправдоподобные результаты измерений [37]. Как видно из результатов измерения полей скорости, несмотря на осесимметричное течение, профиль скорости смещен в сторону.

Активное изучение процессов горения начал Антуан Лавуазье, опровергнувший теорию флогистона в 1770-х годах. Именно создание кислородной теории горения позволило начать химическую революцию в конце XVIII века.

В 1889 году, шведский химик Сванте Аррениус, на основе теории активных соударений вывел температурную зависимость коэффициента скорости реакции. В основе предположения Аррениуса лежат две теории – молекулярно-кинетическая и Больцмана. С помощью теории Больцмана определяется количество молекул, чья энергия при столкновении превышает энергию активации реакции, а с помощью молекулярно-кинетической теории определяется число соударений. Согласно теории Аррениуса на константу скорости химической реакции влияет только температура. Но, так же на многие реакции влияет и давление, при котором протекает реакция. Примером таких реакций может являться реакции с участием закиси водорода ( $H_2O_2$ ). Чаще всего для таких

реакций используются различные значения констант скоростей реакций, при высоких и низких значениях давления. Проблемы возникают при значениях давления, близких к промежуточным, когда становится не понятным какой набор констант необходимо использовать. Для этого случая используются различные методы определения констант. Один из методов был предложен Трое и др. который использует «сшивание» предельных случаев для различных давлений. Более подробно этот метод изложен в работах [9, 10].

Еще одним недостатком формулы Аррениуса является то, что она не учитывает изменение теплоемкости реагирующей смеси.

Дальнейшее развитие теории горения было сосредоточено в учете влияния турбулентных пульсаций параметров потока на скорости протекающих химических реакций. В целом, турбулентное горение можно разделить на две большие группы – горение предварительно перемешанной смеси и диффузионное горение. В первом случае, пламя распространяется через тщательно перемешанную, турбулентную, гомогенную смесь горючего и окислителя. Во втором случае горючее и окислитель изначально разделены, и горение происходит только тогда, когда они смешиваются. Задача ламинарного горения в данной работе не рассматривалась, так как этот тип задач не представляет больших трудностей при выполнении расчетов горения топливно-воздушной смеси.

В целом, научные исследования турбулентного горения предварительно перемешанных топлив, начались еще в 40-х годах XX-го века с классических теоретических и экспериментальных исследований Дамкёлера. Более подробные обзоры горения предварительно смешанной топливной смеси можно найти в работах Льюиса и фон Ельбе [42], Эндрюса, Брэдли и Лвакабамба [43], Уильямса [44], Абдель-Гайеда и Брэдли [45], Либби и Уильямса [46].

Систематический анализ большого количества экспериментальных данных, по турбулентным струям, в том числе, с распространением приведен в работах,

под редакцией Г.Н. Абрамовича [98, 99, 100]. Большое количество работ посвящено моделированию турбулентных струй с помощью различных моделей турбулентности двухпараметрических [101, 105, 103] и прямого численного моделирования [106].

В условиях предварительно смешанного горения фронт пламени распространяется за счет диффузии и турбулентности, имеющей размерность масштаба Колмогорова. Ввиду того, что размер шага по времени мелкомасштабной турбулентности крайне мал, что приводит к сложности моделирования процессов газовой динамики и химических реакций. Моделированию мелкомасштабной турбулентности посвящено большое количество работ [47, 48, 49, 50, 51, 52, 53], но существует ряд проблем. Упрощенные модели турбулентности, (модели на основе RANS или LES) не позволяют напрямую рассчитывать мелкие вихри, моделируя их с помощью подсеточных моделей [93, 94, 95, 96]. В этом и заключается принципиальный недостаток при моделировании турбулентного горения.

Большую роль в развитии теории и практики турбулентного горения сыграли работы отечественного ученого В.Р. Кузнецова. Работы [109, 110, 111, 112] посвящены, преимущественно, влиянию пульсаций концентраций на скорости химических реакций, а так же образованию окислов азота, что является важной задачей современного авиационного двигателестроения.

При изучении процессов воспламенения горючего и срыва горения в ПВРД, а так же догорания в факеле ракетного двигателя реакция начинается до того, как произойдет полное смешение горючего и окислителя, таким образом, необходимо рассматривать совершенно другую модель горения. При контакте горючего и окислителя воспламенение происходит не сразу, а, только, спустя некоторое время, что дает возможность компонентам перемешаться. В условиях турбулентного горения крайне важны пульсации параметров потока, особенно давления, температуры и концентраций, которые напрямую влияют на скорость

образования компонентов реакции. В качестве примера можно рассмотреть реакцию окисления азота при температуре  $\sim 2000K$ , и при пульсации температуры на величину около 10%, средняя скорость реакции будет отличаться на порядок, от скорости реакции рассчитанной при средней температуре [89].

В настоящее время, разработаны несколько моделей учета влияния турбулентности на скорости химических реакций: модель реактора частичного перемешивания (PaSR), модель микроламинарных пламен, статистический подход, и ряд других. Классификация моделей взаимодействия турбулентности и химии, представлено в таблице 1.1.

Таблица 1.1.

	Предварительно перемешанное горение	Диффузионное горение
Бесконечная скорость реакции	Eddy Break Up (EBU) модель	
	модель Bray Moss Libby (BML)	Conserved Scalar-equilibrium модель
	Функция распределения плотности вероятности (ФРПВ) Eddy Dissipation Concept (EDC) Conditional Source-term Estimation (CSE)	
Конечная скорость реакции	Turbulent Flame Speed Correction (G-equation) Flamelet (based on flame surface density)	Conditional Momentum Closure (CMC) Flamelet (based on mixture fraction)
	Linear Eddy Model Laminar Finite Rate Model	

Главными требованиями к современным моделям турбулентного горения:

- универсальность;
- конечная скорость реакции;
- точность моделирования турбулентности;
- учет дополнительных эффектов.

## 1.2. «Фронтные» модели

Существуют несколько подходов для моделирования турбулентного горения, основанных на предположении что горение происходит, только в зоне так называемого тонкого фронта пламени. В первом подходе решается специальное уравнение переноса, для скалярной величины, которая описывает некую изоповерхность, на которой проходит реакция. Вторым подходом основан на моделировании изменения переменной, характеризующий полноту сгорания.

Первый подход часто называют моделью микроламинарных пламен или flamelet. Впервые концепт flamelet модели был сформулирован Форманом Уильямсом в 1975 году [86]. А основные теоретические положения вывел Норберт Петерс в начале 1980-х годов [87]. В основе метода лежит представление зоны турбулентного горения, как совокупности ламинарных фрагментов пламени, в турбулентном поле потока. Предполагается, так же, что фрагменты пламени деформируются турбулентным потоком, но не меняют структуру.

В модели предполагается, что характерное время диффузии компонентов и реакций, много меньше, чем время контакта горючего и окислителя. На рисунке 1.1 показана структура турбулентной струи.

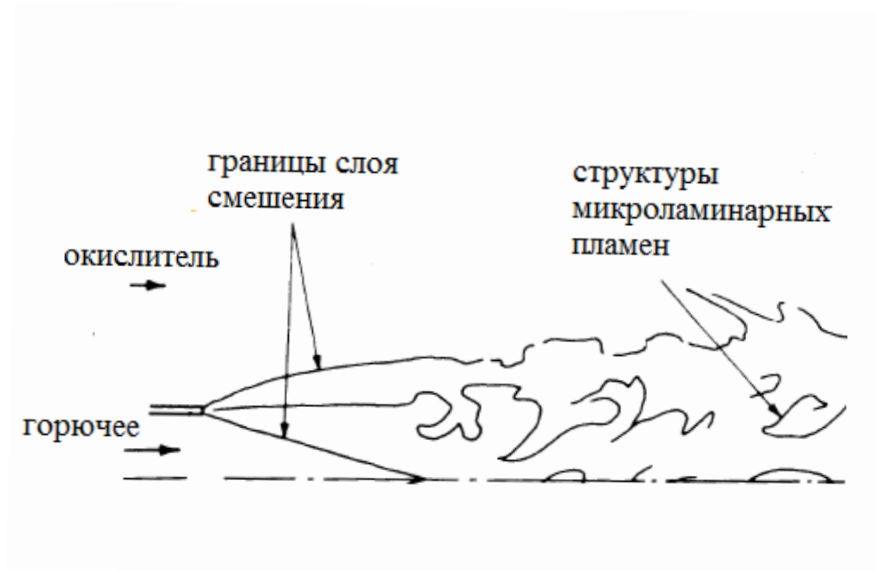


Рисунок 1.1. Структура турбулентной струи.

Уравнение сохранения массы химического компонента, в случае flamelet модели, с учетом предположения о времени контакта будет иметь вид:

$$D \frac{d^2 C_s}{dn^2} + S_s = 0,$$

здесь  $S_s$  - источник учитывающий влияние химических реакций.

Проблемой данного подхода является то, что при осреднении данного уравнения, возникнет проблема поиска средней величины значения источника. Ввиду этого, часто предполагается, что среднее значение источника, будет равно значению источника от средних значений переменных.

В 90-х годах модель flamelet активно развивалась, в качестве примера можно привести работы [107, 108].

Во втором подходе используются модели, связанные со скоростью турбулентного горения [88, 90]. Наиболее распространённой моделью является модель из работы [91], которая используется в коммерческих CFD пакетах. Основное уравнение для данной модели имеет вид:

$$\rho U_k \frac{\partial C}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \rho (D_t + D) \frac{\partial C}{\partial x_k} \right] + \rho U_t |\text{grad} C|,$$

здесь  $C$  - полнота сгорания, определяемая из соотношения:

$$C = \frac{T - T^o}{T^b - T^o},$$

$T^o$  и  $T^b$  - температуры свежей смеси и продуктов сгорания, соответственно.

В этих моделях скорость турбулентного горения  $U_t$  выражается через параметры потока. Выражения для скорости потока были получены путем обработки экспериментальных данных, и представлены в ряде работ.

Второй подход имеет ряд существенных недостатков, главным из которых является невозможность его использования для диффузионного горения из-за необходимости задания так называемой ламинарной нормальной скорости, который, ввиду его нелокальности, невозможно определить в произвольной точки камеры сгорания.

### 1.3. Модели основанные на теории реактора частичного перемешивания

Большая группа методов – это методы, основанные на модели реактора частичного перемешивания (PaSR). В основе этих методов лежит предположение о том, что большая часть химических реакций протекает в так называемых тонких структурах, особенно, при больших значениях числа Рейнольдса. Существование тонких структур было доказано экспериментально работами Магнуссена и др. [54,



55]. Концепт модели тонких структур представлен на рисунке 1.2, а экспериментальное подтверждение на рисунке 1.3 (а) – предварительно перемешанное горение и (б) – диффузионное горение.

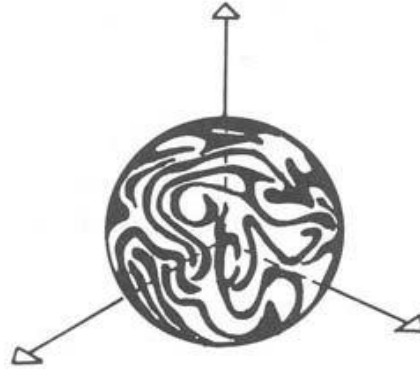
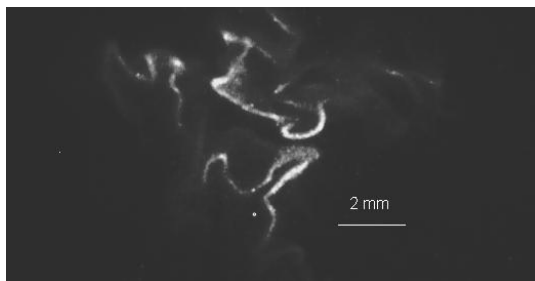
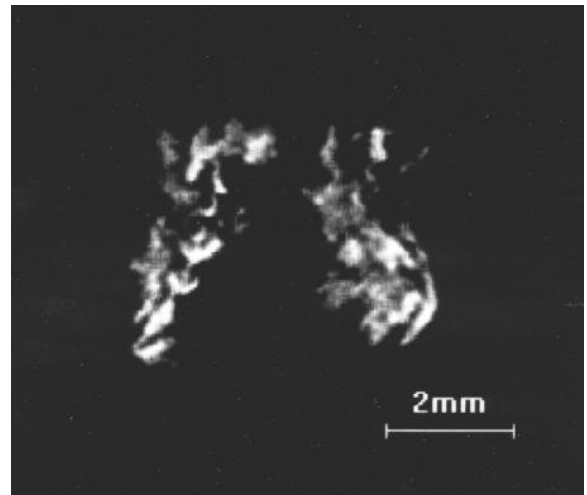


Рисунок 1.2. Концепт тонких структур.



(а)



(б)

Рисунок 1.3. Экспериментальные фотографии тонких структур.

При использовании PaSR-моделей на практике используются следующие допущения [56]:

- во всех тонких структурах, находящихся в одной ячейки расчетной сетки, состав газа однороден;
- в оставшейся части ячейки состав газа также однороден;

- скорости газа как сплошной среды в тонких структурах и в окружающем пространстве одинаковы и однородны по ячейке.

Эти тонкие структуры связаны с мельчайшими турбулентными вихрями. Распределение тонких структур по области течения неравномерно, и занимает некоторую долю от всего реагирующего потока. Ключевое отличие PaSR-моделей друг от друга является в методах вычисления этой самой доли.

Одним из вариантов модели реактора частичного перемешивания, которая сейчас наиболее активно применяется, является модель Eddy-Dissipation Concept, разработанная Бьёрном Магнуссенном, в семидесятых годах двадцатого века [57].

В модели EDC предполагается, что скорость реакции в тонких структурах значительно превосходит скорость реакции во внешнем объеме. Таким образом, средняя скорость реакции будет равна скорости реакции в тонкой структуре, умноженной на долю этих структур.

Преимуществом данной модели является, отход от системы дифференциальных уравнений, к системе алгебраических уравнений. Для реализации этого преимущества предполагается, что состояние в тонких структурах является квазистационарным и описывается алгебраической системой уравнений для стационарного состояния гомогенного реактора. Для нахождения этого стационарного состояния нужно на каждом шаге физического времени находить стационарный предел (установление по псевдовремени  $t'$ ) решения системы дифференциальных уравнений, описывающей состояние в реакторе. Эти уравнения в переменных модели EDC имеют вид [56]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d(\gamma^* \rho^* e^*)}{dt'} = -\gamma^* \rho^* \cdot \eta \frac{h^* - h^0}{\tau^*} + \hat{e} \frac{d(\gamma^* \rho^*)}{dt}, \quad \frac{\eta}{\tau^*} = \frac{\dot{m}}{\gamma^* \rho^* V}, \\ \frac{d(\gamma^* \rho^* C_i^*)}{dt'} = \gamma^* \rho^* \cdot \left( \frac{S_i^*}{\rho^*} - \eta \frac{C_i^* - C_i^0}{\tau^*} \right) + \hat{C}_i \frac{d(\gamma^* \rho^*)}{dt}, \quad \rho^* T^* \sum_{i=1}^{N_{sp}} \frac{Y_i^*}{m_i} = \bar{p} \end{array} \right.$$

В работах Магнуссена [57, 58], моделирование характеристик тонких структур осуществлялось по следующему подходу:

- массовая доля тонких структур вычислялась по формуле

$$\gamma^* = 9.7 \left( \frac{\nu \cdot \varepsilon}{k^2} \right)^{3/4}.$$

Данная формула справедлива для изотропной турбулентности.

Значение массовой доли тонких структур в расчетной области можно выразить через турбулентное число Рейнольдса:

$$\gamma^* = 40.2 \cdot \text{Re}_\lambda^{-3/2}.$$

Магнуссен так же получил выражение для массообмена между тонкими структурами и окружающей средой:

$$\dot{m} = 2 \cdot \frac{u^*}{L^*} \cdot \gamma^*,$$

в случае приближения турбулентности к изотропической, выражение превращается в:

$$\dot{m} = 23.6 \cdot \left( \frac{\nu \cdot \varepsilon}{k^2} \right)^{1/4} \cdot \frac{\varepsilon}{k}.$$

Массообмен внутри тонких структур выражается по формуле:

$$\dot{m}^* = 2 \cdot \frac{u^*}{L^*},$$

или, при выражении через характеристики турбулентности, выражение можно записать как:

$$\dot{m}^* = 2.45 \left( \frac{\varepsilon}{\nu} \right)^{1/2}.$$

Время пребывания в тонких структурах является обратно пропорциональной величиной массообмену в тонких структурах:

$$\tau^* = \frac{1}{\dot{m}^*} = 0.41 \left( \frac{V}{\varepsilon} \right)^{1/2}.$$

Характеристическое время смешения в тонких структурах выражается по формуле:

$$\tau^{**} = \tau^* \cdot \gamma^{*1/2}$$

В модели Магнуссена предполагается, что молекулярное смешение определяется массообменом между тонкими структурами и окружающим пространством. Выражение, объединяющее молекулярное смешение, массообмен между тонкими структурами и долю тонких структур, в которых протекает реакция:

$$\bar{R}_i = \bar{\rho} \cdot \dot{m} \cdot \chi \cdot \left( \frac{C_i^0}{\rho^0} - \frac{C_i^*}{\rho^*} \right)$$

Так же формулу для молекулярного смешения можно выразить через единицу объема и долю тонких структур:

$$R_i^* = \dot{m} \cdot \rho^* \cdot \left( \frac{C_i^0}{\rho^0} - \frac{C_i^*}{\rho^*} \right)$$

Таким образом, средняя концентрация *i*-го компонента может быть выражена через концентрацию этого компонента в реагирующих тонких структурах, и концентрацию, в окружающем пространстве:

$$\frac{\bar{C}_i}{\bar{\rho}} = \frac{C_i^*}{\rho^*} \cdot \gamma^* \cdot \chi + \frac{C_i^0}{\rho^0} \cdot (1 - \gamma^* \cdot \chi),$$

при подстановке данного выражения в уравнение для молекулярного смешения, его можно преобразовать выражение для массообмена между окружающей жидкостью и тонкими структурами в вид:

$$\bar{R}_i = \frac{\bar{\rho} \cdot \dot{m} \chi}{1 - \gamma^* \cdot \chi} \left( \frac{\bar{C}_i}{\bar{\rho}} - \frac{C_i^*}{\rho^*} \right),$$

аналогично:

$$R_i^* = \frac{\rho^* \cdot \dot{m}^*}{1 - \gamma^* \chi} \left( \frac{\bar{C}_i}{\bar{\rho}} - \frac{C_i^*}{\rho^*} \right)$$

Основываясь на приближении тонкой структуры, как гомогенного реактора, среднее значение расхода  $i$ -го компонента определяет скорость реакции в тонких структурах, так же на скорость реакции влияет наличие других компонентов, их химическое взаимодействие и состояние внутри реактора, включая температуру. Таким образом, для решения уравнений химической кинетики, необходимо решать уравнение теплового баланса, имеющее вид:

$$q^* = \frac{\rho^* \cdot \dot{m}^*}{1 - \gamma^* \cdot \chi} \cdot \sum_{i=1}^{N_{sp}} \left( \frac{\bar{C}_i}{\bar{\rho}} \cdot \bar{h}_i - \frac{C_i^*}{\rho^*} \cdot h_i^* \right)$$

Доля структур, в которых идет реакция, обозначается через  $\chi$ , и формула для этой величины выглядит следующим образом:

$$\chi = \frac{\tilde{C}_{pr} / (1 + r_{fu})}{\tilde{C}_{min} + \tilde{C}_{pr} / (1 + r_{fu})},$$

здесь  $\tilde{C}_{pr}$  – средняя концентрация продуктов сгорания,  
 $\tilde{C}_{min} = \min \{ \tilde{C}_{fu}; \tilde{C}_{ox} / r_{fu} \}$ , и  $r_{fu}$  – стехиометрическое соотношение, между топливом и окислителем.

Несмотря на то, что данная модель не учитывает реакции в окружающей среде, она может быть расширена, с включением дополнительных членов в уравнение. Это может быть необходимо для учета образования оксидов азота (что довольно важно, особенно при рассмотрении воздействия на окружающую среду), в первую очередь в предварительно перемешанных пламенах.

С учетом выше сказанного, средняя скорость реакции может быть выражена, как:

$$\frac{\bar{R}_i}{\bar{\rho}} = \gamma^* \cdot \chi \frac{R_i^*}{\rho^*} + (1 - \gamma^* \cdot \chi) \frac{R_i^0}{\rho^0}$$

Важно всегда помнить, что реагирующие вещества перемешиваются на молекулярном уровне. Быстрые реакции протекают, практически, только в тонких структурах, но некоторые, медленные реакции не успевают пройти, и выносятся из реактора, проходя в окружающем пространстве. В данном случае, можно использовать температуру окружающей среды, в качестве температуры тонких структур, при расчете скорости химических реакций.

В большом количестве задач горения, необходимо использовать ограничение бесконечной скорости химических реакций. Это может быть реализовано более точным заданием условий горения, и выбором одного из основных реагирующих компонентов, в качестве ограничивающего главного компонента. Предположив, что один из основных компонентов (окислитель или горючее), полностью израсходуется в реакторе, и тогда уравнения можно привести к виду:

$$\tilde{R}_{fu} = \frac{\tilde{\rho} \cdot \dot{m} \cdot \chi}{1 - \gamma^* \cdot \chi} \cdot \tilde{C}_{\min}$$

$$\tilde{R}_{fu}^* = \frac{\rho^* \cdot \dot{m}^*}{1 - \gamma^* \cdot \chi} \cdot \tilde{C}_{\min}$$

И тогда, температуру в реакторе и окружающей среде можно выразить по формулам:

$$T^* = T + \frac{\bar{C}_{\min} \cdot \Delta H_R}{\bar{\rho} \cdot C_p} - \frac{q^* (1 - \gamma^* \cdot \chi)}{\rho^* \cdot C_p \cdot \dot{m}^*},$$

$$T^0 = T - \frac{\bar{C}_{\min} \cdot \Delta H_R}{\bar{\rho} \cdot C_p} \frac{\gamma^* \cdot \chi}{1 - \gamma^* \cdot \chi} + \frac{q^* \cdot \gamma^* \cdot \chi}{\rho^* \cdot C_p \cdot \dot{m}^*}.$$

Существует интересный подход, позволяющий избежать детальной химической кинетики, который состоит в том, чтобы предварительно рассчитать равновесные концентрации основных реагентов, как функцию концентрации и температуры и предположить, что эти значения достигаются в реакторе.

Когда применяется подход с «быстрой» химией, время затухания,  $\tau_{ext}$ , должно быть предварительно вычислено, используя подход с детальной химической кинетики, и использовано в расчетах. Затухание наступает, когда  $\tau^* \leq \tau_{ext}$ .

Результаты расчетов горения с использованием модели EDC, а так же сопоставление с результатами экспериментов [58], приведены на рисунке 1.2.3

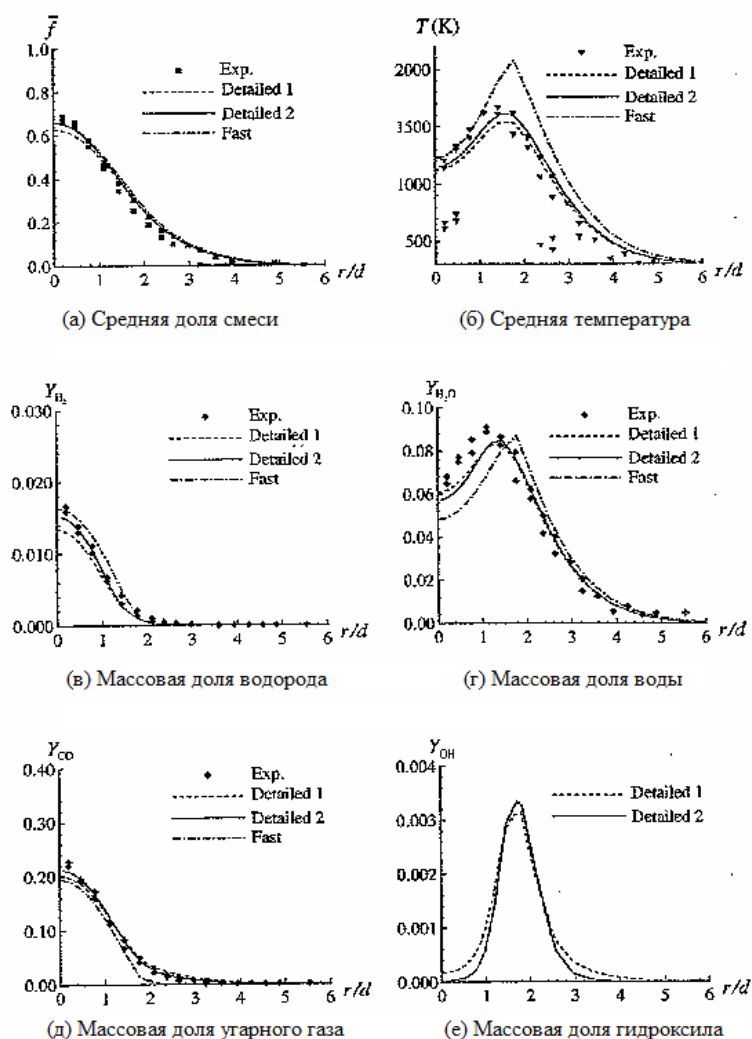


Рисунок 1.4. Результаты расчетов с использованием модели EDC.

Как видно, из рисунка 1.2.3, модель показывает хорошее совпадение с экспериментом в части расчетов концентраций компонентов реагирующей смеси, но большую погрешность при расчете температуры. Это может быть обусловлено использованием модели переноса напряжений Рейнольдса.

Существенным минусом данной модели является приближение к квазиламинарному состоянию, при высокой степени турбулизации потока.

Существует ряд моделей, исправляющих данный недостаток, например работы [59, 60].



Еще один недостаток моделей рассмотренных выше заключается в том, что в тонких структурах не учитываются влияние точек, расположенных вверх по потоку, а так же предысторию состояния во времени.

Исправлению этих недостатков посвящен ряд работ. Например, в работах [61, 62, 63], за авторством В.А. Сабельникова и К. Фюрби, предложена модель, учитывающая изменение состояния в реакторе. С этой целью была добавлена система дифференциальных уравнений, аналогичным уравнениям Навье-Стокса с учетом обмена между тонкими структурами и окружающим пространством. Модель называется Extended PaSR или EPaSR. Недостатком данной модели является увеличение количества решаемых уравнений.

В других работах В.А. Сабельникова были выдвинуты модели, упрощающие модель EPaSR, которые решают проблемы EDC модели, но не сильно увеличивающие размерность итоговой системы уравнений. Например, нестационарная модель PaSR или UPaSR, отличается тем, что система дифференциальных уравнений, для модели EDC решается не до установления, а считается, что псевдовремя равно физическому времени.

Расчеты, выполненные А.А. Ширяевой [56], с использованием различных моделей учета взаимодействия турбулентности и горения и без, результаты представлены ниже.

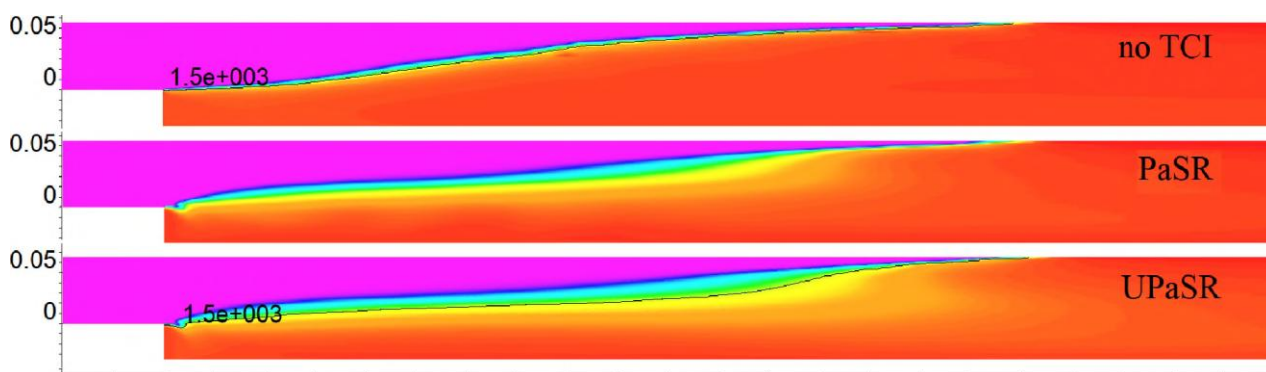


Рисунок 1.5. Поле средней температуры в расчетах без TCI и по UPaSR.

Модели класса PaSR обладают еще одним существенным недостатком – зависимость от точного моделирования тонких структур, имеющих размер мельчайших турбулентных вихрей, имеющих размер масштаба Колмогорова. Поскольку ни RANS модели, ни LES модели не позволяют точно рассчитать эти вихри. Единственная модель, позволяющая точно смоделировать вихри масштаба Колмогорова это DNS модель, требующая колоссальных вычислительных ресурсов, особенно при возрастании числа Рейнольдса.

#### **1.4. Статистические модели расчета взаимодействия турбулентности и горения**

В большинстве современных инженерных расчетах либо не учитывается влияние турбулентности на скорости химических реакций, либо учет идет с помощью моделей, использующих слишком большое количество допущений. Наиболее часто использующиеся на практике сегодня модели взаимодействия турбулентности и химических реакций разработаны для предварительно перемешанных пламен. Но для многих важных задач горения данные, сильно идеализированные, модели нельзя применять, ввиду сильно больших потенциальных погрешностей. Например: для ступенчатого горения, управляемое диффузионное горение, неоднородное, предварительно перемешанное, горение и другие.

Использование более реалистичных моделей кинетики диктуется двумя важными соображениями:

- учет эффектов «медленных» реакций, таких как образование оксидов азота, сажи и догорание в факеле двигателя.
- расчет воспламенения, срыва горения и связанные с ними явления.

Методы на основе функции распределения плотности вероятности начали развиваться во второй половине двадцатого века. В 1969 году Лундгрэн получил и

решил уравнение переноса для функции плотности вероятности для скорости [64]. В 1974-1976-х гг Допазо и О'Брайен [65, 66, 67], а так же Поуп [68, 97] получили и решили уравнение переноса для функции распределения плотности вероятности, включавшей в себя шесть переменных, описывающих термодинамическое состояние реагирующего потока и его состав.

В большинстве случаев принято считать, что среднее значение функции равна значению этой функции от средних значений её аргументов:

$$\bar{S}(x_i) = S(\bar{x}_i),$$

Данное допущение верно, при условии, что функция  $S(x_i)$  должна быть линейна относительно её аргументов или пульсация параметров равна нулю. Что не является верным, в случае, например, химически реагирующих течений, где скорость реакции может экспоненциально зависеть от температуры. Это допущение не приводит к большим ошибкам, в случае гомогенных, предварительно перемешанных пламен [70].

В случае диффузионного горения, зависимость скорости образования компонента от температуры и концентрации принимает нелинейную форму. В таком случае предположение о том, что средняя скорость образования компонента равна скорости от средних значений неверно.

Зная распределение вероятности  $x$ , можно так же получить распределение вероятности функции  $S(x)$ , которая определяется с помощью следующей формулой:

$$\rho(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\bar{x}) p(\bar{x}) d\bar{x}$$

и, следовательно:

$$\overline{\rho(x)} = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\bar{x}) \overline{p(\bar{x})} d\bar{x}$$

Аналогично и для всех остальных переменных. Элгобаши и Пун сделали вывод уравнений для замыкания данной системы уравнений. Формула справедлива для плотности, температура и концентраций.

Для идеализированного случая предварительно перемешанного горения система может быть замкнута с помощью одной скалярной переменной. В этом случае скорость образования компонента будет равна:

$$\overline{\dot{w}_s(T)} = \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{w}_s(T) P(T) dT$$

Некоторую сложность представляет собой выбор вида функции распределения плотности вероятности. Наиболее часто используемые функции – дельта-функция Дирака, функция Гаусса (нормальное распределение) и  $\beta$ -распределение.

Функция Хэвисайда определяется следующим образом:

$$H(y) = \begin{cases} 0, & y \leq 0, \\ 1, & y > 0. \end{cases}$$

Более хорошим определением функции Хэвисайда (для любой функции  $g(y)$ ), будет:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H(y) g(y) dy = \int_0^{+\infty} g(y) dy$$

Дельта-функция Дирака, определяемая через функцию Хэвисайда, имеет следующий вид:

$$\delta(y) = \frac{dH(y)}{dy}$$

Течение химически реагирующей газовой смеси описывается следующими уравнениями сохранения:

- уравнение неразрывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0$$

- уравнение движения:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i + \delta_{ji} p - \tau_{ij}) = 0, \quad i = 1, 2, 3$$

- уравнение массы  $i$ -го компонента:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho C_s) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j C_s + J_{s,j}) = \dot{w}_s, \quad s = 1, 2, \dots, N_C - 1$$

- уравнение энергии:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \frac{\partial}{\partial x_j} [u_j (\rho E + p) + q_j - u_i \tau_{ij}] = 0$$

В работе [70] С. Поуп, для моделирования взаимодействия турбулентности и горения использовал следующие допущения: низкое число Маха, отсутствие излучения и постоянное значение относительного давления. Используя эти допущения, можно получить уравнения состояния, которые связывают плотность, температуру, и другие термодимические свойства:

$$\begin{aligned} \rho(x_i, t) &= \bar{\rho}(C_\alpha[x_i, t], p_0), \\ T(x_i, t) &= \bar{T}(C_\alpha[x_i, t], p_0). \end{aligned}$$

В работе [71] средняя скорость образования компонента равна:

$$\bar{\dot{w}}_s = \int_0^\infty \int_0^\infty \dot{w}_s P(T, C_s) dT dC_s,$$

что, после интегрирования, дает следующее выражение:

$$\bar{w}_s = W_s (v'' - v') \left( \bar{k}_f \prod_{i=1}^{N_s} C_i^{v_i'} - \bar{k}_b \prod_{i=1}^{N_s} C_i^{v_i''} \right),$$

здесь

$$\bar{k}_f = \int_0^{+\infty} k_f P(T) dT,$$

аналогично и  $\bar{k}_b$

Поскольку в этой работе авторы рассматривали только влияние пульсаций температуры, то рассматривалась только функция распределения плотности вероятности для температуры. Рассмотрено два варианта функции распределения плотности вероятности – нормальное распределение и  $\beta$ -распределение. Функция для нормального распределения имеет вид:

$$P_T(T) = \frac{1}{\sqrt{2\pi T'T'}} \exp \left[ \frac{-(T - \bar{T})^2}{2T'T'} \right]$$

Поскольку нормальное распределение имеет пределы интегрирования  $(-\infty; +\infty)$ , что противоречит физике. Что бы уйти от этого противоречия, на пределы интегрирования накладываются искусственные ограничения, имеющие вид:

$$T_{min} = \bar{T} - \phi \sqrt{T'T'},$$

$$T_{max} = \bar{T} + \phi \sqrt{T'T'}$$

Для того, что бы учесть влияние оставшихся частей ФРПВ, которые тоже оказывают влияние, вводится поправка. Таким образом, функция распределения плотности вероятности становится равной:

$$P_T(T) = \frac{1}{\sqrt{2\pi T''^2}} \exp\left[-\frac{(T-T)''^2}{2T''^2}\right] \left[ H(T-T_{\min}) - H(T-T_{\max}) \right] + A_1 \delta(T-T_{\min}) + A_2 \delta(T-T_{\max}),$$

Второй возможный вид ФРПВ для температуры это  $\beta$ -распределение. В работе [72] Гиримажи предложил использовать  $\beta$ -распределение, для расчета процессов турбулентного смешения, с целью повышения точности моделирования данных процессов. В данной работе использовалась двухпараметрическая модель для  $\beta$ -распределения. Функция распределения плотности вероятности имеет вид:

$$P_T(T) = \frac{\Gamma(\beta_1 + \beta_2)}{\Gamma(\beta_1)\Gamma(\beta_2)} \left[ \theta^{\beta_1-1} (1-\theta)^{\beta_2-1} \right]$$

В данной формуле  $\Gamma(\beta)$  – гамма-функция,  $\theta$  – приведенная температура:

$$\theta = \frac{T - T_{\min}}{T_{\max} - T_{\min}}$$

Значение переменных  $\beta_1$  и  $\beta_2$  вычислялись по следующим формулам:

$$\beta_1 = \tilde{\theta} \left[ \frac{\tilde{\theta}(1-\tilde{\theta})}{\theta''^2} - 1 \right], \quad \beta_2 = (1-\tilde{\theta}) \left[ \frac{\tilde{\theta}(1-\tilde{\theta})}{\theta''^2} - 1 \right]$$

Среднее значение приведенной температуры и её дисперсия определялась согласно:

$$\tilde{\theta} = \frac{T - T_{\min}}{T_{\max} - T_{\min}},$$

$$\theta''^2 = \frac{T''^2}{(T_{\max} - T_{\min})^2}$$

В работе [32] Гаффни и Гиримажи рассмотрели влияние не только пульсаций температуры, но и пульсации концентраций. Для концентраций рассматривалась многомерная  $\beta$ -функция. Формула для функции распределения плотности выглядит следующим образом:

$$P_C(C_1, \dots, C_{N_c}) = \frac{\Gamma(\beta_1 + \beta_2 + \dots + \beta_{N_c})}{\Gamma(\beta_1) \cdot \Gamma(\beta_2) \cdot \dots \cdot \Gamma(\beta_{N_c})} C_1^{\beta_1-1} \cdot C_2^{\beta_2-1} \cdot \dots \cdot C_{N_c}^{\beta_{N_c}-1} \delta(1-S)$$

коэффициенты в этой формуле вычисляются следующим образом:

$$S = \sum_{m=1}^{N_c} C_m, \quad \beta_m = C_m \left( \frac{1-S_C}{\sigma_C} - 1 \right),$$

$$S_C = \sum_{m=1}^{N_c} (C_m)^2, \quad \sigma_C = \sum_{m=1}^{N_c} C_m^2$$

Дисперсии и ковариации в этом случае будут равны:

$$\overline{C_m'' C_n''} = \begin{cases} \sigma_C \frac{-C_m C_n}{1-S_C}, & m \neq n \\ \sigma_C \frac{C_m (1-C_n)}{1-S_C}, & m = n \end{cases}$$

В качестве тестовой задачи в этой работе было моделирование двумерного слоя смешения и горения водорода в воздухе. Расчетная область была 0.2 метра в длину и 0.05 метра в высоту. Статические давление и температуры были равны, соответственно, 1 атм и 1000 К. Скорость потока водорода была равна 3800 м/с, скорость потока воздуха – 1200 м/с. Профили массовых долей компонентов приведены на рисунке 1.5.1. Авторы провели ряд тестов, с разными условиями:

- без учета влияния турбулентных пульсаций на скорости реакций (Case 1);
- с учетом пульсаций температуры, но без учета пульсаций концентраций (Case 2);



- с учетом пульсаций концентраций, используя многомерное  $\beta$ -распределение (Case 3).

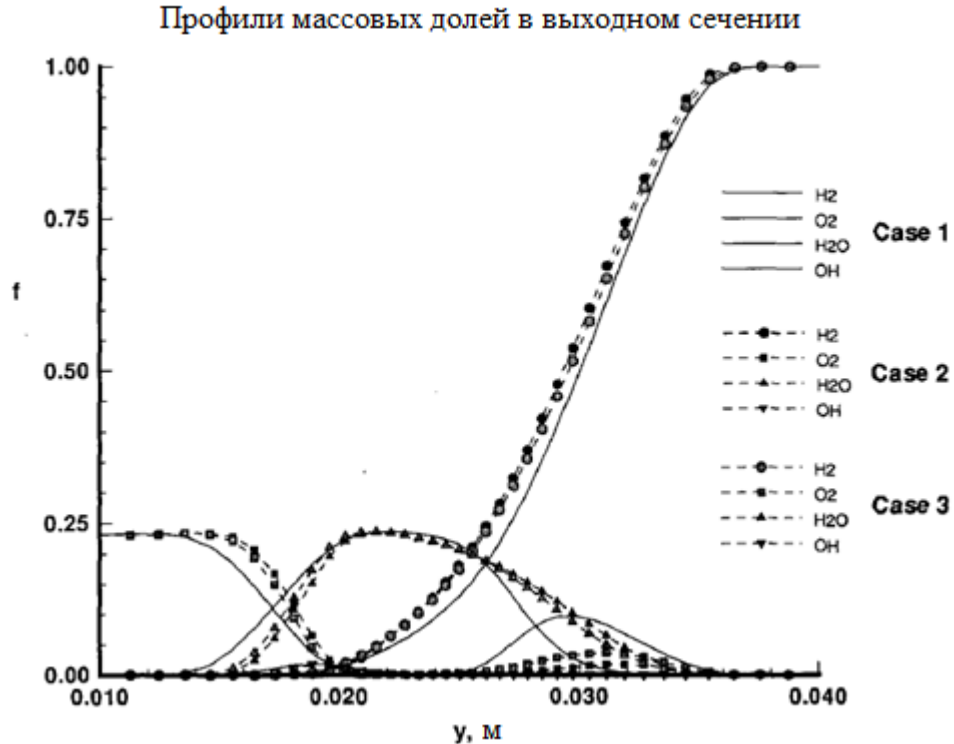


Рисунок 1.6. Профили массовых долей компонентов на выходе из расчетной области.

## 1.5. Влияние переменных чисел Прандтля и Шмидта на турбулентную струю.

### Влияние сжимаемости.

Одним из важнейших факторов при моделировании турбулентных процессов смешения и горения является учет влияния турбулентных чисел Прандтля и Шмидта. В классических моделях турбулентности эти числа принимаются постоянными, в то время как, в сверхзвуковых потоках они оказывают существенное влияние на турбулентные процессы. На больших скоростях так же существенное влияние оказывает фактор сжимаемости, ввиду снижения процессов смешения топлива с воздухом, на сверхзвуковой скорости.

На рисунке 1.7 показано влияние различных значений турбулентных чисел Прандтля/Шмидта на расчеты эксперимента Барроуса и Куркова [39].

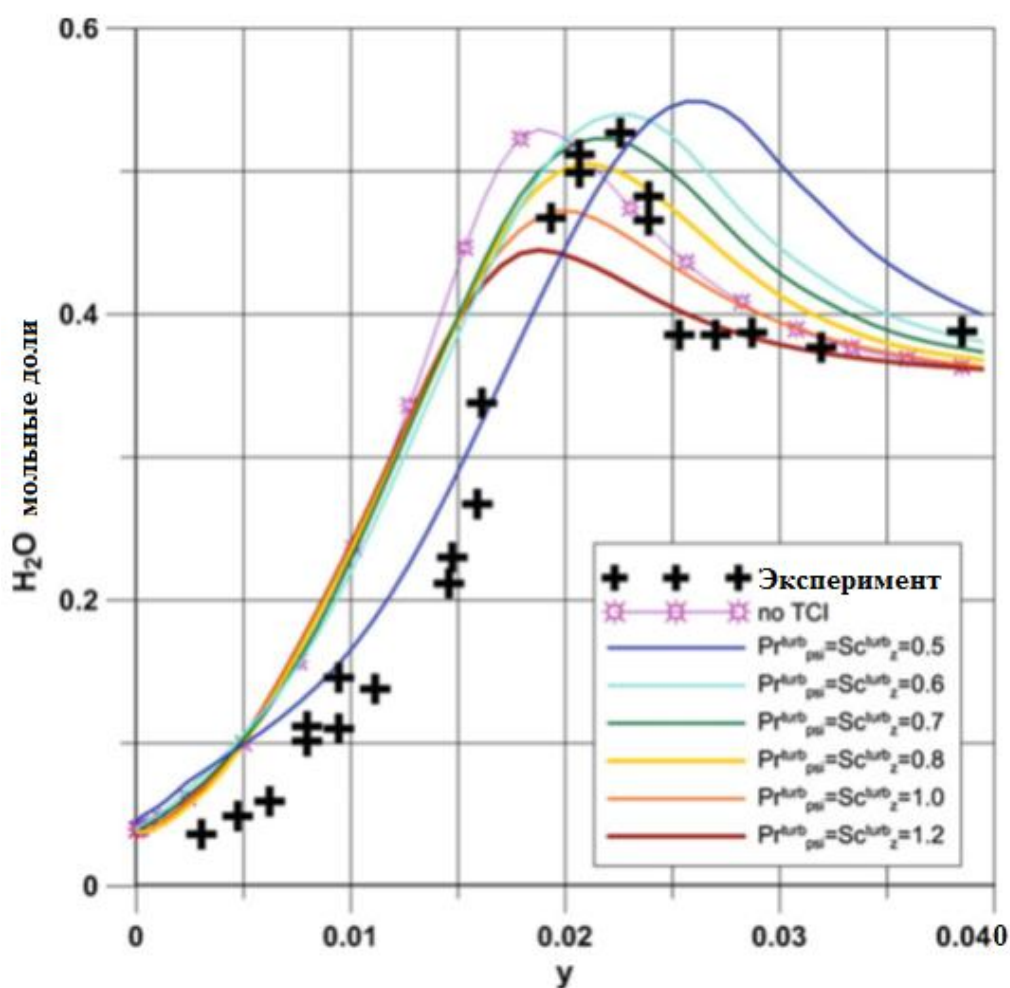


Рисунок 1.7. Влияние различных значений турбулентных чисел Прандтля/Шмидта на мольную долю воды [92].

В работе [73] Нагано разработал модель из двух уравнений для расчета процесса турбулентного смешения, используя  $k-\varepsilon$  модель, для замыкания системы уравнений. Эта модель была разработана для низкоскоростных потоков, и не подходит для высокоскоростных, так как не включает в себя эффекты сжимаемости.

Соммер, в работе [74], вышедшей в 1993 году представил модель с переменным значением турбулентного числа Прандтля. Несмотря на учет сжимаемости в уравнении энергии, в ней не учтены градиент давления и эффекты

диссипации, крайне важные для высокоскоростных потоков. Для замыкания системы уравнений, в этой работе так же использовалась  $k$ - $\varepsilon$  модель. Данные четыре уравнения позволили смоделировать процессы турбулентного смешения.

Гуо и др., в работе [75] создали модель с переменным числом Шмидта. Для расчета процессов турбулентного смешения в этой модели использовалось только одно уравнение. В сочетании с  $k$ - $\varepsilon$  моделью это дает только три уравнения для моделирования смешения в струе, что позволяет сократить время моделирования.

В работе [76], для моделирования влияния турбулентного числа Прандтля на течение предложены уравнения, для расчета турбулентного теплового потока:

$$-\overline{\rho h'' u_j''} = \bar{\rho} \left( \alpha_t \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} + D_t \sum_{s=1}^{N_c} \tilde{h}_s \frac{\partial \tilde{Y}_m}{\partial x_j} \right),$$

здесь  $\alpha_t$  – турбулентная температуропроводность, рассчитывается по следующей формуле:

$$\alpha_t = 0.5(C_h k \tau_h + \nu_t / \beta_h)$$

В данной формуле  $C_h$  и  $\beta_h$  – константы данной модели, а  $\tau_h$  вычислялась по формуле:

$$\tau_h = \frac{h''^2}{\varepsilon_h}, \quad \varepsilon_h = \overline{\alpha \left( \frac{\partial h''}{\partial x_i} \right)^2}$$

Значение констант, для данной модели приведены в [76].

При расчете с фиксированным числом Шмидта может возникнуть проблемы с определением его значения. При слишком большом значении реакции будут идти слишком быстро, а при слишком низком реакция вообще может не пойти. Ввиду этого, переменность числа Шмидта фактор, который необходимо учитывать.

Турбулентный коэффициент бинарной диффузии, вычисляется по формуле, предложенный в работе [77]:

$$D_t = 0.5(C_c k \tau_c + \nu_t / \beta_c)$$

переменные в данной формуле будут равны:

$$\tau_c = \frac{\sigma_c}{\varepsilon_c}, \quad \sigma_c = \sum_{s=1}^{N_c} C_s''^2, \quad \varepsilon_c = \sum_{s=1}^{N_c} D \overline{\left( \frac{\partial C_s''}{\partial x_i} \right)^2}$$

Значения констант, так же могут быть взяты из [77].

## 2. Математическая модель высокоскоростных химически неравновесных турбулентных течений

### 2.1. Основные дифференциальные уравнения сохранения

Для описания течения газа в рассматриваемой задаче используются следующие уравнения, описывающие основные законы сохранения.

#### 1) Уравнение неразрывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = S_\rho, \quad (2.1)$$

где  $\rho$  - плотность газовой смеси;  $\mathbf{V}$  - вектор скорости;  $S_\rho$  - источник, учитывающий массообмен с жидкими/твердыми частицами.

#### 2) Уравнение количества движения

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{V}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} \mathbf{V} - \mathbf{T}) + \nabla p = \mathbf{F}_u, \quad (2.2)$$

где  $p$  - давление;  $\mathbf{T}$  - тензор вязких напряжений;  $F_{u,i}$  - источник, учитывающий динамическое взаимодействие с жидкими/твердыми частицами.

#### 3) Уравнение сохранения массы химического компонента $s$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho C_s) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} C_s + \mathbf{J}_s) = \dot{w}_s + S_s, \quad s = 1, 2, \dots, N_C - 1, \quad (2.3)$$

где  $C_s = \rho_s / \rho$  - массовая доля компонента  $s$ ;  $\rho_s$  - плотность компонента  $s$ ;  $\dot{w}_s$  - скорость образования компонента  $s$  в результате химических реакций;  $N_C$  - количество компонентов газовой смеси;  $\mathbf{J}_s$  - вектор диффузионного потока;  $S_s$  - источник, связанный с межфазным взаимодействием.

#### 4) Уравнение полной энергии

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \nabla \cdot [\mathbf{V} (\rho E + p) + \mathbf{q} - \mathbf{V} \cdot \mathbf{T}] = F_h, \quad (2.4)$$

где  $E$  - полная энергия [Дж/кг];  $\mathbf{q}$  - плотность теплового потока, обусловленного теплопроводностью и диффузией;  $F_h$  - источник, учитывающий тепловое взаимодействие с жидкими/твердыми частицами.

## 2.2. Альтернативные формы записи основной системы уравнений

В декартовой системе координат система уравнений (2.1)-(2.4) имеет вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = S_\rho, \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i + \delta_{ji} p - \tau_{ij}) = F_{u,i}, \quad i = 1, 2, 3, \quad (2.6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho C_s) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j C_s + J_{s,j}) = \dot{w}_s + S_s, \quad s = 1, 2, \dots, N_C - 1, \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \frac{\partial}{\partial x_j} [u_j (\rho E + p) + q_j - u_i \tau_{ij}] = F_h, \quad (2.8)$$

где  $u_j$  - компонента скорости в  $j$ -ом направлении;  $\tau_{ij}$  - компонента тензора вязких напряжений.

В произвольной криволинейной системе координат все эти уравнения записываются в виде:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_i (\rho v^i) = S_\rho, \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho v^i) + \nabla_j (\rho v^j v^i + g^{ji} p - \tau^{ij}) = F_u^i, \quad i = 1, 2, 3, \quad (2.10)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho C_s) + \nabla_j (\rho v^j C_s + J_s^j) = \dot{w}_s + S_s, \quad s = 1, 2, \dots, N_C - 1, \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \nabla_j [v^j (\rho E + p) + q^j - v_i \tau^{ij}] = F_h, \quad (2.12)$$

где  $\nabla_i$  - ковариантная производная;  $v^k, v_k$  - соответственно контравариантные и ковариантные компоненты скорости;  $g^{ji}$  - контравариантные компоненты метрического тензора.

В дальнейшем будет использоваться, в основном, запись уравнений в декартовой системе координат, за исключением тех случаев, когда криволинейность системы координат имеет принципиальное значение.

### 2.3. Уравнения состояния

Давление газовой смеси складывается из парциальных давлений всех компонентов:

$$p = \sum_{s=1}^{N_c} p_s = \sum_{s=1}^{N_c} \rho_s \frac{R}{M_s} T = \rho \frac{R}{M_\Sigma} T \quad (2.13)$$

где  $T$  - температура;  $R$  - универсальная газовая постоянная;  $M_\Sigma$  - кажущаяся молекулярная масса газовой смеси:

$$M_\Sigma = \left( \sum_{s=1}^{N_c} \frac{C_s}{M_s} \right)^{-1} \quad (2.14)$$

Полная энергия состоит из внутренней и кинетической составляющих:

$$E = e + \frac{u_k^2}{2}, \quad (2.15)$$

Внутренняя энергия газовой смеси складывается из внутренних энергий отдельных компонентов  $e_s$ :

$$e = \sum_{s=1}^{N_c} C_s e_s \quad (2.16)$$

Энтальпия определяется по формуле

$$h = e + \frac{p}{\rho} = \sum_{s=1}^{N_c} C_s e_s + \sum_{s=1}^{N_c} C_s \frac{R}{M_s} T = \sum_{s=1}^{N_c} C_s \left( e_s + \frac{R}{M_s} T \right) = \sum_{s=1}^{N_c} C_s h_s \quad (2.17)$$

где

$$h_s = e_s + \frac{R}{M_s} T - \quad (2.18)$$

энтальпия компонента  $s$ .

Для  $h_s$  используются справочные термодинамические формулы в зависимости от температуры [1]:

$$\frac{h_s(T)}{R_s T} = a_{1,s} + a_{2,s} \frac{T}{2} + a_{3,s} \frac{T^2}{3} + a_{4,s} \frac{T^3}{4} + a_{5,s} \frac{T^4}{5} + \frac{b_{1,s}}{T}, \quad (2.19)$$

где  $R_s = R/M_s$  - газовая постоянная компонента  $s$ .

#### 2.4. Вязкие напряжения, тепловые/диффузионные потоки

Предполагается, что газ подчиняется законам ньютоновской жидкости и для него справедлива гипотеза Стокса:

$$\tau_{ij} = \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij}, \quad (2.20)$$

где  $\mu$  - коэффициент динамической вязкости.

Как уже указывалось, тепловой поток  $q_j$ , входящий в уравнение энергии (2.8), обусловлен теплопроводностью газа и переносом теплоты за счет диффузии:

$$q_j = q_{\lambda,j} + q_{D,j} \quad (2.21)$$

Плотность теплового потока  $q_{\lambda,j}$ , обусловленного теплопроводностью, определяется законом Фурье:

$$q_{\lambda,j} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j}, \quad (2.22)$$

а перенос за счет диффузии - соотношением:

$$q_{D,j} = \sum_s V_{s,j} \rho_s h_s = \sum_s J_{s,j} h_s \quad (2.23)$$

Здесь  $\lambda$  - коэффициент теплопроводности;  $V_{s,i}$  - скорость диффузии компонента  $s$ .

Для диффузионного потока используется модифицированная формула Фика [2]:

$$J_{s,i} = g_{s,i} - C_s \sum_{r \neq s} g_{r,i}, \quad (2.24)$$



где

$$g_{s,i} = -\rho D_s \frac{\partial C_s}{\partial x_i}, \quad (2.25)$$

$D_s$  - коэффициент диффузии компонента  $s$ . Такой подход обеспечивает условие равенства нулю суммарного диффузионного потока всех компонентов и является хорошей аппроксимацией диффузионных потоков, полученных их уравнений Стефана-Максвелла [3].

## 2.5. Переносные свойства

Для расчета переносных свойств газовой смеси использовалась модель, основанная на правиле смешения Уилки [4], аппроксимации Блоттера для вязкости [5] и справочных данных МакБрайда [1].

Для вязкости газовой смеси используется формула Уилки [4]:

$$\mu = \sum_{s=1}^{N_c} \frac{X_s \mu_s}{\phi_s}, \quad (2.26)$$

где  $X_s$  - мольная доля компонента  $s$ ,

$$\phi_s = \sum_{r=1}^{N_c} X_r \left[ 1 + \sqrt{\frac{\mu_s}{\mu_r}} \left( \frac{M_r}{M_s} \right)^{1/4} \right]^2 \left[ \sqrt{8 \left( 1 + \frac{M_s}{M_r} \right)} \right]^{-1} \quad (2.27)$$

$\mu_s$  - динамическая вязкость компонента  $s$ , определяемая по формуле [5]:

$$\mu_s = 0.1 \exp \left[ (A_s \ln T + B_s) \ln T + C_s^* \right] \quad (2.28)$$

где  $A_s, B_s, C_s^*$  - справочные константы [1].

Коэффициент теплопроводности задается формулой:

$$\lambda = \sum_s \frac{X_s \lambda_s}{\phi_s}, \quad (2.29)$$

Коэффициенты теплопроводности компонентов  $\lambda_s$  определяются по формулам аналогичным формуле (2.28), а коэффициенты, входящие в формулы, берутся из справочника [1].

Диффузионный коэффициент  $D_s$  можно выразить через коэффициент теплопроводности и число Льюиса  $Le_s$ :

$$D_s = \frac{Le_s \lambda}{\rho c_p}, \quad (2.30)$$

где  $c_p$  - удельная (на единицу массы) теплоемкость газовой смеси при постоянном давлении:

$$c_p = \sum_{s=1}^{N_c} C_s c_{p,s} \quad (2.31)$$

Для теплоемкости компонента  $s$  из формулы (2.19) следует соотношение

$$c_{p,s}(T) = \frac{dh_s}{dT} = R_s (a_{1,s} + a_{2,s}T + a_{3,s}T^2 + a_{4,s}T^3 + a_{5,s}T^4) \quad (2.32)$$

Если положить число Льюиса постоянным и одинаковым для всех компонентов  $Le$ , то для диффузионного потока (2.24) получается упрощенная формула:

$$J_{s,i} = -\rho D \frac{\partial C_s}{\partial x_i} = -Le \frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial C_s}{\partial x_i}, \quad (2.33)$$

где  $D = \frac{Le \lambda}{\rho c_p}$  - обобщенный коэффициент диффузии.

При таком подходе можно получить упрощенную формулу для теплового потока. Из формулы (2.17) следует

$$\frac{\partial h}{\partial x_i} = \sum_{s=1}^{N_c} \frac{\partial C_s}{\partial x_i} h_s + \sum_{s=1}^{N_c} C_s \frac{\partial h_s}{\partial x_i} = \sum_{s=1}^{N_c} \frac{\partial C_s}{\partial x_i} h_s + \sum_{s=1}^{N_c} C_s \frac{dh_s}{dT} \frac{\partial T}{\partial x_i} = \sum_{s=1}^{N_c} \frac{\partial C_s}{\partial x_i} h_s + c_p \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (2.34)$$

Отсюда

$$\frac{\partial T}{\partial x_i} = \frac{1}{c_p} \left( \frac{\partial h}{\partial x_i} - \sum_{s=1}^{N_c} \frac{\partial C_s}{\partial x_i} h_s \right) \quad (2.35)$$

Таким образом, для теплового потока получается следующая формула:

$$\begin{aligned}
q_i &= -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_s J_{s,i} h_s = -\lambda \frac{1}{c_p} \left( \frac{\partial h}{\partial x_i} - \sum_{s=1}^{N_c} \frac{\partial C_s}{\partial x_i} h_s \right) - \sum_s \text{Le} \frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial C_s}{\partial x_i} h_s \\
&= -\frac{\lambda}{c_p} \left[ \frac{\partial h}{\partial x_i} + (\text{Le} - 1) \sum_s \frac{\partial C_s}{\partial x_i} h_s \right]
\end{aligned} \tag{2.36}$$

Если диффузия полностью подобна теплопроводности ( $\text{Le}=1$ ), то получается очень простая формула для теплового потока

$$q_i = -\frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial h}{\partial x_i} = -\frac{\mu}{\text{Pr}} \frac{\partial h}{\partial x_i} \tag{2.37}$$

Числа Прандтля, Шмидта и Льюиса (точнее, Льюиса-Семенова) определяются по формулам:

$$\text{Pr} = \frac{\mu c_p}{\lambda}, \quad \text{Sc} = \frac{\mu}{\rho D}, \quad \text{Le} = \frac{\rho c_p D}{\lambda} = \frac{\text{Pr}}{\text{Sc}} \tag{2.38}$$

Замечание. В англоязычной литературе иногда встречается обратная величина для определения числа Льюиса ( $\text{Le} = \text{Sc} / \text{Pr}$ ).

## 2.6. Дополнительные уравнения для термически неравновесного газа

### 2.6.1. Уравнение колебательной энергии

В том случае, когда наблюдается существенная колебательная неравновесность, к основным уравнениям следует добавить уравнения переноса колебательной энергии. Основные уравнения, для термически неравновесного газа, представлены в работе автора [113].

Для колебательной энергии в данной работе используется подход, основанный на модели гармонического осциллятора. При использовании этой модели среднее число  $m$ -ых колебательных квантов  $\alpha_m$ , приходящихся на одну молекулу, определяется формулой

$$\alpha_m = r_m \frac{1}{\exp(\theta_m / T_{v,m}) - 1} \tag{2.39}$$

где  $\theta_m$  - характеристическая колебательная температура  $m$ -ой колебательной моды;  $T_{v,m}$  - соответствующая колебательная температура;  $r_m$  - кратность вырождения  $m$ -ой моды молекулы.

Энергия одного кванта равна  $h\nu_m = k\theta_m$ , где  $k$  - постоянная Больцмана,  $k=1,3806488 \cdot 10^{-23}$  [Дж/К].

Удельная (на единицу массы компонента, к которому относится данная мода) колебательная энергия  $m$ -ой колебательной моды  $e_{v,m}$  связана с  $\alpha_m$  следующим соотношением:

$$e_{v,m} = \frac{R\theta_m}{M_{s(m)}} \alpha_m = \frac{r_m R_{s(m)} \theta_m}{\exp(\theta_m / T_{v,m}) - 1} \quad (2.40)$$

где  $M_{s(m)}$  - молярная масса компонента  $s$ , к которому относится  $m$ -ая колебательная мода;  $R_{s(m)} = R / M_{s(m)}$  - газовая постоянная данного компонента.

Отметим, что в формуле (2.40) удельная энергия  $e_{v,m}$  относится к единице массы компонента, а не к единице массы газовой смеси. Если нас интересует, сколько колебательной энергии содержится в единице массы смеси, то следует использовать величину

$$E_{v,m} = C_{s(m)} e_{v,m} = C_{s(m)} \frac{r_m R_{s(m)} \theta_m}{\exp(\theta_m / T_{v,m}) - 1}, \quad m = 1, 2, \dots, N_M \quad (2.41)$$

Уравнение переноса колебательной энергии имеет следующий вид [36]:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E_{v,m}) + \nabla \cdot (\rho E_{v,m} \mathbf{V}) = \rho \dot{E}_{v,m} - \nabla \cdot \mathbf{q}_{v,m} \quad (2.42)$$

где  $\rho \dot{E}_{v,m}$  - источник колебательной энергии;

$$\mathbf{q}_{v,m} = -\frac{\mu}{Sc} \left[ C_{s(m)} (c_v)_{v,m} \nabla T_{v,m} + e_{v,m} \nabla C_{s(m)} \right] \quad (2.43)$$

Первый член в правой части этой формулы обусловлен колебательной теплопроводностью, а второй диффузией химического компонента.

$$(c_v)_{v,m} = \frac{\partial e_{v,m}}{\partial T_{v,m}} = r_m R_{s(m)} \left( \frac{\theta_m}{T_{v,m}} \right)^2 \frac{\exp(\theta_m / T_{v,m})}{[\exp(\theta_m / T_{v,m}) - 1]^2} \quad (2.44)$$

### 2.6.2. Механизмы колебательного энергетического обмена

В многокомпонентной смеси двухатомных и многоатомных молекул возбуждение или дезактивация колебательных степеней свободы молекул при неупругих соударениях может происходить несколькими путями: 1) путем непосредственного перехода кинетической энергии сталкивающихся молекул в колебательную энергию, и наоборот (процесс прямого возбуждения или дезактивации), обозначаемый как T-V (V-T) переход; 2) путем обмена энергией между колебательными степенями свободы сталкивающихся молекул (процесс колебательно-колебательного обмена), обозначаемый как V-V переход. V-V переходы бывают как внутримолекулярные, так и межмолекулярные; 3) вследствие спонтанной излучательной дезактивации.

Рассмотрим следующие энергетические переходы [18]:

#### *V-T процессы:*

- |   |   |
|---|---|
| 1. $N_2(1) + M \rightleftharpoons N_2(0) + M$       | 8. $H_2O(100) + M \rightleftharpoons H_2O(000) + M$ |
| 2. $CO_2(01^10) + M = CO_2(00^00) + M$              | 9. $H_2O(001) + M \rightleftharpoons H_2O(000) + M$ |
| 3. $CO(1) + M \rightleftharpoons CO(0) + M$         | 10. $O_2(1) + M \rightleftharpoons O_2(0) + M$      |
| 4. $H_2O(010) + M \rightleftharpoons H_2O(000) + M$ | 11. $OH(1) + M \rightleftharpoons OH(0) + M$        |
| 5. $H_2(1) + M \rightleftharpoons H_2(0) + M$       | 12. $CO_2(00^01) + M = CO_2(00^00) + M$             |
| 6. $HCl(1) + M \rightleftharpoons HCl(0) + M$       | 13. $Cl_2(1) + M \rightleftharpoons Cl_2(0) + M$    |
| 7. $NO(1) + M \rightleftharpoons NO(0) + M$         |   |

#### *внутримолекулярные V-V процессы:*

- |  |  |
|--|--|
| 14. $CO_2(00^01) + M = \begin{cases} CO_2(03^10) + M \\ CO_2(11^10) + M \end{cases}$ | 16. $H_2O(100) + M \rightleftharpoons H_2O(020) + M$ |
| 15. $CO_2(10^00) + M = CO_2(02^00) + M$  | 17. $H_2O(001) + M \rightleftharpoons H_2O(020) + M$ |
|  | 18. $H_2O(001) + M \rightleftharpoons H_2O(100) + M$ |

#### *межмолекулярные V-V' процессы:*



Общий вид  $V-T$  процессов (1-13):



где  $A^*$  - колебательно возбужденное состояние молекулы  $A$ . Скорость такого процесса определяет по формуле вида:

$$\frac{d\alpha_A}{dt}\Big|_{VT} = \frac{1}{\tau_A}(\alpha_A^0 - \alpha_A), \quad (2.48)$$

где  $\tau_A$  - время релаксации процесса  $V-T$  для колебательно возбужденной молекулы  $A^*$ ; оно зависит от характерных времен релаксации  $\tau_{A,s}$  при столкновении со всеми молекулами, входящими в газовую смесь:

$$\frac{1}{\tau_A} = \sum_{s=1}^{N_c} \frac{X_s}{\tau_{A,s}}, \quad (2.49)$$

$\alpha_A$  - среднее число колебательных квантов  $A^*$ , приходящихся на одну молекулу  $A$ ;  $\alpha_A^0$  - равновесное значение  $\alpha_A$  при поступательной температуре газа  $T$ ;  $X_s$  - мольная доля компонента  $s$ .

Для  $V-V$  процесса



справедливы следующие формулы [113]:

$$\frac{d\alpha_A}{dt}\Big|_{VV} = \frac{X_B}{\tau_{AB}} \left[ (1 + \alpha_A)\alpha_B \exp\left(\frac{\theta_B - \theta_A}{T}\right) - (1 + \alpha_B)\alpha_A \right] \quad (2.51)$$

$$\frac{d\alpha_B}{dt}\Big|_{VV} = \frac{X_A}{\tau_{AB}} \left[ (1 + \alpha_B)\alpha_A - (1 + \alpha_A)\alpha_B \frac{\exp(\theta_B / T)}{\exp[\theta_A / T]} \right] \quad (2.52)$$

## 2.7. Химическая кинетика

### 2.7.1. Общие положения

Скорость образования компонента в результате химических реакций  $\dot{w}_s$  складывается из скоростей всех реакций, в которых он участвует

$$\dot{w}_s = M_s \sum_{k=1}^K (v_{k,s}'' - v_{k,s}') R_k, \quad (2.53)$$

где  $K$  – число реакций, которые протекают в химически реагирующей системе;  $\nu'_{k,s}$  – стехиометрический коэффициент компонента  $s$  в  $k$ -ой прямой реакции (слева направо);  $\nu''_{k,s}$  – стехиометрический коэффициент компонента  $s$  в  $k$ -ой обратной реакции (справа налево);  $R_k$  – скорость  $k$ -ой химической реакции.

Обычно химическую реакцию под номером  $k$  представляют в виде:



где  $N_C$  – число компонентов,  $I_s$  – компонент под номером  $s$ .

Скорость химической реакции  $R_k$  определяется как изменение мольной (молярной) концентрации одного из реагирующих веществ за единицу времени, т.е. размерность  $R_k$  равна  $[\text{кмоль м}^{-3} \text{с}^{-1}]$ .

Пусть  $[I_s]$  – мольная концентрация компонента  $s$  – т.е. количество молей (киломолей) данного вещества в единице объема. Очевидно, что

$$[I_s] = \frac{\rho_s}{M_s} = \frac{\rho C_s}{M_s} \quad (2.55)$$

Скорость химической реакции определяется на основе закона действующих масс:

$$R_k = \left( F_k \prod_{s=1}^{N_C} [I_s]^{\nu'_{k,s}} - B_k \prod_{s=1}^{N_C} [I_s]^{\nu''_{k,s}} \right) \quad (2.56)$$

где  $F_k$  и  $B_k$  – коэффициенты скоростей прямой и обратной  $k$ -ой реакции, соответственно),  $n_k = \sum_{s=1}^{N_C} \nu_{k,s}$  – порядок реакции.

Коэффициенты скоростей реакций рассчитываются по формулам:

$$\begin{aligned} F_k &= A_k T^{\beta_k} \exp\left(-\frac{T_k}{T}\right) = A_k T^{\beta_k} \exp\left(-\frac{E_k}{R_U T}\right), \\ B_k &= A_k T^{\beta_k} \exp\left(-\frac{T_k}{T}\right) = A_k T^{\beta_k} \exp\left(-\frac{E_k}{R_U T}\right) \end{aligned} \quad (2.57)$$



где  $A_k$  - предэкспоненциальный множитель,  $\beta_k$  - безразмерный температурный показатель степени,  $T_k$  - температура активации,  $T$  - температура,  $E_k$  - энергия активации.

Константы  $A_k, \beta_k, T_k$  имеют разное значение для прямой и обратной реакций. Существует два способа задания этих констант:

- 1) задаются все константы для прямой и обратной реакции,
- 2) задаются константы для прямой реакции, а скорость обратной реакции определяется по формуле

$$B = F / K_C \quad (2.58)$$

(индекс « $k$ » для упрощения записи опущен, но подразумевается). Константа равновесия  $K_C$  определяется с помощью свободной энергии Гиббса:

$$K_C = \left( \frac{p_0}{RT} \right)^{\nu} \exp \left[ - \sum_{s=1}^{N_c} (\nu_s'' - \nu_s') \frac{g_s}{R_s T} \right], \quad (2.59)$$

где:  $\nu = \sum_{k=1}^{N_c} (\nu_s'' - \nu_s')$ ;  $p_0 = 10^5$  [Па];  $R = 8314.41 \left[ \frac{\text{Дж}}{\text{кмоль} \cdot \text{К}} \right]$ ;  $R_s$  - газовая постоянная компонента  $s$ ;  $g_s = h_s - sT$  - энергия Гиббса;  $R$  - универсальная газовая постоянная.

Для определения теплоемкостей, энтальпий и энтропий компонентов можно использовать полиномы (2.32), (2.19) и

$$\frac{s_s(T)}{R_s} = a_{1,s} \ln(T) + a_{2,s} T + a_{3,s} \frac{T^2}{2} + a_{4,s} \frac{T^3}{3} + a_{5,s} \frac{T^4}{4} + b_{2,s}, \quad (2.60)$$

где  $R_s$  - газовая постоянная компонента,

$$h_s(T) = [h_s(T) - h_s(0)] + h_s(0) = [h_s(T) - h_s(0)] + h_s^0, \quad (2.61)$$

$T_0 = 298.15 \text{ K}$  - стандартная температура;  $h_s(0)$  - химическая энергия компонента при  $0 \text{ K}$ ;  $h_s^0 = h_s(T_0)$  - энтальпия компонента при стандартной температуре  $T_0$ , которую принимают равной

$$h_s^0 = \Delta_f H_s^0(T_0), \quad (2.62)$$

$\Delta_f H_s^0(T_0)$ - энтальпия образования (теплота образования) компонента из простых веществ при температуре  $T$  и стандартных условиях из простых веществ. В качестве простых веществ выбирают химические компоненты в их естественном фазовом и химическом состоянии при данной температуре.

При использовании для определения термодинамических свойств полиномов вида (2.32), (2.19), (2.60) энергия Гиббса задается формулой

$$\frac{g_s}{R_s T} = \frac{h_s}{R_s T} - \frac{s_s}{R_s} = a_{1,s} [1 - \ln(T)] - a_{2,s} \frac{T}{2} - a_{3,s} \frac{T^2}{6} - a_{4,s} \frac{T^3}{12} - a_{5,s} \frac{T^4}{20} + \frac{b_{1,s}}{T} - b_{s,2} \quad (2.63)$$

Упрощенная формула получается без учёта изменения теплоёмкости реакции (так называемое первое приближение Улиха):

$$\Delta G^0 = \Delta H_{298}^0 - T \Delta S_{298}^0 \quad (2.64)$$

$$K_C = \left( \frac{p_0}{R_U T} \right)^{\nu} \exp \left[ \frac{\Delta S_{298}^0}{R_U} \right] \exp \left[ \frac{-\Delta H_{298}^0}{R_U T} \right] \quad (2.65)$$

Выбор набора элементарных реакций зависит от конкретной задачи.

### 2.7.2. Химические реакции диссоциации воздуха

В работе [2] предложено использовать систему реакций, представленную в таблице 2.1.

Таблица 2.1

	Реакция	A	$\beta$	$T_k$ (K)
	Диссоциация			
1	$N_2 + M = N + N + M$ (M=N <sub>2</sub> , O <sub>2</sub> , NO, N <sub>2</sub> <sup>+</sup> , O <sub>2</sub> <sup>+</sup> , NO <sup>+</sup> )	7.0E+21	-1.60	113200
2	$N_2 + M = N + N + M$ (M=N, O, N <sup>+</sup> , O <sup>+</sup> )	3.0E+22	-1.60	113200
3	$O_2 + M = O + O + M$ (M= N <sub>2</sub> , O <sub>2</sub> , NO, N <sub>2</sub> <sup>+</sup> , O <sub>2</sub> <sup>+</sup> , NO <sup>+</sup> )	2.0E+21	-1.50	59500
4	$O_2 + M = O + O + M$ (M=N, O, N <sup>+</sup> , O <sup>+</sup> )	1.0E+22	-1.50	59500
5	$NO + M = N + O + M$ (M= N <sub>2</sub> , O <sub>2</sub> , NO, N <sub>2</sub> <sup>+</sup> , O <sub>2</sub> <sup>+</sup> , NO <sup>+</sup> )	5.0E+15	0.00	75500
6	$NO + M = N + O + M$ (M=N, O, N <sup>+</sup> , O <sup>+</sup> )	1.1E+17	0.00	75500
	Обменные реакции			
7	$N_2 + O = NO + N$	5.7E+12	0.42	42938
8	$NO + O = O_2 + N$	8.4E+12	0.00	19400

В таблице 2.1 используются следующие стандартные для физ. химии размерности:  $см^3$ , моль, с, K.

### 2.7.3. Химические реакции горения водорода и окиси углерода в воздухе

В работе [6] использовалась система реакций, представленная в таблице 2.2

Таблица 2.2

№	Реакция	Коэффициент скорости прямой реакции, $F_k$
1	$\text{H} + \text{O}_2 = \text{OH} + \text{O}$	$8.650 \cdot 10^{11} \cdot T^{-0.24} \cdot \exp(-8220/T)$
2	$\text{O} + \text{H}_2 = \text{OH} + \text{H}$	$1.5 \cdot 10^4 \cdot T^{2.0} \cdot \exp(-3800/T)$
3	$\text{OH} + \text{H}_2 = \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	$2.53 \cdot 10^5 \cdot T^{1.48} \cdot \exp(-1700/T)$
4	$2 \text{OH} = \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	$1.5 \cdot 10^6 \cdot T^{1.14} \cdot \exp(-50/T)$
5	$2 \text{H} + \text{M} = \text{H}_2 + \text{M}$	$9.72 \cdot 10^{10} \cdot T^{-0.6}$
6	$\text{H} + \text{OH} + \text{M} = \text{H}_2\text{O} + \text{M}$	$2 \cdot 10^{14} \cdot T^{-1}$
7	$2 \text{O} + \text{M} = \text{O}_2 + \text{M}$	$1.89 \cdot 10^7 \cdot \exp(900/T)$
Размерность $F_k$ для бимолекулярных реакций 1-4 - $\left[ \frac{\text{м}^3}{\text{кмоль} \cdot \text{сек}} \right]$ , для реакций с третьим телом 5,6,7 - $\left[ \frac{\text{м}^6}{\text{кмоль}^2 \cdot \text{сек}} \right]$ .		

Используется следующая сравнительная эффективность третьего тела, взятая из работы [7]:

Таблица 2.3.

М	Ar	N <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	CO	CO <sub>2</sub>
Эфф.	0.35	0.4	0.4	1.0	6.5	0.75	1.5

Практика показывает, что такая схема приемлема для задач развитого горения. Когда важны проблемы воспламенения и срыва горения или догорания, указанную систему реакций необходимо расширить, добавив реакции, включающие такие компоненты, как  $\text{H}_2\text{O}_2$  и  $\text{HO}_2$

Наиболее часто используется система реакций Коннэра и др. [8], приведенная в табл.2.4.

В этой таблице используются следующие стандартные для физической химии размерности:  $см^3$ ,  $моль$ ,  $с$ ,  $кал$ ,  $К$ . Скорости реакций 14,19 берутся как суммы двух выражений. У тех компонентов, для которых отсутствует информация в правом столбце таблицы, эффективность третьего тела принимается равной 1. В реакциях 9, 15 верхнее выражение используется при обычных и низких давлениях, нижнее – при высоких. В то время как по классической теории считается, что константы скорости реакций являются функцией температуры, на самом деле многие химические реакции также являются функцией давления. Реакции 9 и 15 являются примерами этого. При очень высоких давлениях константа скорости может быть определена одним набором параметров и при очень низких давлениях другим набором параметров.

Метод, предложенным Трое и др., использует сшивание этих двух предельных случаев для промежуточного давления [9]. Используя оба набора параметров, определяются константы скорости для высокого давления  $k_{\infty}$  и  $k_0$ .

Таблица 2.4.

№	Реакция	$F_k$			$B_k$			Эфф. 3-го тела
		$A$	$\beta$	$E$	$A$	$\beta$	$E$	
1	$H+O_2 = O+OH$	1.915E+14	0.00	1.644E+04	5.481E+11	0.39	-2.930E+02	
2	$O+H_2 = H+OH$	5.080E+04	2.67	6.292E+03	2.667E+04	2.65	4.880E+03	
3	$OH+H_2 = H+H_2O$	2.160E+08	1.51	3.430E+03	2.298E+09	1.40	1.832E+04	
4	$O+H_2O = OH+OH$	2.970E+06	2.02	1.340E+04	1.465E+05	2.11	-2.904E+03	
5	$H_2+M = H+H+M$	4.577E+19	-1.40	1.044E+05	1.146E+20	-1.68	8.200E+02	$H_2/2.5/$ $H_2O/12.0/$
6	$O+O+M = O_2+M$	6.165E+15	-0.50	0.000E+00	4.515E+17	-0.64	1.189E+05	$H_2/2.5/$ $H_2O/12.0/$ $Ar/0.83/$
7	$O+H+M = OH+M$	4.714E+18	-1.00	0.000E+00	9.880E+17	-0.74	1.021E+05	$H_2/2.5/$ $H_2O/12.0/$ $Ar/0.75/$
8	$H+OH+M = H_2O+M$	4.500E+22	-2.00	0.000E+00	1.912E+23	-1.83	1.185E+05	$H_2/0.73/$ $H_2O/12.0/$ $Ar/0.38/$
9	$H+O_2+M = HO_2+M$	3.4820E+16	-0.411	-1.115E+3				$H_2/1.3/$ $H_2O/14.0/$ $Ar/0.67/$
	$H+O_2 = HO_2$	1.475E+12	0.60	0.000E+00	3.090E+12	0.53	4.887E+04	
10	$HO_2+H = H_2+O_2$	1.660E+13	0.00	8.230E+02	3.164E+12	0.35	5.551E+04	

11	HO <sub>2</sub> +H = OH+OH	7.079E+13	0.00	2.950E+02	2.027E+10	0.72	3.684E+04	
12	HO <sub>2</sub> +O = OH+O <sub>2</sub>	3.250E+13	0.00	0.000E+00	3.252E+12	0.33	5.328E+04	
13	HO <sub>2</sub> +OH = H <sub>2</sub> O+O <sub>2</sub>	2.890E+13	0.00	-497.	5.861E+13	0.24	6.908E+04	
14	HO <sub>2</sub> +HO <sub>2</sub> = H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +O <sub>2</sub>	4.200E+14	0.00	1.198E+04	4.634E+16	-0.35	5.067E+04	
		1.300E+11	0.00	-1629.	1.434E+13	-0.35	3.706E+04	
15	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +M = OH+OH+M	1.202E+17	0.00	45500.				H <sub>2</sub> /2.5/ H <sub>2</sub> O/12.0/ Ar/0.64/
	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> = OH+OH	2.951E+14	0.00	4.843E+04	3.656E+08	1.14	-2.584E+03	
16	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +H = H <sub>2</sub> O+OH	2.410E+13	0.00	3.970E+03	1.269E+08	1.31	7.141E+04	
17	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +H = H <sub>2</sub> +HO <sub>2</sub>	6.025E+13	0.00	7.950E+03	1.041E+11	0.70	2.395E+04	
18	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +O = OH+HO <sub>2</sub>	9.550E+06	2.00	3.970E+03	8.660E+03	2.68	1.856E+04	
19	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +OH = H <sub>2</sub> O+HO <sub>2</sub>	1.000E+12	0.00	0.000E+00	1.838E+10	0.59	3.089E+04	
		5.800E+14	0.00	9.557E+03	1.066E+13	0.59	4.045E+04	

Константа скорости определяется по формуле

$$k = k_{\infty} \left( \frac{p_r}{1 + p_r} \right) F \quad (2.66)$$

где  $p_r = \frac{k_0}{k_{\infty}} C_{mix}$  ;  $C_{mix}$  определяется как отношение объемной плотности к

молекулярному весу смеси;

$$\lg F = \left\{ 1 + \left[ \frac{\lg p_r + c}{n - d(\lg p_r + c)} \right]^2 \right\}^{-1} \lg F_{cent}, \quad (2.67)$$

$$c = -0.4 - 0.67 \lg F_{cent}, \quad n = 0.75 - 1.27 \lg F_{cent}, \quad d = 0.14, \quad (2.68)$$

$$F_{cent} = (1 - a) \exp(-T / T^{***}) + a \exp(-T / T^*) + \exp(-T^{**} / T^*)$$

Для реакций 9, 15:

$$a = 0.5, \quad T^{***} = 1.0 \times 10^{-30}, \quad T^* = 1.0 \times 10^{30}, \quad T^{**} = 1.0 \times 10^{100} \quad (2.69)$$

Если в пламени присутствуют CO и CO<sub>2</sub>, то к системе реакций горения водорода следует добавить следующие реакции:

Таблица 2.5

	Реакция	$F_k$
1	OH + CO = CO <sub>2</sub> + H	$3.3 \cdot 10^3 \cdot T^{1.55} \cdot \exp(402/T)$
2	CO + O + M = CO <sub>2</sub> + M	$6.17 \cdot 10^8 \cdot \exp(-1510/T)$ (M=N <sub>2</sub> )

3	$O_2 + CO = O + CO_2$	$2.53 \cdot 10^9 \cdot \exp(-24000/T)$
---	-----------------------	--

Размерность  $F_k$  для бимолекулярных реакций 1,3 -  $\left[ \frac{M^3}{\text{кмоль} \cdot \text{сек}} \right]$ , для реакции с третьим телом 2 -  $\left[ \frac{M^6}{\text{кмоль}^2 \cdot \text{сек}} \right]$ .

Для учета эффективности третьих тел используется таблица 2.3.

#### 2.7.4. Система газофазных химических реакций в пламени твердотопливного двигателя

Пример такой системы предлагается в работе [10]. В ней, кроме приведенных выше реакций, рассматриваются реакции соединений хлора, азота, а также озона. Все используемые реакции представлены в таблицах 2.6, 2.7.

Таблица 2.6

	Реакция	$A, \text{cm}^3 \text{molecule}^{-1} \text{s}^{-1}$	$\beta$	$E/R_{un}, \text{K}$
1	$O_2 + M = O + O + M$	$3.0 \times 10^{-6}$	-1	59380
2	$HO_2 + NO = NO_2 + OH$	$3.7 \times 10^{-12}$	0	-240
3	$O + NO_2 = NO + O_2$	$6.5 \times 10^{-12}$	0	-120
4	$NO_2 + H = NO + OH$	$1.4 \times 10^{-10}$	0	0
5	$NO + O = N + O_2$	$3.5 \times 10^{-15}$	1	19500
6	$O + N_2 = NO + N$	$1.3 \times 10^{-10}$	0	38000
7	$NO + H = N + OH$	$2.8 \times 10^{-10}$	0	24560
8	$N_2O + M = N_2 + O + M$	$1.2 \times 10^{-6}$	-0.73	31600
9	$O + N_2O = N_2 + O_2$	$1.7 \times 10^{-10}$	0	14100
10	$N + NO_2 = N_2O + O$	$3 \times 10^{-12}$	(при 298 К)	-----
11	$N_2O + H = N_2 + OH$	$1.6 \times 10^{-10}$	0	7600
12	$NO_2 + H_2 = HNO_2 + H$	$3.98 \times 10^{-11}$	0	14594
13	$HNO + H = H_2 + NO$	$3 \times 10^{-11}$	0	500
14	$HNO + OH = H_2O + NO$	$8 \times 10^{-11}$	0	500
15	$NO + M = N + O + M$	$2.4 \times 10^{-9}$	0	74700
16	$N_2 + M = N + N + M$	$3.82 \times 10^5$	-3.5	113240
17	$N + OH = NO + H$	$3.8 \times 10^{-11}$	0	-85
18	$Cl + O_3 = ClO + O_2$	$2.9 \times 10^{-11}$	0	260
19	$ClO + NO = NO_2 + Cl$	$6.4 \times 10^{-12}$	0	-290
20	$ClO + OH = HO_2 + Cl$	$1.1 \times 10^{-11}$	0	-120
21	$Cl + HO_2 = HCl + O_2$	$1.8 \times 10^{-11}$	0	-170
22	$Cl + HO_2 = OH + ClO$	$4.1 \times 10^{-11}$	0	450
23	$Cl_2 + OH = HOCl + Cl$	$1.4 \times 10^{-12}$	0	900
24	$HOCl + OH = H_2O + ClO$	$3 \times 10^{-12}$	0	500
25	$ClONO_2 + hv = Cl + NO_3$	$5 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}$	---	---
26	$H_2 + OH = H_2O + H$	$5.5 \times 10^{-12}$	0	2000

27	$\text{OH} + \text{O} = \text{H} + \text{O}_2$	$2.2 \times 10^{-11}$	0	-120
28	$\text{OH} + \text{H} = \text{H}_2 + \text{O}$	$8.1 \times 10^{-21}$	2.8	1950
29	$\text{OH} + \text{OH} = \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	$4.2 \times 10^{-12}$	0	240
30	$\text{OH} + \text{CO} = \text{CO}_2 + \text{H}$	$7.29 \times 10^{-18}$	1.5	-373
31	$\text{Cl} + \text{H}_2 = \text{HCl} + \text{H}$	$3.7 \times 10^{-11}$	0	2300
32	$\text{OH} + \text{HCl} = \text{Cl} + \text{H}_2\text{O}$	$2.6 \times 10^{-12}$	0	350
33	$\text{Cl} + \text{H}_2\text{O} = \text{HCl} + \text{OH}$	$2.79 \times 10^{-11}$	0	8670
34	$\text{HCl} + \text{O} = \text{OH} + \text{Cl}$	$1 \times 10^{-11}$	0	3300
35	$\text{H} + \text{Cl}_2 = \text{HCl} + \text{Cl}$	$1.43 \times 10^{-10}$	0	590

Таблица 2.7.

	Реакция	$A, \text{cm}^6 \text{molecule}^{-2} \text{s}^{-1}$	$\beta$	$E/R_{un}, \text{K}$
36	$\text{M} + 2\text{H} = \text{H}_2 + \text{M}$	$1.5 \times 10^{-29}$	-1.3	0
37	$\text{M} + 2\text{O} = \text{O}_2 + \text{M}$	$5. \times 10^{-35}$	0	-900
38	$\text{M} + 2\text{Cl} = \text{Cl}_2 + \text{M}$	$6.14 \times 10^{-34}$	0	-906
39	$\text{H} + \text{O} + \text{M} = \text{OH} + \text{M}$	$1.3 \times 10^{-29}$	-1	-906
40	$\text{H} + \text{OH} + \text{M} = \text{H}_2\text{O} + \text{M}$	$6.11 \times 10^{-26}$	-2	0
41	$\text{CO} + \text{O} + \text{M} = \text{CO}_2 + \text{M}$	$1.7 \times 10^{-33}$	-2	0
42	$\text{NO} + \text{O} + \text{M} = \text{NO}_2 + \text{M}$	$4.7 \times 10^{-26}$	1.5	0
43	$\text{OH} + \text{NO}_2 + \text{M} = \text{HNO}_3 + \text{M}$	$1.77 \times 10^{-15}$	-5.49	1187
44	$\text{H} + \text{NO} + \text{M} = \text{HNO} + \text{M}$	$2.47 \times 10^{-28}$	-1.32	370
45	$\text{ClO} + \text{NO}_2 + \text{M} = \text{ClONO}_2 + \text{M}$	$4.65 \times 10^{-23}$	-3.40	0
46	$\text{OH} + \text{NO} + \text{M} = \text{HNO}_2 + \text{M}$	$1.4 \times 10^{-24}$	-2.51	-34

### 2.7.5. Реакции горения метана

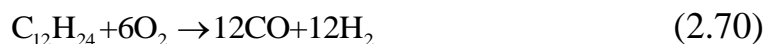
Для расчета горения метана используется следующая система реакций, в которых происходит распад  $\text{CH}_4$  до более простых компонентов ( $\text{CO}$ ,  $\text{H}_2$  т.п.) [11]. Для учета дальнейшего догорания добавляются реакции горения водорода и окиси углерода (см. п. 2.6.3.)

Таблица 2.8.

		$K_f = AT^B \exp(-E/T), (\text{cm}^3 / \text{mole} / \text{sec})$		
		A	B	E
1	$\text{CH}_4 + \text{M} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{H} + \text{M}$	$0.1 \cdot 10^{19}$	0	$0.445 \cdot 10^5$
2	$\text{CH}_4 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$	$0.28 \cdot 10^{14}$	0	$0.25 \cdot 10^4$
3	$\text{CH}_4 + \text{O} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{OH}$	$0.2 \cdot 10^{14}$	0	$0.464 \cdot 10^4$
4	$\text{CH}_4 + \text{H} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{H}_2$	$0.69 \cdot 10^{14}$	0	$0.595 \cdot 10^4$
5	$\text{CH}_3 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CHO} + \text{H}_2\text{O}$	$0.2 \cdot 10^{11}$	0	0
6	$\text{CH}_3 + \text{O} \rightleftharpoons \text{CHO} + \text{H}_2$	$0.1 \cdot 10^{15}$	0	0
7	$\text{CHO} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$	$0.1 \cdot 10^{15}$	0	0
8	$\text{CHO} + \text{M} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H} + \text{M}$	$0.2 \cdot 10^{13}$	0.5	$0.144 \cdot 10^5$

### 2.7.6. Упрощенная схема горения керосина

Процесс разложения керосина марки RP-1 представлен одной брутто-реакцией, записываемой в следующем виде:



Для учета дальнейшего догорания добавляются реакции горения водорода и окиси углерода (см. п. 2.6.3.) .

Коэффициент скорости реакции (2.70) согласно [12] рассчитываются по следующей формуле:

$$K_f = AT^B \exp(-E/RT) \quad (2.71)$$

где  $A = 2e+13$ ,  $B = 0$ ,  $E = 2.177e+8$ . Здесь единицы измерения: джоули, кмоли,  $\text{м}^3$ , секунды.

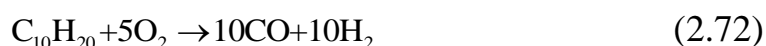
В работе [13] керосин представляется как смесь парафиновых (41.7%) и нафтеновых (58.3%) углеводородов. Для каждого из них используется своя формула для скорости реакции

Таблица 2.9.

Реакция	A	B	E/R	Формула для скорости реакции
Парафиновые углеводороды				
$\text{C}_{12}\text{H}_{24} + 6\text{O}_2 \rightarrow 12\text{CO} + 12\text{H}_2$	3.888e4	1	1.220e4	$p^{0.3} [\text{C}_{12}\text{H}_{24}]^{0.5} [\text{O}_2]$
Нафтеновые углеводороды				
$\text{C}_{12}\text{H}_{24} + 6\text{O}_2 \rightarrow 12\text{CO} + 12\text{H}_2$	2.312e7	1	1.965e4	$p^{0.3} [\text{C}_{12}\text{H}_{24}]^{0.5} [\text{O}_2]$

Используются следующие единицы измерения: моли,  $\text{см}^3$ , секунды, атм., градусы Кельвина и формула (2.71).

Кроме того, рассматривалась следующая общая схема горения углеводородов (точнее, первая стадия горения - распад углеводородов на  $\text{H}_2$  и  $\text{CO}$ ) [14]:





Коэффициент скорости рассчитывается по формуле (2.71), где  $A = 2e + 16$ ,  $B = 0$ ,  $E = 52000$ ,  $E/R = 26200K$ . Здесь используются следующие единицы: секунды, моли,  $\text{см}^3$ , градусы Кельвина.

## 2.8. Моделирование турбулентности в высокоскоростных потоках

### 2.8.1. Осреднение основных уравнений

Наиболее распространенным способом моделирования турбулентности является использование осреднения Рейнольдса, когда вместо уравнений для мгновенных значений параметров используются уравнения для неких осредненных величин. Можно использовать различные способы осреднения газодинамических параметров течения. Например, с использованием математического ожидания и функции плотности распределения вероятностей:

$$M(T) = \int_{-\infty}^{+\infty} T \cdot f(T) dT, \quad (2.73)$$

где  $T$  - некоторый газодинамический параметр (например, температура), который рассматривается как случайная величина,  $f(T)$  - плотность вероятности этой величины.

Для стационарной турбулентности используется осреднение по времени:

$$\bar{T}(x, y, z) = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} T(x, y, z, t) dt, \quad (2.74)$$

где  $\Delta t$  - период времени, существенно превышающий временной масштаб турбулентности.

Согласно эргодической гипотезе, вероятность отличия среднего по формуле (2.74) от среднего, полученного по формуле (2.73), стремится к нулю при увеличении  $\Delta t$ , т.е.

$$M(T) \cong \bar{T} \quad (2.75)$$

В дальнейшем будем обозначать осредненные параметры верхним подчеркиванием:  $\bar{\rho}, \bar{T}, \bar{p}$  и т.д. Это, так называемые, средние по Рейнольдсу.

Мгновенное значение параметра представляется в форме:

$$T = \bar{T} + T', \quad (2.76)$$

где  $T'$  - пульсационная составляющая параметра  $T$ .

Для осредненных и пульсационных величин справедливы следующие соотношения:

$$\begin{aligned} \overline{A \pm B} &= \bar{A} \pm \bar{B}, \\ \overline{AB} &= \bar{A} \cdot \bar{B} + \overline{A'B'}, \quad \overline{A'B'} \neq 0, \\ \overline{\overline{AB}} &= \bar{A} \cdot \bar{B}, \\ \frac{\partial \overline{A}}{\partial x_i} &= \frac{\partial \bar{A}}{\partial x_i}, \quad \frac{\partial \overline{A}}{\partial t} = \frac{\partial \bar{A}}{\partial t}, \\ \overline{A'} &= 0 \end{aligned} \quad (2.77)$$

Величину  $\overline{A'B'}$  называют корреляцией пульсаций случайных величин  $A$  и  $B$ . В общем случае она не равна нулю, и это порождает очень интересные следствия. Об этом будет рассказано далее.

При применении правил (2.77) к основным уравнениям (2.5)-(2.8) получаются так называемые уравнения Рейнольдса. Однако для сжимаемых течений в полученных уравнениях содержится большое количество членов, содержащих пульсации плотности.

Для устранения этой проблемы используется метод, предложенный Фавром [15], в котором используются так называемые среднемассовые значения параметров или средние по Фавру:

$$H = \frac{\overline{\rho H}}{\bar{\rho}} \quad (2.78)$$

Мгновенные значения величин в этом случае представляются в виде:

$$H = H + H'' \quad (2.79)$$

Для средних по Фавру и соответствующих пульсаций справедливы следующие соотношения:

$$\begin{aligned}
A \pm B &= \frac{\overline{\rho(A \pm B)}}{\bar{\rho}} = A \pm B, \\
\overline{AB} &= A \frac{\overline{\rho B}}{\bar{\rho}} = \bar{A}B, \\
\overline{\rho A''} &= \overline{\rho(A - A)} = \overline{\rho A} - \overline{\rho A} = \bar{\rho}A - \bar{\rho}A = 0, \\
\overline{\rho AB} &= \bar{\rho}AB + \bar{\rho}A''B'', \\
\overline{A''} &= -\frac{\overline{\rho' A'}}{\bar{\rho}} \neq 0
\end{aligned} \tag{2.80}$$

Для плотности, давления, тензора вязких напряжений, векторов теплового потока, скоростей образования компонентов используем осреднение по Рейнольдсу:

$$\begin{aligned}
\rho &= \bar{\rho} + \rho', \quad p = \bar{p} + p', \quad \tau_{ij} = \bar{\tau}_{ij} + \tau'_{ij}, \\
q_j &= \bar{q}_j + q'_j, \quad \dot{w}_s = \bar{\dot{w}}_s + \dot{w}'_s
\end{aligned} \tag{2.81}$$

для всех остальных величин – осреднение по Фавру:

$$\begin{aligned}
u_i &= u_i + u_i'', \quad E = E + E'', \quad H = H + H'', \\
V_{k,j} &= V_{k,j} + V_{k,j}'', \quad C_k = C_k + C_k''
\end{aligned} \tag{2.82}$$

Подставляя эти выражения в основную систему уравнений, описывающих течение химически неравновесного газа (2.5)-(2.8), и применяя к этим уравнениям осреднение Рейнольдса, получаем следующую систему:

Уравнение неразрывности

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j) = 0, \tag{2.83}$$

Уравнения количества движения

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i + \bar{\rho} u_j'' u_i'' + \delta_{ji} \bar{p} - \bar{\tau}_{ij} \right) = 0, \quad i = 1, 2, 3, \tag{2.84}$$

Уравнения неразрывности для компонентов газовой смеси (уравнения сохранения массы химических компонентов)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}C_s) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \bar{\rho}C_s \tilde{u}_j + \bar{\rho}C_s'' u_j'' + \overline{J_{s,j}} \right) = \bar{w}_s, \quad s=1,2,\dots,N_C-1, \quad (2.85)$$

Уравнение полной энергии

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}E) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \bar{\rho}u_j H + \overline{\rho u_j'' h''} + \overline{u_i \rho u_j'' u_i''} + \frac{\overline{\rho u_j'' u_i''^2}}{2} + \bar{q}_j - \overline{u_i \tau_{ij}} \right] = 0, \quad (2.86)$$

Здесь:

$$H = E + \frac{P}{\rho} - \quad (2.87)$$

полная энтальпия,

$$H = \left( h + \frac{1}{2} \tilde{u}_i^2 + K \right), \quad (2.88)$$

$$K = \frac{1}{2} u_i''^2 - \quad (2.89)$$

кинетическая энергия турбулентности.

В осредненных уравнениях появляются дополнительные члены, имеющие физический смысл турбулентных напряжений (напряжений Рейнольдса) и турбулентных потоков энергии и массы.

Основная проблема расчета турбулентных течений состоит в моделировании этих членов.

### 2.8.2. Коэффициент турбулентной вязкости

Как уже говорилось, в уравнениях Рейнольдса появились новые неизвестные величины: дополнительные турбулентные потоки энергии, концентраций и напряжений турбулентного трения:  $\bar{\rho}u_j'' H''$ ,  $\bar{\rho}u_j'' C_s''$ ,  $\bar{\rho}u_j'' u_i''$  и т.п. Задачей моделирования турбулентности является получение явных выражений или специальных уравнений для этих потоков.

Многие модели турбулентности основаны на понятии *коэффициента турбулентной вязкости*  $\mu_T$ . При этом турбулентные потоки выражаются по следующим формулам:

$$\tau_{T,ij} \equiv -\bar{\rho} u_i'' u_j'' = \mu_T \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu_T \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} - \frac{2}{3} \bar{\rho} K \delta_{ij}, \quad (2.90)$$

$$\bar{\rho} u_j'' C_s'' = -\frac{\mu_T}{Sc_T} \frac{\partial \tilde{C}_s}{\partial x_j}, \quad \bar{\rho} u_j'' h'' = -\frac{\mu_T}{Pr_T} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j}, \quad \frac{1}{2} \bar{\rho} u_j'' u_k'' = -\frac{\mu_T}{\sigma_K} \frac{\partial K}{\partial x_j} \quad (2.91)$$

где  $Sc_T$  - турбулентное число Шмидта;  $Pr_T$  - турбулентное число Прандтля;  $\sigma_K$  - аналог числа Прандтля для ТКЕ.

Наиболее широко используемые модели турбулентности, основанные на использовании коэффициента турбулентной вязкости: К- $\epsilon$  модель, К- $\omega$  модель, SST (Shear Stress Transfer) модель. Они описаны во многих монографиях и статьях, в частности, в [16].

Основное и очень важное преимущество таких моделей состоит в том, основные осредненные уравнения (2.83)-(2.86) имеют практически такой же вид, как и неосредненные уравнения (2.5)-(2.8), только вместо молекулярной вязкости (теплопроводности, диффузии и т.п.) используются их некие эффективные аналоги:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j) = 0, \quad (2.92)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i + \delta_{ji} \bar{p} - \tau_{ij,ef}) = 0, \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.93)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{C}_s) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{C}_s) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \frac{\mu_T}{Sc_T} + \frac{\mu}{Sc} \right) \frac{\partial \tilde{C}_s}{\partial x_j} \right] = \bar{w}_s, \quad s = 1, 2, \dots, N_c - 1 \quad (2.94)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{E}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{E}) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \frac{\mu_T}{Pr_T} + \frac{\mu}{Pr} \right) \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} + \frac{\mu_T}{\sigma_K} \frac{\partial K}{\partial x_j} + \tilde{u}_i \tau_{ij,ef} \right] = 0 \quad (2.95)$$

где:

$$\tau_{ij,ef} = \bar{\tau}_{ij} - \bar{\rho} u_j'' u_i'' = (\mu_T + \mu) \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) - \frac{2}{3} \bar{\rho} K \delta_{ij} \quad (2.96)$$

### 2.8.3. Модель напряжений Рейнольдса

В этом параграфе рассматривается модель, основанная не на явном выражении для напряжений Рейнольдса (см. формулу (2.90)), а на решении дополнительных дифференциальных уравнений в частных производных для этих параметров.

Уравнения переноса напряжений Рейнольдса выводятся непосредственно из уравнения количества движения [16] и имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left( \overline{\rho u_i'' u_j''} \right) + \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \overline{\rho \tilde{u}_k u_i'' u_j''} \right) = \frac{\partial}{\partial x_k} \underbrace{\left( -\overline{\rho u_k'' u_i'' u_j''} + \overline{u_i'' \tau_{jk}} + \overline{u_j'' \tau_{ik}} - \overline{\delta_{kj} p' u_i''} - \overline{\delta_{ki} p' u_j''} \right)}_{(I)} \\ - \underbrace{\left( \overline{\rho u_i'' u_k''} \frac{\partial u_j''}{\partial x_k} + \overline{\rho u_j'' u_k''} \frac{\partial u_i''}{\partial x_k} \right)}_{(II)} + \underbrace{\left( \overline{p' \frac{\partial u_i''}{\partial x_j}} + \overline{p' \frac{\partial u_j''}{\partial x_i}} \right)}_{(III)} - \underbrace{\left( \overline{\tau_{jk}' \frac{\partial u_i''}{\partial x_k}} + \overline{\tau_{ik}' \frac{\partial u_j''}{\partial x_k}} \right)}_{(IV)} \end{aligned} \quad (2.97)$$

Физический смысл членов в правой части уравнения:

(I) - турбулентная, молекулярная и связанная с пульсациями давления диффузия;

(II) - генерация напряжений Рейнольдса;

(III) - корреляция пульсаций давления с тензором скоростей деформации;

(IV) - диссипативный член.

Введем обозначения:

$$R_{ij} = \overline{u_i'' u_j''} \quad , \quad (2.98)$$

$$T_{ij} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left( -\overline{\rho u_k'' u_i'' u_j''} + \overline{u_i'' \tau_{jk}} + \overline{u_j'' \tau_{ik}} - \overline{\delta_{kj} p' u_i''} - \overline{\delta_{ki} p' u_j''} \right), \quad (2.99)$$

$$P_{ij} = - \left( \overline{\rho u_i'' u_k''} \frac{\partial u_j''}{\partial x_k} + \overline{\rho u_j'' u_k''} \frac{\partial u_i''}{\partial x_k} \right), \quad (2.100)$$

$$\Pi_{ij} = \left( \overline{p' \frac{\partial u_i''}{\partial x_j}} + \overline{p' \frac{\partial u_j''}{\partial x_i}} \right), \quad (2.101)$$

$$\rho \varepsilon_{ij} = \left( \overline{\tau_{jk}' \frac{\partial u_i''}{\partial x_k}} + \overline{\tau_{ik}' \frac{\partial u_j''}{\partial x_k}} \right) \quad (2.102)$$

Таким образом, уравнение (2.97) представляется в виде

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}R_{ij}) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\bar{\rho}\tilde{u}_k R_{ij}) = T_{ij} + P_{ij} + \Pi_{ij} - \bar{\rho}\varepsilon_{ij} \quad (2.103)$$

Перейдем к моделированию величин, входящих в это уравнение.

Для диффузия предлагается простейшая формула:

$$T_{ij} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_K} \right) \frac{\partial R_{ij}}{\partial x_k} \right] \quad (2.104)$$

Диссипация при локальной изотропности:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{2}{3} \varepsilon \delta_{ij} \quad , \quad (2.105)$$

где  $\varepsilon$  - скорость диссипации ТКЕ.

Моделирование  $\Pi_{ij}$  представляет серьезную проблему и зависит, как будет показано в следующем параграфе, от скорости потока, т.е. от числа Маха. Рассмотрим сначала низкие скорости.

Корреляция пульсаций давления и производных скорости разбивается на медленную и быструю составляющие:

$$\Pi_{ij} = \Pi_{ij}^{(s)} + \Pi_{ij}^{(r)} \quad (2.106)$$

Для медленной части, характеризующей тенденцию к изотропности, используется простейшая формула:

$$\Pi_{ij}^{(s)} = -C_1 \bar{\rho} \varepsilon \left( \frac{R_{ij}}{K} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \right) \quad (2.107)$$

Для быстрой части используется модель Лондера-Риса-Роди [17]:

$$\Pi_{ij}^{(r)} = -\alpha \left( P_{ij} - \frac{2}{3} P \delta_{ij} \right) - \beta \left( D_{ij} - \frac{2}{3} P \delta_{ij} \right) - \gamma \rho K \left( S_{ij} - \frac{1}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad (2.108)$$

где:

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \quad (2.109)$$

тензор скоростей деформации;

$$P = \frac{1}{2} P_{kk} = -\rho R_{mk} \frac{\partial \tilde{u}_m}{\partial x_k} - \quad (2.110)$$

генерация турбулентной кинетической энергии;

$$D_{ij} = -\rho \left( R_{ik} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_j} + R_{jk} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_i} \right) \quad (2.111)$$

Упрощенный вариант LRR:

$$\Pi_{ij}^{(r)} = -\Gamma \left( P_{ij} - \frac{2}{3} P \delta_{ij} \right) \quad (2.112)$$

Коэффициенты определяются следующими формулами [17]:

$$\alpha = \frac{(c_2 + 8)}{11}, \quad \beta = \frac{(8c_2 - 2)}{11}, \quad \gamma = \frac{(60c_2 - 4)}{55} \quad (2.113)$$

$$C_1 = 1.5, \quad c_2 = 0.4, \quad \Gamma = 0.6$$

Упрощенная формула отличается от полной тем, что в ней:

$$\alpha = \Gamma, \quad \beta = \gamma = 0 \quad (2.114)$$

Уравнение переноса  $\varepsilon$  имеет следующий вид:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho u_k \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_k} \right] + \frac{\varepsilon}{K} [C_{\varepsilon 1} P - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon], \quad (2.115)$$

где  $\sigma_\varepsilon$  - аналог числа Прандтля для  $\varepsilon$ . Обычно используются следующие значения констант:

$$\sigma_K = 1.0; \quad \sigma_\varepsilon = 1.3; \quad C_{\varepsilon 1} = 1.44; \quad C_{\varepsilon 2} = 1.92 \quad (2.116)$$

Для высокоскоростных сжимаемых течений необходимо внести корректировки в моделирование  $\Pi_{ij}$ . В [18] предложена следующая формула:

$$\Pi_{ij} = -\hat{C}_1(M_G) \bar{\rho} \varepsilon \left( \frac{R_{ij}}{K} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \right) + C_{\Pi 1}(M_G) \Pi_{ij}^{(r)} - C_{\Pi 2}(M_G) P_{ij} \quad (2.117)$$

где для коэффициентов, учитывающих сжимаемость, используются следующие соотношения:

$$\hat{C}_1 = C_1 \left[ 0.2786 \cdot \exp(-4.7758 \cdot M_G^*) + 0.7213 \cdot \exp(-0.0334 \cdot M_G^*) \right] \quad (2.118)$$

$$C_{\Pi 1} = 0.9978 \cdot \exp(-2.2155 \cdot M_G^*) \quad (2.119)$$

$$C_{\Pi 2} = 17 \cdot M_G^{*3} / \left[ \exp(8 \cdot M_G^*) - 0.999 \right] \quad (2.120)$$

где  $M_G^* = M_G / 3.05$ .

Здесь  $M_G$  - градиентное число Маха,

$$M_G = \frac{SK^{3/2}}{a\varepsilon}, \quad S = \sqrt{2S_{ij}^* S_{ij}^*}, \quad S_{ij}^* = S_{ij} - \frac{1}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij}, \quad (2.121)$$

$a$  - скорость звука.



#### 2.8.4. К-ε модель турбулентности

Уравнение переноса турбулентной кинетической энергии  $K$  получается сворачиванием уравнения (2.103) по индексам и делением его на два:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}K) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\bar{\rho}\tilde{u}_k K) = T_{k,k} + P_K + \overline{p'd''} - \bar{\rho}\varepsilon \quad (2.122)$$

где

$$P_K = \frac{1}{2} P_{ii} = \overline{\rho u_i'' u_k''} \frac{\partial u_i}{\partial x_k}, \quad (2.123)$$

$$T_{k,k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_K} \right) \frac{\partial K}{\partial x_k} \right] \quad (2.124)$$

Здесь использовалось соотношение

$$\frac{1}{2} P_{ii} = \overline{p' \frac{\partial u_i''}{\partial x_i}} = \overline{p'd''}, \quad (2.125)$$

где  $d''$  - пульсация дивергенции. В работе [19] показано, что в высокоскоростных течениях величина  $\overline{p'd''}$  является отрицательной и может моделироваться следующей формулой:

$$\overline{p'd''} = -0.29 \bar{\rho} M_T \varepsilon \quad (2.126)$$

Для расчета диссипации используется уравнение (2.115), а коэффициент турбулентной вязкости определяется по формуле:

$$\mu_T = \frac{0.09 \bar{\rho} K^2}{\varepsilon (1 + 0.29 \bar{\rho} M_T)}, \quad (2.127)$$

При выводе формулы (2.127) использовалась алгебраическая модель напряжений. Из нее следует, что

$$V_n''^2 / K = \frac{0.52}{(1 + 0.29 \bar{\rho} M_T)} \quad (2.128)$$

Здесь  $V_n$  - мгновенное значение компоненты скорости, направленной по нормали к линии тока. Имеется в виду линия тока, полученная по средним значениям скорости, поэтому  $V_n = 0$ , но  $V_n \neq 0$ .

Окончательно уравнение переноса турбулентной кинетической энергии выглядит следующим образом

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}K) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\bar{\rho}\tilde{u}_k K) = T_{k.k} + P_K - (1 + 0.29M_T)\bar{\rho}\varepsilon \quad (2.129)$$

Эта модель широко используется для свободных течений (струи, слой смешения и т.п.), но плохо описывает пристеночные течения. Дело в том, что при выводе основных уравнений, относящихся к скорости диссипации  $\varepsilon$ , использовалось допущение о больших значениях локального числа Рейнольдса. Возле стенки это допущение нарушается – локальное число Рейнольдса стремится к нулю.

### 2.8.5. К- $\omega$ модель Уилкокса

В ней также используются два параметра: турбулентная кинетическая энергия  $K$  и величина  $\omega$ , которая обратно пропорциональна характерному масштабу времени  $\tau$  и имеет, следовательно, размерность частоты  $[1/c]$ .

Коэффициент турбулентной вязкости рассчитывается по формуле:

$$\mu_T = \rho \frac{K}{\omega} \quad (2.130)$$

Уравнения переноса  $K$  и  $\omega$  имеют следующий вид:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho K) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \bar{u}_j K) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_{K1}} \right) \frac{\partial K}{\partial x_j} \right] + P_K - \beta_0^* \rho K \omega, \quad (2.131)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \omega) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \bar{u}_j \omega) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_{\omega 1}} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + \alpha \frac{\omega}{K} P_K - \beta_0 \rho \omega^2 \quad (2.132)$$

Числовые константы, входящие в эту модель, равны:

$$\beta_0^* = 0.09, \quad \alpha = 5/9, \quad \beta_0 = 0.075, \quad \sigma_{k1} = 2, \quad \sigma_{\omega 1} = 2$$

Связь между параметрами  $\omega$  и  $\varepsilon$  имеет вид:

$$\omega = \frac{\varepsilon}{\beta_0^* K} \quad (2.133)$$

$K-\omega$  модель хорошо описывает пристеночные течения, но крайне неудобна для свободных течений: В зависимости от задания параметра частоты турбулентных пульсаций  $\omega$ , принимаемого на границе расчетной области, может быть получен значительный разброс в результатах расчета. Кроме того, рассматриваемый метод имеет низкую точность решения в области свободного течения.

### 2.8.6. SST модель

SST модель Ментера [21, 22] является некой комбинированной моделью турбулентности, основанной на использовании  $K-\omega$  модели, в пристеночных областях, и  $K-\varepsilon$  модели в областях, находящихся на достаточном удалении от стенки. Этот комбинированный метод заключается в преобразовании уравнений  $K-\varepsilon$  модели к  $K-\omega$  формулировке. Уравнения видоизмененной  $K-\varepsilon$  модели, дополняются стыковочной функцией  $1-F_1$ . Функция  $F_1$  принимает значение  $F_1 = 1$  вблизи поверхности и обращается в ноль за пределами пограничного слоя, т.е. на линии границы пограничного слоя и за его пределами  $K-\varepsilon$  модель возвращается к первоначальной, стандартной формулировке.

Эта модель показала хорошие результаты при расчете течений в зоне отрыва и при сильном продольном градиенте давления. Она учитывает перенос касательных напряжений.

Основные уравнения модели:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho K) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \bar{u}_j K) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_{K3}} \right) \frac{\partial K}{\partial x_j} \right] + P_K - \beta_0^* \rho K \omega, \quad (2.134)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\omega) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho\overline{u_j\omega}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_{\omega 3}} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + \alpha_3 \frac{\omega}{K} P_K - \beta_3 \rho \omega^2 + (1-F_1) \frac{2\rho}{\sigma_{\omega 2} \omega} \frac{\partial K}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \quad (2.135)$$

где коэффициенты новой модели - линейная комбинация соответствующих коэффициентов моделей, лежащих в основе метода:

$$\begin{aligned} \alpha_3 &= F_1 \alpha + \alpha_2 (1-F_1), & \beta_3 &= F_1 \beta_0 + \beta_2 (1-F_1) \\ \frac{1}{\sigma_{K3}} &= F_1 \frac{1}{\sigma_{K1}} + (1-F_1) \frac{1}{\sigma_K}, & \frac{1}{\sigma_{\omega 3}} &= F_1 \frac{1}{\sigma_{\omega 1}} + (1-F_1) \frac{1}{\sigma_{\omega 2}} \end{aligned} \quad (2.136)$$

Стыковочная функция в модели Ментера строится таким образом, чтобы наиболее адекватно учитывать перенос напряжения трения в пограничном слое.

Напомним, что  $F_1 = 1$  вблизи поверхности и  $F_1 = 0$  за пределами пограничного слоя

В модели Ментера коэффициент турбулентной вязкости определяется по формуле:

$$\mu_T = \rho \frac{a_1 K}{\max(a_1 \omega, \Omega F_2)} = \rho \frac{K}{\max(\omega, S F_2 / a_1)}, \quad (2.137)$$

где  $a_1 = 0.31$ ,

$$S = \sqrt{2 S_{ij} S_{ij}} - \quad (2.138)$$

инвариант тензора скоростей деформации,

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.139)$$

Стыковочные функции в SST – модели определяются по следующим формулам.

$$\begin{aligned}
F_1 &= \tanh(\arg_1^4) \\
\arg_1 &= \min \left[ \max \left( \frac{\sqrt{K}}{\beta_0^* \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right), \frac{4\rho K}{CD_{K\omega} \sigma_{\omega 2} y^2} \right] \\
CD_{K\omega} &= \max \left( \frac{2\rho}{\sigma_{\omega 2} \omega} \frac{\partial K}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}, 1.0 \times 10^{-10} \right) \\
F_2 &= \tanh(\arg_2^2) \\
\arg_2 &= \max \left( \frac{2\sqrt{K}}{\beta_0^* \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right)
\end{aligned} \tag{2.140}$$

Здесь  $y$  - расстояние до ближайшей стенки.

Расстояние от стенки можно определять чисто геометрически, но лучше использовать следующий алгоритм.

Для всей расчетной области решается уравнение Пуассона

$$\nabla^2 \phi = -1 \tag{2.141}$$

с граничными условиями Дирихле  $\phi = 0$  на стенке и Неймана  $\frac{\partial \phi}{\partial n} = 0$  на всех остальных границах.

После нахождения функции  $\phi$  расстояние от стенки определяется через градиент  $\phi$ :

$$y = -|\nabla \phi| + \sqrt{|\nabla \phi|^2 + 2\phi} \tag{2.142}$$

Используются следующие граничные условия:

$$\frac{U_\infty}{L} < \omega_\infty < 10 \frac{U_\infty}{L}, \quad \frac{10^{-5} U_\infty^2}{\text{Re}_L} < K_\infty < 10 \frac{0.1 U_\infty^2}{\text{Re}_L}, \tag{2.143}$$

$$\omega_w = 10 \frac{6\mu}{\rho \beta_0 (\Delta d_1)^2}, \quad K_w = 0, \tag{2.144}$$

где индекс " $\infty$ " относится к значениям параметров в свободном потоке, а индекс " $w$ " - к параметрам на стенке;  $L$  - характерный размер расчетной области;  $\Delta d_1$  - расстояние от стенки до ближайшего узла расчетной сетки.

### 2.8.7. Модификация SST модели для высокоскоростных течений. Учет влияния сжимаемости

Уравнение для  $K$ , следующее из (2.129), с учетом связи (2.133) имеет следующий вид:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho K) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho u_k K) = T_{k,k} + P_K - (1 + 0.29M_T)\rho\beta_0^* K\omega \quad (2.145)$$

Из уравнения (2.115) следует:

$$\begin{aligned} \rho \frac{d\omega}{dt} &= \frac{1}{\beta_0^* K} \rho \frac{d\varepsilon}{dt} - \frac{\omega}{K} \rho \frac{dK}{dt} = \frac{1}{\beta_0^* K} \left\{ \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_k} \right] + \frac{\varepsilon}{K} [C_{\varepsilon 1} P_K - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \varepsilon] \right\} \\ &- \frac{\omega}{K} \left\{ \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_{K3}} \right) \frac{\partial K}{\partial x_j} \right] + P_K - (1 + 0.29M_T)\beta_0^* \rho K\omega \right\} = \frac{1}{K} \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) K \frac{\partial \omega}{\partial x_k} \right] \\ &+ \frac{1}{K} \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \omega \frac{\partial K}{\partial x_k} \right] - \frac{\omega}{K} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_{K3}} \right) \frac{\partial K}{\partial x_j} \right] + \frac{\omega}{K} \{ (C_{\varepsilon 1} - 1) P_K - \beta_0^* \rho K\omega [(C_{\varepsilon 2} - 1) - 0.29M_T] \} \quad (2.146) \\ &= \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_k} \right] + \frac{2}{K} \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial K}{\partial x_k} \frac{\partial \omega}{\partial x_k} + \frac{\omega}{K} \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial K}{\partial x_k} \right] \\ &- \frac{\omega}{K} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_{K3}} \right) \frac{\partial K}{\partial x_j} \right] + \frac{\omega}{K} \{ (C_{\varepsilon 1} - 1) P_K - \beta_0^* \rho K\omega [(C_{\varepsilon 2} - 1) - 0.29M_T] \} \\ &\approx \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_{\omega 2}} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_k} \right] + \frac{2\rho}{\sigma_{\omega 2} \omega} \frac{\partial K}{\partial x_k} \frac{\partial \omega}{\partial x_k} + \frac{\omega}{K} (C_{\varepsilon 1} - 1) P_K - \beta_0^* [(C_{\varepsilon 2} - 1) - 0.29M_T] \rho \omega^2 \end{aligned}$$

Таким образом, уравнение переноса  $\omega$ , следующее из (2.145) и (2.115), имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho\omega) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \omega) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_{\omega 2}} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] \\ &+ \alpha_2 \frac{\omega}{K} P_K - \beta_2^* \rho \omega^2 + \frac{2\rho}{\sigma_{\omega 2} \omega} \frac{\partial K}{\partial x_k} \frac{\partial \omega}{\partial x_k} \end{aligned} \quad (2.147)$$

где

$$\alpha_2 = C_{\varepsilon 1} - 1 = 0.44, \quad \beta_0^* = 0.09, \quad \beta_2^* = \beta_0^* [(C_{\varepsilon 2} - 1) - 0.29M_T] \quad (2.148)$$

Уравнения SST модели, учитывающей сжимаемость имеют следующий вид:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho K) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \bar{u}_j K) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_{K3}} \right) \frac{\partial K}{\partial x_j} \right] + P_K - (1 + 0.29M_T)\rho\beta_0^* K\omega, \quad (2.149)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\omega) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \overline{u_j \omega}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_{\omega 3}} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + \alpha_3 \frac{\omega}{K} P_K - \beta_3 \rho \omega^2 + (1 - F_1) \frac{2\rho}{\sigma_{\omega 2} \omega} \frac{\partial K}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \quad (2.150)$$

где коэффициенты новой модели - линейная комбинация соответствующих коэффициентов моделей, лежащих в основе метода:

$$\begin{aligned} \alpha_3 &= F_1 \alpha + \alpha_2 (1 - F_1), & \beta_3 &= F_1 \beta_0 + \beta_2^* (1 - F_1) \\ \frac{1}{\sigma_{K3}} &= F_1 \frac{1}{\sigma_{K1}} + (1 - F_1) \frac{1}{\sigma_K}, & \frac{1}{\sigma_{\omega 3}} &= F_1 \frac{1}{\sigma_{\omega 1}} + (1 - F_1) \frac{1}{\sigma_{\omega 2}} \end{aligned} \quad (2.151)$$

А коэффициент турбулентной вязкости с учетом (2.127), (2.133) и (2.137) получается равным

$$\mu_T = \rho \frac{K}{\max[\omega(1 + 0.29 \bar{\rho} M_T), SF_2 / a_1]} \quad (2.152)$$

Остальные параметры рассчитываются по тем же формулам, что и в стандартной SST модели.

## 2.9. Турбулентные потоки скалярных величин в химически реагирующих течениях

### 2.9.1. Уравнение для потока скалярной величины

И энтальпия, и внутренняя энергия, и концентрация газового компонента являются скалярными величинами. Поэтому их турбулентные потоки называются *потоками скалярной величины*. Для общности обозначим эту величину через  $f$ .

Чаще всего для этих потоков используются формулы, основанные на градиентной гипотезе:

$$\bar{\rho} u_j'' f'' = - \frac{\mu_T}{\sigma_f} \frac{\partial f}{\partial x_j}, \quad (2.153)$$

где  $\sigma_f$  - некий числовой коэффициент.

Для турбулентной диффузии химических компонентов это *турбулентное число Шмидта*, а для потока энтальпии это так называемое *турбулентное число*

*Прандтля*. В практических расчетах это число полагают обычно константой, равной 0.7 для свободных течений, и 0.9 для пристеночной области.

Тем не менее, многочисленные экспериментальные данные показывают, что на самом деле турбулентное число Прандтля, введенное формулой (2.153), может меняться в весьма широком диапазоне: от 0.1 до 2. В данном разделе будут рассмотрены некоторые аспекты, которые позволят более корректно определять турбулентные потоки скалярных величин.

Общий вид уравнения переноса скалярной величины:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho f) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j f) + \frac{\partial}{\partial x_j}(J_j) = \omega \quad (2.154)$$

в консервативной форме,

$$\rho \frac{\partial f}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial f}{\partial x_j} = \omega - \frac{\partial}{\partial x_j}(J_j) \quad (2.155)$$

в неконсервативной форме.

Уравнение энергии, записанное через энтальпию  $h$ , выводится из (2.8) и имеет вид:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j h) = \frac{\partial p}{\partial t} + u_i \frac{\partial p}{\partial x_i} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial q_j}{\partial x_j} \quad (2.156)$$

Таким образом, для уравнения энергии получается:

$$\omega = \frac{\partial p}{\partial t} + u_i \frac{\partial p}{\partial x_i} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}, \quad (2.157)$$

$$J_j = q_j \quad (2.158)$$

Уравнение переноса потока скалярной величины  $u_j f$  выводится аналогично выводу уравнения переноса напряжений Рейнольдса и имеет следующий вид [16]:



$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \overline{\rho u_i'' f''} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \overline{\rho u_j u_i'' f''} \right) = - \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \overline{\rho u_j'' u_i'' f''} + \delta_{ji} \overline{p' f''} \right)$$

$$\underbrace{- \overline{\rho u_i'' u_j''} \frac{\partial f}{\partial x_j} - \overline{\rho f'' u_j''} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}}_{(I)} + \underbrace{\left( \overline{f'' \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}} - \overline{u_i'' \frac{\partial (J_j)}{\partial x_j}} \right)}_{(II)} + \underbrace{p' \frac{\partial f''}{\partial x_i}}_{(III)} + \underbrace{\overline{u_i'' \omega}}_{(IV)} - \underbrace{\overline{f'' \frac{\partial p}{\partial x_i}}}_{(V)} \quad (2.159)$$

В левой части этого уравнения стоит производная по времени и конвективный член, первый член правой части – диффузионный член. Физический смысл и моделирование членов, входящих в источниковую часть уравнения (2.159):

(I) - генерация осредненным течением;

(II) - вязкая диссипация; в случае локальной изотропности этот член равен нулю [23].

(III) - корреляция пульсаций давлений с градиентом скалярной величины.

(IV) - корреляция пульсаций скорости и источника  $\omega$ .

(V) - член, включающий градиент давления; этим членом с достаточной точностью можно пренебречь.

Как и в случае корреляции скоростей деформаций с пульсациями давления корреляция пульсаций давлений с градиентом скалярной величины разбивается на сумму двух физически разнородных частей: турбулентной части  $\Pi_{if,1}$  и средних деформаций  $\Pi_{if,2}$ .

Первая часть имеет смысл тенденции к изотропности и моделируется как

$$\Pi_{if,1} = -C_{1\varphi} \overline{\rho} \frac{u_i'' f''}{\tau_f} \quad (2.160)$$

где  $\tau$  - характерное время пульсаций. Обычно в качестве этого времени используется отношение  $K/\varepsilon$ , которое на самом деле характеризует только пульсацию скорости. Более правильно было бы учесть временной масштаб пульсаций скалярной величины - отношение  $\frac{f''^2}{\varepsilon_f}$ .

В данной работе используется среднее геометрическое между этими двумя временными масштабами

$$\tau_f = \sqrt{\frac{K f''^2}{\varepsilon \varepsilon_f}}, \quad (2.161)$$

где  $\varepsilon_f$  - диссипация скалярной величины  $f''^2$ .

Для части  $\Pi_{if,2}$  при малых скоростях потока предполагается, что она пропорциональна генерации за счет средней деформации [23]:

$$\Pi_{if,2} = C_{2\varphi} \overline{\rho f'' u_j''} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (2.162)$$

Таким образом, член (III) уравнения (2.159) моделируется как

$$\overline{p' \frac{\partial f''}{\partial x_i}} = -C_{1\varphi} \overline{\rho} \frac{u_i'' f''}{\tau_f} + C_{2\varphi} \overline{\rho f'' u_j''} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (2.163)$$

Анализ порядков величин членов, входящих в уравнение (2.159), показывает, что величиной  $\overline{u_i'' \omega}$  можно пренебречь.

В результате источниковый член в правой части этого уравнения моделируется как:

$$S_i = -\overline{\rho u_i'' u_j''} \frac{\partial f}{\partial x_j} + (C_{2\varphi} - 1) \overline{\rho f'' u_j''} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - C_{1\varphi} \overline{\rho} \frac{u_i'' f''}{\tau_f} \quad (2.164)$$

Для турбулентного потока концентраций компонентов можно применить алгебраическую модель. Простейшая модель получается, если положить  $S_i \approx 0$ :

$$u_i'' f'' = \left[ -u_i'' u_j'' \frac{\partial f}{\partial x_j} + (C_{2\varphi} - 1) f'' u_j'' \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right] \frac{\tau_f}{C_{1\varphi}} \quad (2.165)$$

Используем следующее допущение. Рассмотрим линии тока, введенные на основе осредненных по Фавру скоростей. Вполне резонно предположить, что производные скорости вдоль линий тока будут существенно меньше, чем производные по нормали к ним

$$\frac{\partial}{\partial n} \gg \frac{\partial}{\partial s} \text{ для } V_s, V_n, \quad (2.166)$$

а также, что  $V_s \gg V_n$ . (Заметим, что  $V_s, V_n$  - мгновенные, а не осредненные значения скоростей, поэтому  $V_n$  может не равняться нулю, в отличие от средней скорости  $\tilde{V}_n \equiv 0$ ).

Для плоскопараллельного (плоскость XY) течения вдоль оси  $x$  при использовании допущения (2.166) строго получаем:

$$v'' f'' = -v''^2 \frac{\tau_f}{C_{1\varphi}} \frac{\partial f}{\partial n} \quad (2.167)$$

здесь  $v$  - проекция скорости на оси  $y$ .

Нетрудно показать, что подобные соотношения справедливы и для произвольных криволинейных линий тока:

$$V_n'' f'' = -\frac{V_n''^2}{K} K \frac{\tau_f}{C_{1\varphi}} \frac{\partial f}{\partial n} \quad (2.168)$$

Сравнение этого выражения с формулой (2.153) позволяет получить следующее соотношение:

$$\bar{\rho} \frac{V_n''^2}{K} K \frac{\tau_f}{C_{1\varphi}} = \frac{\mu_T}{\sigma_f} \quad (2.169)$$

В качестве формулы для коэффициента турбулентной вязкости используем (2.127), а также формулу (2.128), и получим с учетом (2.161) формулу для турбулентного числа Прандтля-Шмидта  $\sigma_f$

$$\sigma_f = \frac{0.09 C_{1\varphi}}{0.52} \frac{K}{\varepsilon} \frac{1}{\tau_f} = \frac{0.09 C_{1\varphi}}{0.52} \sqrt{\frac{K}{\varepsilon} \frac{\varepsilon_f}{f''^2}} \quad (2.170)$$

Полагаем константу равной  $C_{1\phi} = 3.0$  [23]. Тогда

$$\sigma_f = 0.52 \sqrt{\frac{K}{\varepsilon} \frac{\varepsilon_f}{f^{n_2}}} \quad (2.171)$$

Введем отношение динамических и скалярных турбулентных масштабов времени:

$$R_\tau = \frac{K/\varepsilon}{f^{n_2}/\varepsilon_f} = \left( \frac{\sigma_f}{0.52} \right)^2$$

$$\frac{K/\varepsilon}{f^{n_2}/\varepsilon_f} = \frac{0.5q^2/\varepsilon}{f^{n_2}/\varepsilon_f} = \frac{q^2/\varepsilon}{f^{n_2}/(\varepsilon_f/2)} \quad (2.172)$$

$$\varepsilon_f = 2\varepsilon_0$$

Если принять традиционное значение для свободных потоков  $\sigma_f = 0.7$ , то получим следующее соотношение для характерных времен пульсаций скалярной величины и скорости:

$$\frac{f^{n_2}}{\varepsilon_f} = \frac{1}{R_\tau} \frac{K}{\varepsilon} = 0.55 \frac{K}{\varepsilon} \quad (2.173)$$

Это значение хорошо согласуется с экспериментальными данными из работы [24], в которой получено:

$$\frac{1}{R_\tau} = 0.52 \div 0.61 \quad (2.174)$$

Обычно используемое допущение о том, что турбулентные числа Прандтля и Шмидта являются константами, может нарушаться в химически реагирующих течениях.

Многочисленные экспериментальные данные [25] показали, что турбулентные числа Прандтля и Шмидта могут варьироваться в довольно большом диапазоне: от 0,1 до 2.

Поэтому для более правильного описания турбулентного переноса следует учесть возможность того, что характерные масштабы пульсаций скорости и скалярной величины могут сильно отличаться.

Для этого необходимо решать дополнительные уравнения: для  $f''^2$  и  $\varepsilon_f$ .

### 2.9.2. Уравнения для дисперсии пульсаций инертной скалярной величины и ее диссипации

Если рассматривать  $f$  как некую инертную примесь (т.е.  $\omega = 0$ ), то уравнение для ее дисперсии легко выводится аналогично выводу уравнения переноса напряжений Рейнольдса [16] и имеет следующий вид:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} f''^2) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \tilde{u}_j f''^2) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \frac{\mu_T}{\sigma_{T,f}} + \frac{\mu}{Sc} \right) \frac{\partial f''^2}{\partial x_j} \right] + 2 \frac{\mu_T}{Sc_T} \left( \frac{\partial f}{\partial x_j} \right)^2 - \bar{\rho} \varepsilon_f \quad (2.175)$$

где

$$\varepsilon_f = 2D \frac{\partial C_s''}{\partial x_j} \frac{\partial C_s''}{\partial x_j} - \quad (2.176)$$

скалярная скорость диссипации.

Для скалярной скорости диссипации в литературе встречается несколько вариантов. Краткое изложение существующих моделей представлено в исследовании Сандерса и Гокалпа [26]. В настоящей работе уравнение, предложенное Джонсом и Мусонге [27], вводится как

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon_f) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \varepsilon_f) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \frac{\mu_T}{\sigma_{T,\varepsilon f}} + \frac{\mu}{Sc} \right) \frac{\partial \varepsilon_f}{\partial x_j} \right] - C_{f1} \rho \frac{\varepsilon_f^2}{f''^2} - C_{f2} \rho \frac{\varepsilon}{K} \varepsilon_f \\ + C_{f3} \frac{\varepsilon}{K} P_f + C_{f4} \frac{\varepsilon_f}{K} P_K \end{aligned} \quad (2.177)$$

где  $P_K$  - генерация турбулентной энергии (см. формулу (2.123));

$$P_f = -\bar{\rho} u_j'' f'' \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_j} = \frac{\mu_T}{Sc_T} \left( \frac{\partial f}{\partial x_j} \right)^2, \quad (2.178)$$

$C_{f1}, C_{f2}, C_{f3}, C_{f4}$  - числовые константы. Их разброс в различных источниках очень велик (см. [26]).

В работе [26] уравнение для  $\varepsilon_f$  записано несколько в иной форме:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\varepsilon_f) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\varepsilon_f) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \frac{\mu_T}{\sigma_{T,\varepsilon f}} + \frac{\mu}{Sc} \right) \frac{\partial \varepsilon_f}{\partial x_j} \right] + C_{P1} \frac{\varepsilon_f}{f^{n2}} P_f + C_{P2} \frac{\varepsilon_f}{K} P_K \\ - C_{D1} \bar{\rho} \frac{\varepsilon_f^2}{f^{n2}} - C_{D2} \bar{\rho} \frac{\varepsilon}{K} \varepsilon_f \end{aligned} \quad (2.179)$$

Соответствие между коэффициентами в уравнениях (2.177) и (2.179):

$$C_{f3} = C_{P1} \frac{K/\varepsilon}{f^{n2}/\varepsilon_f} = C_{P1} R_\tau; \quad C_{f4} = C_{P2}; \quad C_{f1} = C_{D1}; \quad C_{f2} = C_{D2} \quad (2.180)$$

В дальнейшем, мы будем использовать следующие значения констант:

$$\begin{aligned} C_{P1} = 1.7/R_\tau; \quad C_{f4} = C_{P2} = 1.45; \quad C_{f1} = C_{D1} = 1.0; \quad C_{f2} = C_{D2} = 0.9; \\ C_{f3} = C_{P1} R_\tau = 1.7 \end{aligned} \quad (2.181)$$

### 2.9.3. Уравнения для корреляций пульсаций концентраций компонентов и соответствующей скорости диссипации

Общий вид уравнения переноса концентрации компонента  $s$ :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho C_s) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j C_s) + \frac{\partial}{\partial x_j}(J_{s,j}) = \dot{w}_s \quad (2.182)$$

или

$$\rho \frac{\partial C_s}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial C_s}{\partial x_j} = \dot{w}_s - \frac{\partial}{\partial x_j}(J_{s,j}) \quad (2.183)$$

Уравнение переноса корреляции пульсаций  $C_s'' C_r''$  выводится аналогично выводу уравнения переноса напряжений Рейнольдса [16] и имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} C_s'' C_r'') + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \tilde{u}_j C_s'' C_r'') = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \underbrace{-\overline{\rho u_j'' C_s'' C_r''} - C_s'' \overline{J_{r,j}} - C_r'' \overline{J_{s,j}}}_{(I)} \right) \\ \underbrace{-\overline{\rho C_r'' u_j''} \frac{\partial C_s}{\partial x_j} - \overline{\rho C_s'' u_j''} \frac{\partial C_r}{\partial x_j}}_{(II)} + \underbrace{J_{r,j} \frac{\partial}{\partial x_j}(C_s'') + J_{s,j} \frac{\partial}{\partial x_j}(C_r'')}_{(III)} + \underbrace{C_s'' \dot{w}_r + C_r'' \dot{w}_s}_{(IV)} \end{aligned} \quad (2.184)$$

Физический смысл членов, входящих в правую часть этого уравнения:

(I) - диффузия; (II) - генерация; (III) - диссипация; (IV) - член, учитывающий влияние источника.

(I) Диффузионные члены моделируются как

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left( -\overline{\rho u_j'' C_s'' C_r''} - \overline{C_s'' J_{r,j}} - \overline{C_r'' J_{s,j}} \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \frac{\mu_T}{\sigma_{T,f}} + \frac{\mu}{Sc} \right) \frac{\partial}{\partial x_j} \left( C_s'' C_r'' \right) \right] \quad (2.185)$$

(II) Для потоков, входящих в генерацию, используется формула (2.153), поэтому:

$$-\overline{\rho C_r'' u_j''} \frac{\partial C_s}{\partial x_j} - \overline{\rho C_s'' u_j''} \frac{\partial C_r}{\partial x_j} = 2 \frac{\mu_T}{Sc_T} \frac{\partial \tilde{C}_r}{\partial x_j} \frac{\partial C_s}{\partial x_j} \quad (2.186)$$

(III) Диссипация с учетом закона Фика моделируется как

$$\begin{aligned} \overline{J_{r,j} \frac{\partial}{\partial x_j} (C_s'')} + \overline{J_{s,j} \frac{\partial}{\partial x_j} (C_r'')} &= -\rho D \frac{\partial C_r}{\partial x_j} \frac{\partial C_s''}{\partial x_j} - \rho D \frac{\partial C_s}{\partial x_j} \frac{\partial C_r''}{\partial x_j} = -\rho D \frac{\partial C_s''}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{C}_r}{\partial x_j} \\ -\rho D \frac{\partial C_r''}{\partial x_j} \frac{\partial C_s''}{\partial x_j} - \rho D \frac{\partial C_r''}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{C}_s}{\partial x_j} - \rho D \frac{\partial C_s''}{\partial x_j} \frac{\partial C_r''}{\partial x_j} &\approx -2\bar{\rho} D \frac{\partial C_r''}{\partial x_j} \frac{\partial C_s''}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (2.187)$$

Введем обозначение для диссипации:

$$\bar{\rho} \varepsilon_{sr} = 2\bar{\rho} D \frac{\partial C_s''}{\partial x_j} \frac{\partial C_r''}{\partial x_j} \quad (2.188)$$

Введем обозначение:

$$W_{sr} = \overline{C_s'' \dot{w}_r} + \overline{C_r'' \dot{w}_s} \quad (2.189)$$

Окончательный вид уравнения:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left( \bar{\rho} C_s'' C_r'' \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \bar{\rho} \tilde{u}_j C_s'' C_r'' \right) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \frac{\mu_T}{\sigma_{T,f}} + \frac{\mu}{Sc} \right) \frac{\partial}{\partial x_j} \left( C_s'' C_r'' \right) \right] \\ + 2 \frac{\mu_T}{Sc_T} \frac{\partial \tilde{C}_r}{\partial x_j} \frac{\partial C_s}{\partial x_j} - \bar{\rho} \varepsilon_{sr} + W_{sr} & \end{aligned} \quad (2.190)$$

Уравнение для среднеквадратичной дисперсии пульсаций  $C_s$  ( $s=r$ ):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}C_s''^2) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j C_s''^2) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \frac{\mu_T}{\sigma_{T,f}} + \frac{\mu}{Sc} \right) \frac{\partial C_s''^2}{\partial x_j} \right] + 2 \frac{\mu_T}{Sc_T} \left( \frac{\partial C_s}{\partial x_j} \right)^2 - \bar{\rho}\varepsilon_{ss} + 2 \overline{C_s'' \dot{w}_s} \quad (2.191)$$

Введем обозначения:

$$C''^2 = \sum_{s=1}^{N_c} C_s''^2, \quad P_c = \frac{\mu_T}{Sc_T} \sum_{s=1}^{N_c} \left( \frac{\partial C_s}{\partial x_j} \right)^2, \quad \varepsilon_c = \sum_{s=1}^{N_c} \varepsilon_{ss} \quad (2.192)$$

и просуммируем (2.191) по всем компонентам:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}C''^2) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j C''^2) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \frac{\mu_T}{\sigma_{T,f}} + \frac{\mu}{Sc} \right) \frac{\partial C''^2}{\partial x_j} \right] + 2P_c - \bar{\rho}\varepsilon_c + 2 \sum_{s=1}^{N_c} \overline{C_s'' \dot{w}_s} \quad (2.193)$$

В случае, когда химические реакции отсутствуют, уравнение (2.179) может быть распространено на определение диссипации для дисперсии массовых долей

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\varepsilon_{ss}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j \varepsilon_{ss}) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \frac{\mu_T}{\sigma_{T,f}} + \frac{\mu}{Sc} \right) \frac{\partial \varepsilon_{ss}}{\partial x_j} \right] + C_{P1} \frac{\varepsilon_{ss}}{C_s''^2} P_{ss} + C_{P2} \frac{\varepsilon_{ss}}{K} P_K \\ &- C_{D1} \bar{\rho} \frac{\varepsilon_{ss}^2}{C_s''^2} - C_{D2} \bar{\rho} \frac{\varepsilon}{K} \varepsilon_{ss} \end{aligned} \quad (2.194)$$

где

$$P_{ss} = \frac{\mu_T}{Sc_T} \left( \frac{\partial C_s}{\partial x_j} \right)^2 \quad (2.195)$$

Делаем допущение, что при наличии химических реакций структура уравнения сохранится, т.е.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\varepsilon_{ss}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j \varepsilon_{ss}) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \frac{\mu_T}{\sigma_{T,f}} + \frac{\mu}{Sc} \right) \frac{\partial \varepsilon_{ss}}{\partial x_j} \right] + C_{P1} \frac{\varepsilon_{ss}}{C_s''^2} P_{ss} + C_{P2} \frac{\varepsilon_{ss}}{K} P \\ &- C_{D1} \bar{\rho} \frac{\varepsilon_{ss}^2}{C_s''^2} - C_{D2} \bar{\rho} \frac{\varepsilon}{K} \varepsilon_{ss} + C_{W1} \frac{\varepsilon_{ss}}{C_s''^2} \overline{C_s'' \dot{w}_s} \end{aligned} \quad (2.196)$$

где  $C_{W1}$  - дополнительная константа.



Суммируем (2.196) по  $s$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon_C) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \varepsilon_C) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \frac{\mu_T}{\sigma_{T,ef}} + \frac{\mu}{Sc} \right) \frac{\partial \varepsilon_C}{\partial x_j} \right] + C_{P1} \frac{\varepsilon_C}{C''^2} P_C + C_{P2} \frac{\varepsilon_C}{K} P \\ - C_{D1} \rho \frac{\varepsilon_C}{C''^2} \varepsilon_C - C_{D2} \rho \frac{\varepsilon}{K} \varepsilon_C + C_{W1} \frac{\varepsilon_C}{C''^2} \sum_s \overline{C_s'' \dot{w}_s} \end{aligned} \quad (2.197)$$

где, как и прежде,

$$C''^2 = \sum_{s=1}^{Nc} C_s''^2, \quad P_C = \frac{\mu_T}{Sc_T} \sum_{s=1}^{Nc} \left( \frac{\partial C_s}{\partial x_j} \right)^2 = \sum_s P_{ss}, \quad \varepsilon_C = \sum_{s=1}^{Nc} \varepsilon_{ss} \quad (2.198)$$

Здесь использовалась гипотеза, что:

$$\varepsilon_{ss} = \frac{C_s''^2}{C''^2} \varepsilon_C, \quad (2.199)$$

т.е., что характерные скалярные времена одинаковы для всех компонентов.

Вопрос определения  $\sum_s \overline{C_s'' \dot{w}_s}$  и  $C_{W1}$  будет рассмотрен в разделе 2.9.

#### 2.9.4. Уравнения для среднеквадратичной дисперсии пульсаций термодинамической энтальпии и соответствующей скорости диссипации

Введем понятие термодинамической энтальпии газовой смеси и соответствующих энергий:

$$\begin{aligned} h_T = \sum_{s=1}^{Nc} C_s h_s^T = \sum_{s=1}^{Nc} C_s h_s - \sum_{s=1}^{Nc} C_s h_s^0 = h - h^0 \\ e_T = h_T - \frac{p}{\rho} = h - h^0 - \frac{p}{\rho} = e - h^0, \quad E_T = e_T + \frac{u_k^2}{2} = e - h^0 + \frac{u_k^2}{2} = E - h^0 \end{aligned} \quad (2.200)$$

где

$$h^0 = \sum_{s=1}^{Nc} C_s h_s^0 \quad (2.201)$$

Т.е. термодинамическая энтальпия это часть энтальпии без учета химической энергии компонентов.

Уравнение для термодинамической энтальпии легко выводится из уравнений (2.5)-(2.8):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h_T) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j h_T) = -\frac{\partial q_j}{\partial x_j} + \dot{w}_h \quad (2.202)$$

где

$$\dot{w}_h = \frac{dp}{dt} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \sum_{s=1}^{Nc} h_s^0 \dot{w}_s \quad (2.203)$$

Уравнение (2.202) полностью подобно уравнению для массовых долей (2.182), и вывод уравнений для дисперсии энтальпии и ее диссипации аналогичен. Эти уравнения имеют вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} h_T''^2) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \tilde{u}_j h_T''^2) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \frac{\mu_T}{\sigma_{T,f}} + \frac{\mu}{Sc} \right) \frac{\partial h_T''^2}{\partial x_j} \right] \\ + 2 \frac{\mu_T}{Sc_T} \left( \frac{\partial h_T''}{\partial x_j} \right)^2 - \bar{\rho} \varepsilon_h + \overline{2 h_T'' \dot{w}_h} \end{aligned} \quad (2.204)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon_h) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \varepsilon_h) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \frac{\mu_T}{\sigma_{T,\varepsilon f}} + \frac{\mu}{Sc} \right) \frac{\partial \varepsilon_h}{\partial x_j} \right] + C_{P1} \frac{\varepsilon_h}{h_T''^2} P_h + C_{P2} \frac{\varepsilon_h}{K} P \\ - C_{D1} \bar{\rho} \frac{\varepsilon_h^2}{h_T''^2} - C_{D2} \bar{\rho} \frac{\varepsilon_h}{K} \varepsilon_h + C_{W1} \frac{\varepsilon_h}{h_T''^2} \overline{h_T'' \dot{w}_h} \end{aligned} \quad (2.205)$$

При определении величины  $\overline{h_T'' \dot{w}_h}$  мы исходим из того, что пульсации энтальпии слабо влияют на динамические характеристики: производную давления и диссипативную функцию, поэтому

$$\overline{h_T'' \dot{w}_h} \approx - \sum_{s=1}^{Nc} h_s^0 \overline{h_T'' \dot{w}_s} \quad (2.206)$$

Вопрос определения  $\overline{h_T'' \dot{w}_s}$  будет рассмотрен в разделе 2.9.

### 2.9.5. Уравнения для среднеквадратичной дисперсии пульсаций скалярных величин и скалярной скорости диссипации в постановке SST модели

Уравнения для скалярных дисперсий в постановке SST модели имеют такой же вид, как и в постановке К-ε модели (см. уравнения (2.193), (2.204)), а для скалярных диссипаций получаем из (2.197) и (2.205) с учетом (2.133):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon_c) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \varepsilon_c) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \frac{\mu_T}{\sigma_{T,\varepsilon f}} + \frac{\mu}{Sc} \right) \frac{\partial \varepsilon_c}{\partial x_j} \right] + C_{P1} \frac{\varepsilon_c}{C^{n2}} P_c + C_{P2} \frac{\varepsilon_c}{K} P \\ - C_{D1} \rho \frac{\varepsilon_c}{C^{n2}} \varepsilon_c - C_{D2} \rho \beta_0^* \omega \varepsilon_c + C_{W1} \frac{\varepsilon_c}{C^{n2}} \sum_s \overline{C_s'' \dot{w}_s} \end{aligned} \quad (2.207)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon_h) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \varepsilon_h) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \frac{\mu_T}{\sigma_{T,\varepsilon f}} + \frac{\mu}{Sc} \right) \frac{\partial \varepsilon_h}{\partial x_j} \right] + C_{P1} \frac{\varepsilon_h}{h_T^{n2}} P_h + C_{P2} \frac{\varepsilon_h}{K} P \\ - C_{D1} \rho \frac{\varepsilon_h^2}{h_T^{n2}} - C_{D2} \rho \beta_0^* \omega \varepsilon_h + C_{W1} \frac{\varepsilon_h}{h_T^{n2}} \overline{h_T'' \dot{w}_h} \end{aligned} \quad (2.208)$$

Основная область применения SST модели - пристеночные течения, поэтому важным вопросом является поведение дисперсии и диссипации скалярных величин у стенки, и, соответственно, задание граничных условий для них.

Следует отметить, что определение этих параметров важно не само по себе, а, в большей степени, как средство определения характерного времени  $\tau_f$ . При использовании концепции коэффициента турбулентной вязкости и турбулентного числа Прандтля/Шмидта принципиально важно правильно определить эти параметры. Правильность расчета коэффициента турбулентной вязкости обеспечивают уравнения SST модели, а для задания турбулентного числа Прандтля/Шмидта используем следующие соображения.

И формул (2.172) и (2.133) получаем:

$$R_\tau = \frac{1/(\beta_0^* \omega)}{f^{n2} / \varepsilon_f} = \left( \frac{\sigma_f}{0.52} \right)^2 \quad (2.209)$$

т.е.

$$(\varepsilon_f)_w = (f^{n^2})_w \beta_0^* \omega_w \left( \frac{\sigma_f}{0.52} \right)^2 \quad (2.210)$$

Если принять значение для пристеночного течения традиционное значение  $\sigma_f = 0.9$  и использовать формулу (2.144) для  $\omega_w$ , то получается следующее граничное условие для  $\varepsilon_f$

$$(\varepsilon_f)_w = (f^{n^2})_w 0.27 \frac{60\mu}{\rho\beta_0(\Delta d_1)^2} \quad (2.211)$$

Напомним, что константа  $\beta_0 = 0.075$ .

Значение дисперсии на стенке  $(f^{n^2})_w$  не имеет принципиального значения при данном подходе и может быть найдено из условия нулевого потока на стенке:

$$\left( \frac{\partial f^{n^2}}{\partial n} \right)_w = 0 \quad (2.212)$$

## 2.10. Модель учета влияния турбулентности на скорости химических реакций

### 2.10.1. Функция распределения плотности вероятностей

Скорость образования химического компонента в общем случае является функцией плотности, температуры и концентраций компонентов:

$$\dot{w}_s = \dot{w}_s(\rho, T, C_1, \dots, C_{N_c}) \quad (2.213)$$

Эта функция существенно нелинейна относительно своих аргументов, поэтому в турбулентных течениях допущение о том, что средняя скорость  $\overline{\dot{w}_s}$  определяется через средние значения своих аргументов, может приводить к грубым ошибкам. На самом деле средняя скорость реакций зависит не только от средних значений газодинамических параметров, но и существенным образом от пульсаций этих величин. Наличие корреляций пульсаций температуры и

концентраций приводит к тому, что скорость процесса может как увеличиваться, так и уменьшаться.

Изучению этой проблемы посвящено немало работ. Большинство из основано на предположении о химическом равновесии. Чаще всего, (см., например, [28, 29]) используется некая функция смешения  $f$ , и все параметры турбулентного горения получаются из ее средней величины и среднеквадратичного отклонения (дисперсии).

Для химически неравновесных течений такой подход неприемлем, т.к. невозможно описать все протекающие химические реакции всего одной функцией.

Более достоверным в процедуре математического описания комплекса химических реакций представляется подход с использованием функции распределения плотности вероятностей (ФРПВ), которая зависит от ряда газодинамических параметров, рассматриваемых в турбулентном течении в качестве случайных величин.

Для получения ФРПВ можно получить специальное уравнение переноса (см. например [30, 31]). Однако в общем случае решение и использования такого уравнения представляет колоссальную математическую проблему. Поэтому в данной работе используется упрощенная модель построения ФРПВ, основанная на представлении этой функции в виде произведения более простых функций заранее заданной формы с последующим решением уравнений, описывающих параметры этих функций. При построении этой модели использовались методы, предложенные в работах [32-35].

В этом случае для расчета осредненной скорости образования компонентов используется подход, основанный на функции распределения плотности вероятностей (ФРПВ):

$$\overline{\dot{w}_s} = \int_0^\infty \int_0^1 \int_0^1 \dots \int_0^1 \dot{w}_s(\rho, T, C_1, \dots, C_{N_c}) P(\rho, T, C_1, \dots, C_{N_c}) d\rho dT dC_1, \dots, dC_{N_c}, \quad (2.214)$$

где  $P(\rho, T, C_1, \dots, C_{N_c})$  - функция распределения плотности вероятностей случайных величин  $(\rho, T, C_1, \dots, C_{N_c})$ .

Используем следующие допущения, представленные в работе [114]:

*Допущение 1.* Функция распределения плотности вероятностей  $P(\rho, T, C_1, \dots, C_{N_c})$  может быть представлена в виде произведения 3-х независимых функций:

$$P(\rho, T, C_1, \dots, C_{N_c}) = P_\rho(\rho) \cdot P_T(T) \cdot P_C(C_1, \dots, C_{N_c}), \quad (2.215)$$

То есть предполагается выполнение статистической независимости между соответствующими случайными величинами.

*Допущение 2.* Структура функции распределения вероятностей в форме (2.215) представляется произведением следующих известных зависимостей:

1) Функция плотности газа  $P_\rho(\rho)$  представляется дельта-функцией (функцией Дирака) [32]:

$$P_\rho(\rho) = \delta(\rho - \bar{\rho}) \quad (2.216)$$

2) Для температуры в данной работе использовалось 2 варианта задания ФРВ: нормальное распределение (распределение Гаусса) и бета-функция.

3) Для концентраций компонентов использовалась многомерная бета-функция.

### 2.10.2. ФРПВ для температуры.

Согласно [33] нормальное распределение имеет вид:

$$P_T(T) = \frac{1}{\sqrt{2\pi T^{\prime 2}}} \exp\left[-\frac{(T - T)^2}{2T^{\prime 2}}\right] \quad (2.217)$$

Как известно, нормальное распределение в общем случае имеет пределы  $(-\infty, +\infty)$ , поэтому вводятся физические ограничения на пределы интегрирования при взятии моментов [115]:

$$\begin{aligned} T_{\min} &= T - \phi\sqrt{T^{n^2}}, \\ T_{\max} &= T + \phi\sqrt{T^{n^2}} \end{aligned} \quad (2.218)$$

где принималось:  $\phi = 3$ .

Соответственно, в формулу (2.217) вводится поправка, так чтобы выполнялось условие:

$$\int_{T_{\min}}^{T_{\max}} P_T(T) dT = 1 \quad (2.219)$$

Для того, чтобы обеспечить это условие, на границах  $T_{\min}$  и  $T_{\max}$  вводятся дельта-функции, которые учитывают влияние "хвостов" ФРПВ в виде:

$$\begin{aligned} P_T(T) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi T^{n^2}}} \exp\left[-\frac{(T-T)^2}{2T^{n^2}}\right] \left[ H(T-T_{\min}) - H(T-T_{\max}) \right] \\ &+ A_1 \delta(T-T_{\min}) + A_2 \delta(T-T_{\max}), \end{aligned} \quad (2.220)$$

где  $H$  - функция Хевисайда (кусочно-постоянная функция, равная нулю для отрицательных значений аргумента и единице — для положительных), коэффициенты  $A_1, A_2$  учитывают площадь отрезанных частей ФРПВ [34]:

$$\begin{aligned} A_1 &= \int_{-\infty}^{T_{\min}} \frac{1}{\sqrt{2\pi T^{n^2}}} \exp\left[-\frac{(T-T)^2}{2T^{n^2}}\right] dT, \\ A_2 &= \int_{T_{\max}}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi T^{n^2}}} \exp\left[-\frac{(T-T)^2}{2T^{n^2}}\right] dT \end{aligned} \quad (2.221)$$

При проведении численного счета функция нормального распределения при значениях  $T^{n^2}$  близких к нулю имеет неопределенное значение, поэтому при  $\sqrt{T^{n^2}}/T < 10^{-4}$ , скорости реакций рассчитываются не через ФРПВ, а по средней температуре  $T$ .

Как отмечалось, во втором варианте функция температуры газа  $P_T(T)$  задаётся бета-функцией, которая имеет следующий вид [33]:

$$P_T(T) = \frac{\Gamma(\beta_1 + \beta_2)}{\Gamma(\beta_1)\Gamma(\beta_2)} \left[ \theta^{\beta_1-1} (1-\theta)^{\beta_2-1} \right], \quad (2.222)$$

где  $\Gamma(\beta)$  - гамма-функция

$$\theta = \frac{T - T_{\min}}{T_{\max} - T_{\min}}, \quad (2.223)$$

$$\beta_1 = \tilde{\theta} \left[ \frac{\tilde{\theta}(1 - \tilde{\theta})}{\theta^{n^2}} - 1 \right], \quad \beta_2 = (1 - \tilde{\theta}) \left[ \frac{\tilde{\theta}(1 - \tilde{\theta})}{\theta^{n^2}} - 1 \right] \quad (2.224)$$

Бета распределение является более сложным по сравнению с нормальным, но более удобно для подобных задач, т.к. его зависимость от двух переменных позволяет более гибко отражать характер изменения ФРПВ в пламени. На ранних стадиях смешения эта функция имеет два пика, а затем постепенно переходит к виду, близкому к нормальному распределению.

Есть и еще одно преимущество бета распределения. Оно заключается в том, что пределы интегрирования в этом случае конечны.

Новая функция  $\theta$  меняется в пределах от 0 до 1.

Среднее значения этой функции, и ее дисперсия определяются формулами:

$$\tilde{\theta} = \frac{T - T_{\min}}{T_{\max} - T_{\min}}, \quad (2.225)$$

$$\theta^{n^2} = \frac{T^{n^2}}{(T_{\max} - T_{\min})^2} \quad (2.226)$$

### 2.10.3. ФРПВ для концентраций компонентов

Многомерная бета функция распределения вероятностей имеет вид [35]:

$$P_C(C_1, \dots, C_{N_c}) = \frac{\Gamma(\beta_1 + \beta_2 + \dots + \beta_{N_c})}{\Gamma(\beta_1) \cdot \Gamma(\beta_2) \cdot \dots \cdot \Gamma(\beta_{N_c})} C_1^{\beta_1 - 1} \cdot C_2^{\beta_2 - 1} \cdot \dots \cdot C_{N_c}^{\beta_{N_c} - 1} \delta(1 - S), \quad (2.227)$$

где

$$S = \sum_{m=1}^{N_c} C_m, \quad \beta_m = C_m \left( \frac{1 - S_C}{\sigma_C} - 1 \right), \quad (2.228)$$

$$S_C = \sum_{m=1}^{N_c} (C_m)^2, \quad \sigma_C = \sum_{m=1}^{N_c} C_m^2$$

Основное достоинство такого представления ФРПВ для концентраций состоит в том, что все необходимые моменты случайных величин находятся



аналитически. В скорости реакций входят произведения концентраций компонентов, поэтому средние скорости складываются из произведений средних величин плюс дисперсии и ковариации (смешанные моменты второго порядка). Дисперсии и ковариации для многомерной бета функции распределения (2.227) определяются по формулам:

$$\overline{C_m'' C_n''} = \begin{cases} \sigma_c \frac{-C_m C_n}{1 - S_c}, & m \neq n \\ \sigma_c \frac{C_m (1 - C_n)}{1 - S_c}, & m = n \end{cases} \quad (2.229)$$

#### 2.10.4. Осредненные скорости реакций, скорости образования компонентов

Скорость образования компонента в результате химических реакций  $\dot{w}_s$  складывается из скоростей всех реакций, в которых он участвует:

$$\dot{w}_s = M_s \sum_{k=1}^K (v_{k,s}'' - v_{k,s}') R_k \quad (2.230)$$

Скорости химических реакций определяются на основе закона действующих масс:

$$R_k = \left( F_k \prod_{s=1}^{N_c} \left( \frac{\rho C_s}{M_s} \right)^{v_{k,s}'} - B_k \prod_{s=1}^{N_c} \left( \frac{\rho C_s}{M_s} \right)^{v_{k,s}''} \right), \quad (2.231)$$

где  $F_k$  и  $B_k$  - коэффициенты скоростей прямой и обратной  $k$ -ой реакции зависят только от температуры.

В соответствии с основным допущением пункта 2.9.1 (формулы (2.215) и (2.216)), получаем:

$$\overline{\dot{w}_s} = M_s \sum_{k=1}^K (v_{k,s}'' - v_{k,s}') \overline{R_k}, \quad (2.232)$$

$$\overline{R_k} = \left( \overline{F_k \prod_{s=1}^{N_c} \left( \frac{\rho C_s}{M_s} \right)^{v_{k,s}'}} - \overline{B_k \prod_{s=1}^{N_c} \left( \frac{\rho C_s}{M_s} \right)^{v_{k,s}''}} \right) \quad (2.233)$$

Моделирование произведений, входящих в формулу (2.233) зависит от числа компонентов, участвующих в реакции. На практике чаще всего встречаются 3 варианта. Рассмотрим на примере прямой реакции.

1) Одномолекулярная реакция  $A \rightarrow B + C + \dots$  (тривиальный, но редкий случай)

$$\overline{\prod_{s=1}^{N_C} \left( \frac{\rho C_s}{M_s} \right)^{v'_{k,s}}} = \frac{\overline{\rho C_A}}{M_A} = \frac{\bar{\rho} C_A}{M_A} \quad (2.234)$$

2) Двухмолекулярная реакция  $A + B \rightarrow C + D + \dots$

$$\overline{\prod_{s=1}^{N_C} \left( \frac{\rho C_s}{M_s} \right)^{v'_{k,s}}} = \frac{\overline{\rho^2 C_A C_B}}{M_A M_B} = \frac{\bar{\rho}^2 (C_A C_B + \overline{C_A'' C_B''})}{M_A M_B} \quad (2.235)$$

3) Трехмолекулярная реакция  $A + B + M \rightarrow C + D + M + \dots$ , где  $M$  - третье тело, т.е. любой компонент газовой смеси. Обычно при расчете в качестве  $M$  берется сумма всех компонентов (с некоторыми весовыми коэффициентами). Пульсациями суммы мольных долей компонентов можно пренебречь, поэтому этот случай мало чем отличается от предыдущего.

$$\overline{\prod_{s=1}^{N_C} \left( \frac{\rho C_s}{M_s} \right)^{v'_{k,s}}} = \frac{\overline{\rho^2 C_A C_B [M]}}{M_A M_B} = \frac{\bar{\rho}^2 (C_A C_B + \overline{C_A'' C_B''})}{M_A M_B} [M], \quad (2.236)$$

где  $[M]$  - мольная концентрация третьего тела.

Для входящей в выражения (2.235) и (2.236) корреляции пульсаций  $\overline{C_A'' C_B''}$  используем формулы (2.229).

Введем обозначение:

$$\sigma = \frac{\sigma_C}{1 - S_C}, \quad S_C = \sum_{m=1}^{N_C} (C_m)^2, \quad \sigma_C = \sum_{m=1}^{N_C} C_m^{\prime 2} \quad (2.237)$$

Тогда для осредненного произведения двух различных компонентов ( $A \neq B$ ) справедливо:

$$C_A C_B + \overline{C_A'' C_B''} = (1 - \sigma) C_A C_B \quad (2.238)$$

и

$$\frac{\bar{\rho}^2 \left( C_A C_B + \overline{C_A'' C_B''} \right)}{M_A M_B} = (1-\sigma) \frac{\bar{\rho}^2 C_A C_B}{M_A M_B} = (1-\sigma) [A][B] \quad (2.239)$$

А для осредненного произведения двух одинаковых компонентов ( $A=B$ ) справедливо

$$C_A C_A + \overline{C_A'' C_A''} = C_A^2 + \sigma C_A (1-C_A) = C_A \left[ C_A + \sigma(1-C_A) \right] \quad (2.240)$$

и

$$\frac{\bar{\rho}^2 \left( C_A C_B + \overline{C_A'' C_B''} \right)}{M_A M_B} = \frac{\bar{\rho} C_A \left[ \bar{\rho} C_A + \sigma(\bar{\rho} - \bar{\rho} C_A) \right]}{M_A M_A} = [A] \left[ [A] + \sigma \left( \frac{\bar{\rho}}{M_A} - [A] \right) \right] \quad (2.241)$$

Т.к.  $\sigma > 0$ , то вследствие турбулентных пульсаций концентраций скорость реакции может как уменьшаться (при  $A \neq B$ ), так и увеличиваться (при  $A = B$ ).

4) В уравнения (2.193), (2.197) и т.д. раздела 2.8. входит корреляция пульсаций  $\overline{C_s'' \dot{w}_s}$ , поэтому возникает необходимость определения следующих параметров:

$$\begin{aligned} \frac{\overline{\rho^2 C_A C_B C_D''}}{M_A M_B} &= \frac{\overline{\rho^2 (C_A + C_A'')(C_B + C_B'') C_D''}}{M_A M_B} \\ &= \bar{\rho}^2 \frac{C_A C_B C_D''}{M_A M_B} + \bar{\rho}^2 \frac{C_A'' C_D'' C_B}{M_A M_B} + \frac{\overline{\rho^2 C_A'' C_B'' C_D''}}{M_A M_B} \approx \bar{\rho}^2 \frac{C_A C_B C_D'' + C_A'' C_D'' C_B}{M_A M_B} \end{aligned} \quad (2.242)$$

Здесь используется допущение, что тройной корреляцией можно пренебречь.

Таким образом, все опять свелось к определению двойных корреляций типа  $C_B'' C_D''$ .

5) Величина корреляции  $\overline{h_T'' \dot{w}_s}$ , входящая в уравнения (2.204) и т.д. раздела 2.8. определяется следующим образом:

$$\overline{h_T'' \dot{w}_s} \approx c_p \overline{T'' \dot{w}_s} \quad (2.243)$$

Таким образом, исходя из основного допущения о независимости случайных величин температуры и концентраций, мы получаем необходимость

определения следующих параметров:  $\overline{T''F_k}$ ,  $\overline{T''B_k}$ . Это легко осуществляется с помощью ФРПВ (2.220) или (2.222).

#### 2.10.4. Формулы для дисперсий температуры и концентраций

В предыдущем разделе 2.8. мы получили уравнения для определения дисперсий концентраций компонентов и термодинамической энтальпии.

Для определения дисперсии температуры используем следующие соображения. Термодинамическая энтальпия определяется формулой

$$h_T = \int_0^T c_p(T) dT \quad (2.244)$$

Отсюда, пренебрегая зависимостью теплоемкости от пульсаций температуры, получаем:

$$h_T'' = c_p(T) T'' \quad (2.245)$$

т. е.

$$T''^2 = \frac{h_T''^2}{c_p^2(T)} \quad (2.246)$$

#### 2.10.5. Программа расчета осредненных параметров, включающих пульсации температуры

Для интегралов, включающих температурную ФРПВ, не существует аналитических решений, поэтому они находятся численно. Чтобы не усложнять численное решение основной системы уравнений этим интегрированием на каждом шаге по времени и в каждом узле сетки сделано следующее. Для всех химических реакций заранее просчитывались средние коэффициенты скоростей реакций и параметр  $\overline{T''\dot{w}_s}$  в зависимости от всех возможных средних температур и дисперсий температуры, и создавалась таблица этих величин. В процессе решения основной системы средние коэффициенты скоростей легко находились по этим таблицам с помощью билинейной интерполяции.

## 2.11. Многофазные течения

Численное моделирование на сегодняшний день является одним из наиболее важных и перспективных инструментов при исследовании многофазных течений. Однако следует отметить, что методики численного моделирования течений с фазовыми переходами на сегодняшний день развиты еще недостаточно хорошо.

В работе [38] рассмотрен способ математического моделирования многофазных потоков с учетом кристаллизации твердой фазы, имеющий следующие особенности:

1) Математическая модель включает в себя уравнения сохранения для газа и для частиц, а именно – уравнения сохранения массы, количества движения, полной энергии. Для частиц дополнительно решается уравнение для относительного радиуса кристаллизации.

2) Уравнения для газа и для твердых частиц записываются в комплексной постановке Лагранжа-Эйлера (модели траекторий - двухжидкостной модели).

3) Учитывается взаимное влияние газа и частиц.

4) Решение уравнений для газа и для частиц происходит совместно в единой системе.

Полидисперсная смесь частиц представляется в виде набора  $L$  групп частиц, каждая из которых характеризуется значениями радиуса  $r_\alpha$ , плотности  $\rho_\alpha = n_\alpha \cdot m_\alpha$ , компонент скорости  $u_{\alpha,j}$  и температуры  $T_\alpha$ . Здесь  $n_\alpha$  - концентрация частиц;  $m_\alpha$  - масса одной частицы. Предполагается, что частицы имеют сферическую форму, химически инертны по отношению к газовой фазе и не взаимодействуют между собой.

Для каждой группы частиц ( $\alpha=1,2,\dots,L$ ) уравнения, описывающие движение частиц, включают в себя [38, 39]:

1) уравнение неразрывности:

$$\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_\alpha u_{\alpha,j}) = 0, \quad (2.247)$$

2) уравнение сохранения количества движения:

$$\rho_{\alpha} \frac{du_{\alpha,i}}{dt} = f_{\alpha,i} \quad (2.248)$$

3) уравнение сохранения энергии:

$$\rho_{\alpha} C_s \frac{dT_{\alpha}}{dt} = q_{phase,\alpha} - q_{conv,\alpha} - q_{rad,\alpha} \quad (2.249)$$

Здесь  $\frac{d}{dt}$  - полная производная по времени (берется вдоль траектории частицы);  $f_{\alpha,i}$  - сила воздействия газа на частицу;  $q_{phase,\alpha}$  - тепло фазового перехода;  $q_{conv,\alpha}$  - тепловой поток, сбрасываемый частицей за счет конвекции;  $q_{rad,\alpha}$  - лучистый тепловой поток, сбрасываемый частицей;  $C_s$  - теплоемкость частиц.

В качестве примера рассмотрим частицы  $Al_2O_3$ . Используются следующие формулы:

$$f_{\alpha,i} = \rho_{\alpha} C_f (u_i - u_{\alpha,i}) = \frac{3}{8} \frac{C_{D,\alpha} \rho (u_i - u_{\alpha,i}) |\vec{V} - \vec{V}_{\alpha}| \rho_{\alpha}}{r_{\alpha} \rho_{Al_2O_3}} \quad (2.250)$$

$$q_{conv,\alpha} = \rho_{\alpha} C_q (T_{\alpha} - T), \quad C_q = \frac{3}{2} \frac{Nu \cdot \lambda}{r_{\alpha}^2 \rho_{Al_2O_3}}, \quad (2.251)$$

$$q_{rad,\alpha} = \rho_{\alpha} \exp(C_{rad}),$$

$$C_{rad} = \begin{cases} 1.25 \cdot 10^{-2} T_{\alpha} - 0.5, & T_{\alpha} < 1000, \\ 10 + 2 \cdot 10^{-3} T_{\alpha}, & 1000 < T_{\alpha} < 2000, \\ 7.143 \cdot 10^{-3} T_{\alpha} - 0.286, & T_{\alpha} > 2000 \end{cases} \quad (2.252)$$

$$\frac{q_{phase,\alpha}}{\rho_{\alpha}} = 3q_{cr} \frac{r_{cr,\alpha}^2}{r_{\alpha}^3} a (T_M - T_{\alpha})^{1.8} \quad (2.253)$$

где  $\rho_{Al_2O_3}$  - плотность материала частиц;  $q_{cr}$  - удельная теплота фазового перехода;  $T_M = 2300K$  - температура начала равновесной кристаллизации;  $r_{kr,\alpha}$  - радиус фронта кристаллизации;  $a = 0.64 \cdot 10^{-6}$  - константа в формуле для скорости распространения фронта кристаллизации. Предполагается, что начало неравновесной кристаллизации соответствует температуре  $T = 0.82T_M$  согласно работе [41].

Для определения положения фронта кристаллизации во времени используется условие

$$\frac{dr_{кр,\alpha}}{dt} = -a(T_M - T_\alpha)^{1.8} \quad (2.254)$$

При интенсивном горении температура газа может превысить температуру плавления частиц, поэтому закристаллизовавшиеся частицы могут начать плавиться. В этом случае из условия совместности процессов  $q_{conv,\alpha} = q_{phase,\alpha}$  определяется положение фронта кристаллизации (расплавленной зоны).

Предполагается, что сначала жидкая фаза  $Al_2O_3$  кристаллизуется в метастабильную твердую  $\gamma$ -фазу, которая затем переходит в стабильную  $\alpha$ -фазу. Доля  $\alpha$ -фазы от общей твердой фазы определяется по формуле [40]:

$$\frac{dC_\alpha}{dt} = A \exp(-B/T_\alpha), \quad 0 < C_\alpha < 1 \quad (2.255)$$

где  $A = 1.5 \cdot 10^{12} \text{ с}^{-1}$ ,  $B = 58368 \text{ К}$ .

Для коэффициента сопротивления используется формула Хендерсона [42], а для критерия Нуссельта используется следующая формула [39]:

$$Nu = \frac{Nu_0}{1 + (3.42 Nu_0 M / (\text{Re Pr}))} \quad (2.256)$$

где  $Nu_0 = 2 + 0.459 \text{Re}^{0.55} \text{Pr}^{0.33}$  - формула Дрейка для сплошной среды. Числа Маха и Рейнольдса равны:

$$M = \frac{|\vec{V} - \vec{V}_\alpha|}{a}, \quad \text{Re} = \frac{\rho |\vec{V} - \vec{V}_\alpha| r_\alpha}{\mu} \quad (2.257)$$

Динамическое и тепловое воздействие частиц на газовую фазу в уравнениях должно быть отражено в уравнениях количества движения и энергии, которые имеют следующий вид:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j u_i + \delta_{ji} p - \tau_{ij}) = F_{u,i}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.258)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \frac{\partial}{\partial x_j} [u_j (\rho E + p) + q_j - u_i \tau_{ij}] = -Q_R + F_h \quad (2.259)$$

Здесь  $F_{u,i}$  - источник, в частности, учитывающий динамическое взаимодействие с жидкими/твердыми частицами;  $F_h$  - источник, учитывающий тепловое взаимодействие с жидкими/твердыми частицами.

Эти источники определяются по формулам:

$$F_{u,i} = -\sum_{\alpha=1}^L f_{\alpha,i}, \quad F_h = \sum_{\alpha=1}^L (q_{conv,\alpha} - f_{\alpha,i} u_{\alpha,i}) \quad (2.260)$$



### 3. Результаты расчетов

#### 3.1. Модель турбулентности, учитывающая сжимаемость, для струйных течений

Для апробации полученной модели турбулентности, учитывающей влияние сжимаемости, была проведена серия расчетов и сопоставление с экспериментальными данными.

##### Тест 1. Затопленные расчетные сверхзвуковые нагретые струи

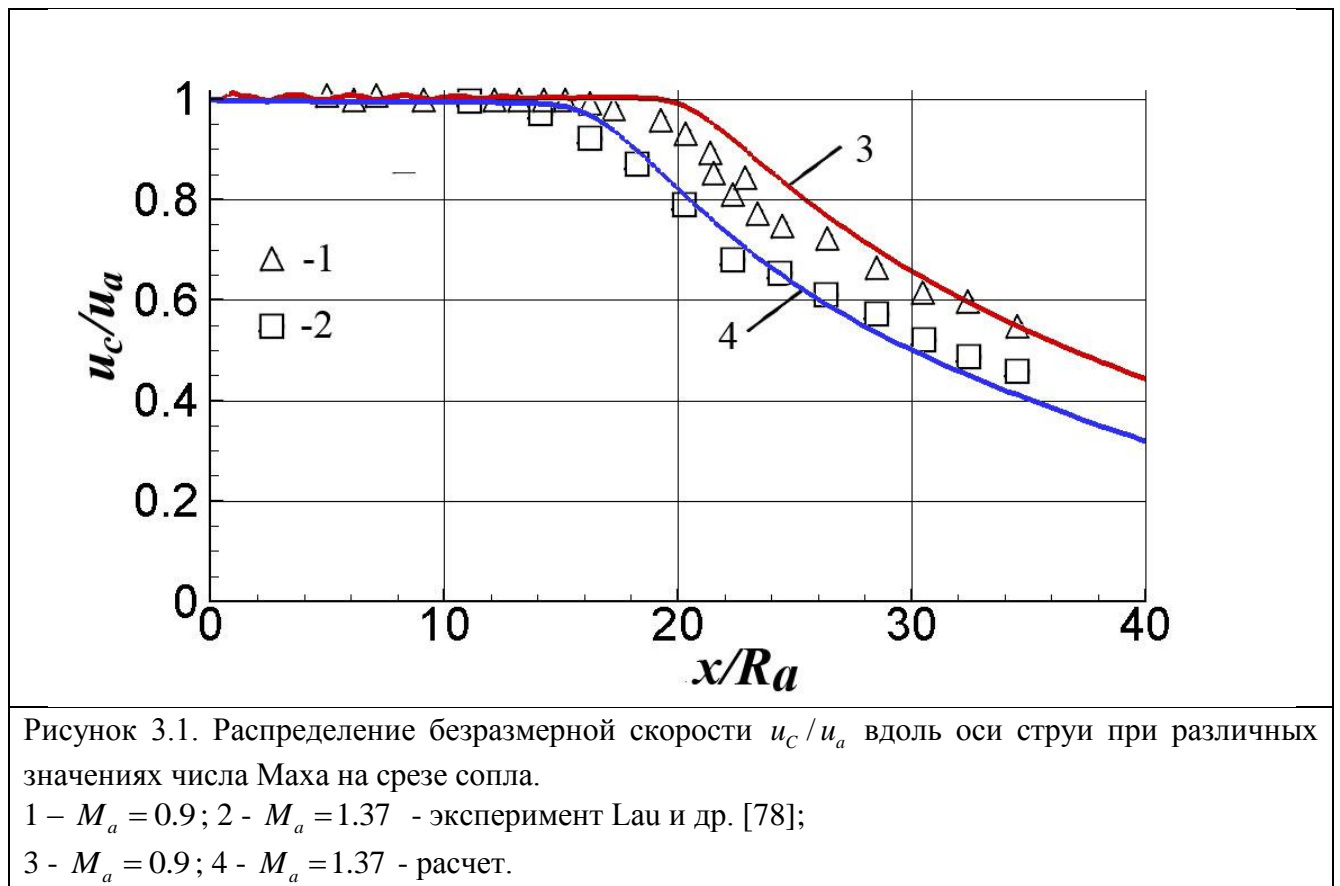
Данный тест посвящен проверке используемой модели турбулентности для расчета струй, у которых температура, плотность и давление на срезе сопла совпадают с соответствующими параметрами в окружающем пространстве, т.е.

$$T_a = T_e, \quad \rho_a = \rho_e, \quad p_a = p_e$$

Это условие позволяет в чистом виде выделить влияние сжимаемости на скорость распространения струй и интенсивность турбулентного смешения.

Кроме того, для таких струй в литературе имеется большое количество экспериментальных данных.

На рисунке 1 представлено изменение скорости вдоль оси струи при различных значениях числа Маха  $M_a$ . Результаты расчета (кривые 3, 4) сопоставляются с экспериментальными данными из работы [78]. С ростом числа Маха на срезе сопла замедляется интенсивность турбулентного смешения и увеличивается длина струи.



На рисунке 3.2 представлена зависимость длины затопленной струи  $\bar{X}_{0.75}$  от числа Маха на срезе сопла. Результаты расчета (кривые) сравниваются с экспериментальными данными из работ [78], [79] и [80] (фигуры). Расчеты проводились с использованием представленной модели турбулентности (кривая 5) и с использованием 3-параметрической К- $\epsilon$ - $V_n$  модели турбулентности с поправкой на сжимаемость из работы [81] (кривая 4).

В качестве оценки размера струи использовалась введенная в работе [107] безразмерная координата  $\bar{X}_{0.75}$ , на которой осевая скорость  $u_c$  уменьшается до значения  $0.75u_a$ , т.е. составляет 75% от скорости на оси среза сопла.

Обе модели удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными и между собой, а также показывают увеличение длины струи с ростом числа Маха. Однако представленная в данной работе модель проще.

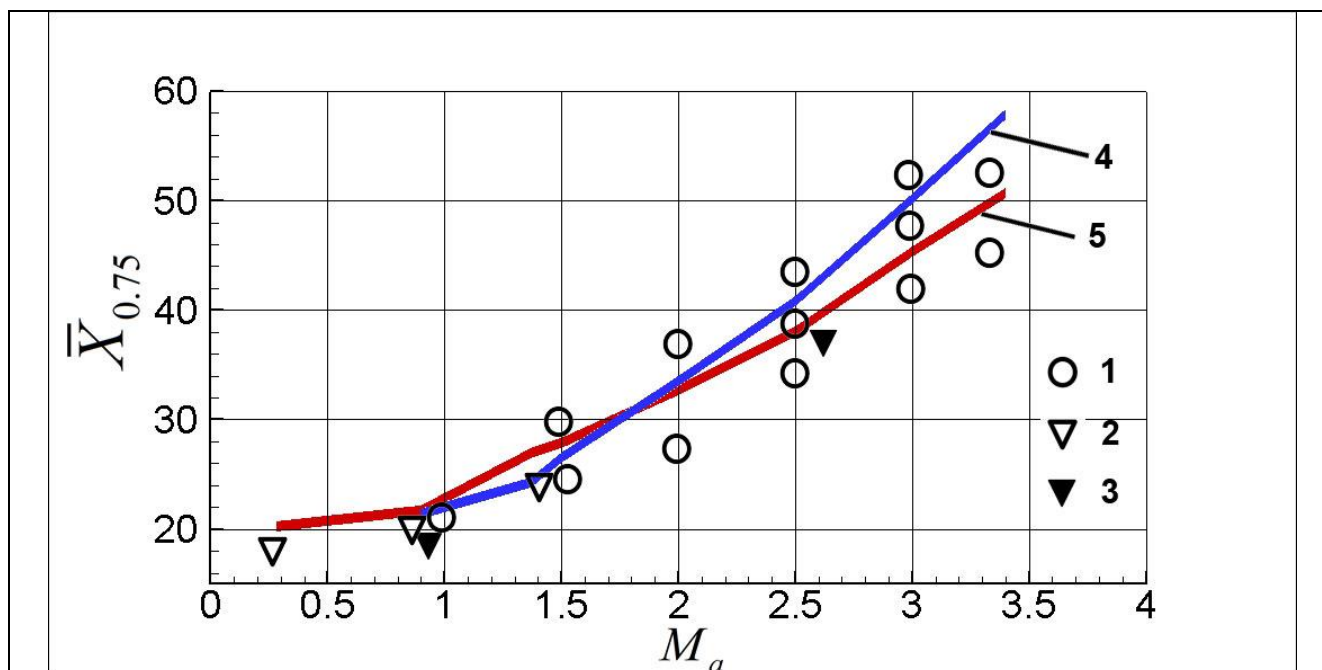


Рисунок 3.2. Зависимость координаты  $\bar{X}_{0.75}$  от числа Маха на срезе сопла  $M_a$ .

1,2,3 – эксперимент: 1 – Красоткин и др. [79], 2 – Lau и др. [78], 3 – Glassman and John [80]; 4,5 – результаты расчетов: 4 – 3-х параметрическая модель  $K-\varepsilon-Vn$  турбулентности из работы [81]. 5 – с использованием  $K-\varepsilon$  модели, включающей поправку на сжимаемость из данной работы.

При использовании стандартной  $K-\varepsilon$  модели турбулентности рост длины струи с ростом числа Маха не наблюдается.

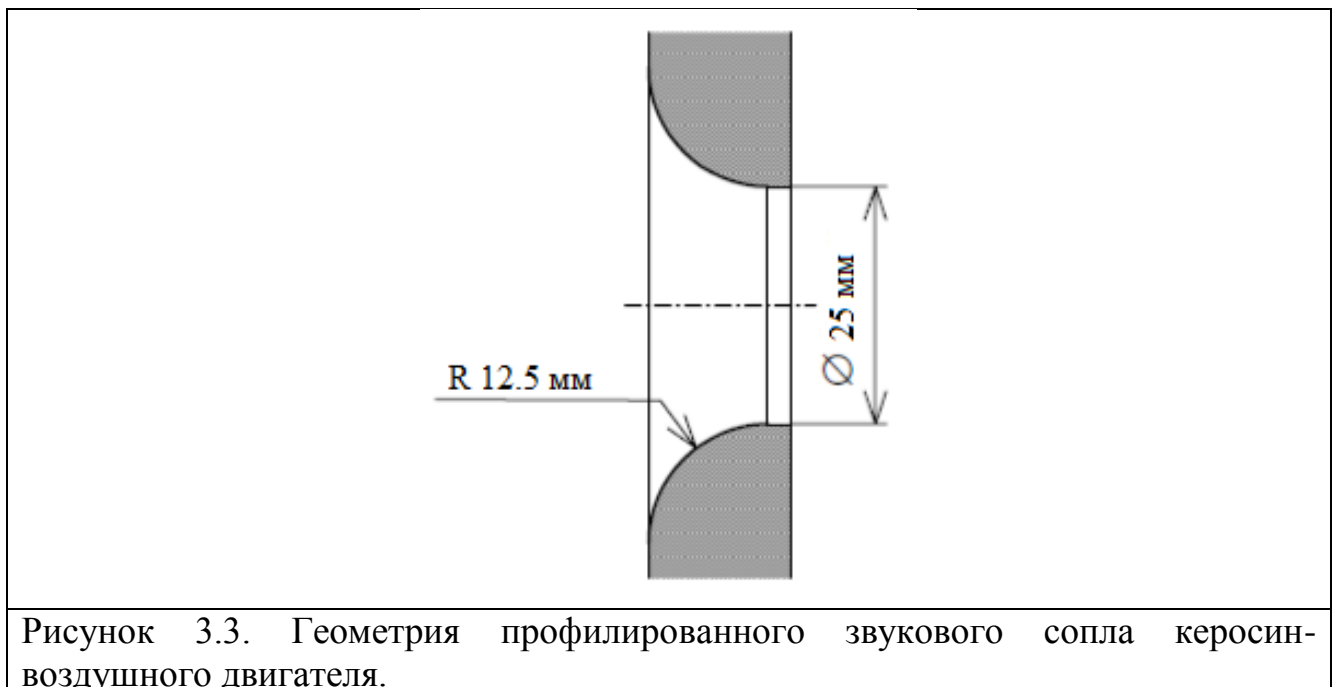
Представленная модель турбулентности позволяет оценить влияние числа Маха на распределение турбулентной кинетической энергии между ее составляющими:  $u''^2, v''^2, w''^2$ . При малых скоростях потока ( $M_a = 0.28$ ) соотношение между поперечной и продольной составляющими пульсаций скорости составляет  $v''^2 / u''^2 \approx 0.54$ , а при  $M_a = 1.37$  -  $v''^2 / u''^2 \approx 0.49$ . Эти соотношения неплохо согласуются с данными работы [78], в которой в районах максимумов турбулентности эти соотношения составляют:  $v''^2 / u''^2 = 0.45 \div 0.55$  для  $M_a = 0.28$  и  $v''^2 / u''^2 = 0.40 \div 0.44$  для  $M_a = 1.37$ .

## Тест 2. Химически реагирующие звуковые недорасширенные струи при высокой степени нерасчетности $p_a / p_e$

Целью данного теста являются струи продуктов сгорания, истекающие из модельных двигателей через сужающие звуковые сопла. Основными чертами таких струй является сравнительно высокая степень нерасчетности ( $\sim 10$ ) и наличие ярко выраженного центрального скачка уплотнения (диска Маха).

Результаты расчетов сравниваются с экспериментальными данными, полученными на двух модельных двигателях: керосин-воздушном (Chauveau и др. [82]) и водород-воздушном (Klavhun и др. [83]).

В первом эксперименте [82] в камеру сгорания подаются воздух и жидкий керосин при комнатной температуре. Давление и температура в камере сгорания составляют соответственно  $p_0 \approx 27 \cdot 10^5 \text{ Pa}$ ;  $T_0 \approx 1950 \text{ K}$ . Истечение в атмосферу происходит через профилированное звуковое сопло – см. рисунок 3.3., обеспечивающее равномерный профиль скорости на срезе сопла.



В эксперименте проводилось измерение скорости с помощью метода PIV (Particles Image Velocimetry).

В расчете использовали следующие параметры на срезе сопла:

$$u_a = 792 \text{ m/s}; T_a = 1720 \text{ K}; p_a = 14.77 \cdot 10^5 \text{ Pa};$$

$$Y_{O_2} = 0.05535; Y_{H_2O} = 0.06001; Y_{CO} = 0.00007; Y_{CO_2} = 0.15116; Y_{N_2} = 0.73341$$

Окружающее пространство – воздух при нормальных условиях.

На рисунке 3.4 представлена расчетная и экспериментальная структура струи. На основе анализа мгновенных PIV снимков можно определить положение основных характерных областей струи: диска Маха, висячего скачка, отраженного скачка и т.д. То же самое получается на основе картины поля скоростей, полученного в расчете. Сопоставление этих данных показывает, что результаты расчета удовлетворительно согласуются с экспериментом.

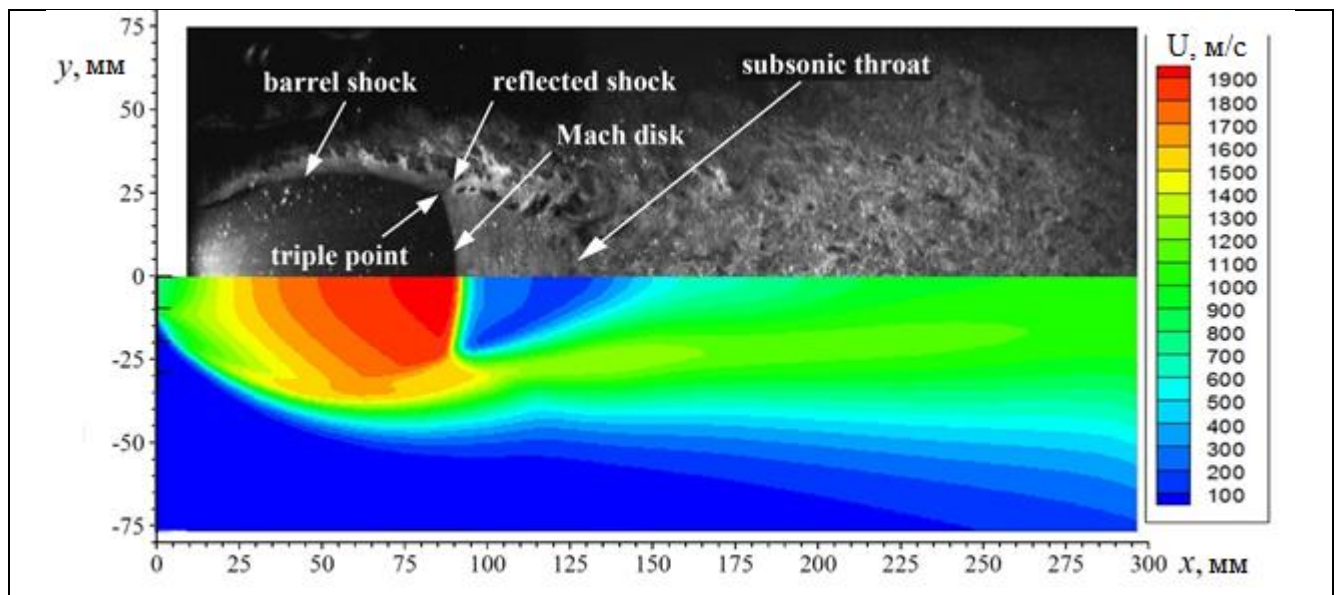
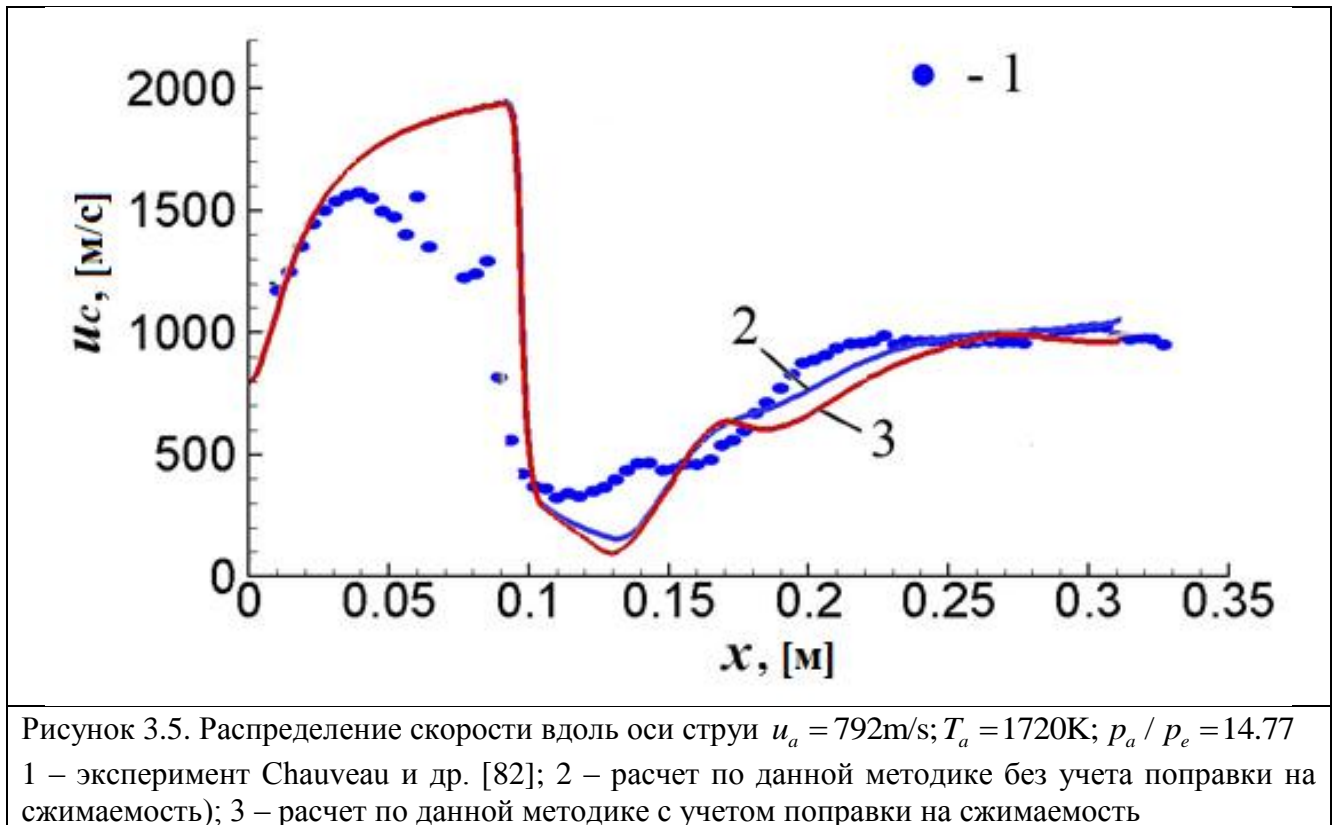
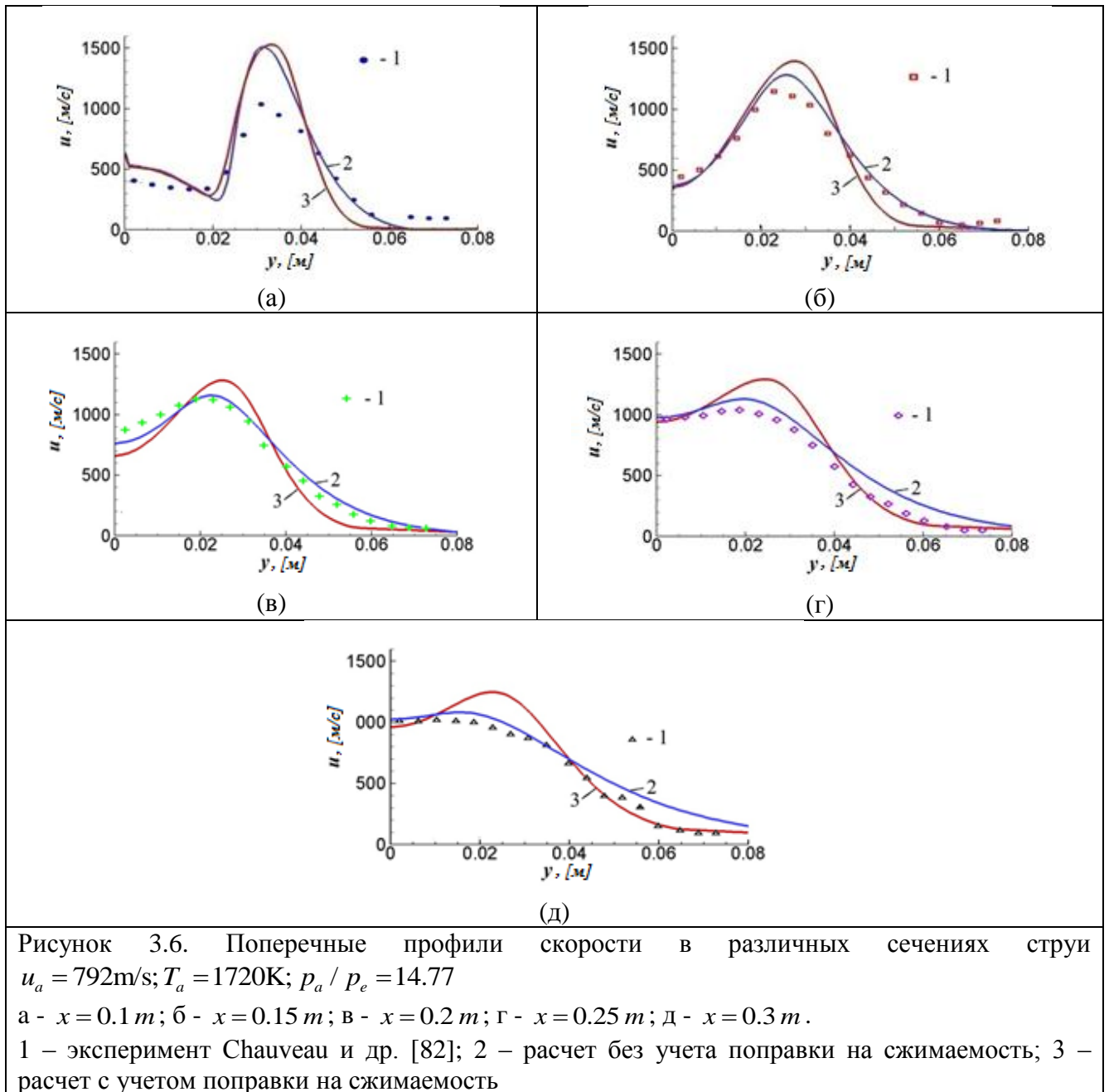


Рисунок 3.4. Структура струи, визуализированная на основе мгновенных PIV снимков, (верхняя половина) [82] и полученное в результате расчетов поле скоростей (нижняя половина).

На рисунках 3.5, 3.6 показаны полученные в результате расчета продольные и поперечные профили скорости и их сравнение с экспериментальными данными.



Это сравнение показывает неплохое совпадение результатов расчета и экспериментальных данных во всей области течения за исключением окрестности диска Маха. Сами авторы эксперимента [82] объясняют, что в районе диска Маха метод измерения PIV имеет большую погрешность из-за того, что при больших значениях числа Маха и низкой плотности частицы просто не успевают сравняться по своим параметрам с параметрами газа, и их скорость может сильно отличаться от скорости газа.



Второй эксперимент, который использовался в этом тесте, как раз и должен был показать, насколько предложенная методика адекватно описывает течение в районе диска Маха.

Для сравнения использовались экспериментальные данные из работы [83], в которой проведено исследование звуковой недорасширенной струи, истекающей из модельного двигателя. В качестве горючего и окислителя используются водород и воздух в стехиометрическом соотношении. Давление в камере сгорания  $p_0 = 1.6 \cdot 10^5 Pa$ , температура в камере сгорания  $T_0 = 2000K$ . Струя истекает через

сопло в вакуумную камеру с давлением  $p_e = 0.11 \cdot 10^5 \text{ Pa}$ . Предполагается, что струя вступает в химические реакции с воздухом, находящимся в этой камере.

Проводится измерение скорости потока методом ОН Laser-Induced Fluorescence (LIF) [83].

В расчете использовали следующие параметры на срезе сопла:

$$u_a = 871 \text{ m/s}; T_a = 1765 \text{ K}; p_a = 0.7 \cdot 10^5 \text{ Pa};$$

$$Y_H = 0.00023; Y_O = 0.00006; Y_{OH} = 0.00205; Y_{H_2} = 0.00509$$

$$Y_{O_2} = 0.00167; Y_{H_2O} = 0.33903; Y_{N_2} = 0.65187$$

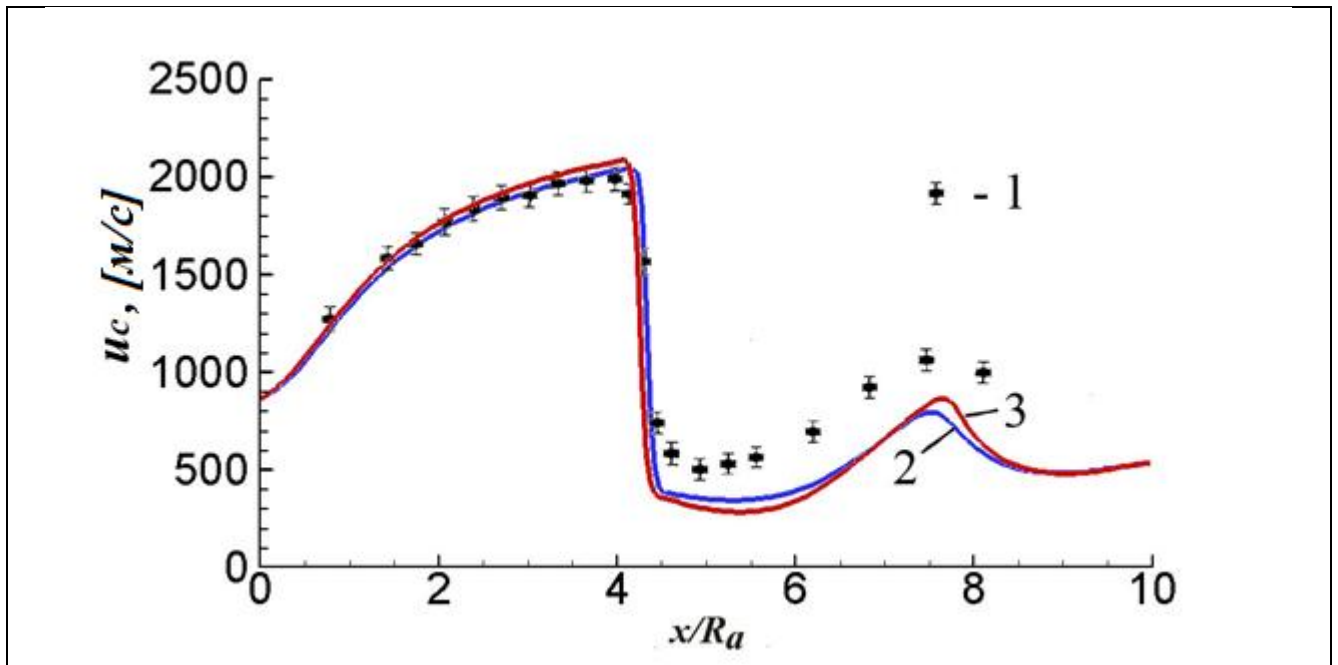


Рисунок 3.7. Распределение скорости вдоль оси струи, истекающей из воздушно-водородного двигателя.  $u_a = 871 \text{ m/s}$ ;  $T_a = 1765 \text{ K}$ ;  $p_a / p_e = 6.36$

1 – эксперимент Klavhun и др. [83];

2 – расчет при постоянных значениях  $Pr_T = Sc_T = 0.7$ ;

3 – расчет при переменных значениях  $Pr_T = \text{var}$ ,  $Sc_T = \text{var}$

На рисунке 3.7. представлено распределение скорости вдоль оси струи. Показаны результаты расчета при постоянных и переменных значениях  $Pr_T, Sc_T$ . Они практически не отличаются, т.е. учет переменности этих критериев не сильно влияет на динамические характеристики течения.

Результаты расчетов удовлетворительно совпадают с экспериментальными данными [83] во всей области течения, в частности и в области диска Маха.



### 3.2. Моделирование турбулентных тепловых и диффузионных потоков в химически реагирующих течениях с переменными значениями чисел Прандтля/Шмидта

#### Тест 1. Сверхзвуковая струя кислорода, истекающая в высокотемпературное окружающее пространство

Целью данного теста является проверка возможностей используемой модели турбулентности для изучения поведения холодной сверхзвуковой струи кислорода в высокотемпературном поле, т.е. для исследования течения с большими перепадами плотности и температуры.

С этой целью проведены расчеты струи со следующими параметрами:

$$u_a = 451 \text{ m/s}; \quad T_a = 190 \text{ K}; \quad p_a = 10^5 \text{ Pa}, \text{ рабочее тело} - O_2$$

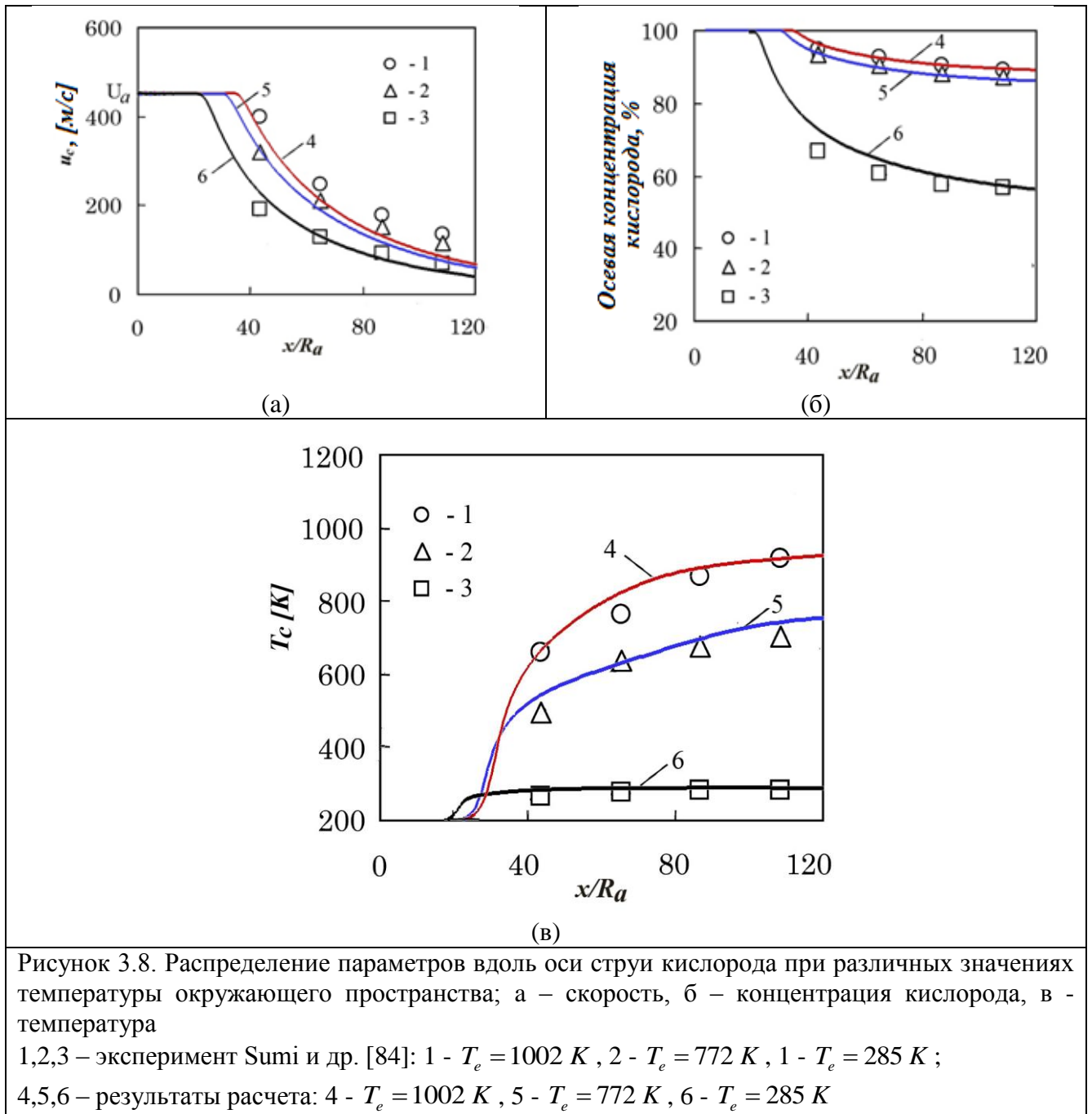
Радиус среза сопла:  $R_a = 9.2 \text{ mm}$

Рассматривалось 3 варианта параметров окружающего пространства:

Таблица 3.1.

$T_e$ [K]	% $O_2$	% $N_2$	% $CO_2$
285	54	46	0
772	85	9	6
1002	88	3	9

Результаты расчета сравниваются с экспериментальными данными Sumi и др. [84]. Эта работа посвящена исследованию струй кислорода в сталелитейной промышленности, и в ней проводилось измерения скорости потока, температуры и концентраций некоторых компонентов.



На рисунках 3.8 а,б,в представлено распределение скорости, концентрации кислорода и температуры вдоль оси струи при различных значениях температуры окружающего пространства. Сопоставление результатов расчета по предложенной методике с экспериментальными данными Sumi и др. [84] показывает удовлетворительное согласование и отражает тот факт, что с увеличением температуры окружающего пространства, т.е. увеличения

отношения плотности струи к плотности окружающего газа, увеличивается дальность струи.

На рисунке 3.9. показано влияние учета переменности числа Прандтля на результаты расчета.

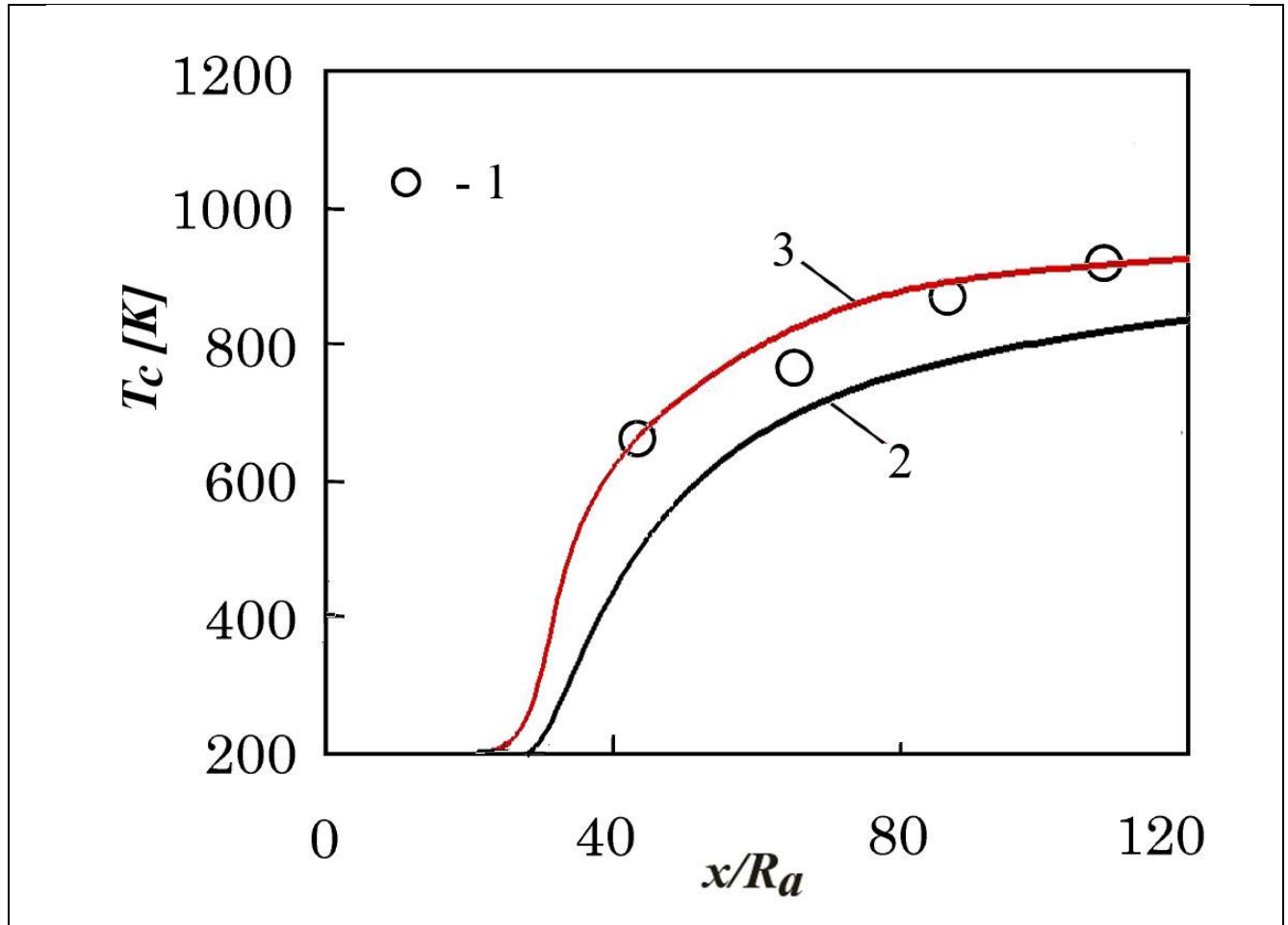


Рисунок 3.9. Распределение температуры вдоль оси струи кислорода при  $T_e = 1002 \text{ K}$ . Сравнение результатов расчета при различных способах моделирования турбулентного числа Прандтля с экспериментом.

- 1 – эксперимент Sumi и др. [84];
- 2 – расчет при постоянном значении  $Pr_T = 0.7$ ;
- 3 – расчет при переменном значении  $Pr_T = var$

Очевидно, что учет переменности  $Pr_T$  позволяет получить более точное совпадение с экспериментом.

На рисунке 3.10 показано пространственное распределение турбулентного числа Прандтля. Наблюдаемое уменьшение числа  $Pr_T$  в слое смешения приводит к тому, температура кислорода быстрее приближается к температуре окружающего

пространства. Этот эффект проявляется только при высоких значениях  $T_e$  и практически никак не влияет на распределение скорости.

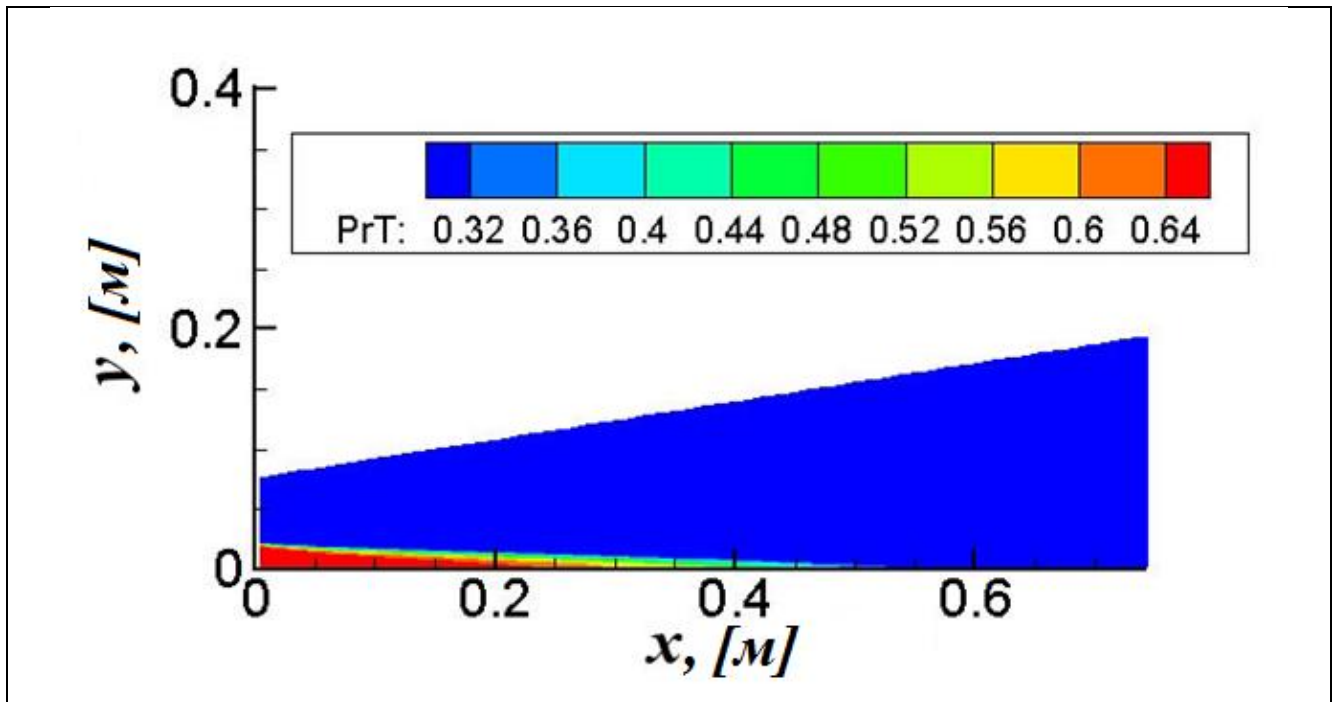
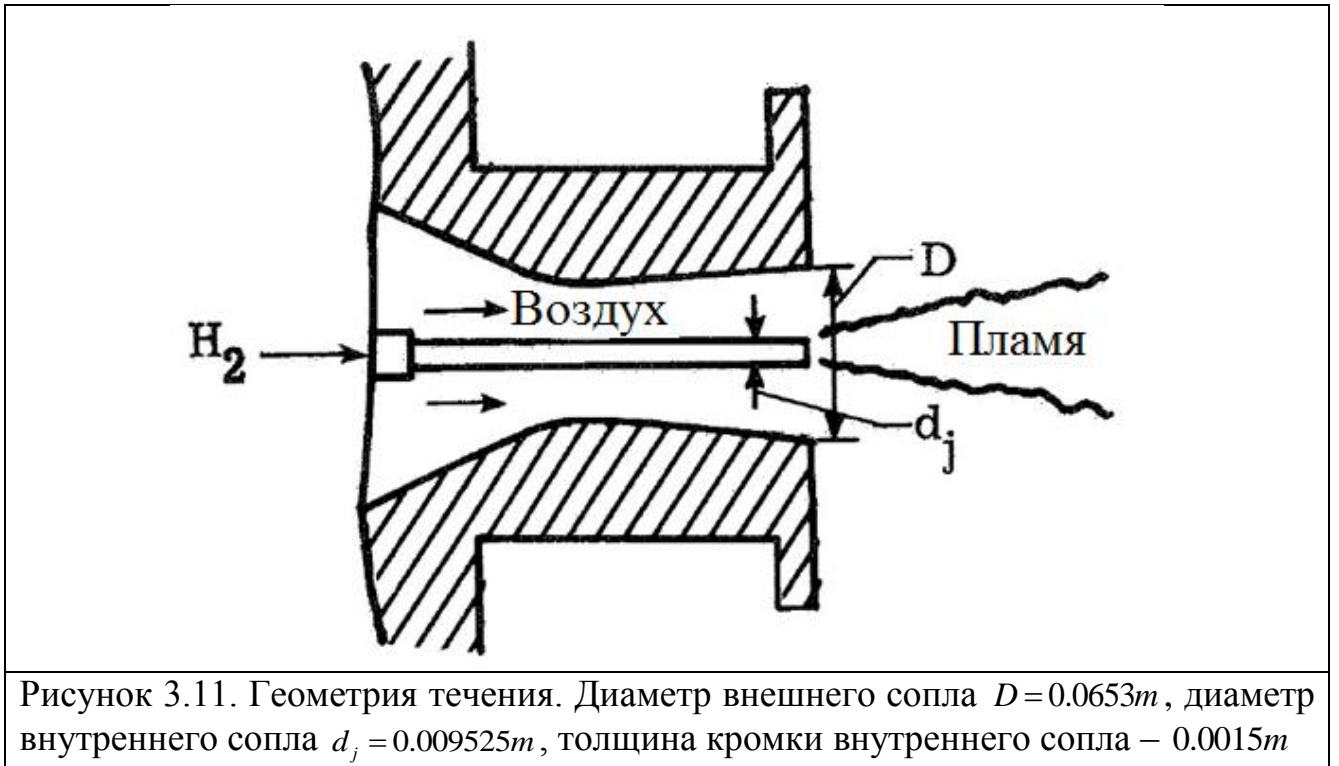


Рисунок 3.10. Расчетное распределение турбулентного числа Прандтля для эксперимента Sumi и др. [84];  $T_e = 1002\text{ K}$

## Тест 2. Сверхзвуковая водородная струя в сверхзвуковом спутном потоке горячего воздуха

В данном тесте предлагаемая методика использовалась для расчета эксперимента Evans и др. [37].

Схема экспериментальной установки представлена на рисунке 3.11.



На рисунках 3.12, 3.13 показаны продольные и радиальные распределения массовых концентраций химических компонентов. Сравниваются результаты расчетов с постоянными и переменными значениями турбулентных чисел Прандтля и Шмидта и экспериментальные данные Evans и др. [37].

Расчетные распределения концентраций водорода и азота при удовлетворительно согласуются с экспериментом. Представленные на рисунках 3.14 пространственные распределения турбулентных чисел Прандтля и Шмидта показывают, что в районе возникновения фронта пламени происходит повышение значений этих параметров, что приводит к некоторому замедлению смешению компонентов, показанному на рисунках 3.15, 3.16.

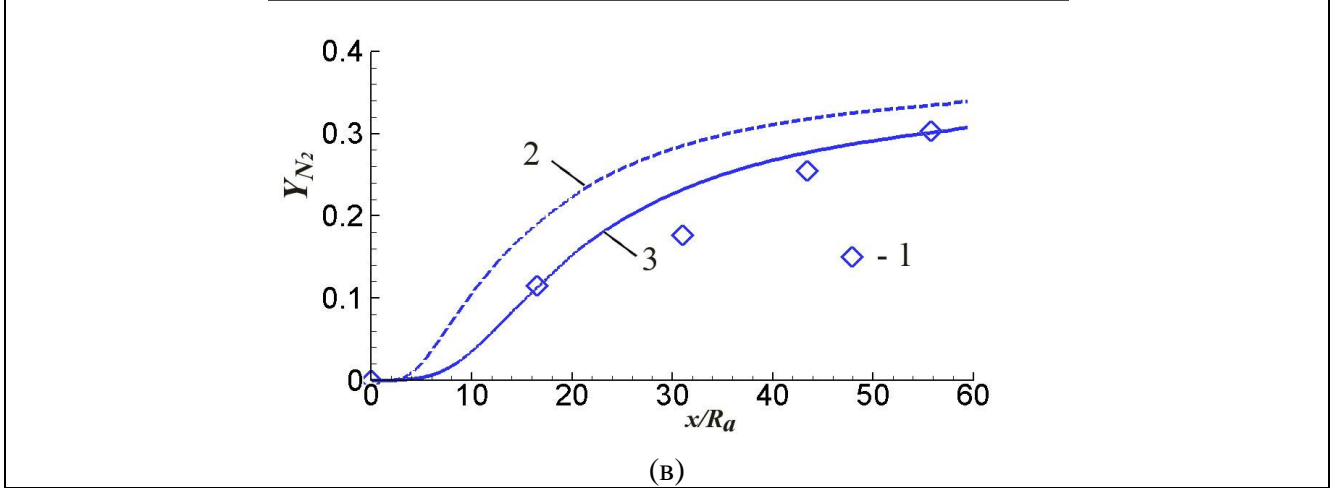
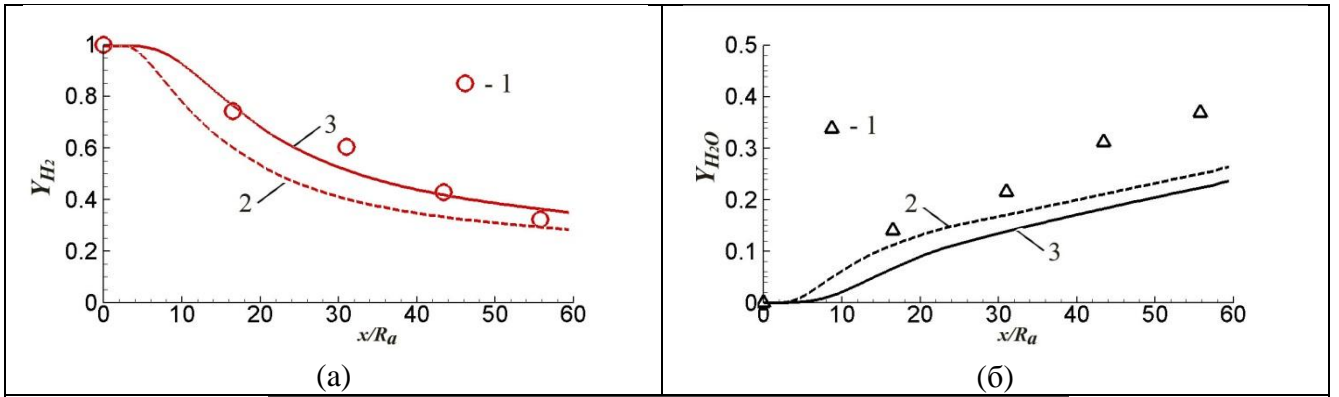


Рисунок 3.12. Распределение массовых концентраций компонентов вдоль оси струи: а -  $H_2$ , б -  $H_2O$ , в -  $N_2$

1 – эксперимент Evans и др. [37]

2 – расчет при постоянных значениях  $Pr_T = Sc_T = 0.7$ ;

3 - расчет при переменных значениях  $Pr_T = var, Sc_T = var$

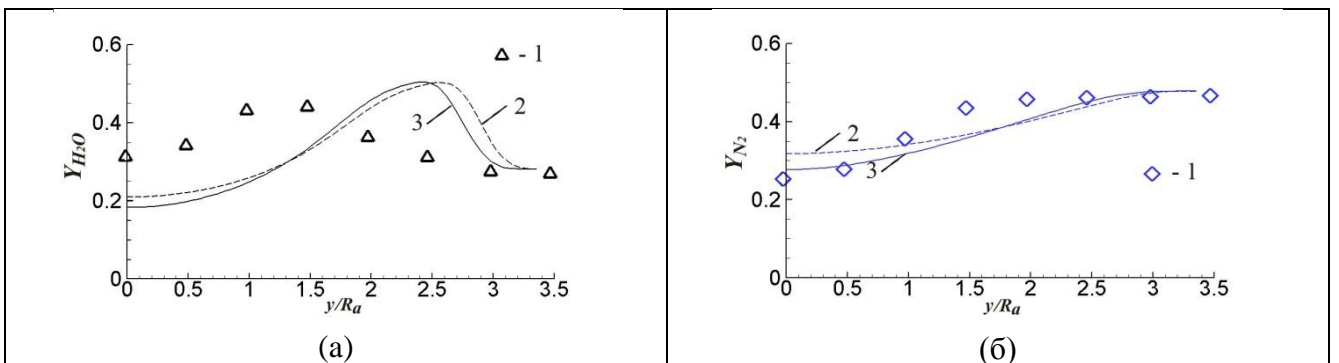


Рисунок 3.13. Радиальные профили массовых концентраций компонентов при вдоль оси струи: а -  $H_2O$ , б -  $N_2$

1 – эксперимент Evans и др. [37]

2 – расчет при постоянных значениях  $Pr_T = Sc_T = 0.7$ ;

3 – расчет при переменных значениях  $Pr_T = var, Sc_T = var$

Хуже обстоит дело с концентрацией воды. Возможное объяснение этому то, что в кинетике горения водорода в данной работе не учитываются

низкотемпературные цепочки реакций, включающие такие компоненты, как  $H_2O_2$ ,  $HO_2$ . Считается, что эти компоненты важны для воспламенения водорода.

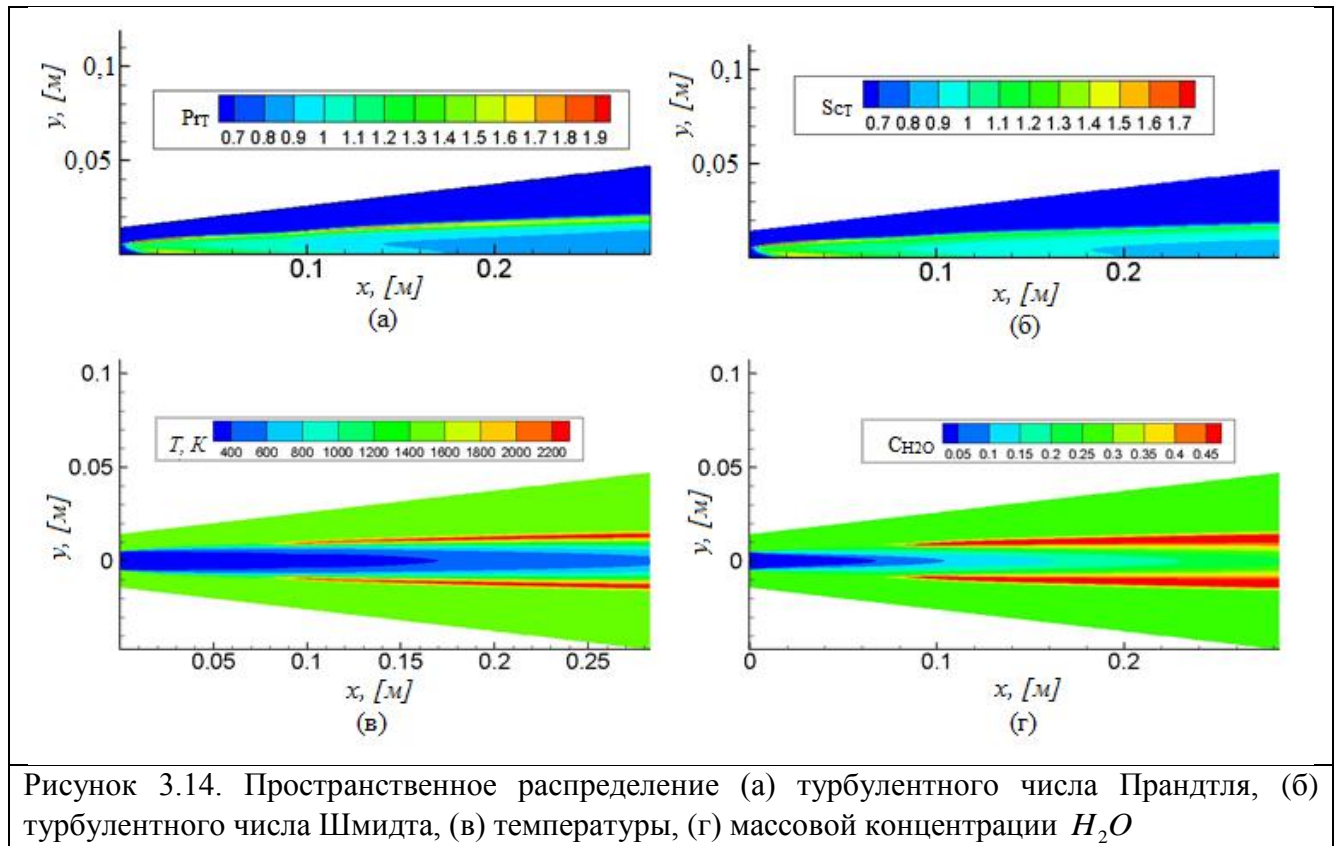


Рисунок 3.14. Пространственное распределение (а) турбулентного числа Прандтля, (б) турбулентного числа Шмидта, (в) температуры, (г) массовой концентрации  $H_2O$

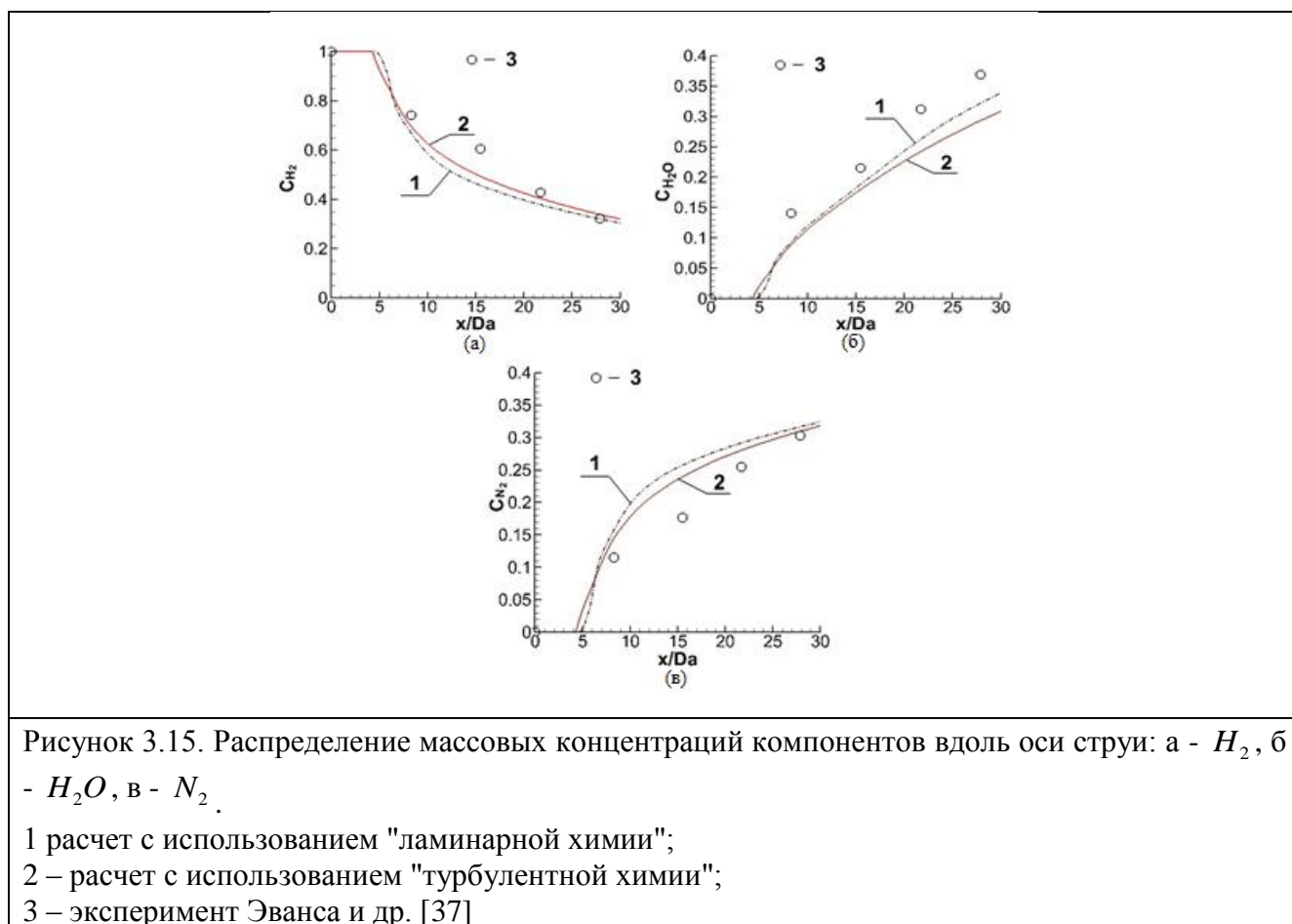
### 3.3. Модель учета влияния турбулентности на скорости химических реакций на основе использования функций распределения плотности вероятностей

Для оценки влияния турбулентности на процессы горения проведено тестирование модели и сопоставление с экспериментальными и расчетными данными других исследователей. Во всех расчетах в качестве модели турбулентности использовались 4 различные модели турбулентности: стандартная модель (обозначена как  $K-\epsilon$ ) и 3 модели, учитывающие влияние высокоскоростной сжимаемости на интенсивность турбулентного смешения: модель Саркара [38] (обозначена как  $K-\epsilon sc1$ ); предложенная в данной работе модификация SST модели, учитывающая влияние сжимаемости (SST  $sc2$ ); и модель, разработанная в МАИ на кафедре Авиационно-космической теплотехники [18] ( $K-\epsilon sc3$ ).

### Тест 1. Сверхзвуковая водородная струя в сверхзвуковом спутном потоке горячего воздуха

В данном тесте предлагаемая методика использовалась для расчета эксперимента Эванса и др. [37] (Test 1). Схема экспериментальной установки представлена на рисунке 3.11.

На рисунке 3.15 показаны распределения массовых концентраций химических компонентов вдоль оси потока. Сравнивались результаты расчетов без учета влияния турбулентных пульсаций на скорости химических реакций ("ламинарная химия") и с учетом ("турбулентная химия") с экспериментальными данными Эванса и др. [37].



Видно, что результаты расчетов в обоих случаях слабо отличаются друг от друга и удовлетворительно согласуются с экспериментом (с учетом того, что авторы [37] декларируют точность эксперимента в пределах  $\sim 30\%$ ).



Гораздо более важным результатом является то, что при использовании "турбулентной химии" воспламенение происходит выше по потоку (см. рисунок 3.16).

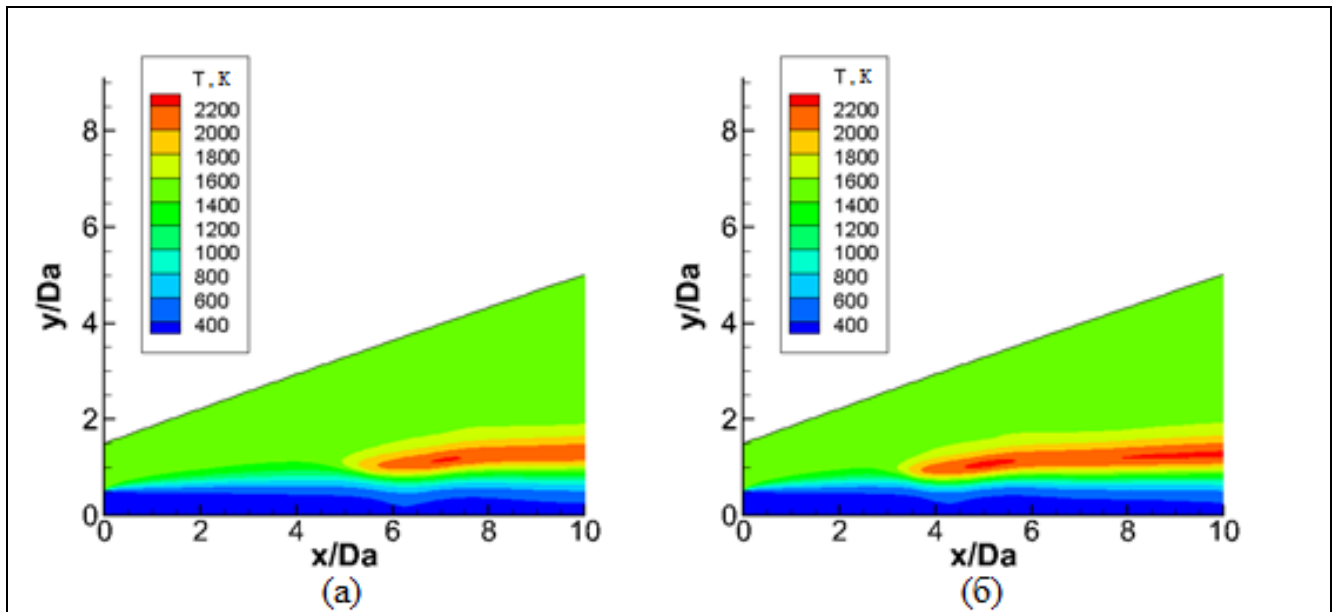


Рисунок 3.16. Пространственное распределение температуры: (а) - при использовании "ламинарной химии"; (и)- при использовании "турбулентной химии".

## Тест 2. Эксперимент Барроуса и Куркова

Для верификации общей математической модели горения для случая плоского течения в работе решена задача истечения пристенной плоской, водородной струи в спутный сверхзвуковой поток. С такими задачами приходится сталкиваться, например, в камере сгорания гиперзвукового ПВРД. Экспериментальное исследование подобного течения проведено в работе [39]. В указанной работе исследовалось горение пристенной звуковой струи холодного водорода, инжектируемого через щель в стенке аэродинамической трубы высотой  $h_1=4$  мм, в сверхзвуковой поток подогретого воздуха. Схема экспериментальной установки приведена на рисунке 3.17.

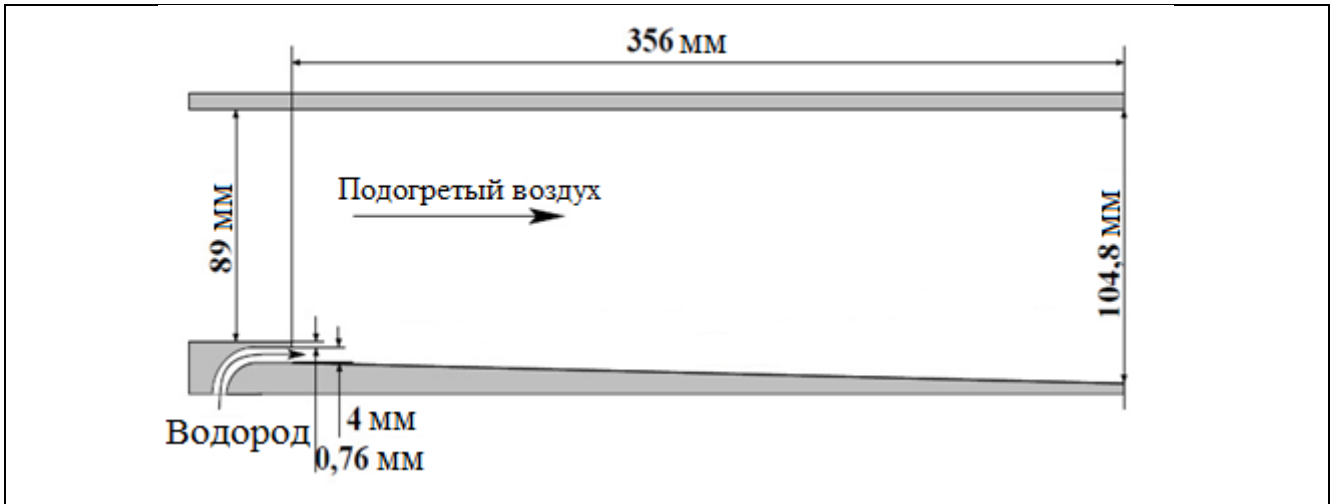


Рисунок 3.17. Схема экспериментальной установки в эксперименте Барроуса и Куркова [39].

Тангенциальный вдув водорода, осуществлялся при статическом давлении, примерно равном статическому давлению набегающего потока. Воздушный поток состоял из кислорода, водяного пара и азота.

В расчетах использовались следующие условия на выходе из щели и в спутном потоке:

Таблица 3.2

	Водород	Внешний поток
Число Маха	1.0	2.44
Температура, К	242	1270
Статическое давление, Па	$1.013 \cdot 10^5$	$1.013 \cdot 10^5$
Массовые доли		
$C_{H_2}$	1.0	0.0
$C_{O_2}$	0.0	0.258
$C_{N_2}$	0.0	0.486
$C_{H_2O}$	0.0	0.256

Были измерены профили температуры, мольных концентраций реагентов ( $H_2$ ,  $O_2$ ) и продуктов сгорания ( $H_2O$ ) в выходном сечении камеры сгорания.

В качестве примера на рисунке 3.18. представлены результаты расчетов и экспериментальные данные по профилю  $H_2O$ .

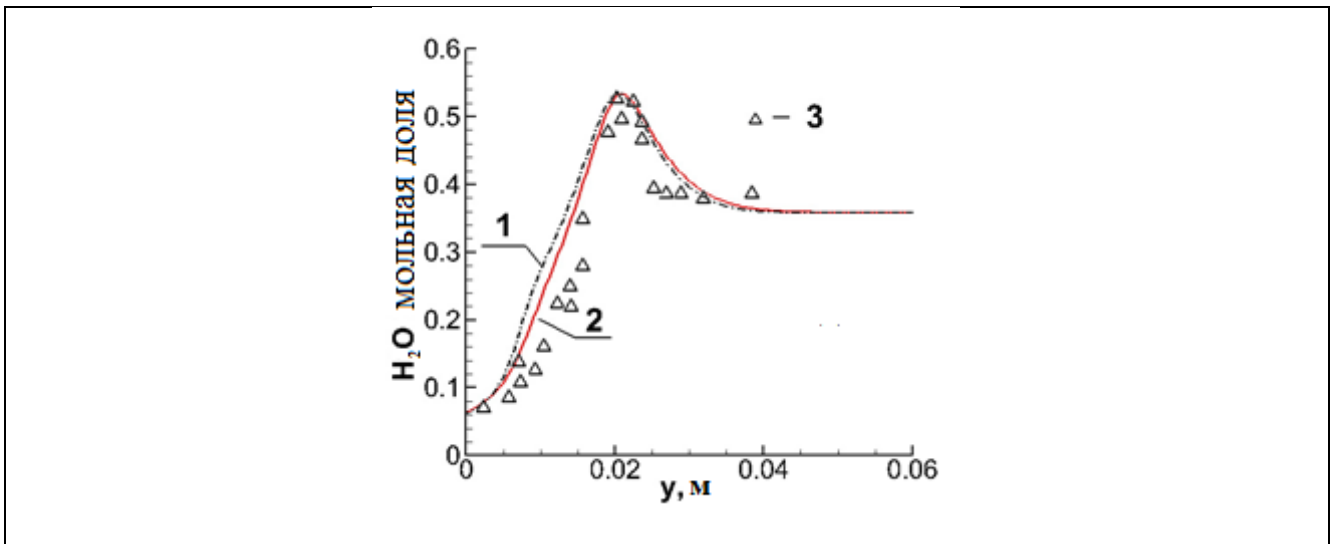


Рисунок 3.18. Поперечные профили мольных долей  $\text{H}_2\text{O}$  в выходном сечении экспериментального участка:

- 1 - расчет с "ламинарной химией";
- 2 - расчет с "турбулентной химией";
- 3 - эксперимент Барроуса и Куркова [39]

Расчеты с "ламинарной химией" и с "турбулентной химией" примерно совпадают и удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными.

Как и в предыдущем тесте, при расчете с использованием "турбулентной химии" воспламенение происходит выше по потоку, чем без учета влияния химии на скорость химических реакций. Как видно по рисунку 3.19 воспламенение начинается при координате  $x$  примерно равной 0.2 м, что очень хорошо согласуется с экспериментальными данными (см. [39], Fig.16).

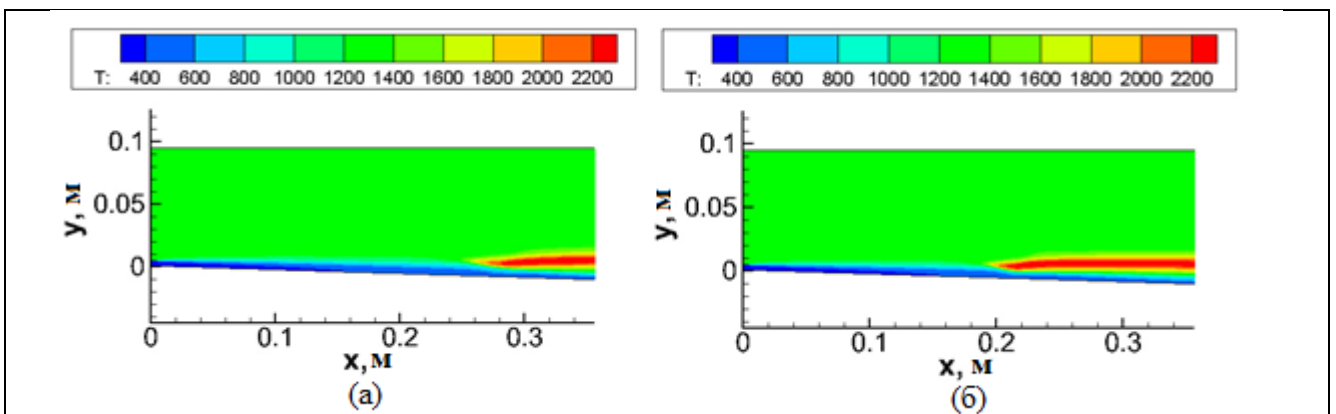


Рисунок 3.19. Пространственное распределение температуры: (а) - при использовании "ламинарной химии"; (б)- при использовании "турбулентной химии".

### 3.4. Срыв догорания в выхлопной струе ЖРД

Большой интерес представляет процесс взаимодействия недогоревших продуктов сгорания двигателей ЛА с кислородом воздуха при истечении в атмосферу. Большинство ракетных двигателей работают с коэффициентом избытка окислителя меньше единицы, поэтому в струях, истекающих из сопла, содержится достаточно большое количество  $H_2$  и  $CO$ , которые могут активно догорать в воздухе.

Возможность процесса догорания определяется числом Дамкёлера:

$$Da = \frac{\tau_G}{\tau_{chem}} = \frac{L/V}{\tau_{chem}}, \quad (261)$$

где  $\tau_G$  - характерное газодинамическое время;  $\tau_{chem}$  - характерное время протекания химических реакций;  $L$  - характерный размер потока (например, диаметр трубы);  $V$  - скорость потока.

Число Дамкёлера уменьшается с увеличением высоты полета, т.к. замедляется скорость реакций за счет снижения давления и температуры в слое смешения и, соответственно растет время химических реакций.

*Замечание.* Вообще говоря, с ростом высоты растет и характерное газодинамическое время за счет увеличения размера струи, но это увеличение несопоставимо с замедлением скоростей химических реакций.

На некоторой высоте число Дамкёлера уменьшается настолько, что течение практически становится "замороженным". Такое явление называется "срывом догорания".

*Замечание.* На самом деле процессы химического взаимодействия с атмосферой могут происходить и на больших высотах, однако их роль незначительна, и газодинамические параметры слабо отличаются от "замороженных".

В качестве примера рассмотрена струя со следующими параметрами на срезе сопла:

Таблица 3.3.

$T_a$ , К	$U_a$ , м/с	$R_a$ , м	$P_a$ , Па	$H_2$	$H_2O$	CO	CO <sub>2</sub>	N <sub>2</sub>
1330	2500	1.0	0.7e5	0.05	0.4	0.05	0.15	0.35

Химический состав задан в мольных долях.

Рассматривалось 5 высот: 25км (скорость внешнего потока 775 м/с), 30км (960 м/с), 33км (1100 м/с) , 35км (1200 м/с) , 37км (1300 м/с).

Температура и мольные доли компонентов на срезе сопла, а также скорости внешнего потока, максимально приближены к заданным в работе Кальхауна [40] (для сопоставления). К сожалению, остальные параметры на срезе сопла в [40] отсутствуют, поэтому они выбраны типичными для соответствующей ступени ракетносителя.

На рисунке 3.20. представлено осевое изменение температуры на высоте 25 км. На этой высоте расчеты с использованием "ламинарной химией" и с "турбулентной химией" практически совпадают, поэтому на рисунке показаны результаты только с "турбулентной химией".

Очевидно, что при использовании моделей, учитывающих влияние высокоскоростной сжимаемости, струя получается длиннее, чем при использовании стандартной  $K-\varepsilon$  модели. Максимум температуры, связанный с догоранием, смещается вниз по потоку. Самая длинная струя получается при использовании модели Саркара. Результаты расчетов с использованием моделей SST  $ss2$  и -  $K-\varepsilon$   $ss3$  очень близки.

С увеличением длины слоя смешения, согласно (261) увеличивается число Дамкёлера, горение усиливается, поэтому максимальная температура у длинной струи несколько выше, чем у короткой (Сравните кривые 1 и 2 рисунка 3.20.).

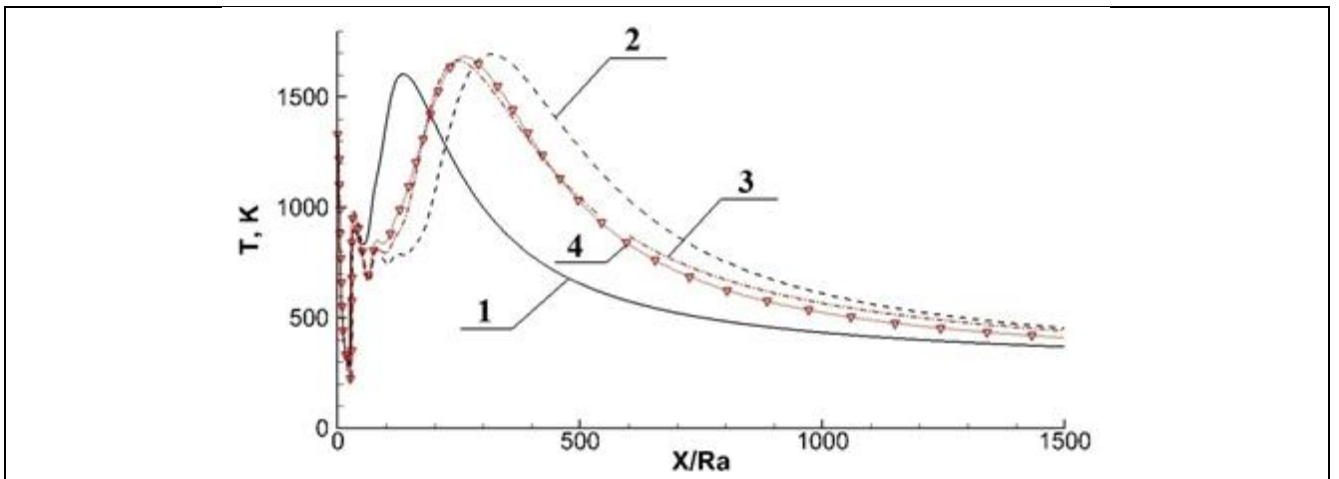


Рисунок 3.20. Распределение температуры вдоль оси струи на высоте 25 км при расчете с использованием различных моделей турбулентности: 1 -  $K-\varepsilon$ ; 2 -  $K-\varepsilon$  cc1; 3 - SST cc2; 4 -  $K-\varepsilon$  cc3.

Аналогичные результаты получаются при расчете струи на высоте 30 км (см. рисунок 3.21).

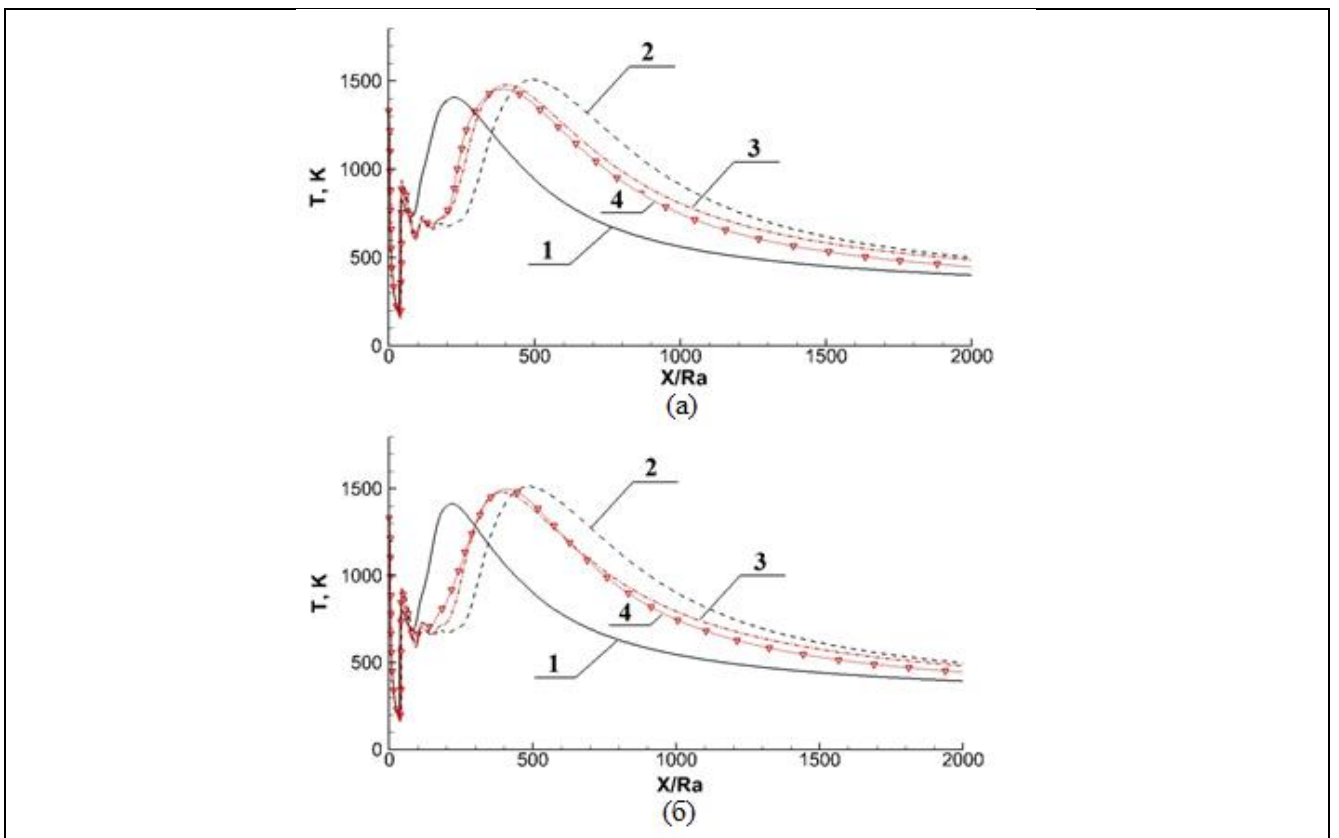
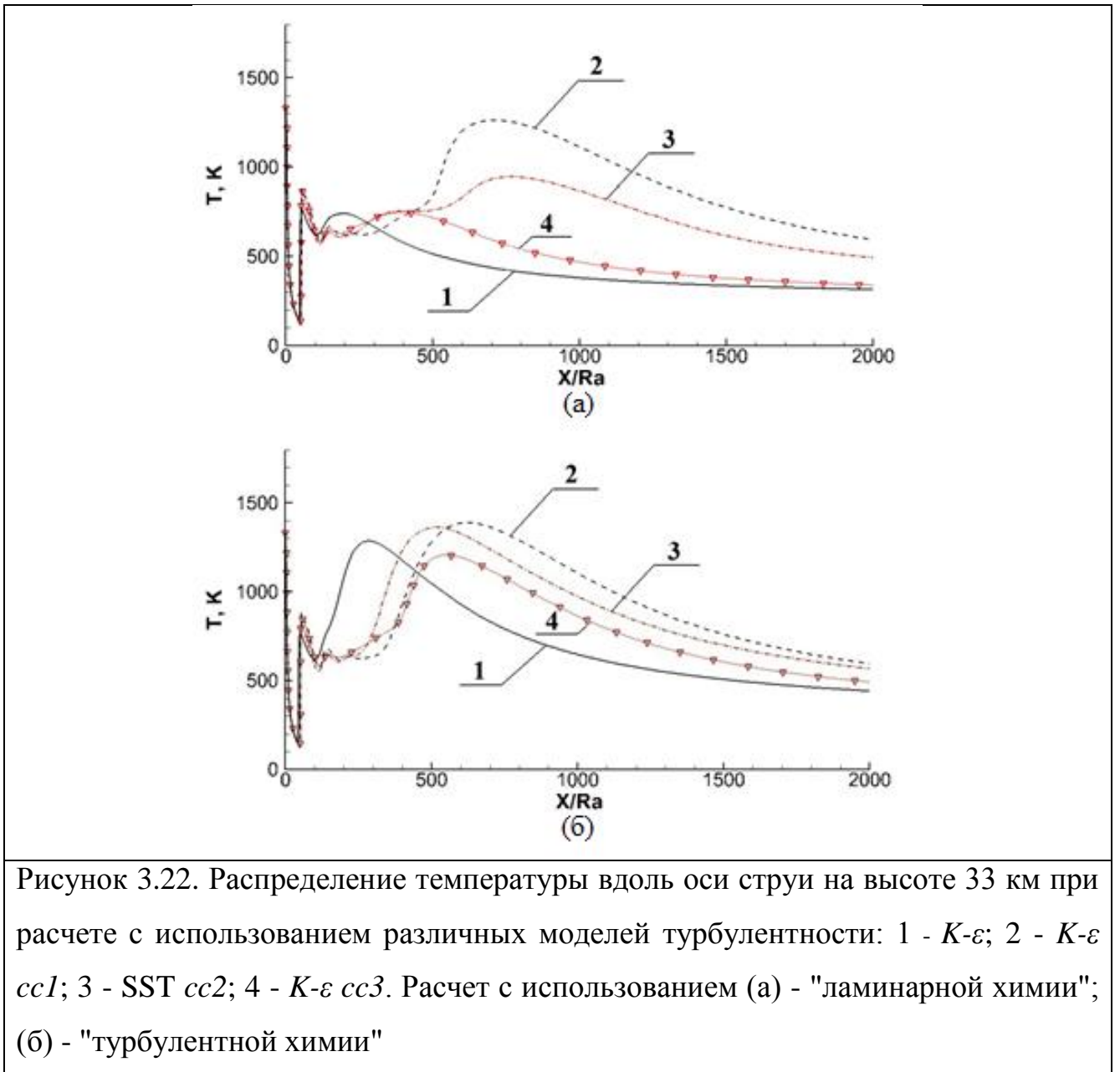


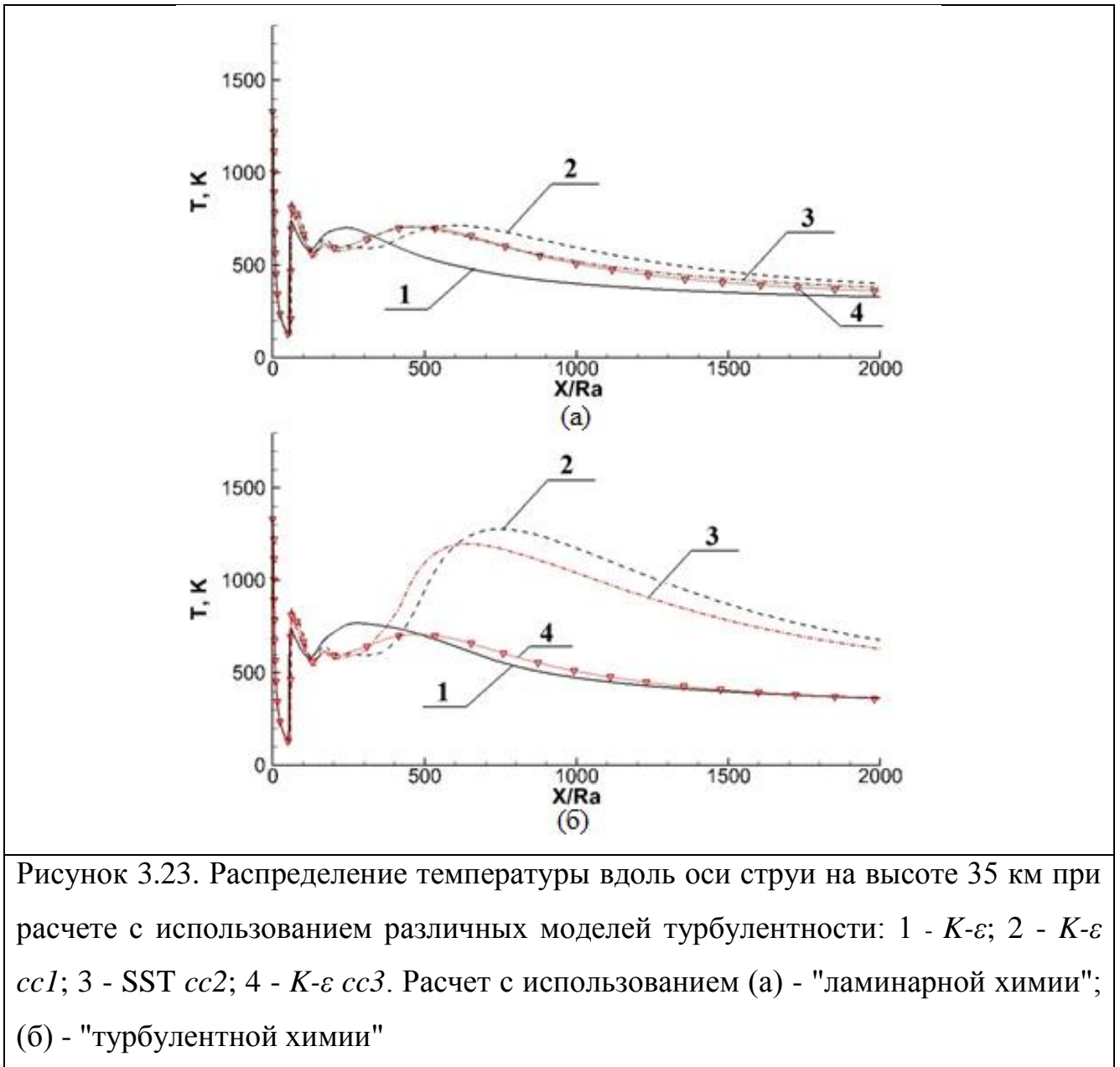
Рисунок 3.21. Распределение температуры вдоль оси струи на высоте 30 км при расчете с использованием различных моделей турбулентности: 1 -  $K-\varepsilon$ ; 2 -  $K-\varepsilon$  cc1; 3 - SST cc2; 4 -  $K-\varepsilon$  cc3. Расчет с использованием (а) - "ламинарной химии"; (б) - "турбулентной химии"

Расчеты с использованием "ламинарной химии" и "турбулентной химии" дают очень близкие результаты.



Существенное отличие расчетов с использованием "ламинарной химии"; и "турбулентной химии" начинает проявляться на высоте 33 км. Как это видно из сравнения рисунков 3.22 (а) и (б), интенсивность горения в первом случае существенно ниже, чем во втором. При использовании моделей  $K-\epsilon$  и  $K-\epsilon$  cc3 догорание находится практически на грани срыва. В случае  $K-\epsilon$  cc1 и SST cc2 догорание при использовании "ламинарной химии" также слабее, а точка

достижения максимальной температуры смещается вниз по потоку по сравнению с "турбулентной химией".



Еще более ярко проявляется различие расчетов с "ламинарной" и "турбулентной" "химиями" на высоте 35 км (см. рисунок 3.23). В первом случае течение при использовании всех моделей турбулентности практически является "замороженным". На рисунке 3.24 для наглядности показано сравнение расчетов с двумя вариантами химии с использованием SST cc2 модели турбулентности.



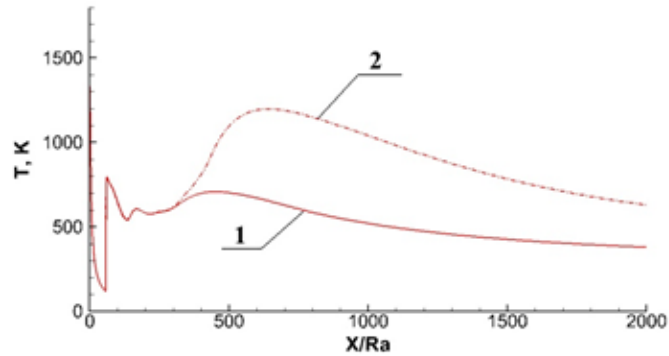


Рисунок 3.24. Распределение температуры вдоль оси струи на высоте 35 км при расчете с использованием  $K-\epsilon$   $cc2$  модели турбулентности: 1 - расчет с использованием "ламинарной химии"; 2 - "турбулентной химии"

На высоте 37 км течение в струе является фактически замороженным для всех моделей турбулентности (см. рисунок 3.25), и результаты расчетов с использованием "ламинарной химии" и "турбулентной химии" практически совпадают; поэтому на рисунке представлены результаты только с использованием последней. Для наглядности на рисунке 3.26 показаны результаты расчетов с использованием обеих моделей "химии" с моделью турбулентности SST  $cc2$ .

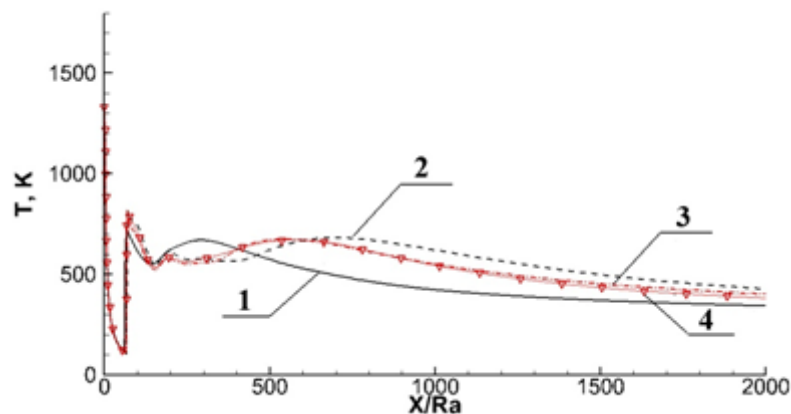


Рисунок 3.25. Распределение температуры вдоль оси струи на высоте 37 км при расчете с использованием различных моделей турбулентности: 1 -  $K-\epsilon$ ; 2 -  $K-\epsilon$   $cc1$ ; 3 - SST  $cc2$ ; 4 -  $K-\epsilon$   $cc3$ . Расчет с использованием "турбулентной химии"

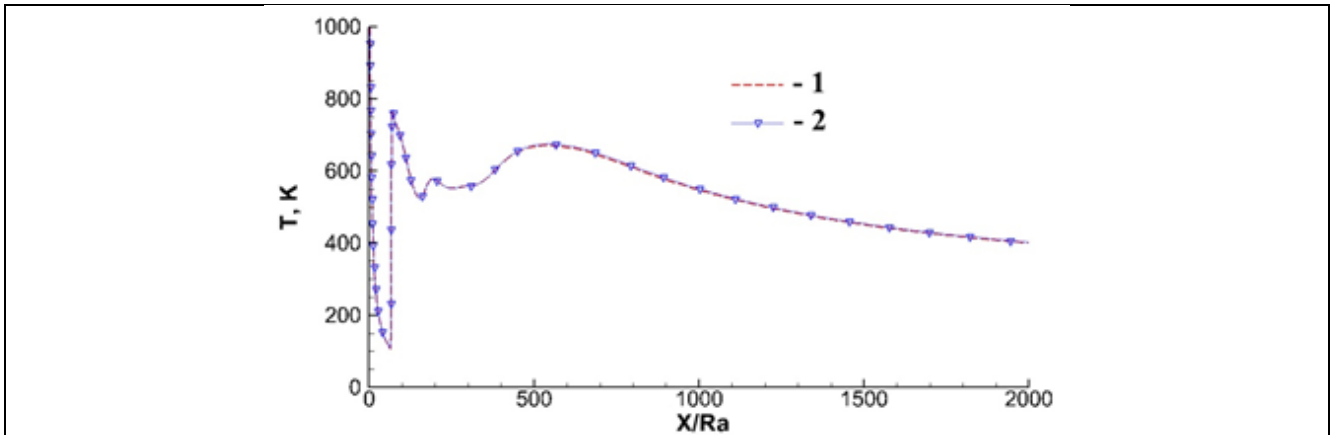


Рисунок 3.26. Распределение температуры вдоль оси струи на высоте 37 км при расчете с использованием  $K$ - $\varepsilon$   $cc2$  модели турбулентности: 1 - расчет с использованием "ламинарной химии"; 2 - "турбулентной химии"

Интересно, что на высотах, при которых наблюдается развитое горение (25-30 км) и при которых течение близко к замороженному модели турбулентности SST  $cc2$  и  $K$ - $\varepsilon$   $cc3$  дают очень близкие результаты расчета. На переходных же высотах (33-35 км) результаты существенно отличаются.

Объясняется это тем, что влияние сжимаемости в этих моделях учитывается принципиально по-разному. В модели  $K$ - $\varepsilon$   $cc2$  вводится дополнительная диссипация в уравнение переноса турбулентной кинетической энергии (ТКЕ), т.е. основное воздействие сжимаемости оказывается на ТКЕ, и через нее опосредованно на турбулентную вязкость. В модели  $K$ - $\varepsilon$   $cc3$  воздействие сжимаемости на ТКЕ невелико, основное влияние проявляется непосредственно на турбулентную вязкость через отношение  $V_n^{*2} / K$ , которое резко уменьшается с увеличением скорости.

Источник в уравнении (2.175) имеет вид:

$$Source_{f,2} = 2 \frac{\mu_T}{\sigma_{T,f}} \left( \frac{\partial f}{\partial x_j} \right)^2 - \frac{2}{R} \bar{\rho} f^{*2} \frac{\varepsilon}{K} \quad (262)$$

Если предположить, что в развитом турбулентном слое смешения при достижении автомодельности наблюдается примерный баланс диссипации и генерации, т.е.  $Source_{f,2} \approx 0$ , то получаем для модели  $K$ - $\varepsilon$   $cc3$  [10]:

$$f^{n_2} \approx \frac{R}{\sigma_{T,f}} \left( \frac{\partial f}{\partial x_j} \frac{K^{3/2}}{\varepsilon} \right)^2 \frac{0.09}{C_\mu(0)} \frac{(1-\Gamma) V_n^{n_2}}{C_1 K} \quad (263)$$

Отношение  $K^{3/2} / \varepsilon$  пропорционально масштабу турбулентности, т.е., по сути, ширине слоя смешения, а градиент  $\frac{\partial f}{\partial x_j}$  обратно пропорционален ширине слоя смешения. Таким образом, основное влияние в формуле (263) оказывает отношение  $V_n^{n_2} / K$ , которое, как уже говорилось, уменьшается с ростом скорости потока. Поэтому в высокоскоростных потоках дисперсия скалярной величины уменьшается. Такой эффект в модели SST *cc2* слабее, чем в *K-ε cc3*. Поэтому в нашем случае высокоскоростного течения при использовании модели *K-ε cc3* дисперсия температуры получается ниже, чем при использовании модели SST *cc2*. Соответственно, влияние турбулентности на скорости химических реакций меньше, и горение на переходном режиме слабее.

На рисунке 3.27 представлено пространственное распределение безразмерной дисперсии температуры  $\bar{\sigma}^2 = T^{n_2} / T^2$  на высоте 33 км в обоих случаях. Очевидно, что при использовании *K-ε cc2* модели дисперсия начинает возрастать гораздо выше по потоку, чем при использовании *K-ε cc3* модели. Это и приводит к более быстрому воспламенению и более интенсивному горению в расчете с использованием *K-ε cc2* модели турбулентности.

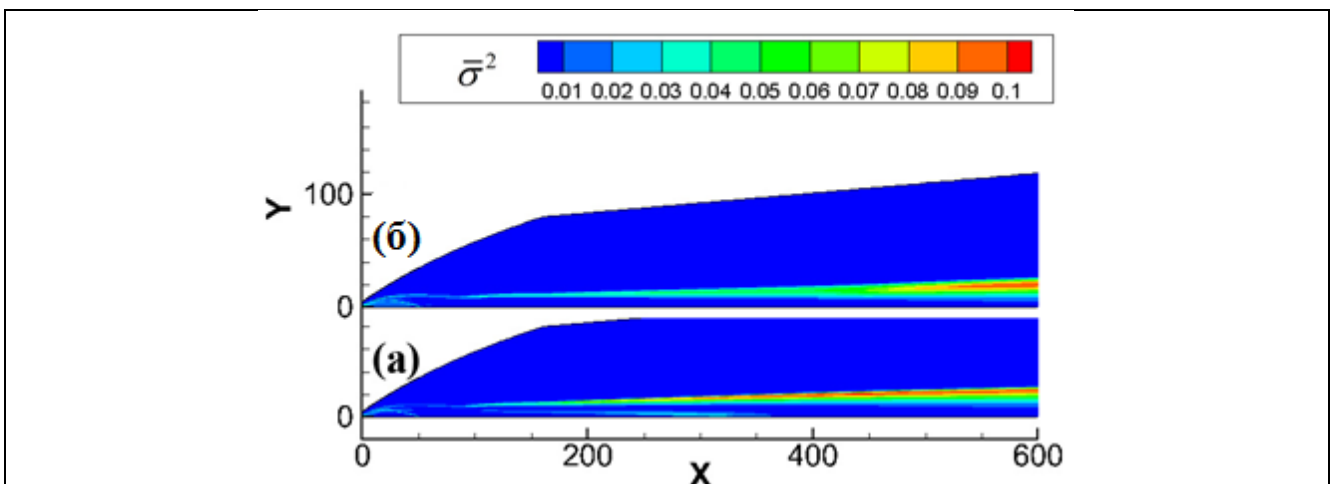
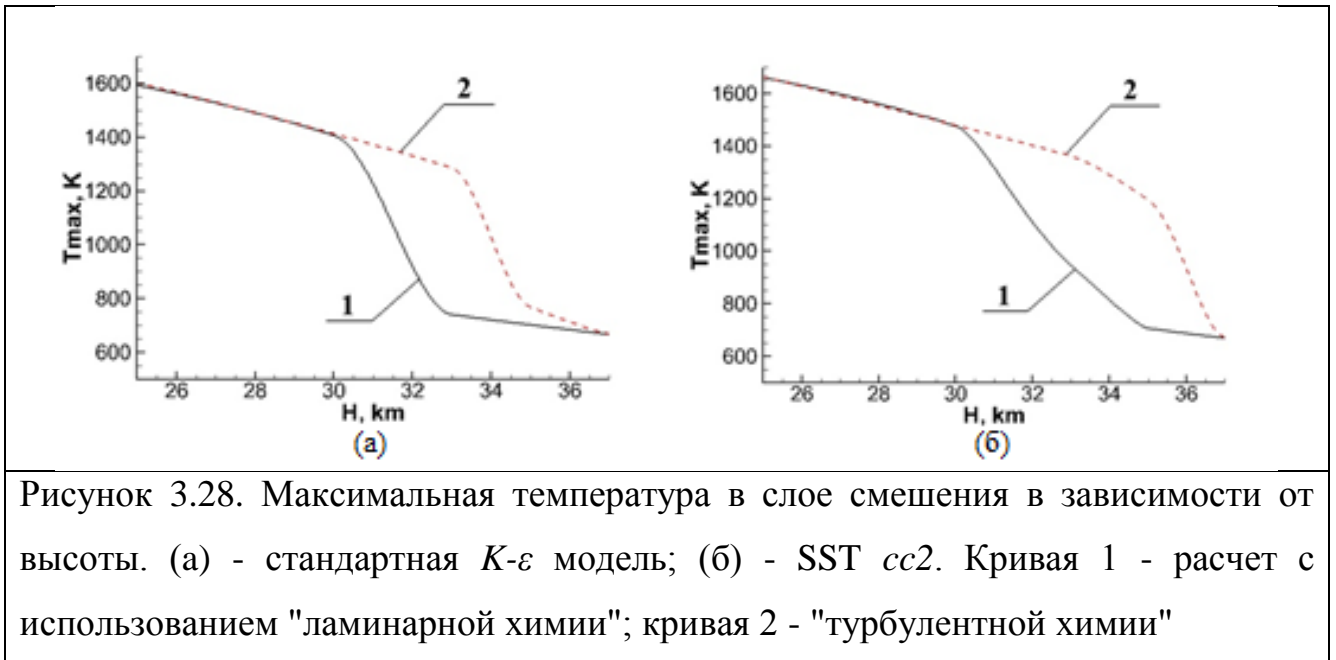


Рисунок 3.27. Распределение безразмерной дисперсии температуры на высоте 33 км при расчете с использованием различных моделей турбулентности: (а) - *K-ε cc2*; (б) - *K-ε cc3*

На рисунке 3.28 представлены зависимости максимальной температуры в слое смешения от высоты при использовании моделей турбулентности  $K-\varepsilon$  стандартной и SST  $ss2$  и обеих моделей химической кинетики: "ламинарной" и "турбулентной".



Очевидно, что срыв догорания при использовании "турбулентной химии" происходит на 4-5 км выше, чем при использовании "ламинарной химии".

### 3.5. Камера сгорания прямогочного двухрежимного двигателя

Целью этого теста являлась проверка представленной модели SST  $ss2$  для расчета ГПВРД. Полученные результаты моделирования сравнивались с экспериментальными данными из работы [41]. Сравнивалось статическое давление на верхней стенке на центральной линии экспериментальной установки.

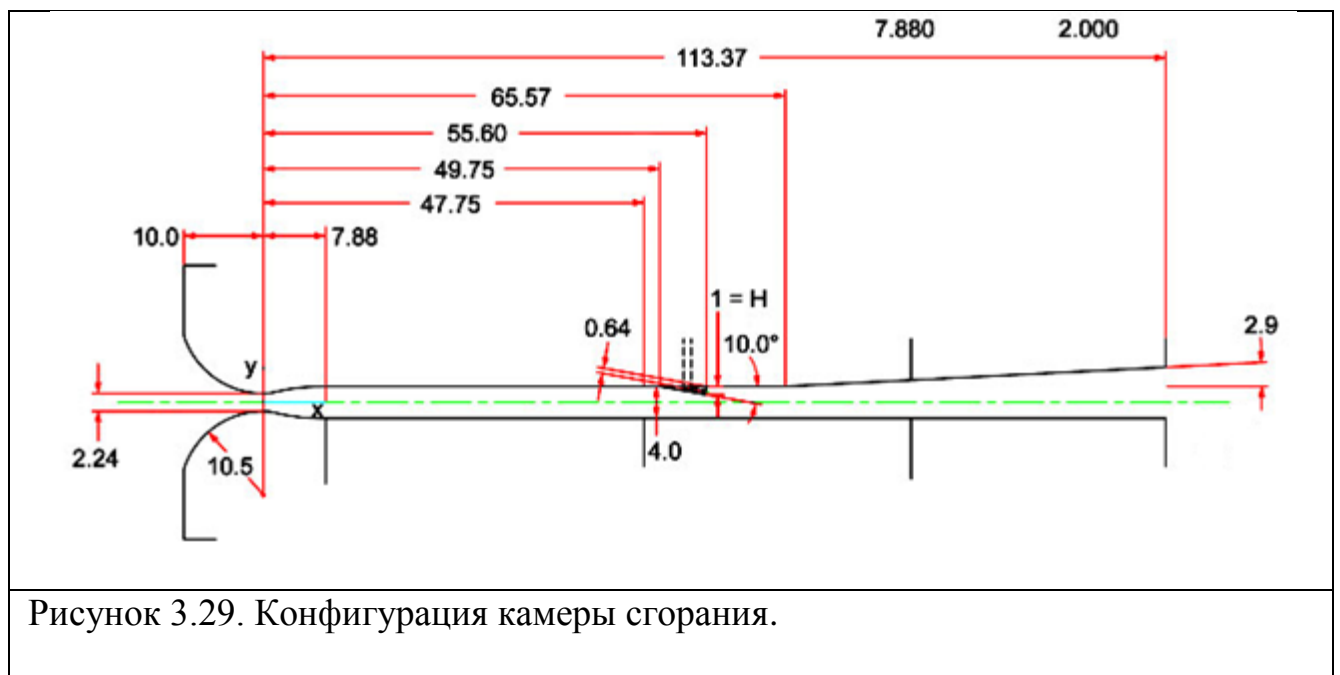
Схема конфигурации камеры сгорания представлена на рисунок 3.29. Канал состоит из двумерного плоского сопла ( $Ma=2$ ), прямоугольного изолятора постоянной площади и камеры сгорания прямоугольной формы. Наклонный под углом 10 градусов инжектор был расположен на одной из стенок камеры сгорания (эта стенка упоминается здесь стенка инжекции). Инжектор имеет отношение

высоты к ширине равное 0,5. Водород вводится в камеру сгорания из конического сопла (число Маха = 1,7), находящегося в инжекторе. Осевая линия сопла параллельна поверхности инжектора (10 град).

Размеры и геометрия течения представлена в таблице.

Таблица 3.4.

Высота инжектора	$H$ $=6.4$ мм	Высота изолятора	$4H$
Ширина изолятора	$6H$	Длина изолятора	$2H$
Высота входного участка канала	$4H$	Ширина входного участка канала	$6H$
Длина поверхности с 2.9 градусами	$10H$	Длина канала	$58H$
Длина инжектора	$6H$	Ширина инжектора	$2H$
Угол сжатия канала инжектором	$10$ град	Координата $Y$ оси инжектора	$0.6H$



Для целей этого теста проведен расчет двух вариантов течения (без горения и с горением): (см. Таблица 1).

Таблица 3.5.

Вариант	Воздух	$H_2$ – условия в камере перед соплом	Внешние условия
1	$P_0=327.72$ кПа $T_0=1201$ К $m_a=0.202$ кг/с	-----	$P_{atm}=99.1$ кПа $T_{atm}=294.4$ К
4	$P_0=326.97$ кПа $T_0=1202$ К $m_a=0.201$ кг/с	$P_0=527.14$ кПа $T_0=298.86$ К $m_{fuel}=1.01e-3$ кг/с	$P_{atm}=99.1$ кПа $T_{atm}=294.4$ К

Рисунок 3.30 показывает распределение давления на верхней стенке камеры в плоскости симметрии в случае варианта 1 (воздух без топлива). Результаты моделирования по сравнению с экспериментом и показать удовлетворительно согласуются с экспериментом при использовании предложенной в данной работе SST *cc2* модели турбулентности. Пики давления в районе наклонного инжектора согласуются с экспериментом [41].

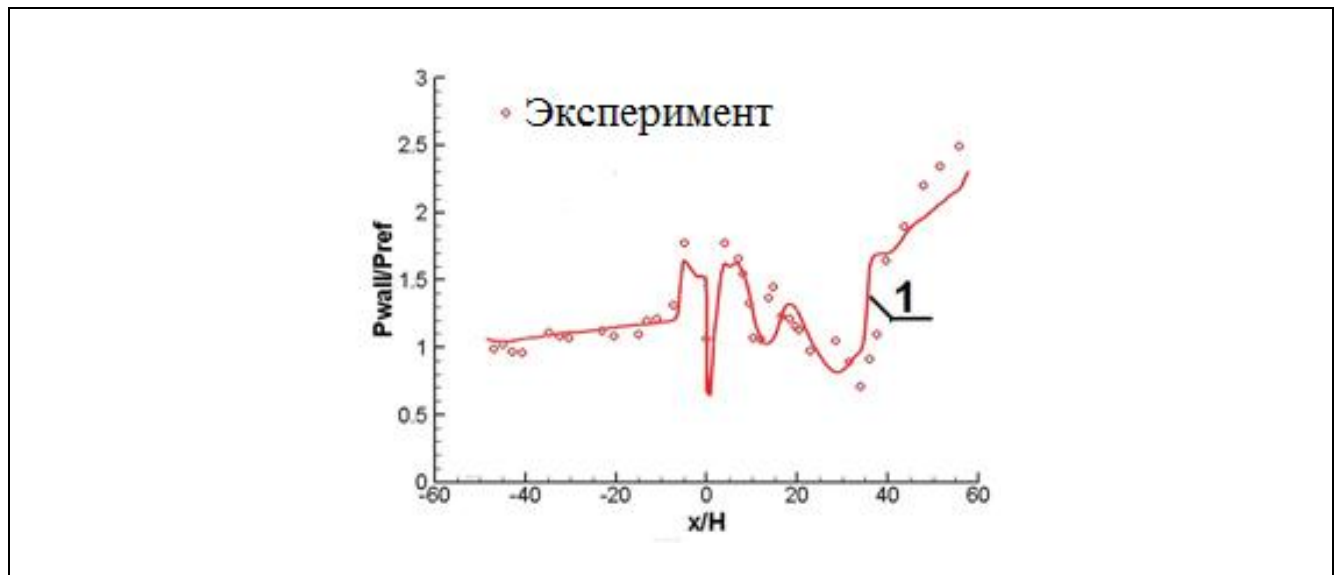


Рисунок 3.30. Распределение давления на верхней стенке камеры в плоскости симметрии в случае варианта 1 (воздух без топлива). Экспериментальные данные из [41]; 1 - результаты расчета, SST-*cc2* модель

Скачок, созданный наклонным инжектором, распространяется вниз по течению к камере сгорания и сопла. Эти ударные структуры вызывают пики и спады в профиле давления. Рисунок 3.31 показывает распределение числа Маха камере сгорания и в сопле при отсутствии горения. Как это видно на рисунке, в выходной части сопла образуется рециркуляционная зона вследствие того, что давление в сопле понижается ниже давления окружающего пространства.

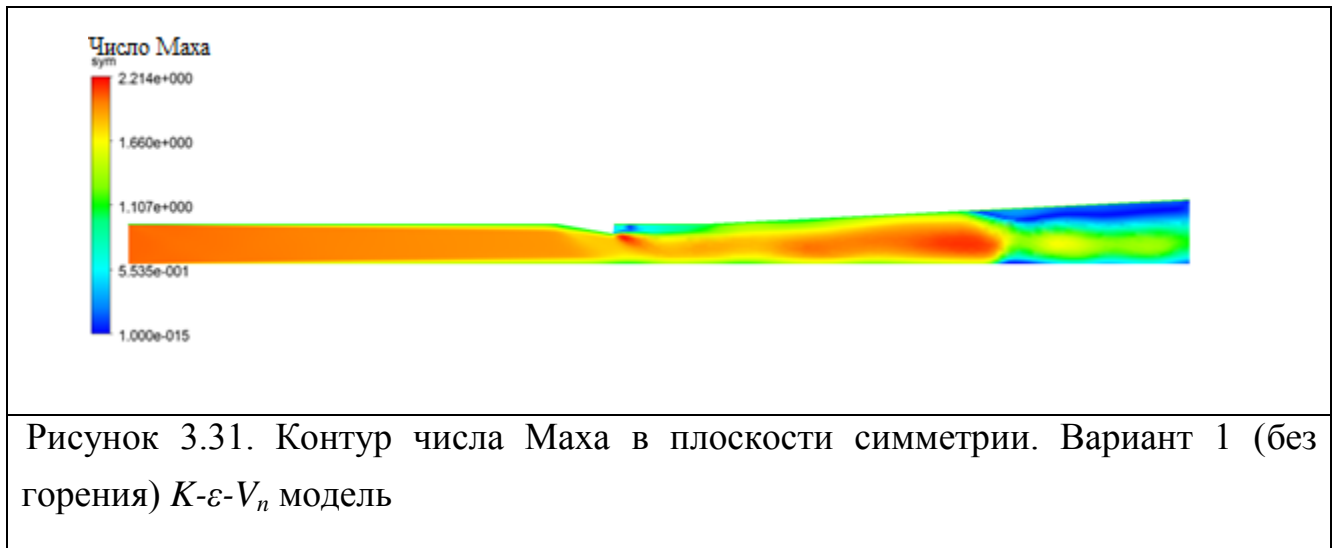


Рисунок 3.32 показывает результаты расчета и сравнение с экспериментальными данными в случае с горением ( $m_{гор} = 1.01e-3$  кг/ с). Для сравнения использовались  $K$ - $\epsilon$  модель (кривая 1) и SST- $cc2$  (кривая 2).

И экспериментальные данные и численные результаты показывают значительное увеличение давления в камере сгорания, по сравнению со случаем без горения. Результаты моделирования помощью SST- $cc2$  модели намного лучше совпадают с экспериментальными данными по сравнению с  $K$ - $\epsilon$  моделью.

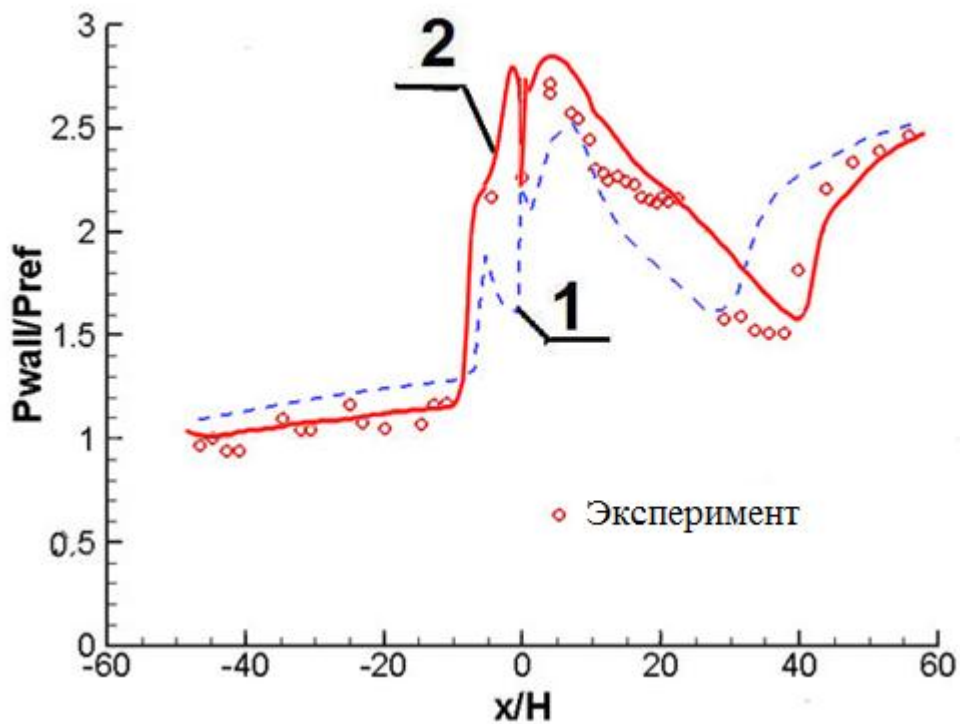


Рисунок 3.32. Распределение давления на верхней стенке камеры в плоскости симметрии в случае варианта 4 (горение водорода). Экспериментальные данные из [41]; 1- результаты расчета,  $K-\epsilon$  модель; 2- результаты расчета SST  $cc2$  модель.

### Выводы по разделу 3

На основе этого метода разработан программный комплекс для решения предложенной математической модели и сформирована методика расчетов параметров струй.

Проведены серии контрольных расчетов и сравнение с имеющимися экспериментальными данными, которое показало удовлетворительное совпадение.



#### 4. Параметрическое исследование типичных ракетных двигателей

##### 4.1. Параметрическое исследование типичного ЖРД

Проведен расчет струи следующего типичного жидкостного ракетного двигателя

Таблица 4.1.

Параметры на срезе	
Скорость, м/с	2868.0
Давление, кПа	74.246
Температура, К	1917.0
Угол на выходе, рад	0.17453
Радиус, м <sup>2</sup>	1.0 (для высот ниже 60 км) 0.5 (для высот выше 60 км)
Состав, мольные доли	
O <sub>2</sub>	.1631 E -5
CO	.08372E 0
H	.2406 E -3
O	.5037 E -6
OH	.1521 E -3
NO	.1058 E -4
H <sub>2</sub>	.05415E 0
H <sub>2</sub> O	.4053 E 0
CO <sub>2</sub>	.1461 E 0
N <sub>2</sub>	.3103 E 0

Условия внешнего потока:

Таблица 4.2.

Высота полета, км	30	50	70	100
Число Маха	5	7	9	10

Некоторые результаты расчетов представлены на графиках.

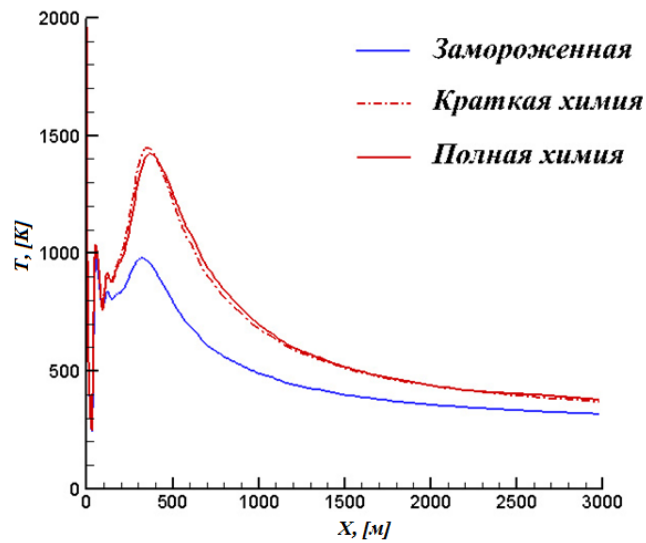


Рисунок 4.1. Жидкое топливо. Высота полета 30 км. Осевая температура:

- 1) без учета горения;
- 2) с учетом горения, упрощенная кинетика горения водорода таблица 2.2.
- 3) с учетом горения, полная кинетика горения водорода таблица 2.4.

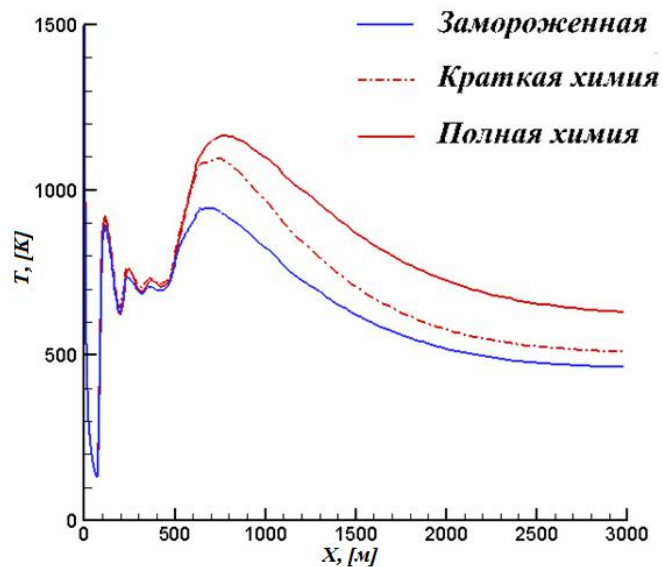


Рисунок 4.2. Жидкое топливо. Высота полета 40 км. Осевая температура:

- 1) без учета горения;
- 2) с учетом горения, упрощенная кинетика горения водорода таблица 2.2.
- 3) с учетом горения, полная кинетика горения водорода таблица 2.4.

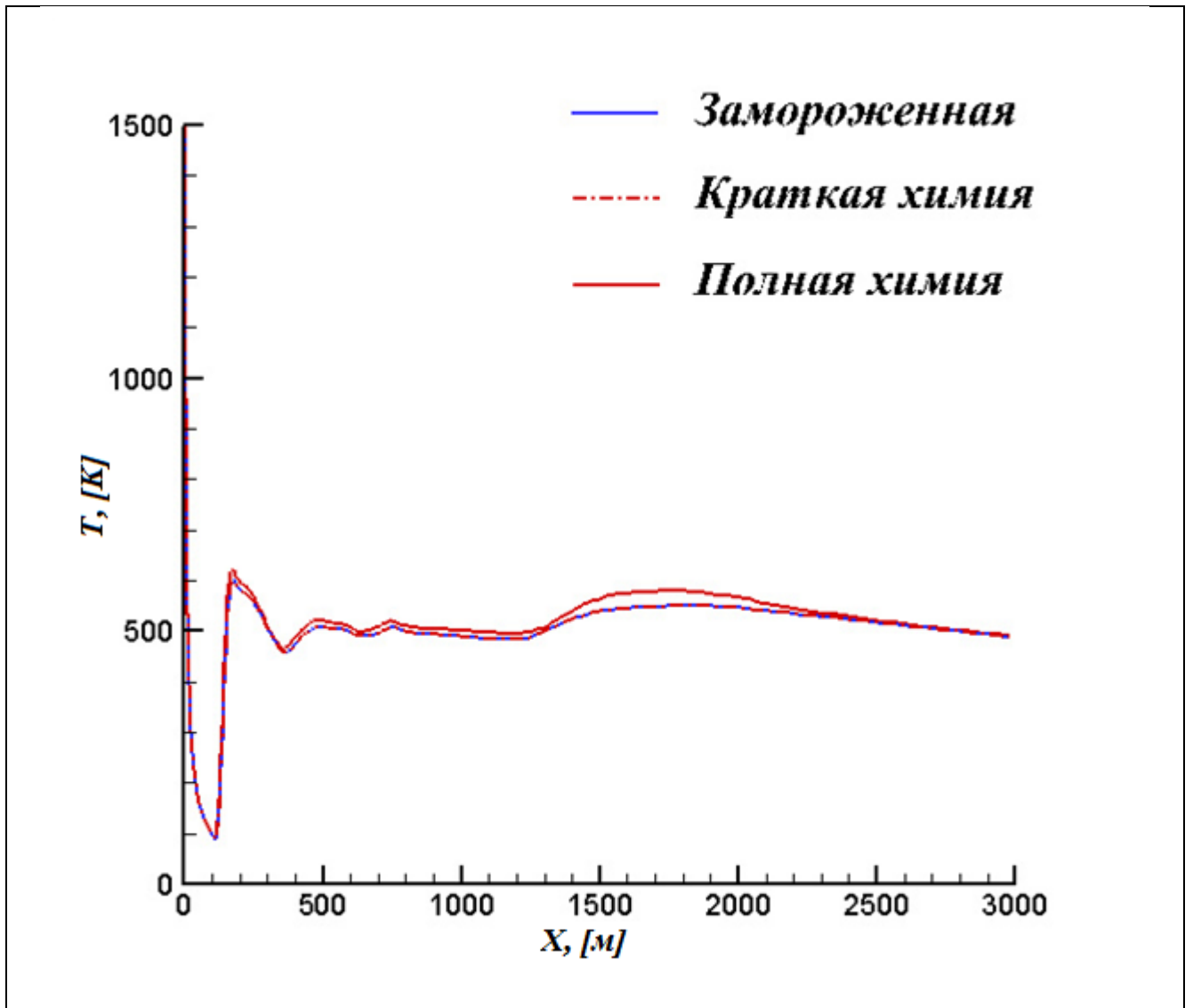


Рисунок 4.3. Жидкое топливо. Высота полета 50 км. Осевая температура:

- 1) без учета горения;
- 2) с учетом горения, упрощенная кинетика горения водорода таблица 2.2.
- 3) с учетом горения, полная кинетика горения водорода таблица 2.4.

Очевидно, что учет полной системы реакций горения водорода важен на переходных режимах (при срыве догорания). При установившемся горении результаты расчета с использованием упрощенной и полной химии практически совпадают.

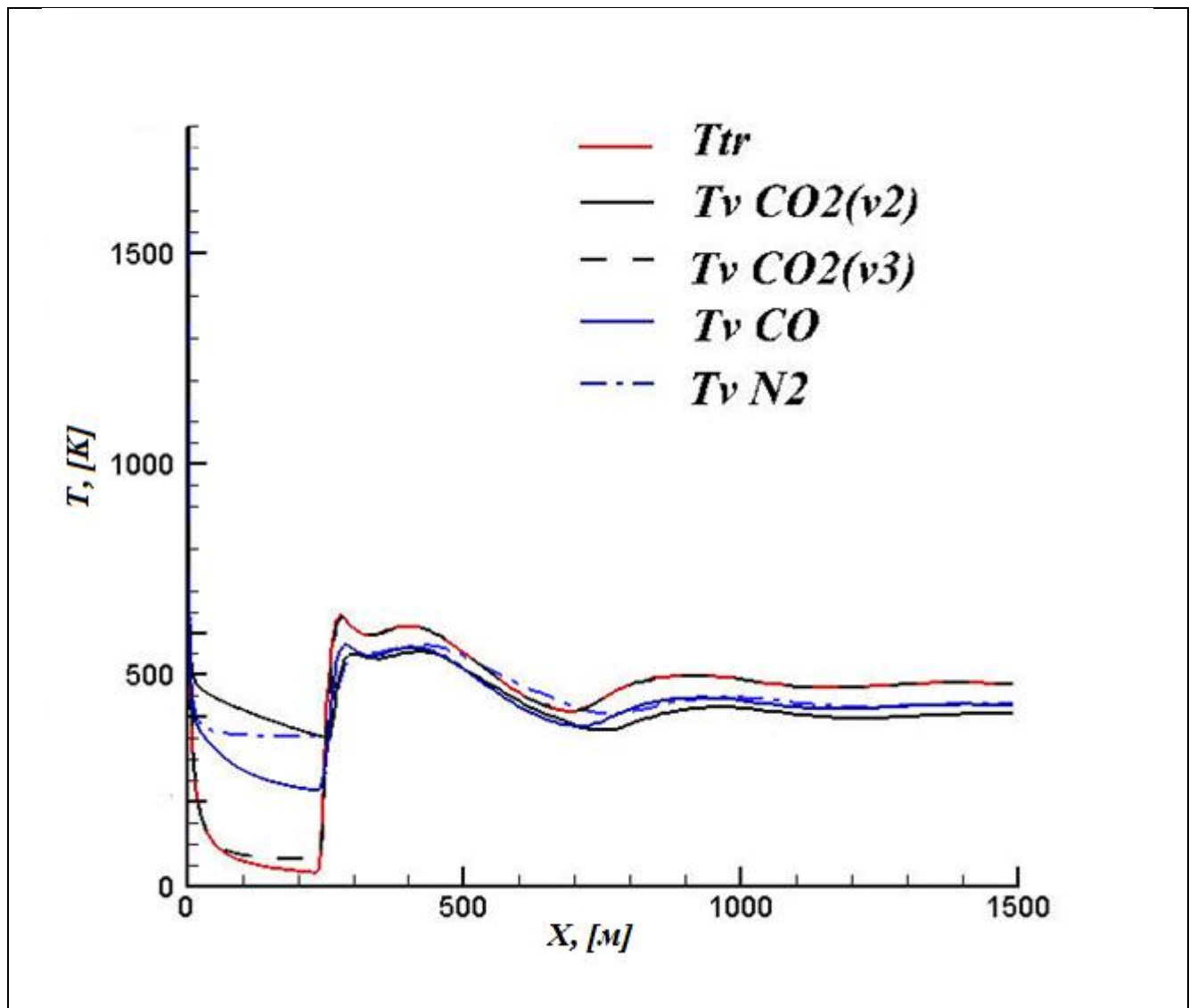


Рисунок 4.4. Жидкое топливо. Высота полета 70 км. Осевые температуры:  $T_{tr}$  - поступательно-вращательная и  $T_v$  - колебательные температуры различных мод

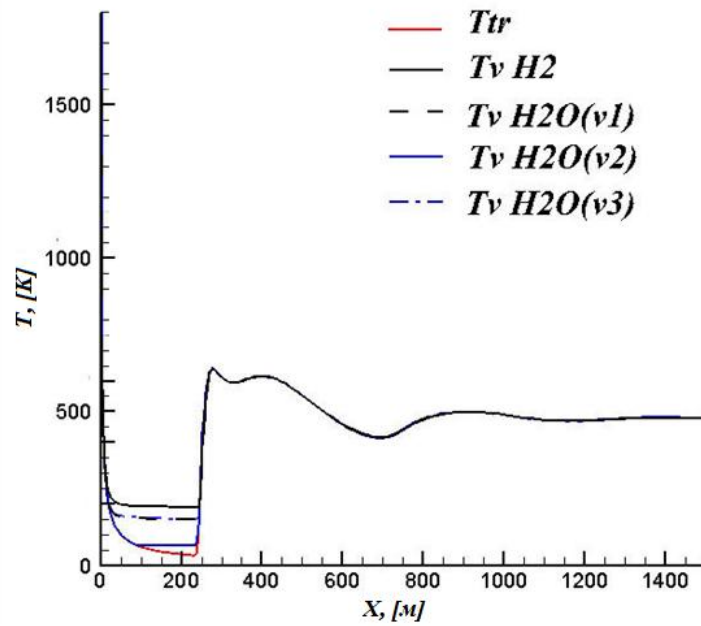


Рисунок 4.5. Жидкое топливо. Высота полета 70 км. Осевые температуры:  $T_{tr}$  - поступательно-вращательная и  $T_v$  - колебательные температуры различных мод. (продолжение)

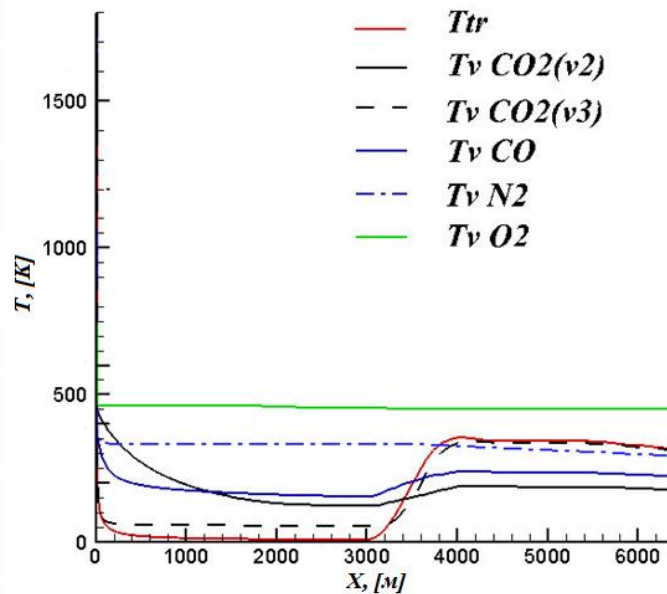


Рисунок 4.6. Жидкое топливо. Высота полета 100 км. Осевые температуры:  $T_{tr}$  - поступательно-вращательная и  $T_v$  - колебательные температуры различных мод

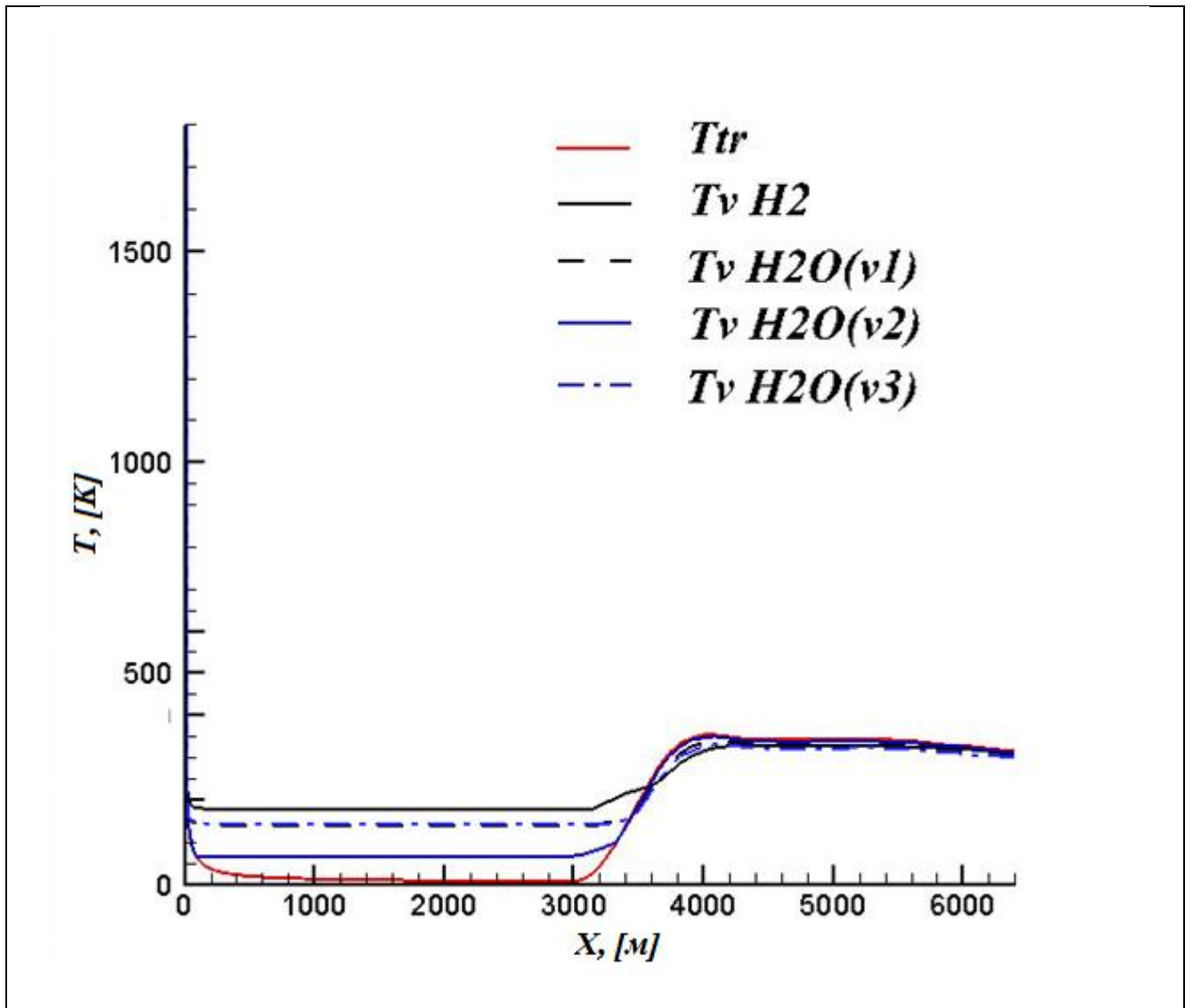


Рисунок 4.7. Жидкое топливо. Высота полета 100 км. Осевые температуры:  $T_{tr}$  - поступательно-вращательная и  $T_v$  - колебательные температуры различных мод. (продолжение)

Отличие колебательных температур от поступательно-вращательной усиливается с ростом высоты полета. На высотах ниже  $\sim 50$  релаксация практически отсутствует.

Колебательные моды CO, CO<sub>2</sub>(v<sub>2</sub>), CO<sub>2</sub>(v<sub>3</sub>), N<sub>2</sub> и O<sub>2</sub> сильно отстают от поступательно-вращательной температуры. Все моды воды в рассмотренном диапазоне высот полета практически совпадают с  $T_{tr}$ .

## 4.2. Параметрическое исследование типичного РДТТ

Проведен расчет струи следующего типичного ракетного двигателя на твердом топливе

Таблица 4.3.

Параметры на срезе	
Скорость, м/с	2987.0
Давление, кПа	15.081
Температура, К	1656.0
Угол на выходе, рад	0.17453
Радиус, м <sup>2</sup>	0.43
Состав, мольные доли	
O <sub>2</sub>	.0
CO	.16737E 0
H	.18709E -3
O	.0
OH	.0
NO	.91991E -7
H <sub>2</sub>	.26640E
HCl	.19568E 0
H <sub>2</sub> O	.23127E 0
CO <sub>2</sub>	.42541E -1
N <sub>2</sub>	.96432E -1

Параметры частиц:

Таблица 4.4.

Радиусы частиц, мкм	0.471E-6	0.746E-6	1.228E-6	1.627E-6	2.214E-6
	3.039E-6	4.084E-6	4.476E-6	5.000E-6	5.390E-6
Доля расхода	.0141	.0582	.1492	.2356	.3631
	.5185	.6490	.7512	.8871	1.0
Скорость частиц, м/с	2968.	2950.	2910.	2875.	2824.
	2758.	2683.	2659.	2628.	2603.
Температура, К	1712.	1742.	1792.	1830.	1880.
	1944.	2016.	2038.	2068.	2091.

Условия внешнего потока:

Таблица 4.5.

Высота полета, км	30	50	70	100
Число Маха	5	7	9	10



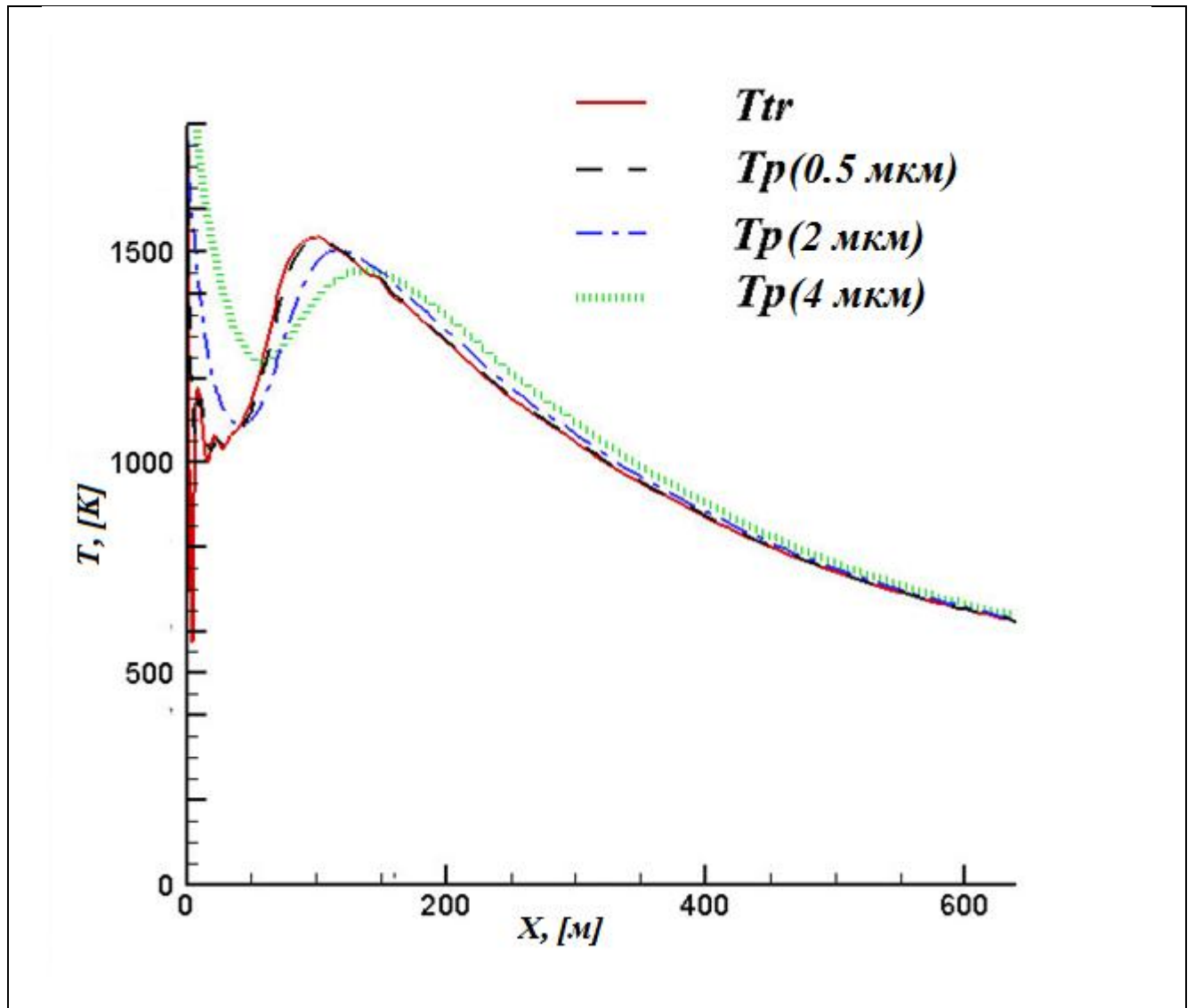


Рисунок 4.8. Твердое топливо. Высота полета 30 км. Осевая температура:  $T_{tr}$  - поступательно-вращательная и  $T_p$  - температуры частиц различного размера.

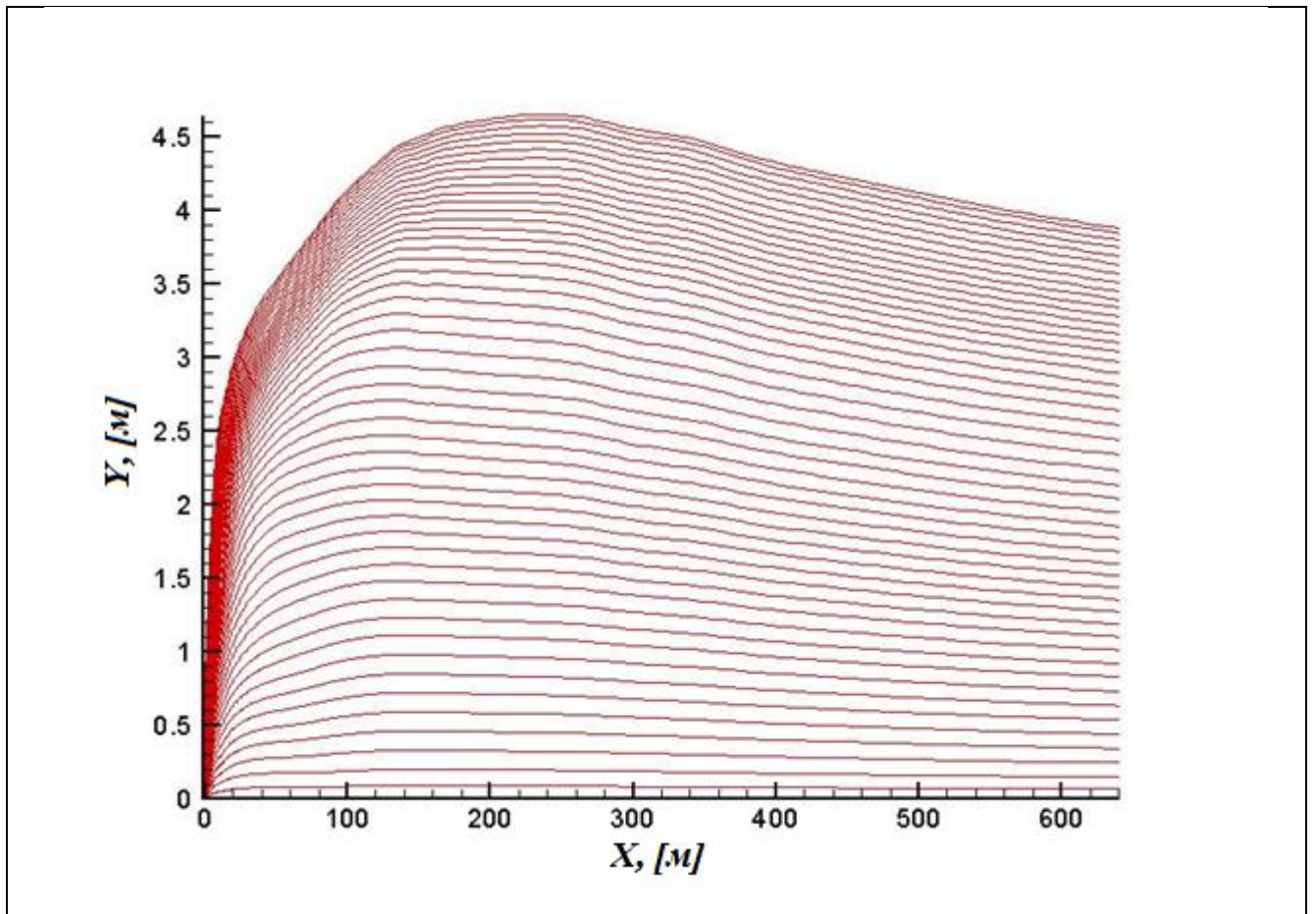


Рисунок 4.9. Твердое топливо. Высота полета 30 км. Траектории частиц размера 4 мкм

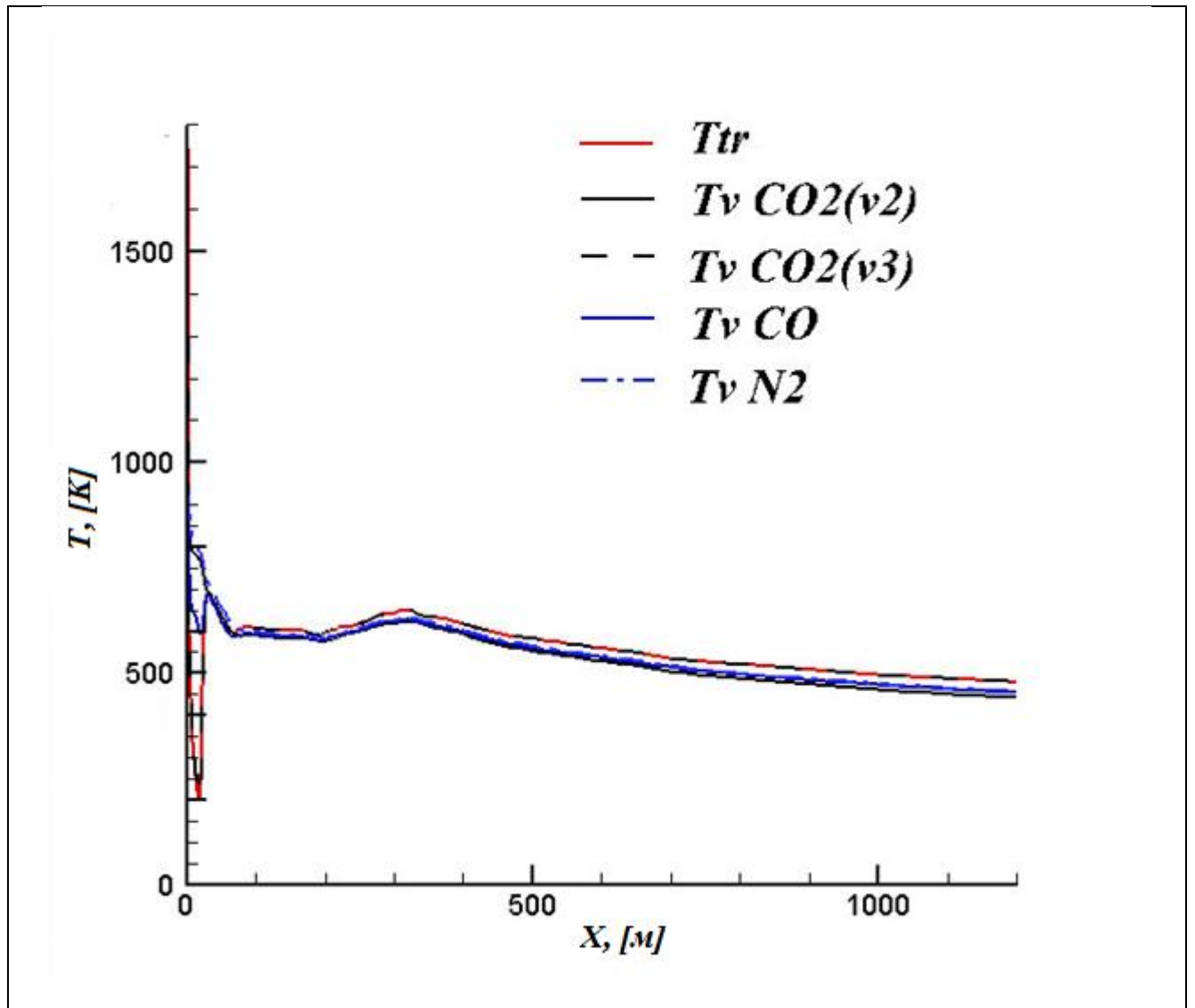


Рисунок 4.10. Твердое топливо. Высота полета 50 км. Осевые температуры:  $T_{tr}$  - поступательно-вращательная и  $T_v$  - колебательные температуры различных мод

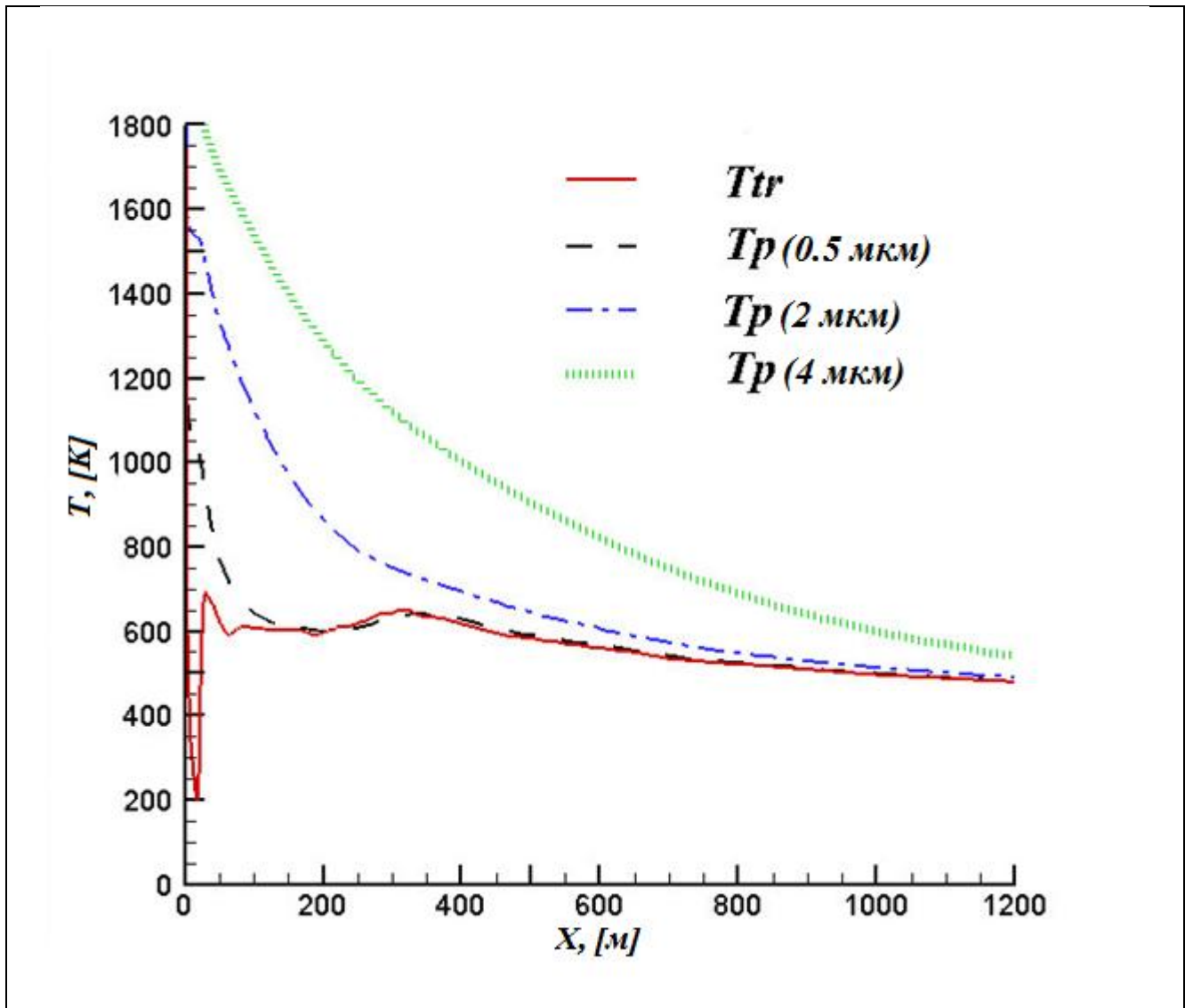


Рисунок 4.11. Твердое топливо. Высота полета 50 км. Осевая температура:  $T_{tr}$  - поступательно-вращательная и  $T_p$  - температуры частиц различного размера.

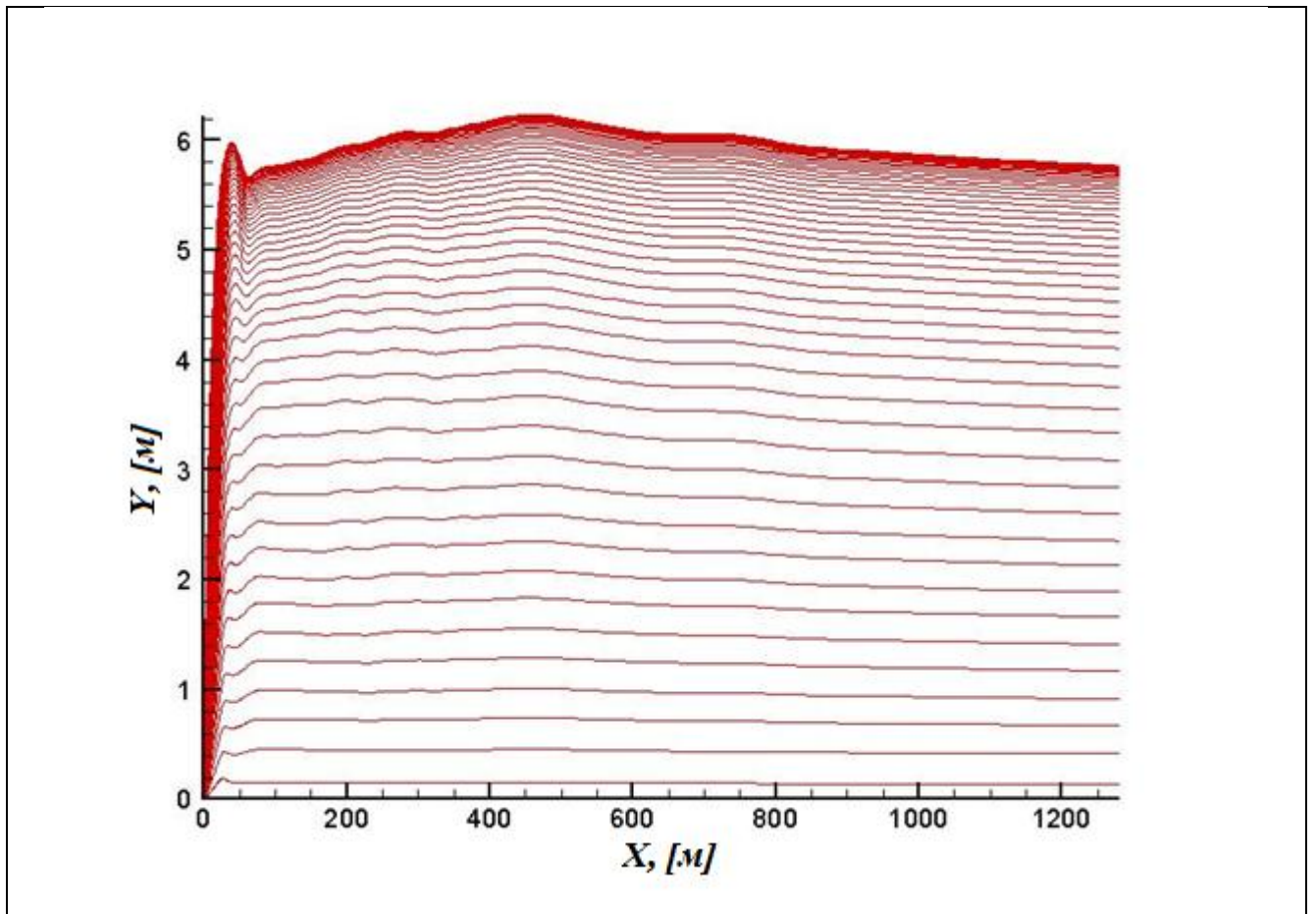


Рисунок 4.12. Твердое топливо. Высота полета 50 км. Траектории частиц размера 0.5 мкм

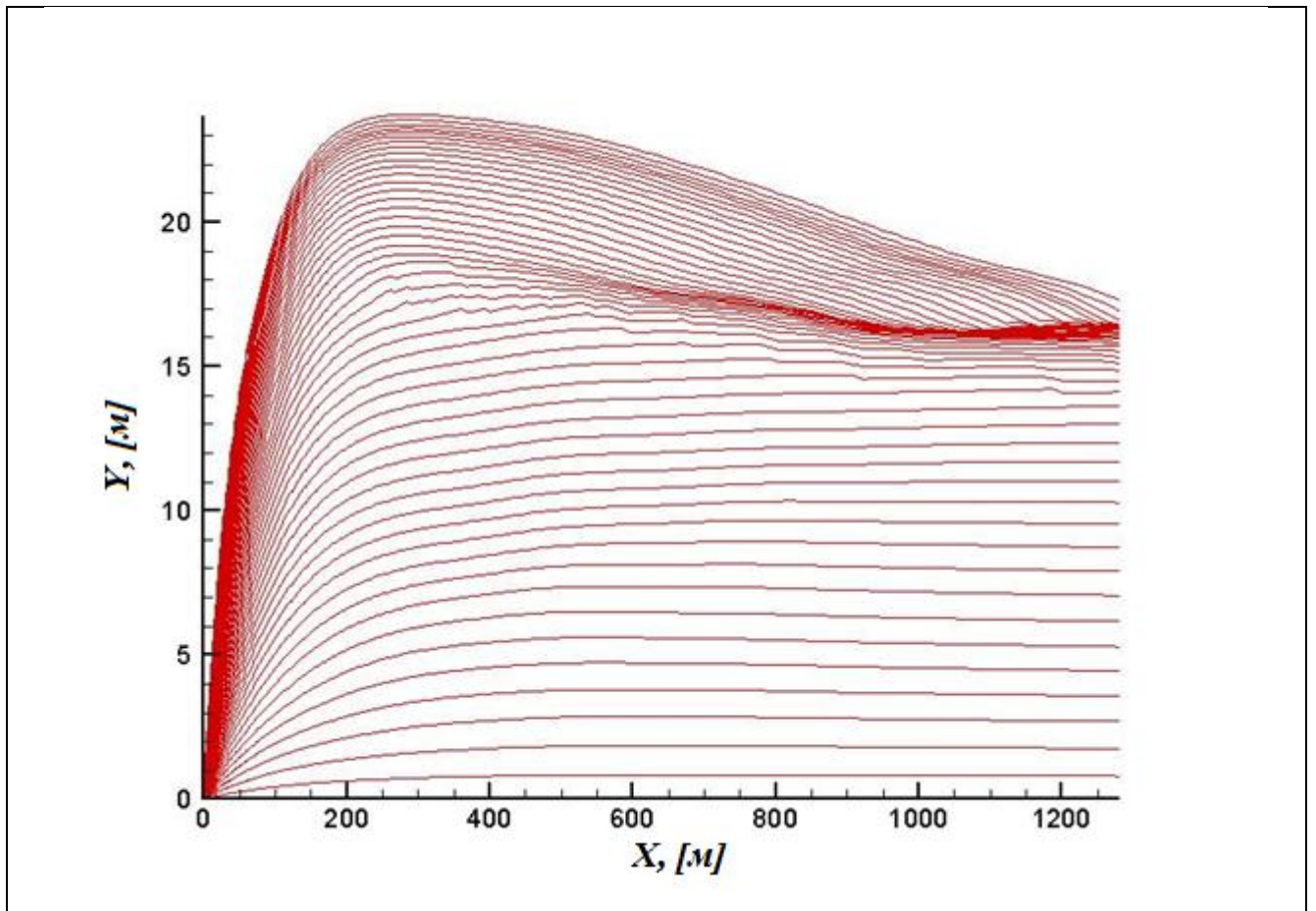


Рисунок 4.13. Твердое топливо. Высота полета 50 км. Траектории частиц размера 4 мкм

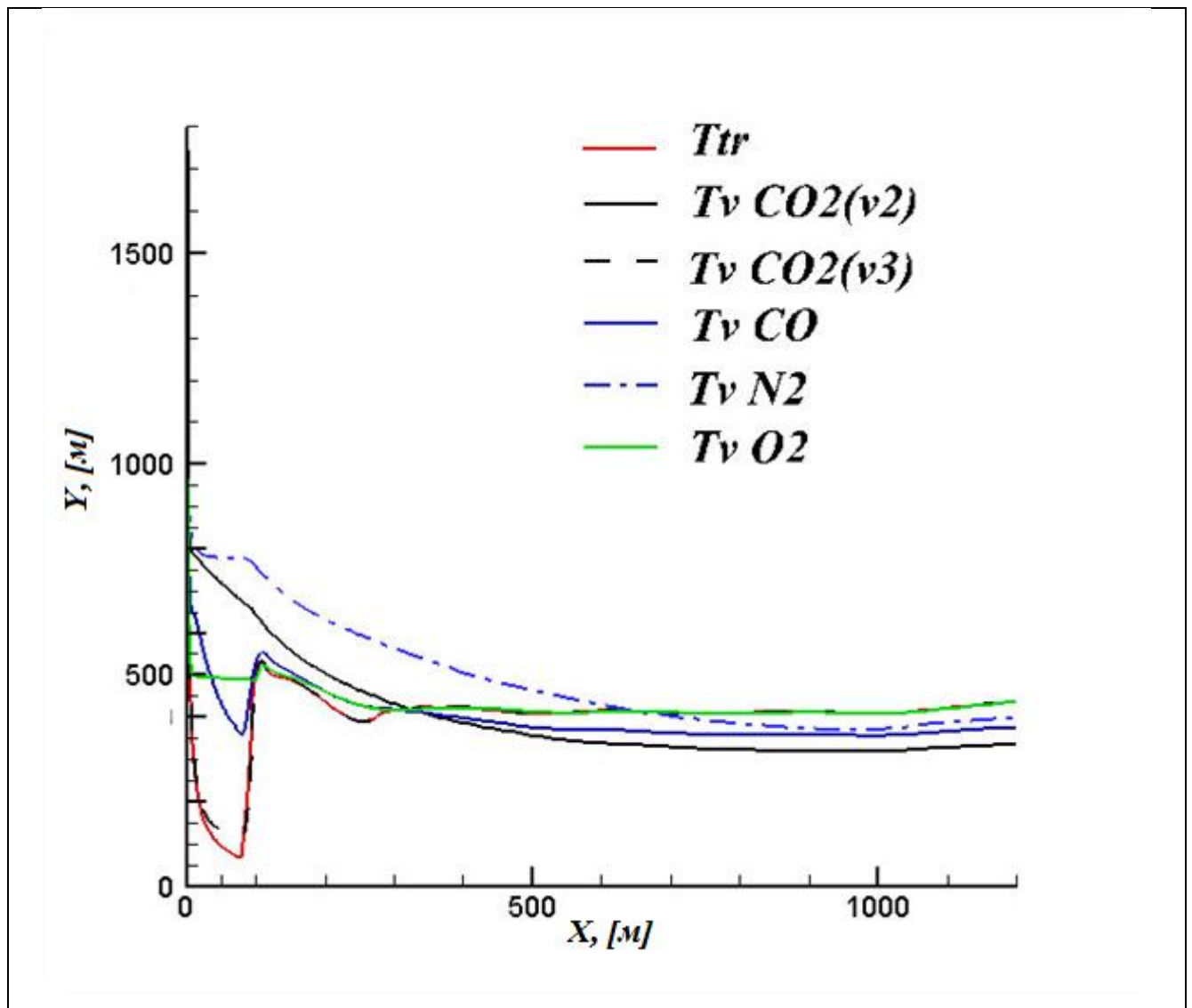


Рисунок 4.14. Твердое топливо. Высота полета 70 км. Осевые температуры:  $T_{tr}$  - поступательно-вращательная и  $T_v$  - колебательные температуры различных мод

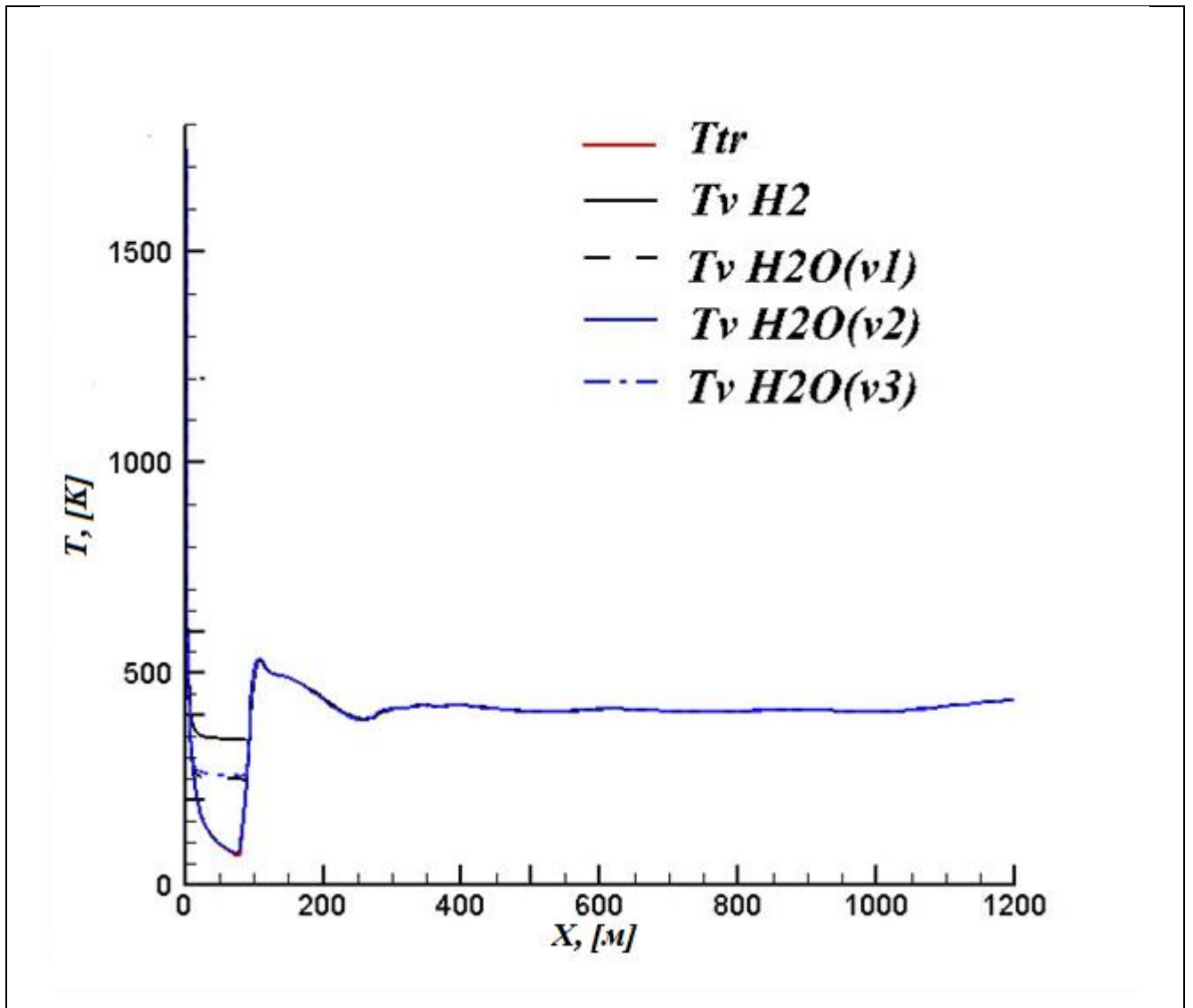


Рисунок 4.15. Твердое топливо. Высота полета 70 км. Осевые температуры:  $T_{tr}$  - поступательно-вращательная и  $T_v$  - колебательные температуры различных мод (продолжение)



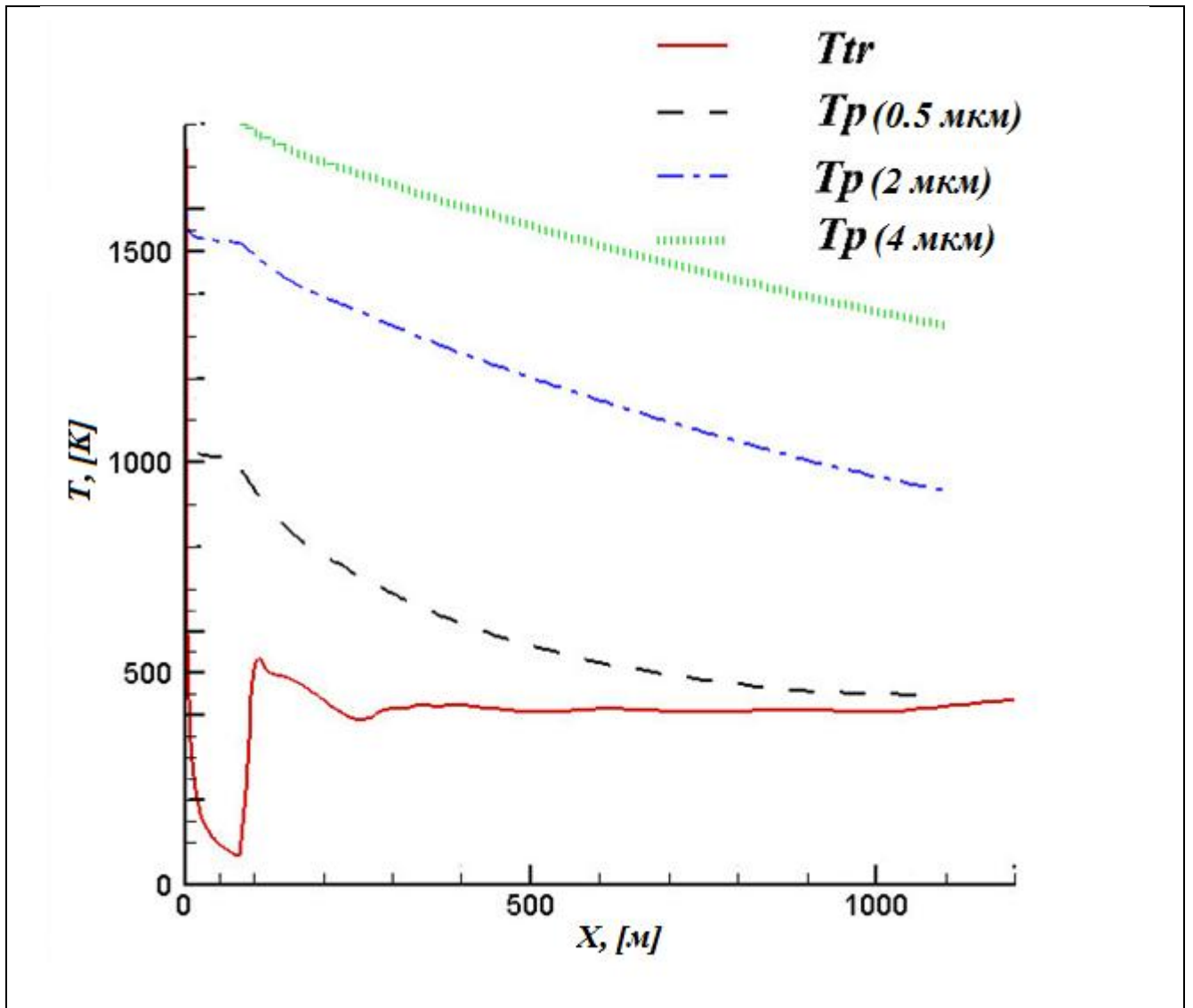


Рисунок 4.16. Твердое топливо. Высота полета 70 км. Осевая температура:  $T_{tr}$  - поступательно-вращательная и  $T_p$  - температуры частиц различного размера.

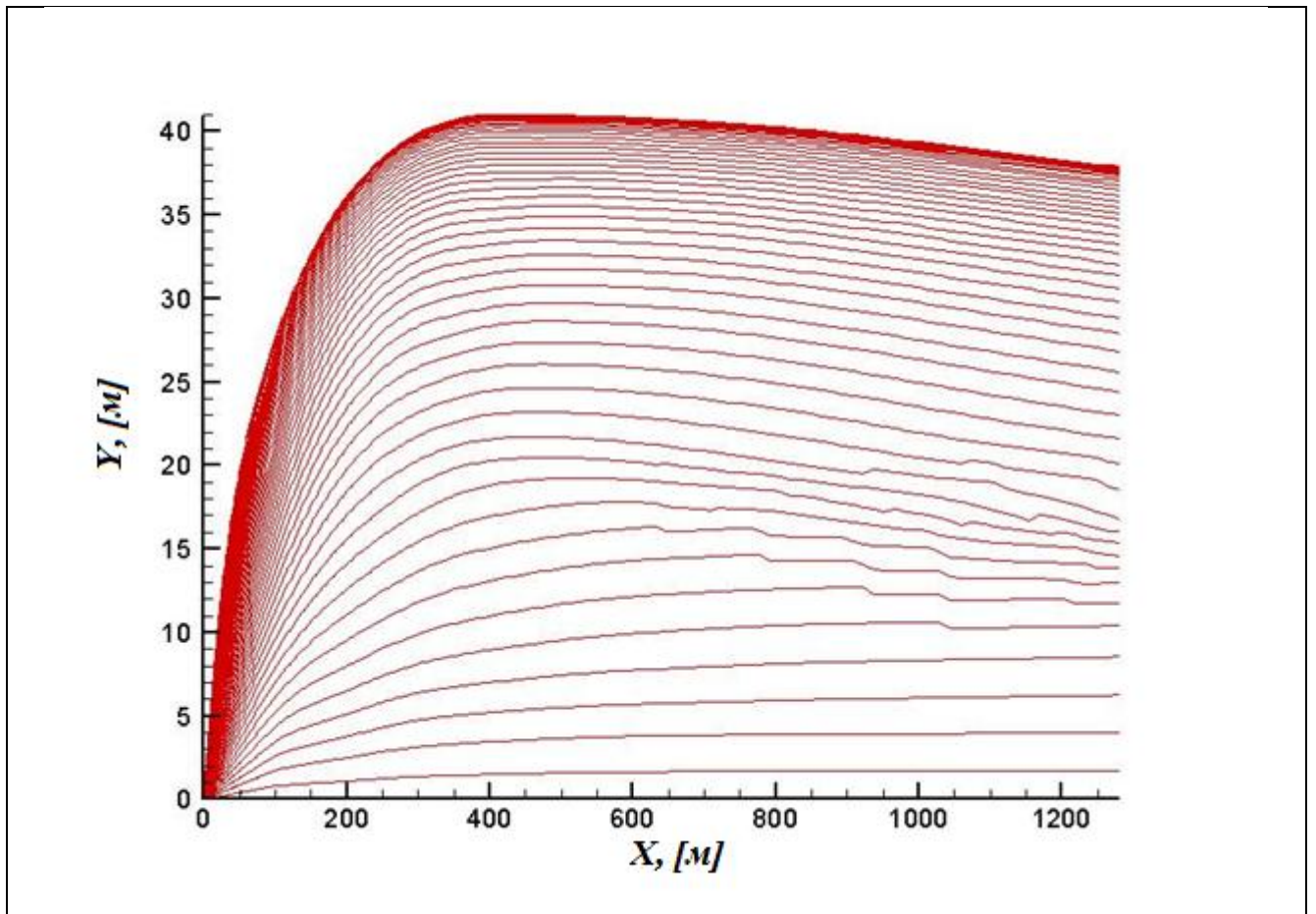


Рисунок 4.17. Твердое топливо. Высота полета 70 км. Траектории частиц размера 0.5 мкм

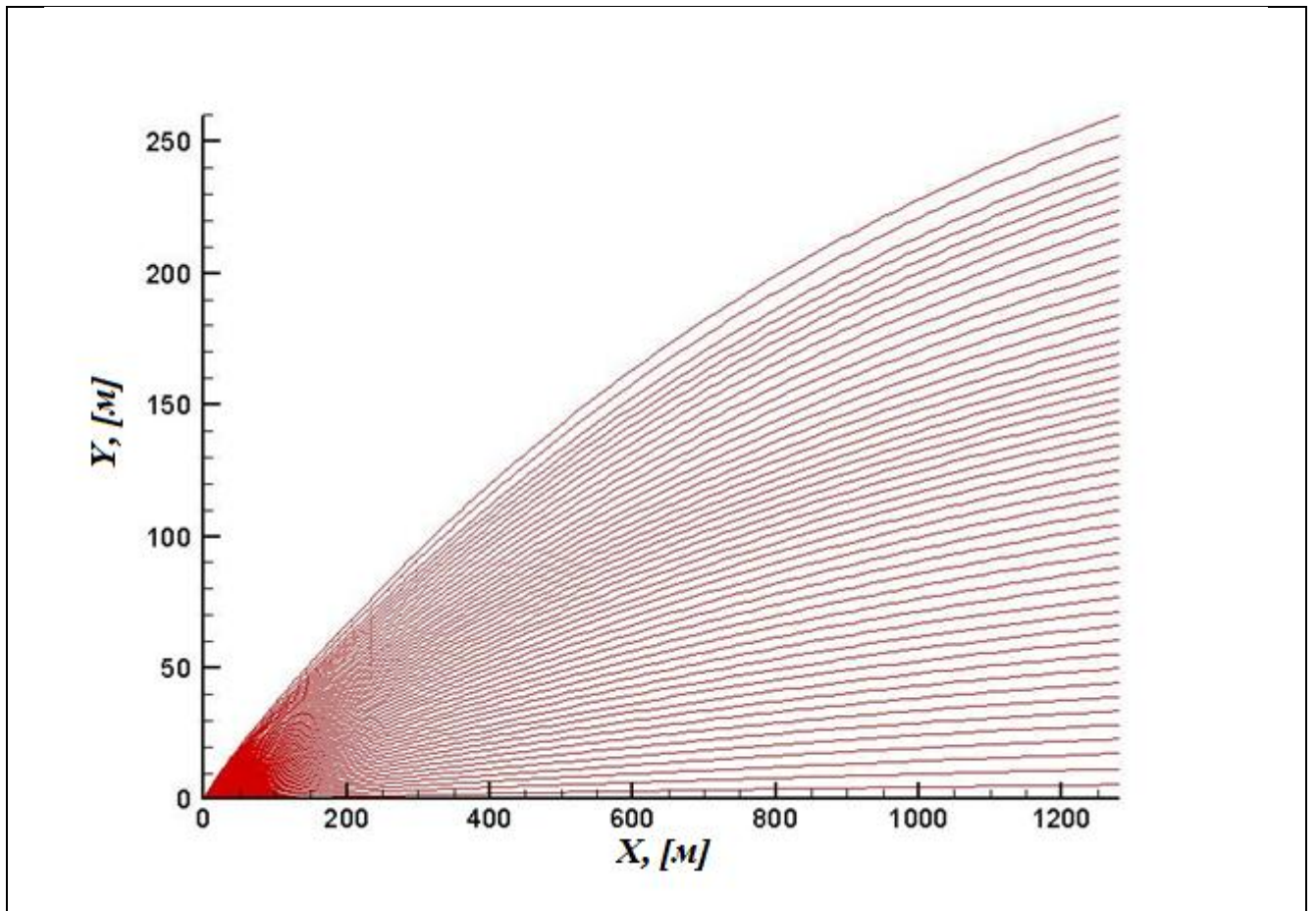


Рисунок 4.18. Твердое топливо. Высота полета 70 км. Траектории частиц размера 4 мкм

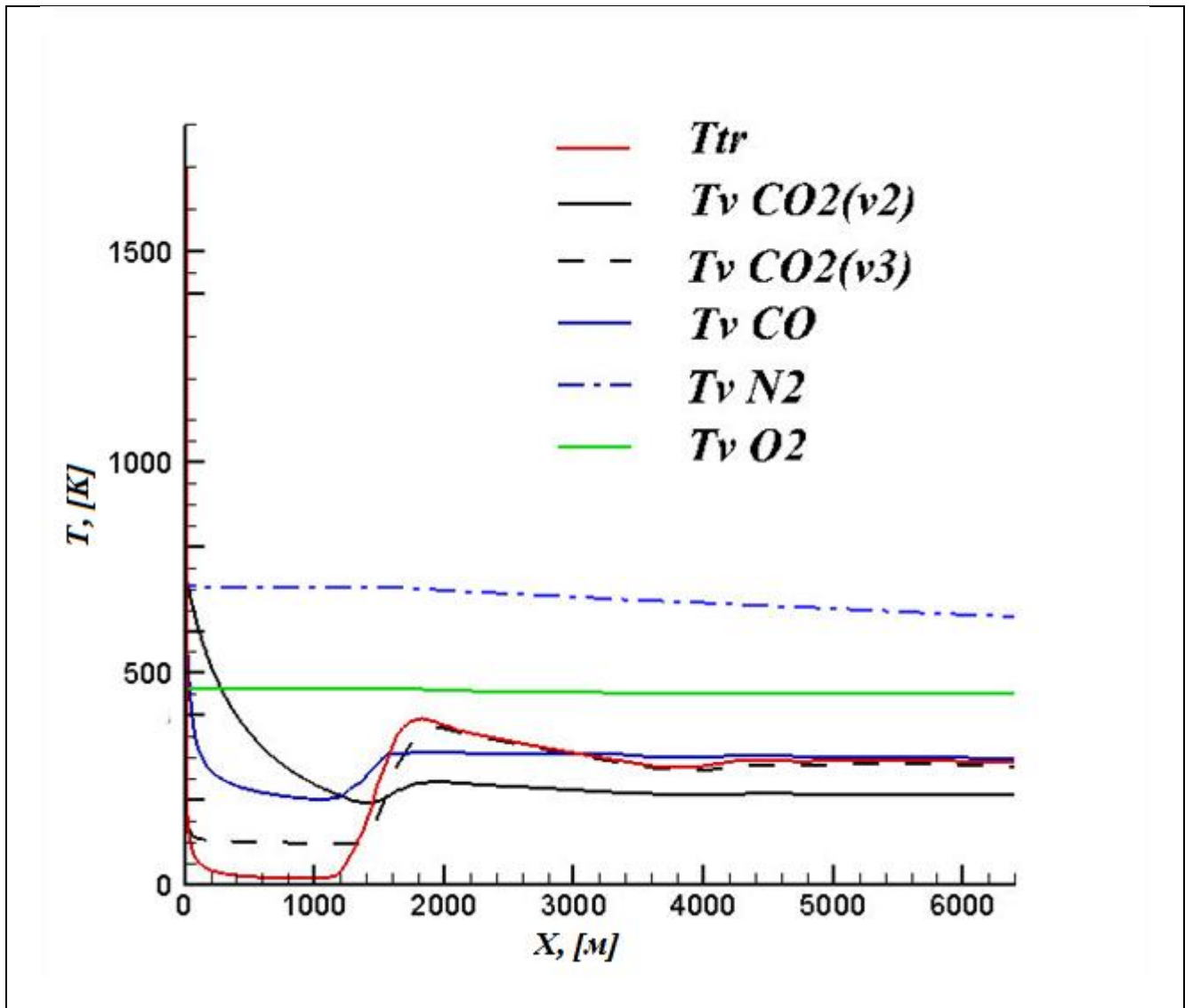


Рисунок 4.19. Твердое топливо. Высота полета 100 км. Осевые температуры:  $T_{tr}$  - поступательно-вращательная и  $T_v$  - колебательные температуры различных мод

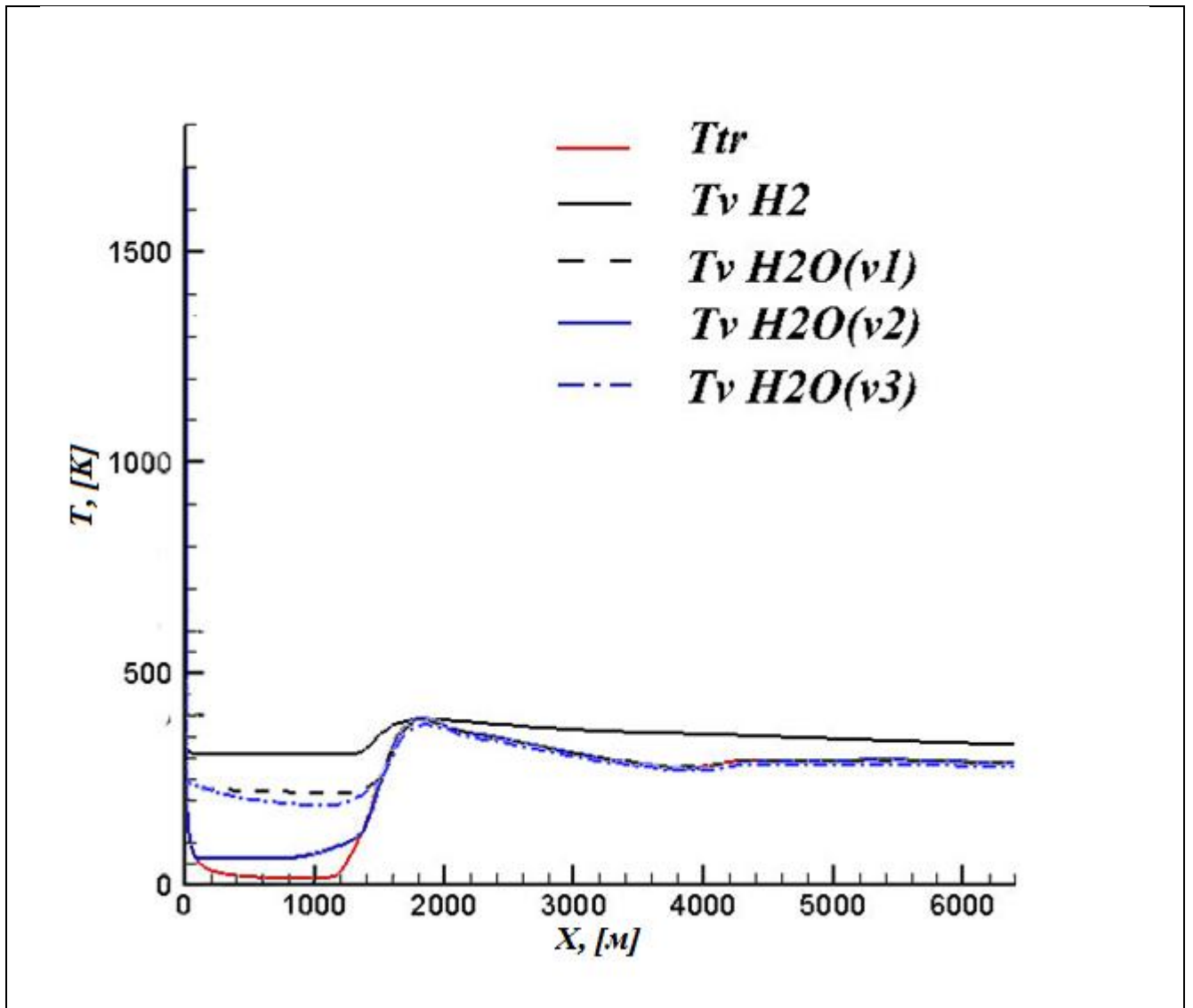


Рисунок 4.20. Твердое топливо. Высота полета 100 км. Осевые температуры:  $T_{tr}$  - поступательно-вращательная и  $T_v$  - колебательные температуры различных мод (продолжение)

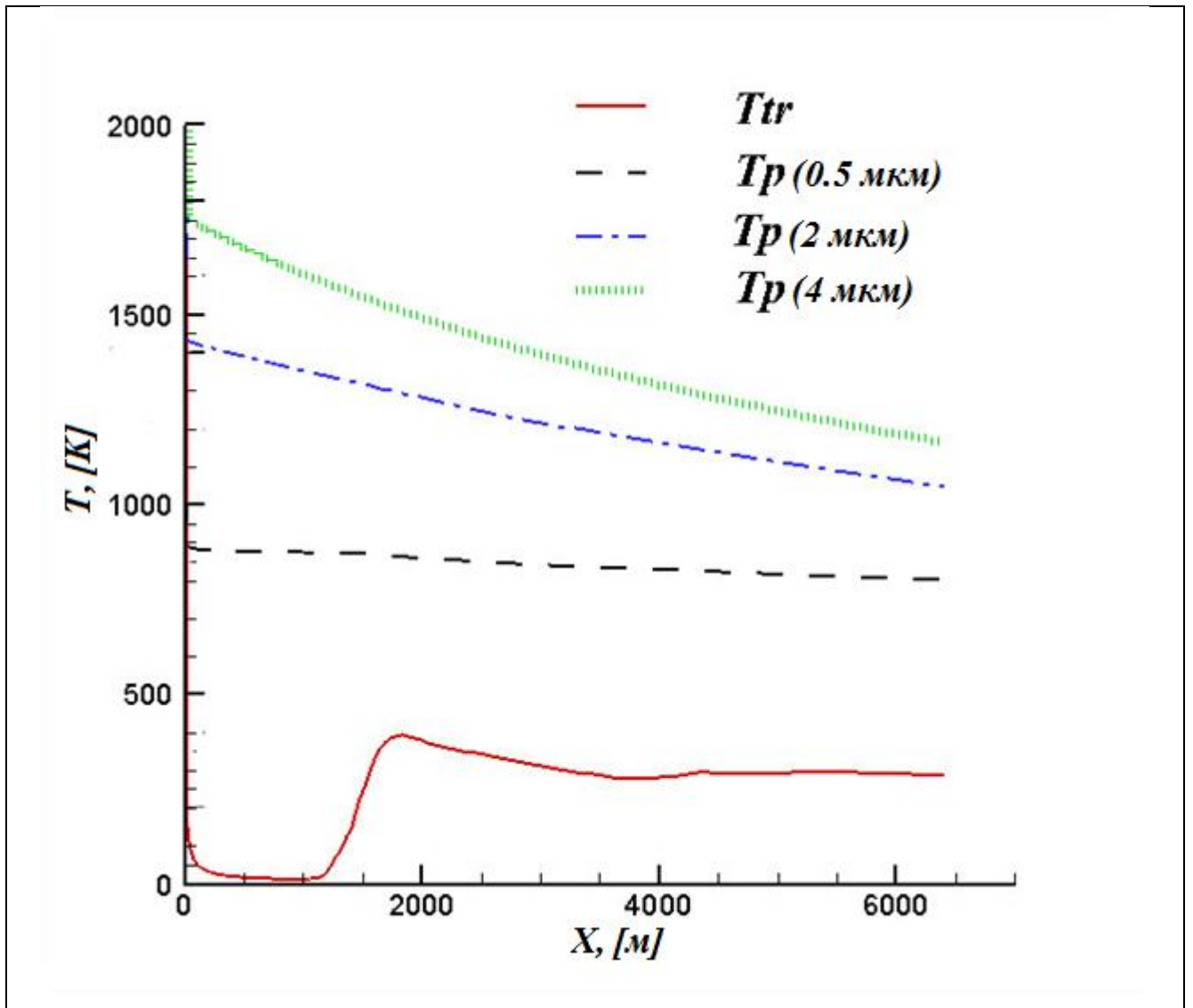


Рисунок 4.21. Твердое топливо. Высота полета 100 км. Осевая температура:  $T_{tr}$  - поступательно-вращательная и  $T_p$  - температуры частиц различного размера.

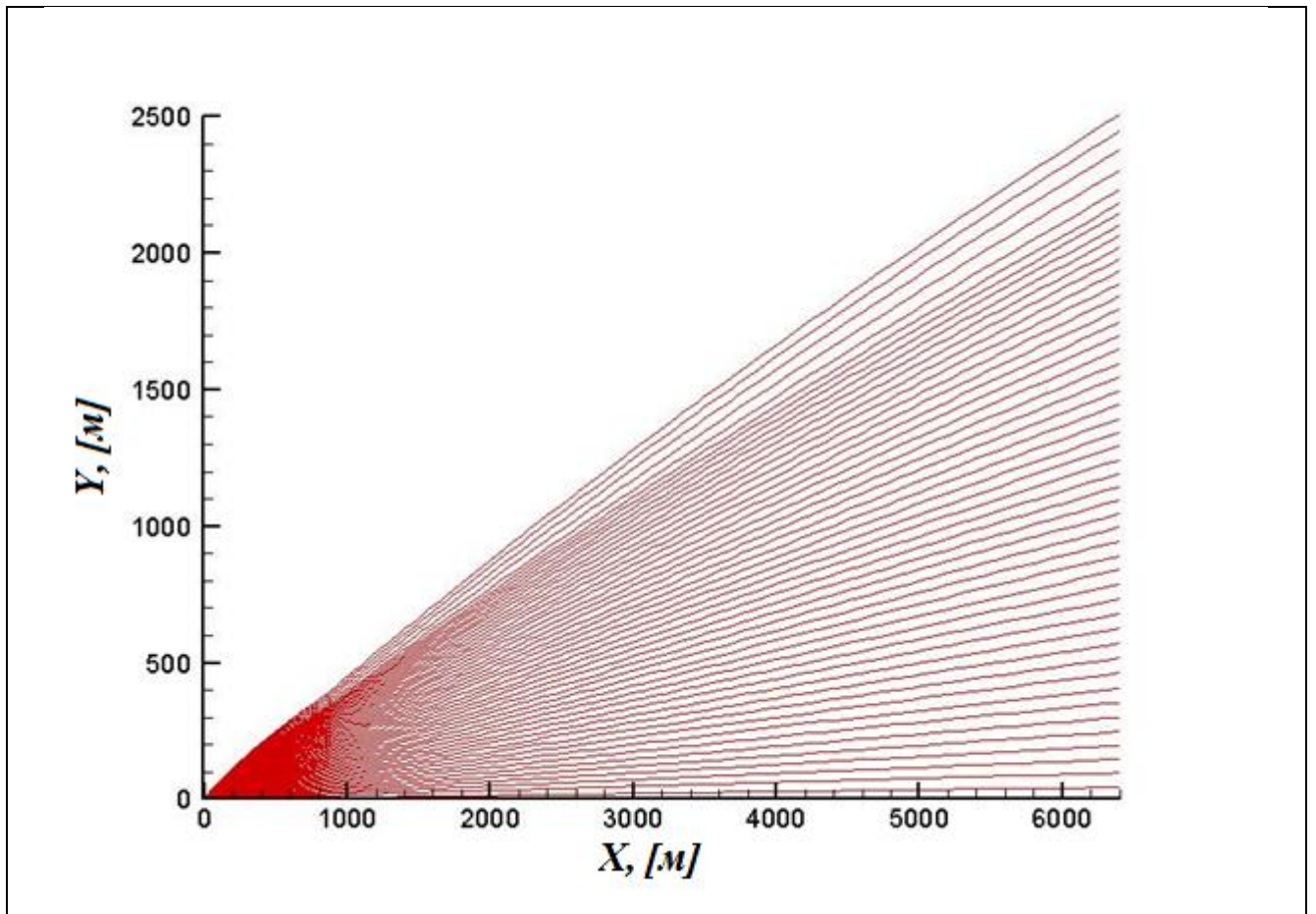


Рисунок 4.22. Твердое топливо. Высота полета 100 км. Траектории частиц размера 0.5 мкм

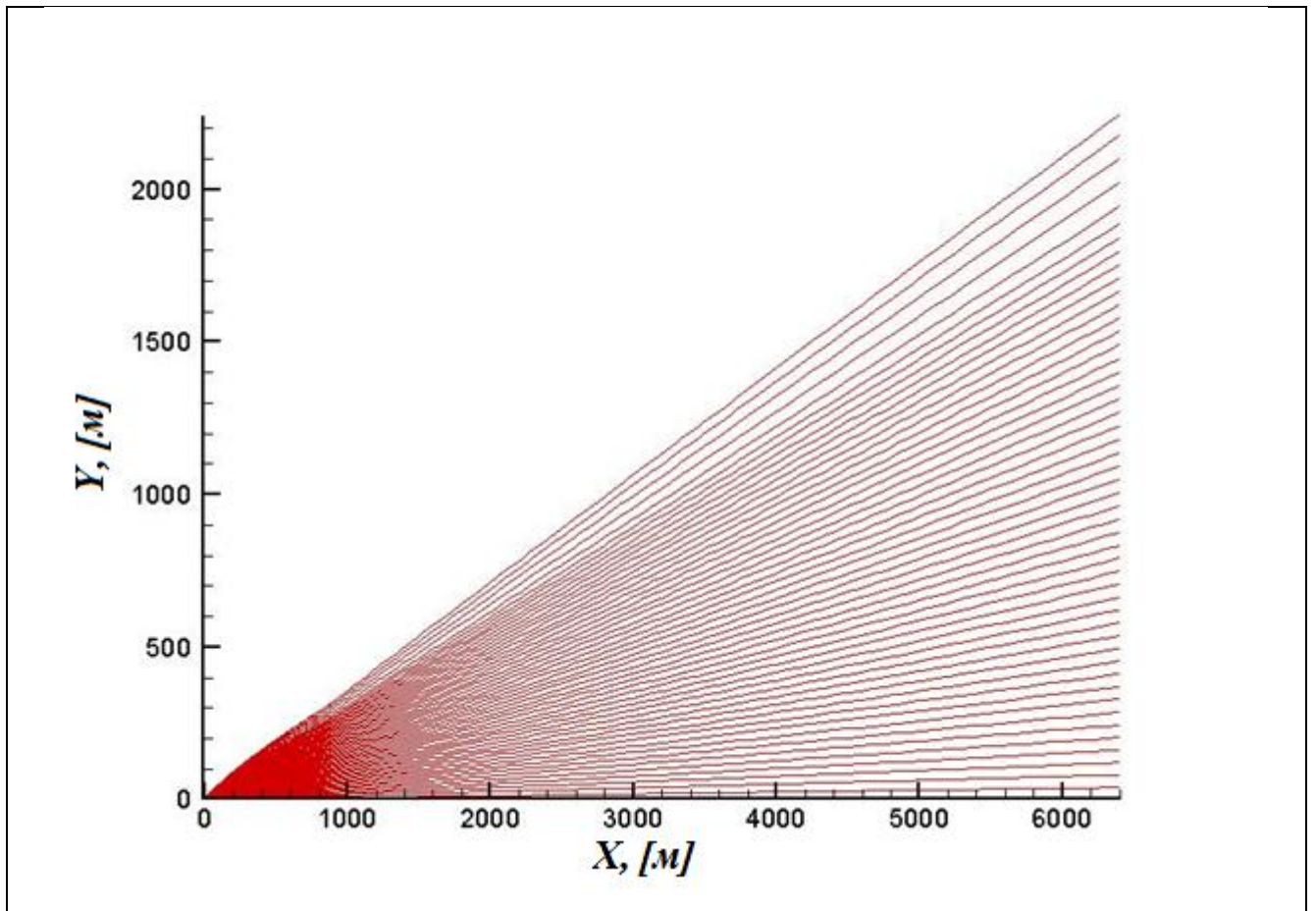


Рисунок 4.23. Твердое топливо. Высота полета 100 км. Траектории частиц размера 4 мкм

Отставание частиц от газа начинает проявляться уже на высоте 30 км и к высоте 100 км ставится весьма существенным.

Колебательная релаксация проявляется более сильно, чем для жидкого и топлива при одинаковых высотах полета.



#### Выводы по разделу 4

Проведены расчеты газодинамических и теплофизических характеристик типичных ракетных двигателей. В результате расчетов получены:

- распределение температуры, давления, концентраций химических компонентов, т.е. тех параметров, которые необходимы для расчета выхлопных струй двигателей;

- распределение поступательно-вращательной температуры, давления, концентраций химических компонентов + колебательных температур и колебательных энергий для различных энергетических мод в струях, т. е. тех параметров, которые необходимы для расчета сигналов от РД в оптическом диапазоне при наличии атмосферы.

При этом рассмотрено 2 типа топлива: типичное жидкое топливо (1 вариант) и типичное твердое топливо (1 вариант).

Показано, что учет полной системы реакций горения водорода важен на переходных режимах (при срыве догорания). При установившемся горении результаты расчета с использованием упрощенной и полной химии практически совпадают.

Отличие колебательных температур от поступательно-вращательной усиливается с ростом высоты полета. На высотах ниже ~50 релаксация практически отсутствует.

Колебательные моды CO, CO<sub>2</sub>(v2), CO<sub>2</sub>(v3), N<sub>2</sub> и O<sub>2</sub> сильно отстают от поступательно-вращательной температуры. Все моды воды в рассмотренном диапазоне высот полета практически совпадают с  $T_{tr}$ .

## Заключение

В диссертационной работе решена важная научная и практическая задача: разработана комплексная модель течения струи с химической и термической неравновесностью. Рассмотрено влияние твердой фазы на процессы в факеле ракетного двигателя. Разработанная модель была реализована в компьютерной программе и проведена её валидация на основе ряда экспериментов.

Наиболее важные результаты, полученные в диссертации:

1. Предложена модификация SST модели турбулентности с учетом влияния высокоскоростной сжимаемости. Учет сжимаемости показал увеличение длины факела ракетного двигателя.

2. Показано, что учет воздействия турбулентных пульсаций на горение проявляется, преимущественно, в задачах воспламенения горючего и срыва догорания в факеле ракетного двигателя. В случае развитого горения влияние турбулентности на химические реакции снижено.

3. Предложена модель воздействия горения на турбулентный перенос энергии и химических компонентов, для расчета которых получены дополнительные уравнения переноса дисперсий энтальпии и концентраций и их диссипаций. Показано, что результаты расчета полей температуры и концентраций при таком подходе могут существенно отличаться от расчетов с использованием постоянных значений турбулентных чисел Прандтля/Шмидта.

4. Показано, что термическая неравновесность проявляется только на высотах более 50 км. С ростом высоты увеличивается различие поступательно-вращательных и колебательных температур различных мод.

5. Проанализирован характер движения частиц твердой фазы в факелах РДТТ на высотах полета от 30 до 100 км для различных размеров частиц от 1 до 6 мкм. Показано, что отставание частиц от газа начинает проявляться уже на

высоте 30 км и к высоте 100 км ставится весьма существенным. На средних высотах для мелких частиц наблюдается образование "кожуха" - большая часть частиц сосредоточена на периферии струи. На больших высотах частицы практически не взаимодействуют с газом и разлетаются по прямым траекториям.

Перспективы дальнейшей разработки тем, рассмотренных в диссертации, заключаются в следующем:

- разработка функции распределения плотности вероятности для параметров потока, без допущения о статистической независимости этих параметров;
- разработка модели течения в LES постановке;
- исследование влияния термической неравновесности на скорости химических реакций;
- исследование влияния турбулентности на процессы колебательно-поступательного энергообмена;
- учет термически неравновесного излучения на процессы, протекающие в высокоскоростных, химически активных струях;
- учет дополнительного тепловыделения, за счет фазовых превращений в частицах конденсированной фазы.

**Список литературы**

1. McBride B.J., Gordon S., Reno M.A., Coefficients for Calculating Thermodynamic and Transport Properties of Individual Species // NASA Technical Memorandum 4513, October 1993.
2. Scalabrin L.C. Numerical Simulation of Weakly Ionized Hypersonic Flow over Reentry Capsules // A dissertation submitted in partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Philosophy (Aerospace Engineering) in The University of Michigan. 2007. 182p.
3. Sutton, K., and Gnoffo, P. A. Multi-component diffusion with application to computational aerothermodynamics // AIAA Paper 1998-2575, 1998.
4. Wilke, C. R. A viscosity equation for gas mixtures // J. of Chem. Phys. 18 1950, 517–519.
5. Blottner, F. G., Johnson, M., and Ellis, M. Chemically reacting viscous flow program for multi-component gas mixtures // SC-RR-70-754, Sandia Laboratories, Albuquerque, New Mexico, 1971.
6. Molchanov A.M. Numerical Simulation of Supersonic Chemically Reacting Turbulent Jets // 20th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference 27-30 June 2011, Honolulu, Hawaii. 2011. AIAA Paper 2011-3211, p. 37.
7. Гардинер У. Химия горения. М.: Мир. 1988. 464 с.
8. Connaire M.O., Curran H.J., Simmie J.M., Pitz W.J., Westbrook C.K. A Comprehensive Modeling Study of Hydrogen Oxidation // International Journal of Chemical Kinetics. 2004. Vol. 36. pp. 603-622.
9. Gilbert, R. G., Luther, K., and Troe, J., Theory of Unimolecular Reactions in the Fall-Off Range. // Ber. Bunsenges. Phys. Chem., Vol. 87, 1983, pp. 169-177.

10. Denison, M. R., Lamb, John J., Bjordahl, William D., Wong, Eric Y., and Lohn, Peter D. Solid rocket exhaust in the stratosphere - Plume diffusion and chemical reactions // *Journal of Spacecraft and Rockets*, 1994, Vol. 31, No. 3, pp. 435-442.
11. Ay J. H., Sichel M. Theoretical Analysis of NO Formation Near The Primary Reaction Zone in Methane Combustion // *Combustion and flame*, 1976, 26, pp.1-15.
12. Лепихов А. В. Упрощенная кинетическая схема горения смеси RP-1/O<sub>2</sub> для CFD-расчетов ракетных двигателей // *Физико-химическая кинетика в газовой динамике*. 2016. Т.17, № 1. С. 10-21.
13. Wang T. Thermophysics Characterization of Kerosene Combustion // *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*. 2001. Vol. 15, No. 2. pp. 140–147.
14. Choi J. A Quasi Global Mechanism of Kerosene Combustion for Propulsion Applications // *47th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit, Joint Propulsion Conferences*.
15. Favre A. Turbulence: space-time statistical properties and behavior in supersonic flows // *Physics of Fluids*.1983. № 23. PP. 2851-2863.
16. Молчанов А.М. Математическое моделирование задач газодинамики и тепломассообмена. М.: МАИ, 2013. 206 с.
17. Launder B., Reece G. J., Rodi W. Progress in the Development of a Reynolds Stress Turbulence Closure // *Journal of Fluid Mechanics*. 1975. № 68. PP. 537 - 566
18. Молчанов А.М. Математическое моделирование гиперзвуковых гомогенных и гетерогенных неравновесных течений при наличии сложного радиационно-конвективного теплообмена. М.: МАИ, 2017. 159 с.
19. 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.

20. Wilcox D.C. Reassessment of the Scale Determining Equation for Advanced Turbulence Models // AIAA Journal. 1988. Vol. 26. No. 11. pp. 1299–1310.
21. Menter F.R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications // AIAA Journal. 1994. Vol. 32. No. 8. pp. 269–289.
22. Menter F.R. Zonal Two Equation  $k-\omega$  Turbulence Models for Aerodynamic Flows // AIAA Paper. 1993. Vol. 93.
23. Кольман В. Методы расчета турбулентных течений. М.: Мир, 1984. 464 с.
24. Beguier C., Dekeyser I., Launder B. E., Ratio of scalar and velocity dissipation time scales in shear flow turbulence // Phys. Fluids. 1978. No. 21. pp. 307-319.
25. Kollmann W. Prediction methods for turbulent flows. Hemisphere Pub. Corp. Washington. 1980. 468 p.
26. Sanders J.P.H., Gökalp I. Scalar dissipation rate modelling in variable density turbulent axisymmetric jets and diffusion flames // Physics of Fluids. 1998. No. 10. pp. 938–948.
27. Jones W.P., Musonge P. Closure of the Reynolds stress and scalar flux Equations // Physics of Fluids. 1988. No. 31. pp. 3589–3604.
28. Майков И. Л. Исследование процессов гидродинамики и химической кинетики методами математического моделирования: Дис. д-ра физико-математических наук: Москва 2007. стр. 220. Специальность: Механика жидкости, газа и плазмы.
29. Bilger R. W. The Structure of Diffusion Flames // Combustion Science and Technology. 1976. Vol. 13. pp. 155-170.

30. Pope S. B. Pdf Methods for Turbulent Reactive Flows // Progress in Energy and Combustion Science. 1985. Vol. 11. pp. 119-192.
31. Subramaniam S. and Haworth D.C. A probability density function method for turbulent mixing and combustion on three-dimensional unstructured deforming meshes. // International Journal of Engine Research. 2000. Vol. 1. pp. 171-190.
32. Gaffney R. L. et al. Modeling Temperature and Species Fluctuations in Turbulent, Reacting flows // Computing Systems in Engineering. 1994. Vol. 5. pp. 117-133.
33. Baurle R. A., Girimaji S. S. Assumed PDF Turbulence-Chemistry Closure with Temperature-Composition Correlations // Combustion and Flame. 2003. Vol. 134. pp. 131–148.
34. Lockwood F. C., Naguib A. S. The Prediction of the Fluctuations in the Properties of Free, Round-Jet, Turbulent Diffusion Flames // Combustion and Flame. 1975. Vol. 24. pp. 109-124.
35. Girimaji S. S. A Simple Recipe for Modeling Reaction-Rate in Flows with Turbulent-Combustion // AIAA Paper. 1991. Vol. 91. pp. 8-21.
36. Molchanov, Alexander M. Термофизика И Динамика Жидкости И Газа. Специальные Главы. OSF Preprints. 6 Feb. 2019.
37. Evans J.S., Schexnayder C.J., Beach H.J., Application of a Two-Dimensional Parabolic Computer Program to Prediction of Turbulent Reacting Flows // NASA Technical Report. 1978. NASA TP Vol. 1169. 56p.
38. Sarkar S.; Erlebacher G., Hussaini M. Y., Kreiss H. O. The Analysis and Modeling of Dilatational Terms in Compressible Turbulence // Journal of Fluid Mechanics. 1991. Vol. 227. pp. 473– 493.

39. Burrows M. C., Kurkov A. P. Analytical and Experimental Study of Supersonic Combustion of Hydrogen in a Vitiated Airstream // NASA Technical Report. 1973. p. 34.
40. Calhoon W.H. Jr. Computational Assessment of Afterburning Cessation Mechanisms in Fuel-Rich Rocket Exhaust Plumes // Journal of propulsion and power. 2001. Vol. 17. pp. 111-119.
41. Vyas M.A., Engblom W. A., Georgiadis N.J., Trefny C. J., Bhagwandin V. A., Numerical Simulation of Vitiation Effects on a Hydrogen-Fueled Dual-Mode Scramjet // AIAA Paper. 2010. July 2010.
42. Lewis B., von Elbe G. Combustion, Flames and Explosions of Gases. 2nd ed. Academic. New York. 1961.
43. Andrews G.E., Bradley D., Lwakabamba S.B. Combust. Flame 1975. Vol. 24. pp. 285-304.
44. Williams F.A. Combustion Theory. Addyson-Wesley. Reading. Mass. 1965.
45. Abdel-Gayed R., Bradley D. In Sixteenth Symposium (International) on Combustion // The Combustion Institute, Pittsburgh, 1977, pp. 1725-1735.
46. Libby A., Williams F.A. Annu. Rev // Fluid Mech. 1976. Vol. 8. pp. 351-376.
47. Белоглазов Б.П., Гиневский А.С. Расчет ламинарных спутных струй с точным удовлетворением условия постоянства избыточного импульса // Ученые записки ЦАГИ. 1974. Т. 5, №4. С. 10–19.
48. Любимов Д.А. Возможности использования прямых методов для численного моделирования турбулентных струй // Аэромеханика и газовая динамика. 2003. №3. С. 14–20.
49. De Bonis J.R. The numerical analysis of a turbulent compressible jet // NASA Technical Report. 2001. No. TM-2001-210716.
50. Freund J.B. Noise sources in a low-Reynolds-number turbulent jet at Mach 0.9 // Journal of Fluid Mechanics. 2001. V. 438. P. 277–305.



51. Freund J.B., Lele S.K., Moin P. Numerical simulation of a Mach 1.92 turbulent jet and its sound field // AIAA Journal. 2000. V. 38, No. 11. P. 2023–2039.

52. Tsujimoto K., Shakouchi T., Sasazaki S., Toshihake A. Direct numerical simulation of jet mixing control using combined jets // Proc. of International Conf. on Jets, Wakes and Separated Flows (ICJWSF-2005), 5–8 October 2005, Toba-shi, Mie, Japan.

53. Watanabe D., Maekawa H., Matsuo Y. Supersonic plane jet at high convective Mach number // Proc. of International Conf. on Jets, Wakes and Separated Flows (ICJWSF-2005), 5–8 October 2005, Toba-shi, Mie, Japan

54. Magnussen P., Investigations into the reacting structures of laminar and premixed turbulent flames by laser-induced fluorescence. Ph.D. Thesis, Dept. of Applied Mechanics, Thermodynamics and Fluid Dynamics. Norwegian University of Science and Technology. Trondheim. Norway. 2005

55. Tichy F. Laser-based measurements in non-premixed jet flames. Ph.D. Thesis, Dept. of Applied Mechanics. Thermodynamics and Fluid Dynamics. Norwegian University of Science and Technology. Trondheim. Norway. 1997.

56. Ширяева А.А. Моделирование высокоскоростных течений со смешанными режимами турбулентного горения на основе трехмерных уравнений Рейнольдса: Дис. канд физико-математических наук 2018 стр. 217. Специальность: Механика жидкости, газа и плазмы.

57. Magnussen B. On The Structure Of Turbulence and a Generalized Eddy Dissipation Concept for Chemical Reaction in Turbulent Flow // 19<sup>th</sup> AIAA Aerospace Science Meeting. St. Louis. USA. 1981.

58. Magnussen B. The Eddy Dissipation Concept a Bridge Between Science and Technology // ECCOMAS Thematic Conference on Computational Combustion. Lisbon. Portugal. 2005.

59. Chomiak, J. Basic Considerations in the Turbulent Flame Propagation in Premixed Gases // Prog. Energy Combust. Sci. 1979. Vol. 5, pp 207-221.

60. Chomiak J., Karlsson A. Flame Liftoff in Diesel Sprays // Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute. 1996. pp. 2557–2564.
61. Moule Y. Modelisation et Simulation de la Combustion dans les Ecoulements Rapides. Applications aux Superstatorreacteurs. Ph.D. Thesis. 2006. 196 p.
62. Moule Y., Sabelnikov V., Mura A. Modelling of Self-Ignition Processes in Supersonic Non Premixed Coflowing Jets Based on a PaSR Approach // 17th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conference. AIAA Paper. 2011. 9 p.
63. Moule Y., Sabelnikov V., Mura A. Highly resolved numerical simulation of combustion in supersonic hydrogen-air coflowing jets // Combustion and Flame. 2014. Vol. 161. № 10. P. 2647-2668.
64. Lundgren, T.S. Phys. Fluids. 1969. 485 p.
65. Dopazo C., O'Brien, E.E. Acta astronaut. I, 1974. 1239 p.
66. Dopazo, C., O'Brien, E.E. Phys. Fluids 17. 1968.
67. Dopazo, C., O'Brien, E.E. Combust. Sci. Technol. 13. 99. 1976.
68. Pope, S.B. Combust. Flame 27. 1976. 299 p.
69. Spalding, D.B., Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames // Thirteenth Symposium on Combustion. 1971. Combustion Institute. p. 649.
70. Pope, S.B. Computations of Turbulent Combustion: Progress and Challenges // Twenty-Third Symposium (International) on Combustion. 1990. The Combustion Institute, pp. 591-612.
71. Gaffney R.L., Jr., White J.A., Girimaji S.S., Drummomd J.P., Modeling Turbulent/Chemistry Interactions Using Assumed PDF Methods // 28th Joint Propulsion Conference and Exhibit 1992. Nashville.

72. Girimaji S.S., Assumed  $\beta$ -pdf Model for Turbulent Mixing: Validation and Extension to Multiple Scalar Mixing // *Combust. Sci. and Tech.* 1991. Vol. 78. pp. 177-196.
73. Nagano Y., Kim C., A Two-Equation Model for Heat Transport in Wall Turbulent Shear Flows // *Journal of Heat Transfer.* 1988. Vol. 110. pp. 583-589.
74. Sommer T. P., So R. M. C., Zhang H. S., Near-Wall Variable-Prandtl-Number Turbulence Model for Compressible Flows // *AIAA Journal.* Vol. 31. pp. 27-35.
75. Gokulakrishnan P., Pal S., Klassen M. S., Hamer A. J., Roby R. J., Kozaka O., and Menon S., Supersonic Combustion Simulation of Cavity-Stabilized Hydrocarbon Flames using Ethylene Reduced Kinetic Mechanism // *AIAA Paper 2006-5092.* 2006.
76. Xiao X., Edwards J. R., Hassan H. A., and Gaffney R. L., Role of Turbulent Prandtl Number on Heat Flux at Hypersonic Mach Numbers // *AIAA Paper 2005-1098,* 2005.
77. Keislter P.G. A Variable Turbulent Prandtl and Schmidt Number Model Study for Scramjet Applications. PhD Dissertation. Raleigh. NC. 2009.
78. Lau J.C., Morris P.J., Fisher M.J. Measurements in subsonic and supersonic free jets using a laser velocimeter // *Journal of Fluid Mechanics.* 1979. Vol. 63. part 1. pp. 1-27.
79. Krasotkin V.S., Myshanov A.I., Shalaev S.P., Shirokov N.N., Yudelovich M.Ya. Investigation of supersonic isobaric submerged turbulent jets // *Fluid Dynamics.* 1988. Vol. 23. No. 4. pp. 529-534.
80. Glassman I., John E.A.J. An unusual aerodynamic stagnation-temperature effect // *Journal Aerospace Science.* 1959. Vol. 26. p. 387.

81. Molchanov Alexander M. Three-Equation  $K$ - $\varepsilon$ - $V_n$  Turbulence Model for High-Speed Flows. // 43rd Fluid Dynamics Conference, Fluid Dynamics and Co-located Conferences. — 2013 (AIAA 2013-3181). — 30 pages.

82. Chauveau C., Davidenko D. M., Sarh B., Gökalp I., Avrashkov V., Fabre C., PIV Measurements in an Underexpanded Hot Free Jet // 13th Int Symp on Applications of Laser Techniques to Fluid Mechanics. 2006. No.1161. pp. 1-12.

83. Klavhun K.G., Gauba G., McDaniel J. C. OH Laser-Induced Fluorescence Velocimetry Technique for Steady, High-Speed, Reacting Flows // Journal of Propulsion and Power. 1994. Vol. 10. No. 6. pp. 787-797.

84. Sumi I., Kishimoto Y., Kikichi Y., Igarashi, H. Effect of high temperature field on supersonic oxygen jet behavior // ISIJ International 2006. Vol. 46. pp.1312-1317.

85. Peters N. Laminar flamelet concepts in turbulent combustion // Symposium (International) on Combustion. 1988. Vol. 21. № 1. pp. 1231–1250

86. Murthy S. N. B. Turbulent Mixing in Nonreactive and Reactive Flows // Springer. 1975. pp. 189–208.

87. Peters N. Laminar flamelet concepts in turbulent combustion // Symposium (International) on Combustion. 1988. Vol. 21. № 1. P. 1231–1250.

88. Козлов В.Е., Лебедев А.Б., Секундов А.Н., Якубовский К.Я. Моделирование скорости турбулентного гомогенного горения на основе "квазиламинарного" подхода // Теплофизика высоких температур. 2009. том 47. № 6. с. 946-953.

89. Кузнецов В.Р., Сабельников В.А. Турбулентность и горение. М.: Наука. 1986. 288 с.

90. Секундов А.Н., Чепрасов С.А., Якубовский К.Я. Сопоставление результатов моделирования полей СО на фронте пламени методами RANS и LES // Теплофизика высоких температур. 2015. том 53. № 5. с. 747–751.

91. Zimont V.L. Gas Premixed Combustion at High Turbulence. Turbulent Flame Closure Combustion Model // *Experimental Thermal and Fluid Science*. 2000. V. 21. № 1-3. pp. 179.
92. Shiryaeva A, Anisimov K Development and application of numerical technology for simulation of different combustion types in high-speed viscous gas turbulent flows // 6th European conference for aeronautics and space sciences (EUCASS 2015), Kraków, 2015, 14 p.
93. Белов И.А. Модели турбулентности. Л.: Изд-во ЛМИ, 1986.
94. Ермишина А.В., Исаева С.А. Управление обтеканием тел с вихревыми ячейками в приложении к летательным аппаратам интегральной компоновки (численное и физическое моделирование). М.: Изд-во МГУ. 2001. 198 с.
95. Launder B.E., Spalding D.B. The numerical computation of turbulent flows // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 1974. V. 3, No. 2. pp. 269-289.
96. Nallasam M. Survey of turbulence models for the computation of turbulent jet flow and noise // *NASA Technical Report*. 1999. No. CR-1999-206592.
97. Pope S.B. An explanation of the turbulent round-jet/plane-jet anomaly // *AIAA Journal*. 1978. V. 16, No. 3. P. 279–281.
98. Абрамович Г.Н., Крашенинников С.Ю., Секундов А.Н., Смирнова И.П. Турбулентное смешение газовых струй. М.: Наука, 1974.
99. Абрамович Г.Н., Гиршович Т.А., Крашенинников С.Ю., Секундов А.Н., Смирнова И.П. Теория турбулентных струй. М.: Наука, 1984.
100. Козлов В.Е., Любимов Д.А., Секундов А.Н., Спаларт Ф.Р. Трансверсальное распространение турбулентности в пограничном слое // *Изв. АН СССР. МЖГ*. 1998. № 3. С.77-84.

101. Берч С.Ф., Лебедев А.Б., Любимов Д.А., Секундов А.Н. Моделирование трехмерных струйных и пограничных течений. // Изв. РАН. МЖГ. 2001. №5. С. 48-63.
102. McLean J.D., Козлов В.Е., Любимов Д.А., Секундов А.Н., Якубовский К.Я. Сопротивление и особенности течения около небольших уступов, погруженных в турбулентный пограничный слой. // Аэромеханика и газовая динамика. 2002. №2. С. 16-30.
103. Козлов В.Е., Лебедев А.Б., Любимов Д.А., Секундов А.Н. Некоторые особенности турбулентного течения в кромочном вихре. // Изв. РАН. МЖГ. 2004. №1. С. 78-85.
104. Секундов А.Н., Лебедев А.Б., Любимов Д.А. Некоторые проблемы описания сложных турбулентных течений с помощью двухпараметрических моделей. «Проблемы современной механики: к 85-летию со дня рождения академика А.А. Черного. [Сборник]. Под ред. А.А. Бармина. М.: Изд-во Моск. Унта; Изд-во «Омега-Л», 2008. – 639с. С.492-507.
105. Любимов Д.А., Секундов А.Н. Применение элементов прямого численного моделирования для анализа влияния геометрии сопла и режима истечения на характеристики турбулентности околосвуковых выхлопных струй // Труды ЦИАМ № 1341.
106. Крашенинников С.Ю. Теоретическая и прикладная газовая динамика. Т.1. М., Торус пресс. 2010. С. 149-170.
106. Pitsch H., Chen M., Peters N. Unsteady flamelet modeling of turbulent hydrogen-air diffusion flames // Twenty-Seventh Symposium on Combustion. The Combustion Insititute. 1998. pp. 1057–1064.
107. Sabel'nikov V., Deshaies B., Figueira da Silva L.F. Revisited Flamelet Model for Nonpremixed Combustion in Supersonic Turbulent Flows // Combustion and Flame. 1998. Vol. 114. № 3–4. pp. 577–584.

108. Кузнецов В.Р., Лебедев А.Б., Секундов А.Н., Смирнова И.П. Расчет турбулентного диффузионного факела горения с учетом пульсаций концентрации и архимедовых сил // Известия Академии наук СССР. Механика жидкости и газа. 1977. с. 32-40.

109. Buriko Y.Y, Kuznetsov V.R., Volkov D.V., Zaitsev S.A., Uryvsky A.F. A test of a Flamelet model for turbulent nonpremixed combustion // Combustion and flame. 1994. Vol. 96. No. 1-2. pp. 104-120.

110. Kuznetsov V.R. Influence of turbulence on the formation of high nonequilibrium concentrations of atoms and free radicals in diffusion flames // Fluid Dynamics. 1982. Vol. 17. No. 6. pp. 815-820.

111. Бурико Ю.Я., Кузнецов В.Р. Образование окислов азота в неравновесном диффузионном пламени // Физика горения и взрыва. 1983. № 71.

112. Чёрный Г.Г., Лосев С.А. (ред.) Физико-химические процессы в газовой динамике. Справочник. Том 2: Физико-химическая кинетика и термодинамика. Москва: Научно-издательский центр механики, 2002. 368 с.

113. Молчанов А. М., Тушканов А. С. Расчет излучения от факела ракетного двигателя с использованием метода  $k$ -распределения // Тепловые процессы в технике. 2017. Т.10. №9. С. 392–396.

114. Молчанов А.М., Янышев Д.С., Тушканов А.С. Влияние турбулентности на скорости химических реакций // Тепловые процессы в технике. 2019. Т.11. №2. С. 61–68.

115. Молчанов А.М., Янышев Д.С., Тушканов А.С. Влияние турбулентности на скорости химических реакций в высокоскоростных потоках // Видеосеминар по аэромеханике ЦАГИ-ИТПМ СО РАН-СПбПУ-НИИМ МГУ-ОИВТ РАН, 5.09.2017 <http://www.tsagi.ru/pressroom/events/seminars/videoseminar-aeromekh/05.09.2017/> (дата обращения 04.10.2019).