

УДК 544.45

Анализ факторов, определяющих структуру численного решения при расчете течения с горением в экспериментальной модели ONERA *

В. Лю

Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Московская обл.

Email: v.lyu@phystech.edu

Выполнено трехмерное численное моделирование вдува поперечной струи водорода в канал со сверхзвуковым потоком воздуха, нагретого огнем подогревателем, основанное на экспериментальных данных, полученных на установке ONERA-LAERTE. Исследование проведено с использованием RANS-уравнений для реагирующего газа, замкнутых моделью SST и различными кинетическими механизмами горения водорода в воздухе с учетом шероховатости стенок канала. Изучена зависимость характеристик течения от таких физических факторов, как форма канала инжектора топлива, эффективная высота шероховатости, различные способы описания молекулярной диффузии. Установлено, что эквивалентный диаметр песчинки оказывает большое влияние на продольное распределение давления в канале. Показано влияние химической кинетики на структуру течения в отрывных зонах в канале.

Ключевые слова: сверхзвуковое течение, горение, канал, шероховатость, кинетический механизм.

Введение

Организация устойчивого и эффективного сжигания топлива в канале со сверхзвуковым потоком воздуха на входе представляет собой чрезвычайно сложную проблему, для решения которой требуется глубокое понимание физических процессов, протекающих в таких потоках. Начиная с середины XX века, во всем мире ведутся теоретические и экспериментальные исследования указанных течений.

Объем данных по горению в высокоскоростном потоке в открытых источниках весьма ограничен. Анализ классических экспериментов с предельно упрощенной постановкой задачи [1 – 3] показал значительные недостатки и нехватку информации в опубликованных данных [4]. Бóльшее количество экспериментальных работ посвящено исследованиям течений в модельных высокоскоростных энергетических устройствах (см., например, [5 – 12]). Несмотря на высокое качество многих работ, сложная геометрия экспериментальной модели, использование устройств для инжекции топлива и стабилизации горения (пилоны, ступеньки, каверны и пр.) приводят к взаимодействию многих

* Работа выполнена при финансовой поддержке Китайского стипендиального совета (договор № 201606120286).

разномасштабных эффектов, затрудняющих валидацию математических моделей горения.

Расширяющийся канал с поперечным впрыском топлива представляет собой простейшую конструкцию экспериментальных моделей со сверхзвуковым горением [13–15]. Впрыскиваемое топливо создает сложную вихревую структуру, включающую такие физические процессы, как отрыв потока, взаимодействие пограничного слоя и ударной волны, а также взаимодействие ударных волн. Высота проникновения струи сильно зависит от соотношения давлений торможения в набегающем потоке и в струе [16]. Для такого типа конструкций температура торможения набегающего потока обычно выше температуры самовоспламенения топлива, поэтому дополнительное оборудование для розжига не требуется. Серия физических экспериментов с детальным исследованием рассматриваемых течений была проведена в французской аэрокосмической лаборатории (ONERA) на установке ONERA-LAERTE [17, 18]. Помимо фиксации распределений давления по стенкам канала, в экспериментах проводились оптические наблюдения через окна, расположенные по всей длине канала. Измерения включали как высокоскоростную ширен-видеосъемку структуры течения, так и видеорегистрацию хемилюминесценции возбужденных радикалов.

Ранее автором были подготовлены два варианта химической кинетики [19] для включения в собственную программу ЦАГИ zFlare [20]. Моделирование течения в экспериментальной установке ONERA-LAERTE с использованием этих кинетических схем показало, что распределения массовых долей активных радикалов на входе в канал экспериментальной модели существенно зависят от кинетической схемы [21]. Также было установлено, что теплообмен на стенках канала оказывает большое влияние на структуру течения и характеристики горения. В работе [22], выполненной в ONERA, была показана необходимость учета шероховатости стенок канала. Это было подтверждено в RANS- и LES-расчетах данного эксперимента, проведенных в Лаборатории физического и численного моделирования течений с турбулентностью и горением (Лаборатория JetSim) ЦАГИ [23] при помощи программы zFlare [24].

Представленное исследование сосредоточено на оценке зависимости получаемых в расчете распределений параметров потока от таких физических факторов, как форма канала инжектора топлива, высота шероховатости стенок канала, обсуждаются различные способы описания молекулярной диффузии. Особое внимание уделяется изучению влияния используемого в расчете механизма химической кинетики. Поскольку процесс горения в основном характеризуется выделением тепла, химическая кинетика может играть важную роль в формировании структуры течения в канале экспериментальной модели. В отличие от работ [21, 22, 24], настоящие расчеты выполнены автором при помощи коммерческого пакета вычислительной аэродинамики ANSYS FLUENT [25].

Постановка задачи

Модельный канал устанавливался на выходе из сопла Лавалья, разгоняющего поток до числа Маха 2. Входное сечение сопла Лавалья было стыкована с огневым подогревателем воздуха, в котором для достижения высокой температуры торможения сначала выполнялся подогрев потока омическим подогревателем, а затем дополнительно осуществлялось сжигание водорода. При этом поток обогащается кислородом таким образом, чтобы массовая доля кислорода после сжигания водорода в подогревателе была близка к массовой доле кислорода в воздухе. Результаты моделирования течения в подогревателе и сопле Лавалья можно найти в статье [21].

Геометрия канала экспериментальной модели показана на рис. 1. Канал имел постоянную боковую ширину 0,04 м. Все его сечения были прямоугольной формы. Входное сечение канала, продольная координата которого составляла $x = 0,065$ м, имело высоту 0,0354 м. Расчетная сетка для описания течения в канале состояла из 128 блоков. В расчетах к концу канала был добавлен дополнительный расширяющийся буферный участок, чтобы исключить влияние выходных граничных условий на поле течения.

Топливо (водород) вдувалось перпендикулярно потоку через два отверстия диаметром 2 мм в верхней и нижней стенках, выполненных на вертикальной плоскости симметрии канала в сечении $x = 0,2$ м. Места инъекции показаны на рисунке стрелками.

Эксперименты на стенде проводились при различных условиях работы. Для данного численного исследования было выбрано одно из них, соответствующее варианту «Case B» в работе [22]. В этом режиме наблюдалось сверхзвуковое горение, индуцированное ударными волнами. Для получения данного режима на входе в подогреватель задавалось постоянное по сечению полное давление $p_0 = 4,07$ бар, параболический профиль температуры торможения, аппроксимирующий данные эксперимента [18], и равновесный состав смеси водорода, кислорода и азота в пропорции 0,019:0,396:0,585 по массе. На оси симметрии температура торможения была максимальна и составляла $T_0 = 1705$ К, а у стенок $T_0 = 1490$ К (стенки подогревателя охлаждались водой). Течение в подогревателе рассчитывалось с учетом реакций с пероксидами (см. [21]). Полученные в расчетах подогревателя поля течения использовались на входе в экспериментальную модель ONERA в качестве входного граничного условия во всех описанных ниже расчетах независимо от выбранной модели химической кинетики. Статическое давление, статическая температура, массовые доли компонентов смеси и число Маха на оси симметрии канала приведены в табл. 1. Этим параметрам соответствует число Рейнольдса $Re_H \approx 165\,620$, посчитанное по высоте канала. Характерная толщина пограничных слоев во входном сечении канала $\delta/H \approx 0,054$. Так же как в исследовании [9], на входе в канал экспериментальной модели массовый расход воздуха, содержащего продукты сгорания в подогревателе, был равен 303,34 г/с. Инжекция топлива в этом режиме эксперимента соответствовала коэффициенту избытка топлива 0,153 [24]. Таким образом, массовый расход инжектируемого со стенок водорода был равен 0,7194 г/с.

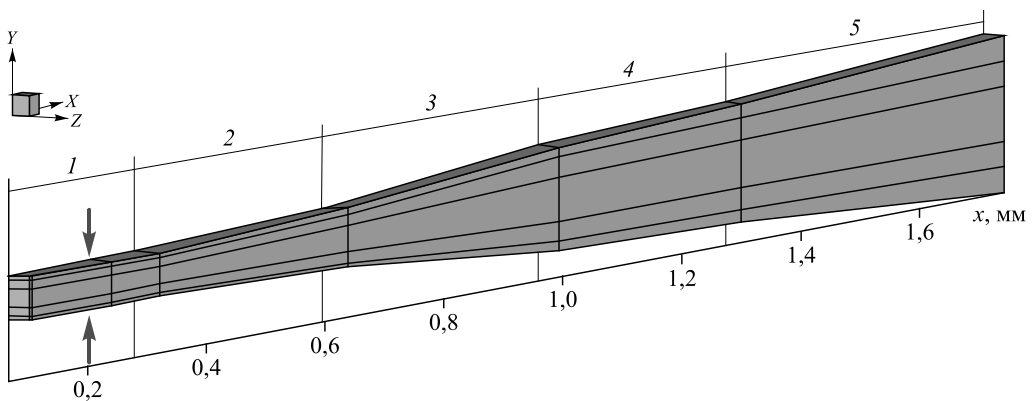


Рис. 1. Геометрия канала и схема блочной структуры расчетной сетки.

Стрелки — подача топлива; 1 — участок постоянного сечения, 2 — участок с расширением 2° ,
3 — участок с расширением 6° , 4 — участок с расширением 2° ,
5 — расширяющийся буферный участок со скольжением.

Таблица 1
Параметры на входе в канал
и параметры инжекции водорода

Параметры	Вход в канал (ось симметрии канала)	Инжектор водорода
P , Па	53979,36	204439,68
T , К	1070,83	250,81
Y_{H_2}	$4,25 \cdot 10^{-7}$	1
Y_{O_2}	0,248	0
Y_{H_2O}	0,167	0
Y_H	$1,24 \cdot 10^{-4}$	0
Y_{OH}	$1,4 \cdot 10^{-4}$	0
Y_O	$2,22 \cdot 10^{-5}$	0
Y_{N_2}	0,5848	0
M	1,97695	0,98286

Попытка измерить температуру стенок модели, предпринятая в эксперименте [18], не увенчалась успехом. В настоящей работе температура стенок канала была принята постоянной и равной 716 К. Как отмечалось в работе [24], это значение было рекомендовано авторами расчетов ONERA [22]. Оно согласуется с оценкой прогрева стенок модели в ходе эксперимента, выполненной в лаборатории JetSim ЦАГИ.

В расчетах использовались стационарные осреднённые по Рейнольдсу уравнения Навье–Стокса (RANS) для реагирующего газа с шероховатостью стенок, которые замыкались моделью SST [26] и различными моделями горения водорода в воздухе [19, 27, 28]. Взаимодействие турбулентности с горением не учитывалось.

За исключением последнего раздела настоящей статьи, в расчетах использовалась наиболее простая модель кинетики Яхимовского с семью реакциями, описанная в работе [27]. Авторами была предложена модель горения этилена, состоящая из квазиглобальной реакции разложения этилена на CO и H₂O, 2 реакций с участием CO и CO₂ и 7 реакций с участием водорода и кислорода. Последние 7 реакций совпадают с первыми 7 реакциями детального механизма горения водорода в воздухе [19] за исключением одной исправленной константы и уточненных коэффициентов влияния третьих частиц (Third-body efficiencies). Эти 7 реакций между 7 веществами (H, O, OH, H₂O, H₂, O₂ и интерным N₂) и использовались в расчетах. Уравнения реакций и константы модели приведены в табл. 2. Указанная модель также была выбрана для расчетов горения водорода в канале модели ONERA в работе [21]. В последнем разделе результаты применения рассматриваемой модели планируется сопоставить с моделью Яхимовского с 19 реакциями и моделью Зеттервала и Фюрби [28] с 22 реакциями. В этих двух моделях к перечисленным 7 веществам добавлены еще 2 — пероксиды HO₂ и H₂O₂. Модель Яхимовского с 19 реакциями выделена из детального механизма [19] (оставлены все реакции с перечисленными 9 веществами).

В ходе вычислений использовался неявный конечно-объемный численный метод 2-го порядка аппроксимации по всем переменным, включающий противоточную схему для конвективных потоков [29], центрально-разностную для диффузионных потоков и устойчивую локально-неявную аппроксимацию жестких химических источниковых членов. Шаг по физическому времени был установлен постоянным и равным 10^{-6} с.

Таблица 2
Уравнения реакций и коэффициенты прямых реакций
для модели кинетики с 7 реакциями*

№	Реакции	A	n	E
1	$\text{H}_2 + \text{O}_2 = \text{OH} + \text{OH}$	$1,70 \cdot 10^{13}$	0	48000
2	$\text{H} + \text{O}_2 = \text{OH} + \text{O}$	$2,60 \cdot 10^{14}$	0	16800
3	$\text{OH} + \text{H}_2 = \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	$2,20 \cdot 10^{13}$	0	5150
4	$\text{O} + \text{H}_2 = \text{OH} + \text{H}$	$1,80 \cdot 10^{10}$	1	8900
5	$\text{OH} + \text{OH} = \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	$6,30 \cdot 10^{13}$	0	1090
6	$\text{H} + \text{H} + M = \text{H}_2 + M$	$6,40 \cdot 10^{17}$	-1	0
7	$\text{H} + \text{OH} + M = \text{H}_2\text{O} + M$	$2,20 \cdot 10^{22}$	-2	0

Выбор расчетной сетки и условий инжекции топлива

Высота пристеночных ячеек принималась равной $2 \cdot 10^{-5}$ м (как в работе [24]), что соответствует $\Delta y^+ \sim 1$ в расчете без горения. Поскольку горение происходит в зоне, расположенной от места впрыска топлива до сечения $x \approx 0,7$ м, то независимость от сетки анализируется в этой части расчетной области.

Для расчетов были построены две сетки (см. рис. 2). Сетка M1 содержит 5117486 ячеек. Сетка M2 строилась на основе сетки M1 с удвоением количества ячеек вдоль оси x на участке $0,199 < x < 0,28$ м и со сгущением к стенкам канала. В ядре потока ячейки

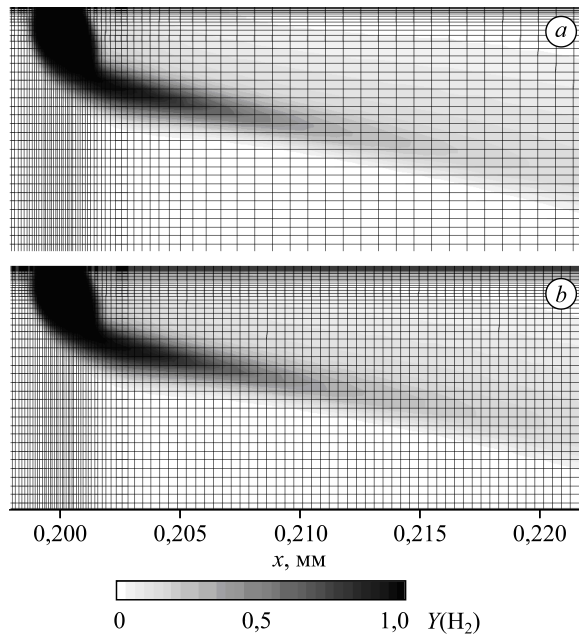


Рис. 2. Поля массовой доли H_2 и
 структура расчетных сеток M1 (a) и M2 (b)
 в области инжекции струй водорода.

* «Константы» скоростей реакций описываются формулой $k = AT^n \exp(-E/RT)$; единицы измерения — секунды, моли, кубические сантиметры, калории и градусы Кельвина. Для реакций 6, 7 коэффициенты влияния третьих частиц следующие: 2,5 для $M = \text{H}_2$, 16,0 для $M = \text{H}_2\text{O}$ и 1,0 для всех других M .

сетки были почти квадратными, каждая сторона составляла около $4 \cdot 10^{-4}$ м. Всего сетка M2 содержала 7276886 ячеек.

На рис. 3а показаны распределения давления по нижней стенке в плоскости симметрии канала, полученные на сетках M1 и M2 при оптимальных параметрах расчета, выбор которых будет описан ниже. Видно, что переход к сетке M2 приводит лишь к очень малым изменениям распределения давления и не меняет расположение главного максимума. На рис. 3б, 3с приведены для сравнения поля давления и числа Маха в плоскости симметрии канала, полученные на двух рассматриваемых сетках. Несмотря на небольшое расхождение давления в окрестности сечения $x = 0,25$ м, эти поля очень близки. В связи с этим в последующих расчетах для экономии компьютерных ресурсов использовалась сетка M1.

В случае газа с переменной теплоемкостью ANSYS FLUENT не позволяет гарантировать описание истечения водорода из отверстия инжекции со скоростью звука. Поэтому в расчете задавалось течение в подводящем канале инжектора с заданным расходом и параметрами торможения (с граничным условием mass-flow inlet на входе в подводящий канал).

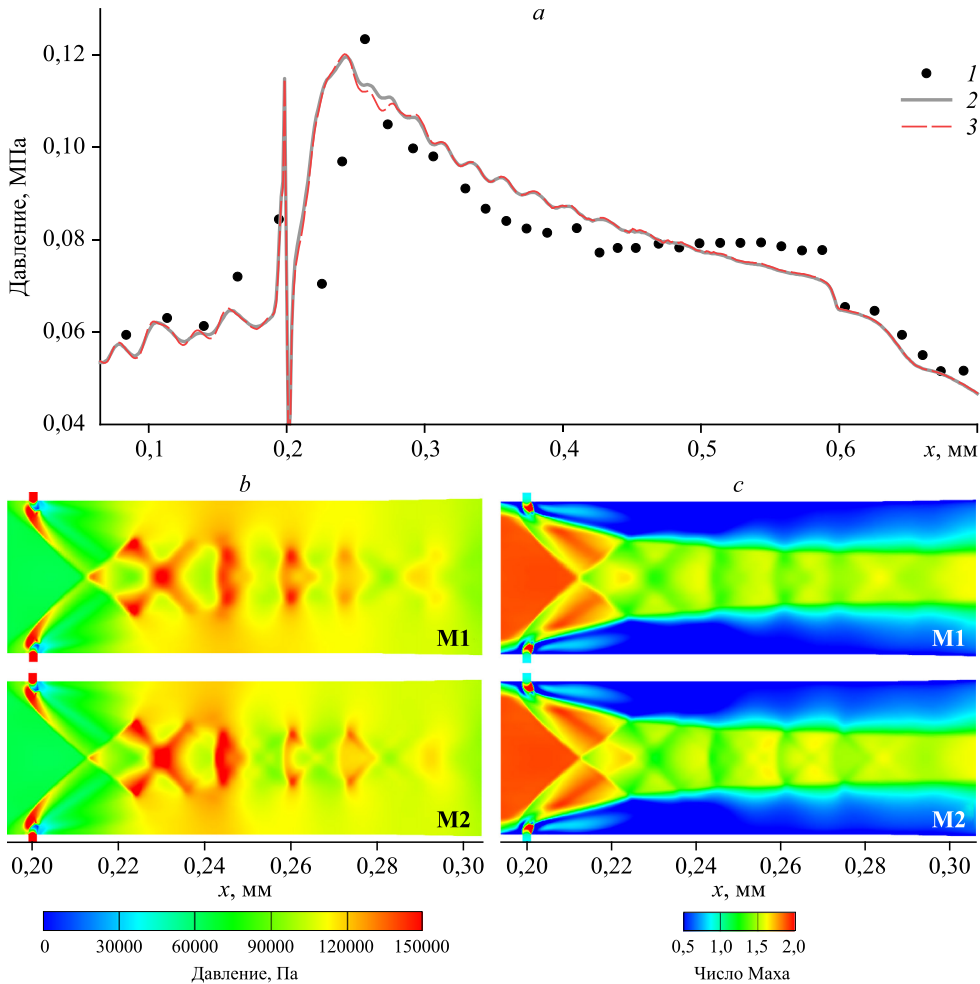


Рис. 3. Влияние плотности сетки на распределение давления по нижней стенке канала (а), поля давления (б) и поля числа Маха (с) в плоскости симметрии канала.
а: данные эксперимента (1) и расчетов на сетках M1 (2) и M2 (3).

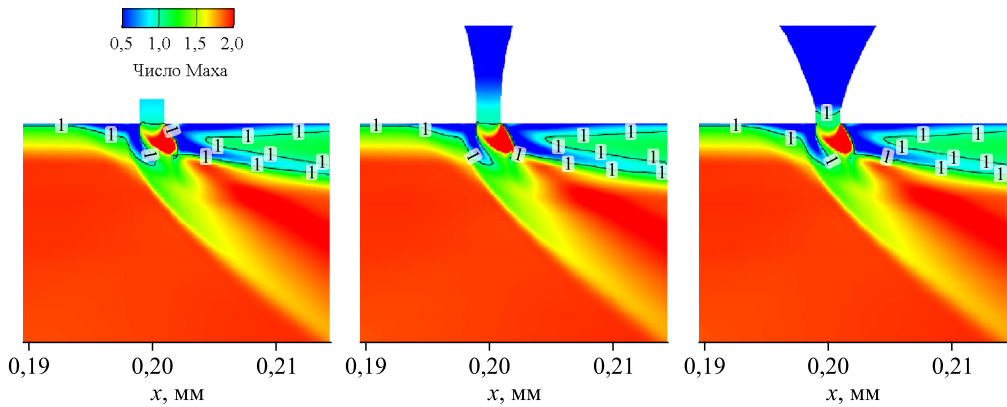


Рис. 4. Поля числа Маха в плоскости симметрии канала для различных форм канала инжекции. Показаны изолинии для $M = 1$.

Поскольку реальная геометрия подводящего канала не была известна автору, сопоставлялись три разные его конфигурации. На рис. 4 представлены поля числа Маха в плоскости симметрии канала для различных моделей инжектора. Все три формы канала инжекции позволяют разогнать поток топлива до скорости звука в отверстии инжекции. Структуры течения, возникающего при взаимодействии топливной струи с набегающим потоком, оказались похожими. С учетом этого была выбрана простейшая (первая) модель подводящего канала. Параметры потока водорода, которые имеют место при этом в сечении инжекции, перечислены в табл. 1.

Модель шероховатости стенки

На внутреннюю поверхность канала экспериментальной модели LAPCAT-II было нанесено теплозащитное покрытие (оксиды циркония и иттрия). Как было установлено в экспериментах, поверхность стенки при этом стала шероховатой. В работе [22] было показано, что шероховатость должна учитываться для корректного описания течения в канале. Поэтому в расчетах используется модель шероховатости, предложенная в работе [30]. Она основана на корреляции [31] и предназначена для использования в сочетании с моделями турбулентности класса $k-\omega$, включая SST. В модели [30] на стенке задаются значения $k \neq 0$ и ω , которые обеспечивают такое же распределение параметров в логарифмической области турбулентного пограничного слоя, как в экспериментах [31]. Безразмерные величины k и ω на стенке зависят от характерного значения безразмерной высоты шероховатости h_s^+ :

$$\begin{cases} k_w^+ = \max \left\{ 0, \frac{1}{\sqrt{\beta^*}} \tanh \left[\left(\frac{\ln h_s^+ / 30}{\ln 10} + 1 - \tanh \frac{h_s^+}{125} \right) \tanh \frac{h_s^+}{125} \right] \right\}, \\ \omega_w^+ = \frac{300}{h_s^{+2}} \left(\tanh \frac{15}{4h_s^+} \right)^{-1} + \frac{191}{h_s^+} \left(1 - \exp \left(-\frac{h_s^+}{250} \right) \right), \end{cases} \quad (1)$$

здесь $\beta^* = 0,09$ — стандартная константа модели SST. Безразмерное расстояние от пристеночной ячейки до ближайшей стенки y^+ и безразмерная высота шероховатости h_s^+ определяются как

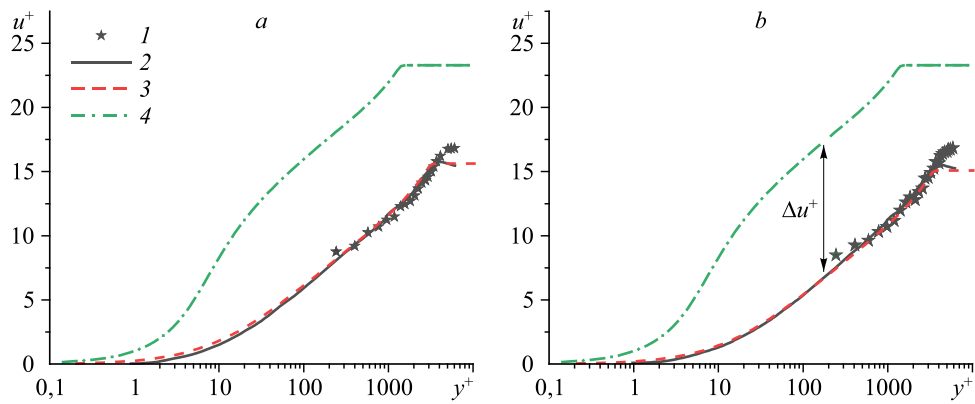


Рис. 5. Профили средней продольной скорости $u^+ = u/u_\tau$ при высоте шероховатости $h_s = 1,42$ (а) и $1,98$ (б) мм.

Данные эксперимента [32] (1), расчетов [22] (2) и [25] (3), а также расчет автора для гладкой стенки (4).

$$y^+ = \frac{\rho_w u_\tau d_w}{\mu_w}, \quad h_s^+ = \frac{\rho_w u_\tau h_s}{\mu_w}, \quad u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho_w}}, \tag{2}$$

где индексом «w» обозначены параметры на стенке, d_w — размерное расстояние до стенки, τ_w — касательное напряжение на стенке. Размерные значения k и ω на стенке вычисляются следующим образом:

$$k_w = f_w(u_\tau, k_w^+) = k_w^+ u_\tau^2, \quad \omega_w = f_w(u_\tau, \omega_w^+) = \frac{\rho_w \omega_w^+ u_\tau^2}{\mu_w}. \tag{3}$$

Авторы [32] провели экспериментальные исследования влияния шероховатости поверхности на параметры среднего течения и турбулентности высокоскоростного турбулентного потока в пограничном слое на пластине. В настоящей работе для валидации модели рассматриваются данные статьи [32] для двух значений высоты шероховатости: 1,42 и 1,98 мм. Профили скорости для двух значений высоты шероховатости представлены на рис. 5. Результаты расчетов автора по программе FLUENT [25] хорошо совпали с расчетными [22] и с экспериментальными [32] данными. В табл. 3 приведены значения коэффициента трения, полученные в результате расчетов и экспериментов при двух высотах шероховатости. Расхождения полученных значений коэффициента трения находятся в пределах погрешности аппроксимации.

Влияние точности описания молекулярной диффузии

При решении RANS-уравнений с химическими реакциями, несмотря на турбулентность течения, эффекты молекулярной диффузии могут быть важны в тонких пристенных областях течения, где молекулярная вязкость сопоставима с турбулентной. В работе [24]

Таблица 3
Коэффициенты трения на шероховатой пластине в сечении $x = 0,54$ м

Типы шероховатости	$\bar{h}$, мм	h_s , мм	h_s^+	Экспериментальные результаты	Численные данные
Песок 36-й фракции	0,90	1,42	395	0,00393	0,003401
Песок 20-й фракции	0,83	1,98	571	0,00399	0,003657

изучалось влияние различных физических факторов на структуру течения в канале экспериментальной модели ONERA, но влияние молекулярной диффузии не рассматривалось. Восполним этот пробел в настоящей работе.

Суммарные (молекулярные и турбулентные) диффузионные потоки тепла вдоль оси x_j , связанные с неоднородностью поля температуры, в газовой смеси определяются формулой

$$q_j = - \left(\lambda + \frac{\mu_t c_p}{Pr_t} \right) \frac{\partial T}{\partial x_j}, \quad (4)$$

где λ — коэффициент теплопроводности, μ_t — турбулентная вязкость, c_p — удельная теплоемкость единицы массы газовой смеси при постоянном давлении. Турбулентное число Прандтля в данной работе принимается равным 0,9.

Суммарный диффузионный поток массы i -го компонента смеси вдоль оси x_j выражается как

$$J_{ij} = - \left(\rho D_i + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial Y_i}{\partial x_j}, \quad (5)$$

где ρ — плотность смеси, D_i — коэффициент массовой диффузии i -го компонента смеси. Турбулентное число Шмидта Sc_t установлено равным 1,0.

При горении обычных топлив массовая доля топлива в воздухе, необходимая для максимального тепловыделения, обычно мала по сравнению с массовой долей воздуха, поэтому часто используется упрощенный подход, при котором коэффициенты диффузии для всех компонентов смеси принимаются такими же, как для воздуха. Для количественной оценки влияния точности описания молекулярной диффузии на структуру течения в представленной работе выполнено сопоставление расчетов течения с горением в экспериментальной модели ONERA с использованием детальной теории и упрощенного подхода для вычисления вязкости, теплопроводности и массовой диффузии (см. табл. 4).

Таблица 4

Детальная теория описания молекулярной диффузии и упрощенный подход

Параметры	Детальная теория ¹	Упрощенный подход ²
Молекулярная вязкость	$\mu = \sum_i \frac{X_i \mu_i}{\sum_j X_j \varphi_{ij}}, \quad \mu_i = 2,67 \cdot 10^{-6} \frac{\sqrt{M_{w,i} T}}{\sigma_i^2 \Omega_i}$	$\mu = \mu_0 \cdot \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2} \frac{T_0 + S}{T + S}$
Теплопроводность	$\lambda = \sum_i \frac{X_i \lambda_i}{\sum_j X_j \varphi_{ij}}, \quad \lambda_i = \frac{15}{4} \frac{R}{M_{w,i}} \mu_i \left[\frac{4}{15} \frac{c_{p,i} M_{w,i}}{R} + \frac{1}{3} \right]$	$\lambda \approx - \frac{\mu c_p}{Pr}$
Массовая диффузия	$D_i = \frac{1 - X_i}{\sum_{j,j \neq i} (X_j / D_{ij})},$ $0,00186 \left[T^3 \left(\frac{1}{M_{w,i}} + \frac{1}{M_{w,j}} \right) \right]^{1/2}$ $D_{ij} = \frac{P_{\text{abs}} \sigma_{ij}^2 \Omega_D}{P_{\text{abs}} \sigma_{ij}^2 \Omega_D}$	$D_i \approx \frac{\mu}{\rho Sc}$

¹ Коэффициент $\varphi_{ij} = \left[1 + \left(\mu_i / \mu_j \right)^{1/2} \left(M_{w,j} / M_{w,i} \right)^{1/4} \right]^2 / \left[8 \left(1 + M_{w,i} / M_{w,j} \right) \right]^{1/2}$, $M_{w,i}$, $M_{w,j}$ — молекулярная масса i -й и j -й-компоненты, σ и ε / k_B — параметры Леннарда-Джонса [33], $\Omega = \Omega(T^*) = \Omega[T / (\varepsilon / k_B)]$.

² Для воздуха при умеренных температурах и давлениях: $\mu_0 = 1,716 \cdot 10^{-5}$ кг/(м·с), $T_0 = 273,11$ K, $S = 110,56$ K, $Pr = 0,72$, $Sc = 0,9$.

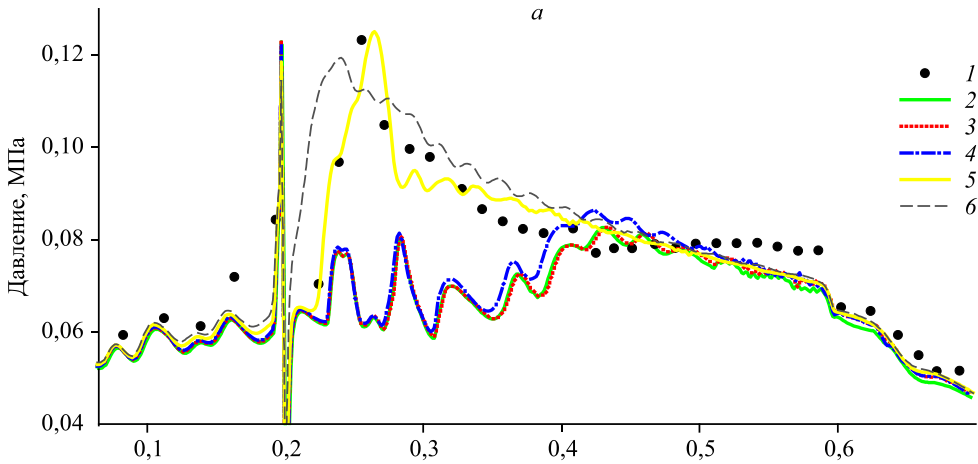


Рис. 6. Распределение давления по нижней стенке канала при $T_w = 716$ К.
Данные эксперимента ONERA (1), моделирование с использованием упрощенного подхода к описанию молекулярной диффузии при $h_s = 65$ мкм (2) и с использованием детальной теории при $h_s = 65$ (3), 100 (4), 200 (5), 300 (6) мкм.

Моделирование с использованием упрощенного подхода и детальной теории выполнялось при температуре стенки 716 К и эквивалентной высоте песчинки 65 мкм. Полученные распределения давления по нижней стенке канала показаны на рис. 6 (см. линии 2 и 3). Видно, что влияние способа описания молекулярной диффузии является незначительным.

Проблема выбора эквивалентного диаметра песчинки

Характеристики шероховатых стенок зависят от формы рельефа шероховатости. В модели шероховатости [30] в качестве характерного размера шероховатости h_s рекомендуется выбирать так называемый эквивалентный диаметр песчинки [34]. Авторы эксперимента ONERA [18] при помощи сканирующего электронного микроскопа провели измерения характерной высоты шероховатости и установили, что она имеет порядок 100 мкм [35]. Авторы работы [22] при использовании модели [30] рекомендовали использовать значение эквивалентного диаметра песчинки 65 мкм. Однако методика пересчета измеренных характеристик рельефа шероховатости в эквивалентный диаметр песчинки не была опубликована. В расчетах [22] при такой высоте шероховатости и температуре стенок 716 К с помощью программы CEDRE (ONERA) было получено правильное положение пика давления. Но в аналогичных расчетах [24], проведенных лабораторией JetSim ЦАГИ с помощью программы zFlare, максимум давления получился гораздо ниже по течению, чем в эксперименте.

В работе [24] также выполнялся поиск физических параметров, которые могли бы изменить положение пика давления, и было установлено, что сильнее всего влияют температура стенок и их шероховатость. Для достижения правильного положения максимума давления при использовании эквивалентного диаметра песчинки 65 мкм температура стенок была увеличена до 1413 К. Однако проведенные позднее теоретические оценки прогрева стенок в лаборатории JetSim показали, что во время эксперимента температура стенок не могла быть больше 850 К. При такой температуре стенок высота шероховатости является единственным параметром, существенно влияющим на положение пика давления. Как было показано в работе [36], в зависимости от формы рельефа шерохова-

тости эквивалентный диаметр песчинки h_s может меняться от $\bar{h}$ до $6\bar{h}$, где $\bar{h}$ — осредненная тем или иным способом высота шероховатости. При этом в работе [37] приводились аргументы в пользу того, что при использовании граничного условия [30] h_s следует рассматривать как настроечный параметр, который должен обеспечить правильное трение на стенке. Исходя из этого были рассмотрены четыре разных эквивалентных диаметра песчинки: 65, 100, 200 и 300 мкм. Полученные распределения давления по нижней стенке канала представлены на рис. 6. Наиболее близкое к экспериментальному распределение давления было получено при $h_s = 200$ мкм.

На рис. 7 поле десятичного логарифма локальной скорости тепловыделения φ наложено на поле числа Маха в плоскости симметрии канала при $h_s = 65, 200$ и 300 мкм. Скорость тепловыделения на единицу длины линий тока рассчитывается по формуле [38]:

$$\varphi = \frac{\sum W_k Q_k}{\rho |\vec{V}|}, \quad (6)$$

где W_k — скорость k -й химической реакции [моль/(м³·с)], Q_k — тепловой эффект указанной реакции [Дж/моль], ρ — плотность, $|\vec{V}|$ — скорость газа. Можно видеть, что процесс тепловыделения в основном происходит в струе топлива и в пристеночной дозвуковой области за этой струей.

Увеличение эквивалентного диаметра песчинки повышает касательное напряжение на стенке, что приводит к понижению скорости в области следа за струей водорода

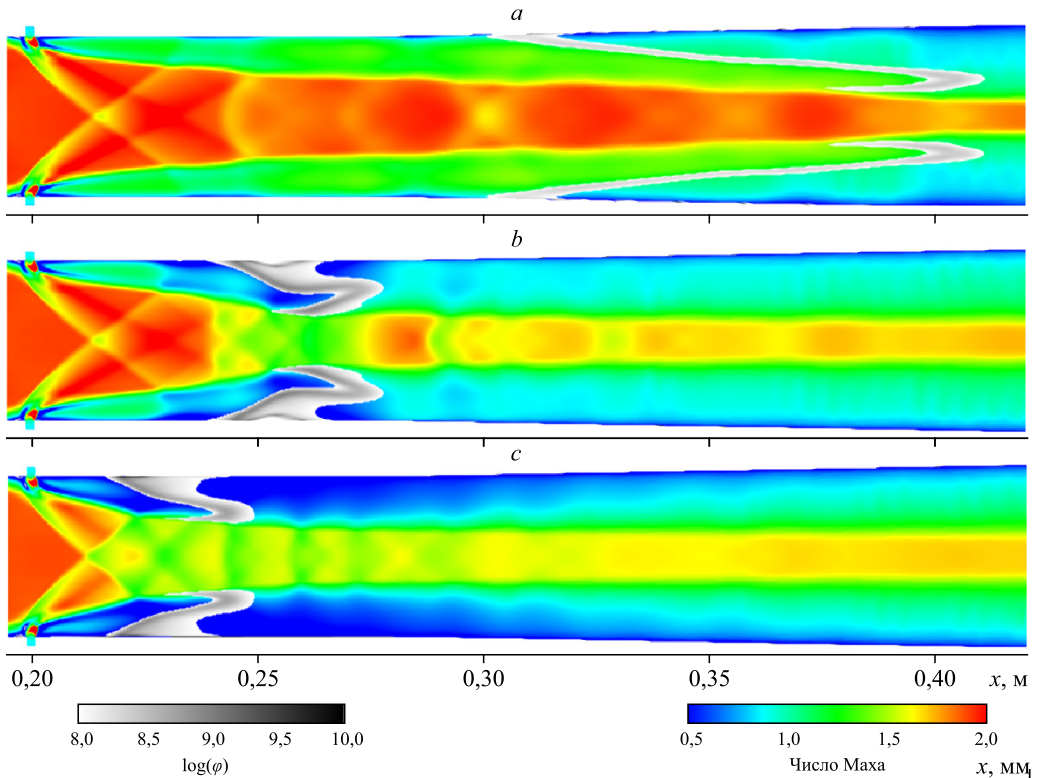


Рис. 7. Поле десятичного логарифма локальной скорости тепловыделения $\log(\varphi)$ вдоль линий тока, наложенное на поле числа Маха в плоскости симметрии канала при $h_s = 65$ (a), 200 (b) и 300 (c) мкм.

и к сокращению длины задержки воспламенения горючей смеси. Вследствие этого по мере увеличения эквивалентного диаметра песчинки область основного тепловыделения и пик давления смещаются вверх по потоку.

Структура течения в канале, получаемая в расчетах с разными механизмами химической кинетики

В экспериментальном канале LAPCAT-II горение инициируется самовоспламенением, поэтому правильное воспроизведение времени задержки воспламенения является основным критерием выбора механизмов химических реакций. В дополнение к двум вариантам механизма Яхимовского [19] (с 7 и 19 реакциями), был также рассмотрен механизм с 22 реакциями, предложенный Зеттервалом и Фюрби [28], который лучше предсказывает время задержки воспламенения водорода в воздухе при начальной температуре меньше 1000 К.

На рис. 8 представлены распределения статического давления по нижней стенке канала при разных механизмах химической кинетики. Видно, что распределения статического давления отличаются слабо. В расчете течения с 7 реакциями максимум давления составляет примерно 1,25 атм, что немного больше значения 1,2 атм, которое получается в расчетах с 19 и 22 реакциями.

На рис. 9 показаны поля статического давления в плоскости симметрии канала и температура вблизи нижней стенки при разных механизмах химической кинетики. Температура стенки составляла 716 К. Поля температуры показывают, что воспламенение водорода происходит в зоне отрыва потока, создаваемой взаимодействием пограничного слоя с ударной волной.

Сравнивая трехмерную структуру отрыва потока, можно обнаружить, что выбор механизма химической кинетики приводит к различной структуре течения в отрыве, где течение менее устойчиво и более чувствительно к различным возмущениям. В расчете с 19 реакциями отрыв и горение происходят в области падения отраженной от плоскости симметрии волны (см. рис. 9b). В расчете с 22 реакциями горение начинается в том же месте, но в области максимального сужения ядра потока возникает еще вторая зона

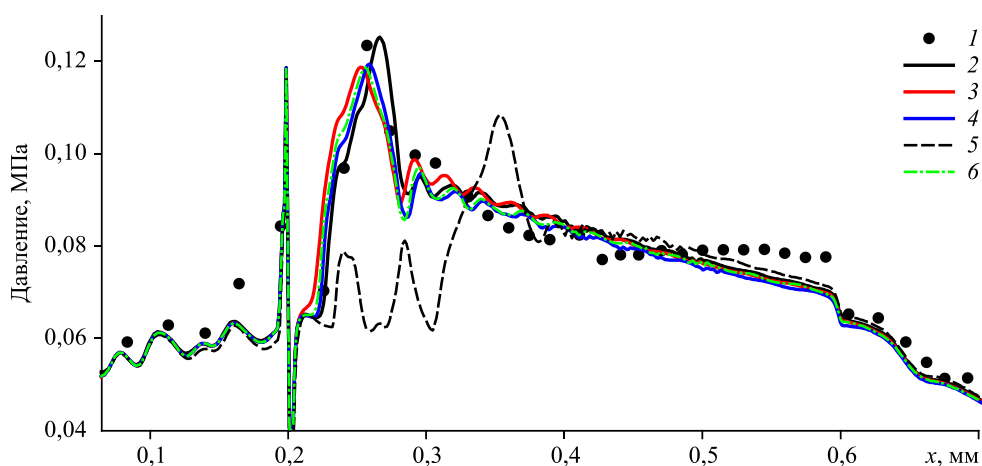


Рис. 8. Распределения статического давления по нижней стенке канала при $T_w = 716$ К и $h_s = 200$ мкм.

Данные эксперимента ONERA (1) и расчетов течения с 7 (2), 19 (3) и 22 (4) реакциями, с 7 реакциями с отключением кинетики перед струей водорода (5), а также 19 реакциями с отключением реакции $H + OH + M = H_2O + M$ (6).

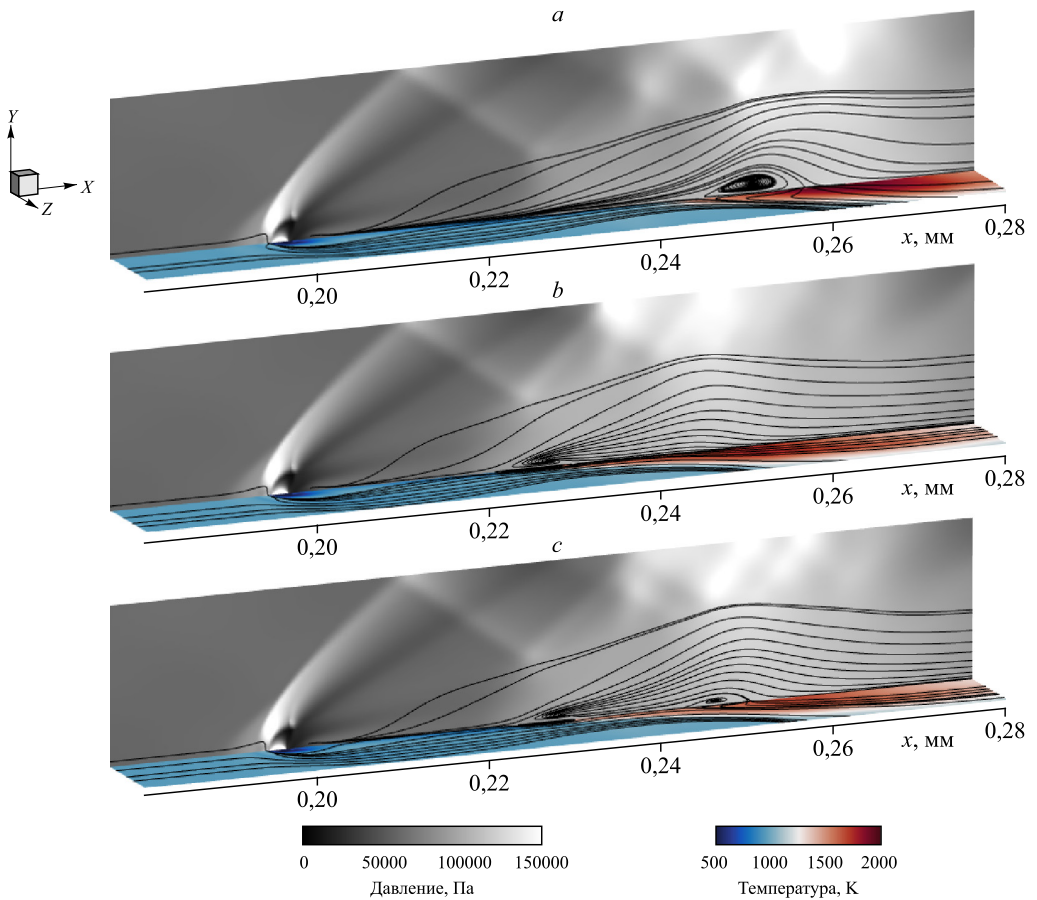


Рис. 9. Поля статического давления в плоскости симметрии канала и поля температуры на высоте 0,1 мм над нижней стенкой с наложением линий тока для 7 (a), 19 (b), 22 (c) реакций.

отрыва, где воспламенения не происходит (см. рис. 9c). А в расчете с 7 реакциями отрыв и воспламенение происходят только в области максимального сужения ядра потока. Чтобы понять причины возникновения разной структуры отрывной зоны, проанализируем поведение различных компонент смеси.

На рис. 10a приведены распределения массовой доли радикала Н вдоль линии $y = -0,0165$ м в плоскости симметрии канала. В расчете с 7 реакциями начальная концентрация радикала Н больше и наблюдается ее монотонный рост по длине с достижением максимума в области горения. Это похоже на процесс самовоспламенения. В расчетах с 19 и 22 реакциями концентрация радикалов Н падает до тех пор, пока не происходит ее резкого увеличения в зоне горения. Так же ведут себя радикалы О и ОН. Следовательно, тепловыделение в данных расчетах не связано с размножением этих радикалов.

Возникает вопрос: почему начальная концентрация радикалов Н в следе за струей водорода в расчете с 7 реакциями получается на порядок больше? Сопоставим поля массовой доли Н в плоскости симметрии канала (рис. 11). В отличие от расчета с 19 реакциями, в случае 7 реакций радикал Н производится в зоне отрыва перед струей, истекающей из инжектора. Из этой области он попадает внутрь следа за струей. Если исключить реакции перед струей, то концентрация Н за струей падает, и длина задержки воспламенения увеличивается (см. рис. 11c и линию 4 на рис. 10a). Таким образом, более высокая концентрация радикала Н в следе за струей обусловлена непосредственно химическими

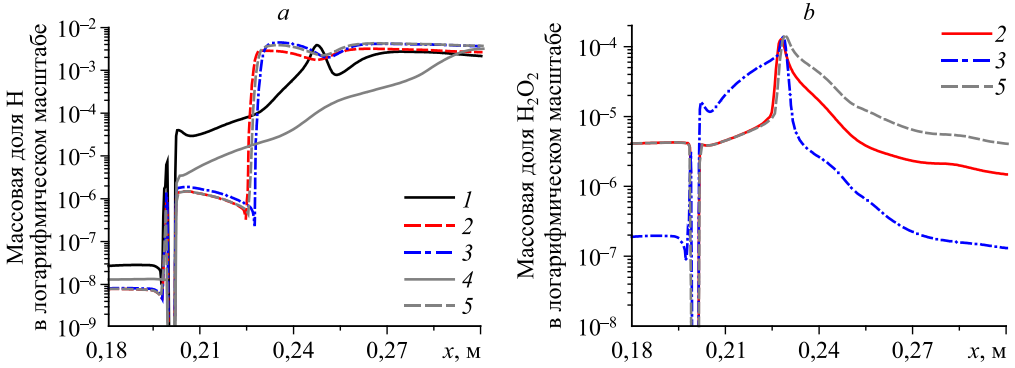


Рис. 10. Распределение десятичного логарифма массовой доли радикалов Н (а) и H_2O_2 (b) вдоль линии $y = -0,0165$ м в плоскости симметрии канала для 7 (1), 19 (2), 22 (3) реакций, для реакций с отключением кинетики перед струей водорода (4) и для 19 реакций с отключением реакции $\text{H} + \text{OH} + \text{M} = \text{H}_2\text{O} + \text{M}$ (5).

реакциями в зоне отрыва и рециркуляции перед струей водорода. Оценки показывают, что характерное время, необходимое для увеличения массовой доли радикалов Н до величины 0,0002, составляет в случае кинетики с 7 реакциями примерно $2 \cdot 10^{-5}$ с, а в случае кинетики с 19 реакциями — $8 \cdot 10^{-5}$ с. Характерное же время пребывания газа внутри отрывной зоны (время одного оборота вихря в этой зоне) составляет $\sim 6,7 \cdot 10^{-5}$ с. С учетом неидеальности процесса в отрывной зоне этого времени достаточно для достижения $Y(\text{H}) = 0,0002$ в случае кинетики с 7 реакциями и недостаточно для случая с 19 реакциями. Вот почему в случае кинетики с 7 реакциями в отрыве достигается гораздо большая концентрация радикалов.

Появляется следующий вопрос: за счет чего тогда происходит стабилизация горения в расчетах течения с 19 и 22 реакциями? Рассмотрим распределения массовой доли H_2O_2 вдоль линии $y = -0,0165$ м в плоскости симметрии канала (рис. 10b). В расчете

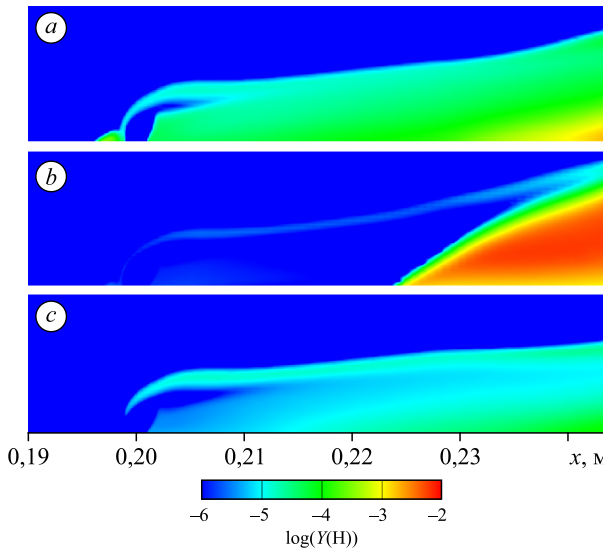


Рис. 11. Поле десятичного логарифма массовой доли радикала Н за струей водорода в плоскости симметрии канала для 7 (a), 19 (b) реакций и для 7 реакций с отключением кинетики перед струей водорода (c).

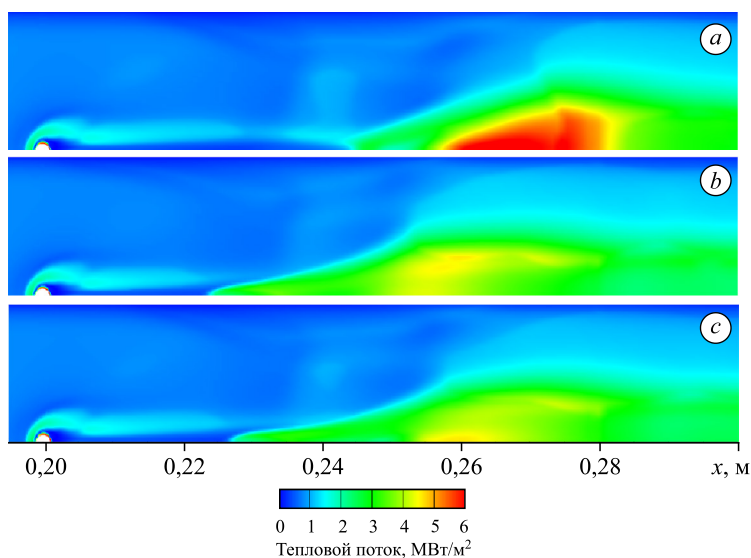


Рис. 12. Распределения тепловых потоков по нижней стенке канала (вид сверху) для 7 (a), 19 (b) и 22 (c) реакций.

течения с 19 реакциями в следе за струей наблюдается рост массовой доли H_2O_2 , который заканчивается взрывным увеличением в зоне падения скачка сверху. В расчете течения с 22 реакциями массовая доля H_2O_2 растет сначала более плавно, но в области горения достигает того же значения, что и в расчете с 19 реакциями.

В результате реакции образования H_2O_2 выделяется тепло, поэтому она может стать источником взрывного тепловыделения. Если исключить основную реакцию, которая производит тепло на стадии взрыва в кинетике с 7 реакциями ($\text{H} + \text{OH} + \text{M} = \text{H}_2\text{O} + \text{M}$), то в расчете с 19 реакциями распределения параметров почти не меняются (см. кривые 2 и 5 на рис 10b). Следовательно, самовоспламенение в следе за струей в расчетах с участием HO_2 и H_2O_2 связано не с ростом H , O и OH , как в расчетах с 7 реакциями, а с ростом доли H_2O_2 .

Хотя все кинетические механизмы, рассмотренные в работе, продемонстрировали близкие распределения давления по стенкам модели (кривые 2, 3 и 4 на рис. 8), наблюдаемые на рис. 9 значительные отличия в структуре отрывных зон могут иметь практическое значение. Достаточно указать на то, что в областях пониженной скорости может происходить тепловыделение, а зоны возвратного течения нередко оказываются заполненными горячими продуктами сгорания. Поэтому иная структура отрывных зон должна приводить к другому распределению тепловых потоков по стенкам канала. Это подтверждают данные, представленные на рис. 12.

Очевидно, что распределение тепловых потоков необходимо учитывать при расчете конструкции для обеспечения ее прочности. Кроме того, изменения структуры течения и тепловых потоков должны приводить к изменению тепловой полноты сгорания топлива [38]. Оценки тепловыделения показывают, что в расчетах с использованием кинетики Яхимовского с 7 реакциями полнота сгорания (с учетом потерь тепла в стенки канала) примерно на 5 % ниже, чем в расчетах с использованием двух других кинетических механизмов.

Заключение

Выполнено численное моделирование поперечного вдува водорода в сверхзвуковой поток в канале для обеспечения звуковой скорости потока топлива с использованием цилиндрической конструкции инжектора и граничного условия mass-flow inlet. При описании высокоскоростного горения водорода в воздухе в канале коэффициент молекулярной диффузии газовой смеси принимался равным коэффициенту для воздуха.

Известно, что эквивалентный диаметр песчинки h_s оказывает большое влияние на структуру поля течения в модели ONERA. Наиболее близкие к эксперименту ONERA результаты получены автором при $h_s = 200$ мкм.

Показано, что выбор модели химической кинетики мало влияет на распределение давления по стенкам канала, но существенно меняет структуру отрывных зон, а следовательно, и распределение тепловых потоков по стенкам модели. При переходе от 7 реакций к 19 и 22 реакциям меняется механизм самовоспламенения — оно вызывается уже не ростом радикалов H, O и OH, а реакциями пероксидов HO_2 и H_2O_2 .

Автор благодарит В.А. Сабельникова, В.В. Власенко и коллектив Лаборатории физического и численного моделирования течений с турбулентностью и горением (JetSim) ЦАГИ за обсуждение полученных результатов и полезные рекомендации, а также Акселя Венсану-Рандоннье и Гийома Пеллетье (ONERA) за представленные данные проведенных ими экспериментов и расчетов.

Список литературы

1. Burrows M.C., Kurkov A.P. An analytical and experimental study of supersonic combustion of hydrogen in vitiated air stream // AIAA J. 1973. Vol. 11, No. 9. P. 1217–1218.
2. Evans J.S., Schexnayder Jr C.J., Beach Jr H.L. Application of a two-dimensional parabolic computer program to prediction of turbulent reacting flows // NASA Technical paper 1169, 1978. 60 p.
3. Cheng T., Wehrmeyer J., Pitz R., Jarrett Jr O., Northam G. Raman measurement of mixing and finite-rate chemistry in a supersonic hydrogen-air diffusion flame // Combustion and Flame. 1994. Vol. 99, No. 1. P. 157–173.
4. Shiryayeva A., Sabelnikov V. Critical analysis of classical turbulent combustion experiments on the basis of RANS simulations // AIP Conf. Proceedings. 2018. No. 030078. 13 p.
5. Sabel'nikov V.A., Penzin V.I. Scramjet research and development in Russia // Scramjet propulsion. Series Progress in astronautics and aeronautics / eds. E.T. Curran, S.N.B. Murthy. 2001. Vol. 189. P. 223–367.
6. Басев В.К., Третьяков П.К., Забайкин В.А. Термогазодинамический анализ процесса в камере сгорания с внезапным расширением при сверхзвуковой скорости на входе и существенном проявлении нестационарности процесса // Препринт ИТПИМ СО РАН. 2000. № 3. 43 с.
7. Roudakov A., Kopchenov V., Bezgin V., Gouskov O., Lomkov K., Prokhorov A. Researches of hypersonic propulsion in central institute of aviation motors // Fourth Symp. on Aerothermodynamics for Space Vehicles. Capua, Italy, ESA SP-487. 2002. P. 81–92.
8. Аврашков В.Н., Метёлкина Е.С., Мещеряков Д.В. Исследование высокотемпературных ПВРД // Физика горения и взрыва. 2010. № 4. С. 36–44.
9. Gardner A., Hannemann K., Paull A., Steelant J. Ground testing of the HyShot supersonic combustion flight experiment in HEG // Shock Waves: Proceedings of the 24th Intern. Symp. on Shock Waves. Beijing, China: Springer, 2005. P. 329–334.
10. O'Byrne S., Danehy P., Cutler A. Dual-pump CARS thermometry and species concentration measurements in a supersonic combustor // 42nd AIAA Aerospace Sci. Meeting and Exhibit. Reno, USA. AIAA Paper. 2004. No. 2004-710. 16 p.
11. Jackson K., Gruber M., Barhorst T. The HIFIRE flight 2 experiment: an overview and status update // 45th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conf. and Exhibit. Denver, USA. AIAA Paper. 2009. No. 2009-5029. 19 p.
12. Micka D.J., Driscoll J.F. Combustion characteristics of a dual-mode scramjet combustor with cavity flameholder // Proceedings of the Combustion Institute. 2009. Vol. 32, No. 2. P. 2397–2404.
13. Belanger J., Hornung H. A combustion driven shock tunnel to complement the free piston shocktunnel T5 at GALCIT // 28th Joint Propulsion Conf. and Exhibit. Nashville, USA. AIAA Paper. 1992. No. 1992-3968. 10 p.

14. **Sabel'nikov V., Voloshenko O., Ostras V., Sermanov V., Walther R.** Gasdynamics of hydrogen-fueled scramjet combustors // 29th Joint Propulsion Conf. and Exhibit. Monterey, USA. AIAA Paper. 1993. No. 93-2145. 12 p.
15. **Boyce R., Gerard S., Paull A.** The HyShot scramjet flight experiment-flight data and CFD calculations compared // 12th AIAA Intern. Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies. Norfolk, USA. AIAA Paper. 2003. No. 2003-7029. 8 p.
16. **Seleznev R., Surzhikov S., Shang J.** A review of the scramjet experimental data base // Progress in Aerospace Sci. 2019. Vol. 106. P. 43–70.
17. **Defoort S., Ferrier M., Serre L., Pastre J.-L., Paridaens C., Scherrer D., Ingenito A., Hendrick P., Bruno C.** LAPCAT II: conceptual design of a Mach 8 TBCC civil aircraft, enforced by full Navier-Stokes 3D nose-to-tail computation // 17th AIAA Intern. Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conf. San Francisco, USA. AIAA Paper. 2011. No. 2011-2317. 18 p.
18. **Vincent-Randonnier A., Moule Y., Ferrier M.** Combustion of hydrogen in hot air flows within LAPCAT-II dual mode ramjet combustor at ONERA-LAERTE facility-experimental and numerical investigation // 19th AIAA Intern. Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conf. Atlanta, USA. AIAA Paper. 2014. No. 2014-2932. 16 p.
19. **Jachimowski C.J.** An analytical study of the hydrogen-air reaction mechanism with application to scramjet combustion // NASA Technical Paper. No. 2791. 1988. 17 p.
20. **Власенко В.В., Михайлов С.В., Молев С.С., Трошин А.И., Ширяева А.А.** Программа для численного моделирования трехмерных течений с горением в каналах прямооточных воздушно-реактивных двигателей в рамках подходов URANS и DES с применением модели взаимодействия турбулентности с горением, технологии дробного шага по времени и метода пристеночных функций (zFlare) / Свидетельство № 2019610822 о государственной регистрации программы для ЭВМ. № 2019610822 от 18 января 2019 г.
21. **Власенко В.В., Лю В., Молев С.С., Сабельников В.А.** Влияние условий теплообмена и химической кинетики на структуру течения в модельной камере сгорания ONERA LAPCAT II // Горение и взрыв. 2020. Т. 13, № 2. С. 36–47.
22. **Pelletier G., Ferrier M., Vincent-Randonnier A., Sabelnikov V., Mura A.** Wall roughness effects on combustion development in confined supersonic flow // J. of Propulsion and Power. 2021. Vol. 37, No. 1. P. 151–166.
23. **Вебсайт лаборатории** физического и численного моделирования течений с турбулентностью и горением (JetSim) ЦАГИ. Режим доступа: <https://www.tsagi.ru/institute/lab220/>.
24. **Сабельников В.А., Трошин А.И., Бахне С., Молев С.С., Власенко В.В.** Поиск определяющих физических факторов в валидационных расчетах экспериментальной модели ONERA LAPCAT II с учетом шероховатости стенок канала // Горение и взрыв. 2021. Т. 14, № 4. С. 55–67.
25. **Ansys Fluent Theory Guide.** 2021, ANSYS, Inc.: Canonsburg, PA 15317.
26. **Menter F.R., Kuntz M., Langtry R.** Ten years of industrial experience with the SST turbulence model // Turbulence, Heat Mass Transfer. 2003. Vol. 4, No. 1. P. 625–632.
27. **Singh D., Jachimowski C.J.** Quasiglobal reaction model for ethylene combustion // AIAA J. 1994. Vol. 32, No. 1. P. 213–216.
28. **Zettervall N., Fureby C.** A computational study of ramjet, scramjet and dual-mode ramjet combustion in combustor with a cavity flameholder // 56th AIAA Aerospace Sci. Meeting. Kissimmee, USA. AIAA Paper. 2018. No. 2018-1146. 14 p.
29. **Liou M.-S.** A sequel to aum: Ausm+ // J. of Computational Physics. 1996. Vol. 129, No. 2. P. 364–382.
30. **Aupoix B.** Roughness corrections for the $k-\omega$ shear stress transport model: status and proposals // J. of Fluids Engng. 2015. Vol. 137, No. 2. P. 021202-1–021202-10.
31. **Colebrook C.F., Blench T., Chatley H., Essex E., Finnicome J., Lacey G., Williamson J., Macdonald G.** Correspondence. turbulent flow in pipes, with particular reference to the transition region between the smooth and rough pipe laws.(includes plates) // J. of the Institution of Civil Engineers. 1939. Vol. 12, No. 8. P. 393–422.
32. **Latin R.M., Bowersox R.D.** Flow properties of a supersonic turbulent boundary layer with wall roughness // AIAA J. 2000. Vol. 38, No. 10. P. 1804–1821.
33. **Hirschfelder J.O., Curtiss C.F., Bird R.B.** Molecular theory of gases and liquids. John Wiley and Sons, Inc., 1964. 1283 p.
34. **Nikuradse J.** Laws of flows in rough pipes // NACA Technical Memorandum 1292. 1950. Translation of "Strömungsgesetze in rauen Rohren." VDI-Forschungsheft 361. Beilage zu "Forschung auf dem Gebiete des Ingenieurwesens". 1937. Vol. B, No. 4. 64 p.
35. **Balland S., Vincent-Randonnier A.** Numerical study of the hydrogen/air combustion with cedre on laerte dual mode ramjet combustion experiments // 20th AIAA Intern. Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies Conf. Glasgow, Scotland. AIAA Paper. 2015. No. 2015-3629. 10 p.
36. **Adams T., Grant C., Watson H.** A simple algorithm to relate measured surface roughness to equivalent sand-grain roughness // Intern. J. of Mechanical Engng Mechatronics, 2012. Vol. 1, No. 2. P. 66–71.

37. **Volino R.J., Devenport W.J., Piomelli U.** Questions on the effects of roughness and its analysis in non-equilibrium flows // J. of Turbulence. 2022. Vol. 23, No. 8. P. 454–466.
38. **Власенко В.В.** О различных способах определения теплового эффекта и полноты сгорания в потоке реагирующего газа. // Ученые записки ЦАГИ. 2014. Т. 45, № 1. С. 1–25.

*Статья поступила в редакцию 11 ноября 2022 г.,
после доработки — 30 января 2023 г.,
принята к публикации 2 марта 2023 г.*