

УДК 530.46:662.3

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕВЯЗКИХ ТЕЧЕНИЙ  
С ГОРЕНИЕМ ВОДОРОДА ЗА СКАЧКАМИ УПЛОТНЕНИЯ  
И В ДЕТОНАЦИОННЫХ ВОЛНАХ***В. В. Власенко, В. А. Сабельников**Центральный аэродинамический институт им. Н.Е. Жуковского,  
140160 г. Жуковский-3*

Описан новый численный алгоритм для моделирования течений невязкого многокомпонентного газа с неравновесными химическими реакциями. Демонстрируется применение этого алгоритма для расчета нескольких задач с горением водородовоздушной смеси в наклонных детонационных волнах.

Численное исследование гиперзвуковых течений реального многокомпонентного газа с конечными скоростями химических реакций представляет как теоретический, так и практический интерес. В последние годы широко ведутся исследования, связанные с созданием воздушно-космического самолета (ВКС). Центральная проблема здесь — разработка гиперзвукового прямоточного воздушно-реактивного двигателя (ГПВРД) на водородном топливе. Неравновесные химические процессы присутствуют во всех элементах этого двигателя: в воздухозаборнике (диссоциация воздуха за интенсивными ударными волнами), в сопле (рекомбинация продуктов сгорания) и, конечно, в камере сгорания, в которой происходят сверхзвуковое смешение и горение водородовоздушной смеси.

Расчет неравновесных гиперзвуковых течений сталкивается с рядом сложнейших проблем. Прежде всего резко увеличивается размерность задачи, так как необходимо отслеживать концентрации всех компонентов реагирующей смеси. Далее, система уравнений химической кинетики принадлежит к типу жестких, т. е. в физическом явлении присутствуют несколько характерных времен, отличающихся в сотни раз. Использование явных численных алгоритмов для моделирования таких процессов едва ли возможно, так как для этого требуется шаг по времени, равный минимальному характерному времени. Применение же неявных алгоритмов связано с проблемами обращения систем нелинейных уравнений большой размерности и достоверности численного решения.

В связи со сложностью задачи целесообразно начать с разработки эффективных численных методов для расчета реагирующих течений невязкого газа. При решении этой проблемы можно использовать надежный фундамент — хорошо разработанное численное моделирование течений невязкого совершенного газа.

Основные задачи, возникающие в рамках модели невязкого реагирующего газа, связаны с рассмотрением ударно-волновых структур в присутствии тепловыделения и, прежде всего, детонационных волн (ДВ). Горение за скачками уплотнения и в ДВ можно использовать в камерах сгорания ГПВРД, а при числах Маха  $M_\infty > 15$  полета ВКС, как отмечается в [1, 2], более перспективен двигатель с наклонной волной детонации. Поэтому имеется научный и практический интерес в численном моделировании невязких реагирующих течений. Назовем некоторые проблемы, которые требуют решения: взаимодействие ДВ в водородовоздушной смеси со стенками камеры сгорания, стабилизация пламени за скачком уплотнения, т. е. локализация процесса горения и его удержание на разных режимах (на-

пример, в условиях неоднородного состава горючей смеси, при изменении угла клина и т. д.).

Разработке эффективного численного метода для расчета реагирующих течений вязкого газа и численному решению перечисленных задач посвящена настоящая работа.

### Уравнения задачи

Уравнения движения вязкого реагирующего газа, записанные в консервативной форме для двумерных задач, имеют вид [3]

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{F}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{G}}{\partial y} = \vec{W},$$

$$\vec{u} = \begin{bmatrix} p \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho E \\ \rho Y_i \end{bmatrix}, \quad \vec{F} = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho u E + pu \\ \rho u Y_i \end{bmatrix}, \quad \vec{G} = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ \rho v E + pv \\ \rho v Y_i \end{bmatrix}, \quad \vec{W} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ W_i \end{bmatrix}. \quad (1)$$

Здесь  $\rho$  — плотность;  $u, v$  — компоненты скорости;  $p$  — давление;  $E$  — полная энергия единицы массы;  $Y_i = \rho_i/\rho$  — массовая доля  $i$ -го компонента газовой смеси;  $W_i$  — источникный член, описывающий производство и расходование  $i$ -го компонента в ходе химических реакций. Предполагается, что смесь состоит из  $N_{sp}$  компонентов. При этом концентрацию одного из компонентов можно выразить через остальные:

$$Y_{N_{sp}} = 1 - \sum_{i=1}^{N_{comp}} Y_i,$$

где  $N_{comp} = N_{sp} - 1$ . Это позволяет исключить из системы (1) уравнение, описывающее изменение  $Y_{N_{sp}}$ , и уменьшить размерность задачи на единицу. Таким образом, в системе (1) индекс  $i$  меняется от 1 до  $N_{comp}$ , и ее размерность  $N_{dim} = 4 + N_{comp}$ .

Система уравнений (1) записана в безразмерных переменных. Используется обезразмеривание достаточно общего вида

$$x = x^*/L_0, \quad y = y^*/L_0, \quad u = u^*/V_0, \quad v = v^*/V_0, \\ t = V_0 t^*/L_0, \quad \rho = \rho^*/\rho_0, \quad T = T^*/T_0, \quad p = p^*/\rho_0 V_0^2,$$

$$(c_p)_i = \frac{(c_p)_i^*}{(c_p)_0}, \quad h_i = \frac{h_i^*}{(c_p)_0 T_0}, \quad E = \frac{E^*}{V_0^2}, \quad m_i = \frac{m_i^*}{m_0}.$$

Здесь  $h_i$  — энтальпия  $i$ -го компонента;  $(c_p)_i$  — удельная теплоемкость;  $m_i$  — молекулярная масса  $i$ -го компонента;  $L_0, V_0, \rho_0, T_0, (c_p)_0, m_0$  — характерные параметры обезразмеривания; звездочкой помечены размерные величины.

Систему уравнений (1) замыкают следующие соотношения:

1) выражение для молекулярной массы смеси

$$m = \frac{1}{\sum_{i=1}^{N_{sp}} \frac{Y_i}{m_i}};$$

2) уравнение состояния

$$p = \text{PINF} \frac{\rho T}{m} = \text{PINF} \rho T \sum_{i=1}^{N_{sp}} \frac{Y_i}{m_i}; \quad (2)$$

3) выражение для полной энергии

$$E = \text{HINF} \sum_{i=1}^{N_{sp}} Y_i h_i(T) + \frac{u^2 + v^2}{2} - \frac{p}{\rho}, \quad (3)$$

где использованы безразмерные комплексы

$$\text{PINF} = \frac{R_0 T_0}{m_0 V_0^2}, \quad \text{HINF} = \frac{(c_p)_0 T_0}{V_0^2},$$

$R_0 = 8,314$  Дж/(моль · К) — универсальная газовая постоянная;

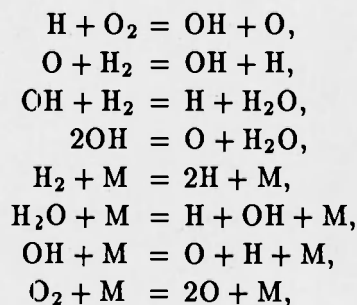
4) выражения для энтальпий компонентов  $h_i(T)$ , как правило, аппроксимируются полиномами от температуры;

5) выражение для химического источника  $i$ -го компонента, которое можно записать в виде

$$W_i = m_i \sum_{j=1}^{N_{react}} n_{ji} \cdot [Da^f \omega_j^f - Da^b \omega_j^b], \quad (4)$$

где  $N_{react}$  — количество реакций;  $n_{ji}$  — стехиометрический коэффициент при  $i$ -м веществе в  $j$ -й реакции ( $n_{ji} > 0$ , если в прямой реакции  $i$ -е вещество производится,  $n_{ji} < 0$ , если оно расходуется);  $\omega_j^f$  — скорость  $j$ -й прямой реакции;  $\omega_j^b$  — скорость  $j$ -й обратной реакции. Выражения для  $\omega_j^f$  и  $\omega_j^b$  можно найти, например, в [3]. Наконец, при работе в безразмерных переменных в (4) скорости реакции умножаются на числа Дамкелера прямой и обратной реакции  $Da^f$  и  $Da^b$ . Для бимолекулярных реакций вводится  $Da_b = \rho_0 L_0 / m_0 V_0$ , для тримолекулярных реакций  $Da_t = \rho_0^2 L_0 / m_0^2 V_0 = \rho_0 / m_0 \cdot Da_b$ . Эти числа размерные:  $[Da] = 1/[k]$  ( $[k]$  — размерность «константы» скорости химической реакции, входящей в выражение для  $\omega_j$ ).

Рассматриваются неравновесные течения водородовоздушной смеси. Используется модель горения водорода, состоящая из элементарных стадий ( $N_{react} = 8$  [4]):



в которых участвуют семь компонентов: радикалы H, O, OH и молекулы  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{N}_2$ . Азот играет роль инертной примеси и может быть третьей частицей M в тримолекулярных реакциях. Таким образом,  $N_{sp} = 7$ ,  $N_{comp} = 6$  и  $N_{dim} = 10$ .

Выражения для энтальпий компонентов и констант скоростей химических реакций, используемые в данной модели, можно найти в работе [4]. Следует отметить, что система уравнений (1)  $t$ -гиперболична, и постановка математически корректных краевых условий принципиально не отличается от случая совершенного невязкого газа.

### Описание численного алгоритма

Сущность предлагаемого численного алгоритма состоит в следующем. Уравнения движения газа записываются в преобразованной системе координат  $(i; j)$ , в которой расчетная область имеет форму прямоугольника, а ячейки расчетной сетки квадратные, размером  $1 \times 1$  (область индексов). Численная схема строится интегральным методом: уравнения движения интегрируются по объему, «заметаемому» ячейкой расчетной сетки за один временной шаг, после чего объемные интегралы преобразуются в поверхностные по формуле Гаусса — Остроградского и аппроксимируются. В итоге схему можно представить в виде

$$\tilde{u}_{ij}^{n+1} = \tilde{u}_{ij}^n + \tau \left[ \vec{Q}_{\text{конв}} + \vec{Q}_{\text{хим}} \right], \quad (5)$$

где  $\tilde{u} = \bar{u} / J$ ;  $J = i_x j_y - i_y j_x$  — якобиан преобразования координат;  $\tau$  — шаг по времени;  $\vec{Q}_{\text{конв}}$  и  $\vec{Q}_{\text{хим}}$  — вклады в  $\tilde{u}_{ij}^{n+1}$  от конвекции и химического источника.

При аппроксимации уравнений движения применяется локально-неявный подход, при котором  $\vec{Q}_{\text{конв}}$  аппроксимируется по параметрам с явного слоя  $t_n$ , и только для вклада от источника  $\vec{Q}_{\text{хим}}$  используется полунявная аппроксимация:

$$\vec{Q}_{\text{хим}} = \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{\vec{W}}{J} \right)_{ij}^n + \left( \frac{\vec{W}}{J} \right)_{ij}^{n+1} \right]. \quad (6)$$

Благодаря такому представлению  $\vec{Q}_{\text{конв}}$  и  $\vec{Q}_{\text{хим}}$  в каждой ячейке сетки возникает система неявных нелинейных уравнений, не связанная с соседними ячейками, что позволяет резко сократить затраты машинного времени по сравнению с полностью неявной аппроксимацией уравнений движения. Конечно, явная аппроксимация конвективных членов диктует ограничение на шаг по времени (число Куранта  $Cu \leq 1$ ), однако нельзя забывать, что применение больших чисел Куранта, допустимое с точки зрения устойчивости в полностью неявных схемах, неизбежно создает проблемы с надежностью и достоверностью счета.

Расчеты в каждой ячейке ведутся в следующем порядке:

- 1) по параметрам с явного слоя рассчитывается вектор  $\vec{Q}_{\text{конв}}$ ;
- 2) из первых четырех уравнений системы (5) имеем

$$\frac{(u_k)^{n+1}}{J^{n+1}} = \frac{(u_k)^n}{J^n} + \tau Q_k^{\text{конв}}$$

( $u_k = \rho, \rho u, \rho v, \rho E$  для  $k = 1, 2, 3$  и  $4$  соответственно), откуда по явной методике находятся  $\rho^{n+1}, u^{n+1}, v^{n+1}, E^{n+1}$ . Найти  $p^{n+1}, T^{n+1}$  пока нельзя, так как в  $E^{n+1}$  входит  $Y^{n+1}$ :

$$E^{n+1} = \text{HINF} \sum_{i=1}^{N_{sp}} Y_i^{n+1} h_i(T^{n+1}) + \frac{(u^{n+1})^2 + (v^{n+1})^2}{2} - \text{PINF} \cdot T^{n+1} \sum_{i=1}^{N_{sp}} \frac{Y_i^{n+1}}{m_i}; \quad (7)$$

3) вычисляется явная часть источника  $W^n$ ; 4) задается в качестве начального приближения  $(\bar{Y}^{n+1})^0 = \bar{Y}^n$ . Затем методом Ньютона обращается система из  $N_{comp}$  нелинейных уравнений для  $\bar{Y}^{n+1}$ :

$$\frac{(\rho Y_i)^{n+1}}{J^{n+1}} = \frac{(\rho Y_i)^n}{J^n} + \tau \left[ (Q_{4+i}^{конв})^n + \frac{1}{2} \left( \frac{\bar{W}_i^n}{J^n} + \frac{W_i^{n+1}}{J^{n+1}} \right) \right],$$

$$\bar{W}^{n+1} = \bar{W}(\rho^{n+1}, T^{n+1}, \bar{Y}^{n+1}).$$

На каждой ньютоновской итерации значения  $T$  находятся из уравнения (7) по текущим (итерационным) величинам  $\bar{Y}$  и известным  $E^{n+1}, u^{n+1}, v^{n+1}$ .

Когда  $\bar{Y}^{n+1}$  найдены, из (7) определяются  $T^{n+1}$ , а из уравнения состояния —  $p^{n+1}$ . Таким образом, параметры на неявном слое определены.

Достоинством данной процедуры является тот факт, что процессы химической кинетики и конвекции сильно связаны (по принятой в ряде работ терминологии, это strongly coupled алгоритм), в отличие от многих других методов, где производят расщепление по физическим процессам и делают сначала «конвективный» шаг, а затем «химический» или наоборот (см., например, [5] о методике effective gamma). В данной же методике оба процесса работают одновременно: при расчете  $Y_i^{n+1}$  используются «конвективные»  $\rho^{n+1}, v^{n+1}, E^{n+1}, u^{n+1}$  и  $(Q_i^{конв})^n$ , а при расчете «конвективных» параметров  $p^{n+1}$  и  $T^{n+1}$  используется  $\bar{Y}^{n+1}$ . Естественно, это приближает процедуру к физической реальности и делает ее более надежной.

В системе разностных уравнений (5) вклад от конвекции имеет вид

$$\bar{Q}_{конв} = (\bar{F}_{i-1/2} - \bar{F}_{i+1/2}) + (\bar{G}_{j-1/2} - \bar{G}_{j+1/2}),$$

$$\bar{F} = \bar{u} \frac{i_t}{J} + \bar{F} \frac{i_x}{J} + \bar{G} \frac{i_y}{J}, \quad \bar{G} = \bar{u} \frac{j_t}{J} + \bar{F} \frac{j_x}{J} + \bar{G} \frac{j_y}{J}.$$

Конкретный тип разностной схемы определяется выбором способа аппроксимации величин  $\bar{F}_{i\mp 1/2}, \bar{G}_{j\mp 1/2}$ . В качестве такого способа предлагается явная схема 2-го порядка аппроксимации по пространству и времени — схема предиктор — корректор Родионова [6]. Данная схема монотонная и аналогична широко распространенным ТУД-схемам. Она относится к классу так называемых схем Годунова, в которых для значений параметров на боковых гранях объема, «заметаемого» ячейкой за временной шаг, используется решение задачи Римана о распаде произвольного разрыва между двумя течениями, прилегающими к данной боковой грани. Достоинства такого подхода — ясный физический смысл и правильное распределение информации, приходящей на боковую грань слева и справа от нее. Благодаря этим свойствам схемы Годунова, безусловно, лучшие среди разработанных к настоящему времени в смысле надежности и качества результата.

Для решения задачи Римана выбрано приближенное безытерационное решение, предложенное в [7]. Основная идея этой методики состоит в пе-

переходе от исходной нелинейной системы уравнений Эйлера (записанной в одномерной постановке, вдоль нормали к боковой грани)

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{F}}{\partial n} = 0$$

к локально линеаризованной системе

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + A \frac{\partial \vec{u}}{\partial n} = 0,$$

где постоянная матрица  $A$  — аналог якобиана уравнений Эйлера  $\partial \vec{F} / \partial \vec{u}$ . Она вычисляется по параметрам течения слева и справа от боковой грани ( $A = A(\vec{u}_l, \vec{u}_r)$ ) и должна отвечать определенным требованиям, обеспечивающим наилучшие свойства приближения, в частности, возможность правильного выделения скачков уплотнения и контактных разрывов. Одно из этих требований —  $\Delta$ -свойство:

$$A(\vec{u}_r - \vec{u}_l) = \vec{F}(\vec{u}_r) - \vec{F}(\vec{u}_l). \quad (8)$$

Для совершенного газа матрица Рое совпадает с якобианом уравнений Эйлера, но вычисленным по осредненным величинам  $\bar{u}$ ,  $\bar{H}$  ( $u$  — скорость,  $H$  — полная энтальпия):

$$A = \frac{\partial \vec{F}}{\partial \vec{u}}(\bar{u}, \bar{H}).$$

Роевские осреднения определяются по следующим формулам:

$$\bar{u} = \frac{\sqrt{\rho_l} u_l + \sqrt{\rho_r} u_r}{\sqrt{\rho_l} + \sqrt{\rho_r}}, \quad \bar{H} = \frac{\sqrt{\rho_l} H_l + \sqrt{\rho_r} H_r}{\sqrt{\rho_l} + \sqrt{\rho_r}}. \quad (9)$$

Однако известно, что для многокомпонентного газа классические роевские осреднения неприменимы, т. е. не дают матрицы, удовлетворяющей требованиям Рое. Это связано с нелинейностью термодинамических функций. Возникает проблема уточнения роевских осреднений, которая представляет собой довольно сложную математическую задачу. Нетрудно доказать, что эта задача имеет много решений.

В ходе многих численных экспериментов установлено, что в основном поле течения многокомпонентного газа (на участках медленного изменения параметров) с высокой точностью можно пользоваться классическими роевскими осреднениями (9). И только в небольшом количестве ячеек, в которых выполняется условие

$$\frac{|\varkappa_r - \varkappa_l|}{\min \varkappa_l \varkappa_r} \geq 0,1 \%,$$

требуется уточнение роевских осреднений ( $\varkappa$  — показатель адиабаты). Такая ситуация возникает, например, в районе ударных волн, особенно фронтов детонации, а также фронтов пламени. Возможный вариант уточнения осреднений — прямое решение системы уравнений для роевских осреднений (8) методом Ньютона. Как уже сказано выше, необходимость в уточнении осреднений возникает сравнительно редко, поэтому данная трудоемкая операция не создает сколько-нибудь заметного увеличения затрат машинного времени. Другие способы решения задачи об уточнении роевских осреднений предлагаются, например, в [8, 9].

Второй порядок аппроксимации по пространству достигается тем, что распределение параметров внутри каждой расчетной области считается

линейным. Градиенты параметров определяются с использованием принципа минимальных значений производных, предложенного в [10] и исследованного и уточненного в [11]. При таком подходе значения параметров для задачи о распаде разрыва вычисляются по формулам

$$u_l = u_j + \frac{1}{2} \Delta u_j, \quad u_r = u_{j+1} - \frac{1}{2} \Delta u_{j+1},$$

$$\Delta u_j = \min\text{mod}(\Delta_{j+1/2} u, \Delta_{j-1/2} u), \quad \Delta_{j+1/2} u = u_{j+1} - u_j,$$

$$\min\text{mod}(a; b) = \text{sign}(a) \cdot \min(|a| \cdot |b|) \cdot \max(0, \text{sign}(a) \cdot \text{sign}(b)).$$

Для переменного шага сетки, а также для двумерных задач эти формулы усложняются. В данной работе используется методика [12].

Второй порядок аппроксимации по времени достигается следующим образом. Сначала выполняется шаг-предиктор по схеме Колгана и находят предикторные значения параметров  $u^*$ . Затем осуществляется шаг-корректор, в котором

$$u_l = \frac{1}{2}(u_j^n + u_j^*) + \frac{1}{2} \Delta u_j,$$

$$u_r = \frac{1}{2}(u_{j+1}^* + u_{j+1}^n) - \frac{1}{2} \Delta u_{j+1},$$

причем  $\Delta u_j$ ,  $\Delta u_{j+1}$  вычисляются по параметрам с явного слоя [6].

Следует отметить, что именно для реагирующих течений газа схема Родионова дает значительное улучшение качества решения. Причина этого в том, что, хотя течения невязкого реагирующего газа описываются гиперболическими уравнениями, римановы инварианты вдоль характеристик не сохраняются, а изменяются. Единственная возможность учесть это, оставаясь в рамках явной схемы, — сделать шаг-корректор по схеме Родионова. При этом предполагается модификация схемы Родионова, в которой источниковый член на шаге-корректоре не пересчитывается, а берется с явного слоя. Это не ухудшает свойств схемы, так как шаг-корректор предназначен для уточнения конвективных членов, а источниковый член благодаря полунявной аппроксимации (6) уже на предикторе считается со вторым порядком точности. Поскольку расчет источника занимает более 70 % времени счета, это дает заметное повышение эффективности вычислений. Схема Родионова устойчива при  $Cu \leq 1$ .

### Результаты расчетов

На основе изложенных идей создан комплекс программ SOLVER 2, предназначенный для расчета двумерных нестационарных течений невязкого многокомпонентного газа с неравновесными химическими реакциями. Возможно решение стационарных задач методом установления. В основном принципы организации комплекса аналогичны принципам разработанного в [13] комплекса SPRUT, который используется для расчета течений совершенного невязкого газа. Комплекс тщательно оттестирован. В частности, для проверки качества моделирования взаимодействия химической кинетики и конвекции использовалась достаточно жесткая тестовая задача об одномерном сверхзвуковом горении водородовоздушной смеси в канале постоянного сечения.

Длина области интегрирования в продольном направлении равна 10 см. На входе задан втекающий поток стехиометрической смеси (т. е. смеси с коэффициентом избытка топлива  $\varphi = 8Y_{H_2}/Y_{O_2} = 1$ ) при

$p = 1,34 \cdot 10^5$  Па,  $T = 1160$  К,  $M = 3,5$ . Уровень газодинамических параметров достаточен для самовоспламенения смеси, и в канале начинается горение, которое взаимодействует с конвекцией. Использована прямоугольная расчетная область размером  $10 \times 0,1$  см, в ней построена квадратная сетка  $100 \times 1$  ячеек (каждая ячейка со стороной 1 мм). В качестве начального приближения задавался равномерный поток с параметрами потока, втекающего в канал. За 500 итераций по времени по схеме Родионова получается установившееся решение. Процесс занимает 2 ч машинного времени на компьютере IBM 3033, и это вполне хороший результат для задач с химической кинетикой (рис. 1).

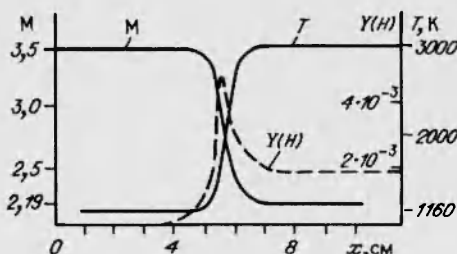


Рис. 1. Профили параметров при равномерном сверхзвуковом горении.

Решение задачи получено также с использованием одномерной программы высокого порядка точности для системы жестких уравнений химической кинетики (см., например, [14]). Результаты, полученные при помощи комплекса SOLVER 2, хорошо согласуются с этими высокоточными данными.

Затем проведен расчет более сложных задач с неравновесной химической кинетикой. Во всех этих задачах сходная конфигурация расчетной области: клин, на который налетает сверхзвуковой поток водородовоздушной смеси. На рис. 2 показан образец применявшейся расчетной сетки и указаны параметры, определяющие геометрию задачи. Их конкретные значения для каждой задачи, а также параметры потока на входе в расчетную область, количество сделанных итераций по времени и данные о сходимости приведены в таблице. В качестве начального поля всегда задавалось равномерное течение с такими же параметрами, что и во втекающем потоке. Для контроля сходимости при расчете стационарных течений методом установления использовался параметр

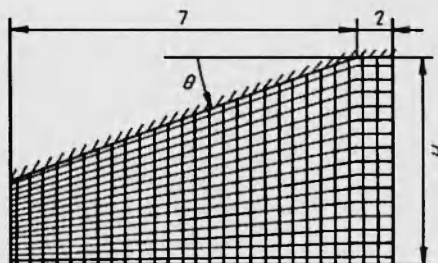


Рис. 2. Конфигурация расчетной области и расчетная сетка.

$$\Delta = \max_{i,j} \frac{|p_{ij}^{n+1} - p_{ij}^n|}{p_{ij}^n}.$$

**1. Классическая задача о присоединенной косо́й детонационной волне на клине** имеет аналитическое решение, если рассматривать ДВ как разрыв без учета структуры зоны горения, а также при условии, что известна величина тепловыделения в ДВ.

Размеры расчетной области выбрали так, что длина задержки воспламенения за скачком уплотнения составляла  $1/3$  длины клина. На рис. 3 видно, что у поверхности клина происходит обычное сверхзвуковое горение за УВ без сильной связи между ударным фронтом и фронтом пламени. Давление вдоль линий тока возрастает, так же как и при выделении тепла в сверхзвуковом одномерном течении в канале с постоянной площадью



Параметр	Задача			
	1	2	3	4
Размер сетки (количество ячеек)	55 × 30	55 × 30	70 × 50	55 × 35
Угол клина $\theta$ , град	20	20	26,5	20 – 5
Длина начального участка $l$ , м	0,0033	0,01	0,04	0,1
Длина основания клина $L$ , м	0,033	0,1	0,24	1,0
Ширина входного сечения $H$ , м	0,02	0,06	0,2,	0,7
Параметры на входе:				
давление $p \cdot 10^{-5}$ , Па	0,167	0,167	0,32	0,167
температура $T$ , К	850	850	450	850
число Маха $M$	5	~ 5	3,8	5
коэффициент избытка топлива $\varphi$	1,0	0,5–2	0,6	1,0
Количество итераций по схеме Родионова	455	265	1250	1500
Конечное значение параметра сходимости $\Delta$	$10^{-5}$	$10^{-2}$	—	—

сечения. При удалении от поверхности клина волны сжатия, зарождающиеся вследствие тепловыделения во фронте пламени, догоняют скачок уплотнения и усиливают его, температура за ним повышается, длина индукции сокращается, и в конце концов зона горения сливается со скачком уплотнения, образуя единую газодинамическую структуру — волну детонации. В результате в районе начала клина образуется волновая структура ( $\lambda$ -структура) характерного вида (рис. 4). При этом угол наклона скачка уплотнения возрастает от  $29^\circ$  до  $36^\circ$ , а давление вдоль линий тока уже начинает медленно уменьшаться (так как по нормали к фронту ДВ имеем одномерное дозвуковое горение, где давление падает). Угол наклона ДВ, полученный в расчете, и параметры потока за ДВ хорошо совпадают с величинами, которые можно получить с помощью законов сохранения.

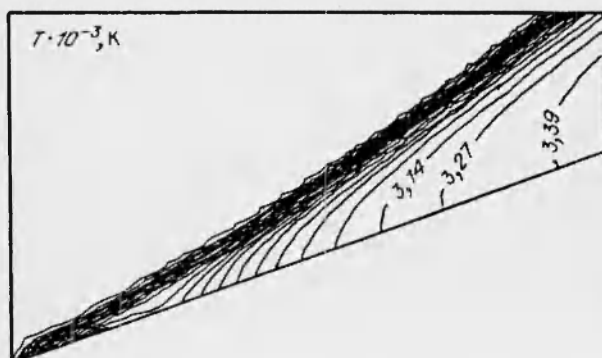


Рис. 3. Поле температуры (задача 1).

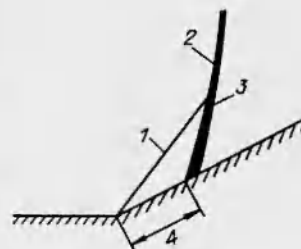


Рис. 4.  $\lambda$ -структура:

1 — скачок уплотнения; 2 — детонация; 3 — фронт пламени; 4 — длина индукции.

**2. Присоединенная волна детонации в неоднородной по составу смеси.** Рассмотренная задача усложнена: при той же конфигурации расчетной области на входе задавалась неоднородная по составу водородовоздушная смесь. Цель — моделирование ситуации, вполне возможной на практике из-за недостаточного перемешивания горючего с воздухом.

На входе задан следующий профиль концентрации водорода:

$$Y_{H_2} = \frac{1}{2} \left[ (Y_{\min} + Y_{\max}) + (Y_{\max} - Y_{\min}) \cos \frac{\pi y}{h} \right],$$

где  $h = L \operatorname{tg} \theta$  — высота клина (см. рис. 2). Величины  $Y_{\min}$  и  $Y_{\max}$  выбирались так, что коэффициент избытка топлива  $\varphi$  менялся от 0,5 до 2. При этом у нижней границы ( $y = 0$ ) концентрация молекулярного водорода максимальна ( $\varphi = \varphi_{\max} = 2$ ). Это моделирует случай, когда водород вдувается в поток с нижней границы.

Размеры расчетной области увеличены по сравнению с предыдущей задачей, так что длина задержки воспламенения занимала теперь  $\sim 1/9$  длины клина. Это вполне удовлетворительно, так как в данной задаче важен не участок индукции, а именно фронт волны детонации и влияние вариации  $\varphi$  на его форму.

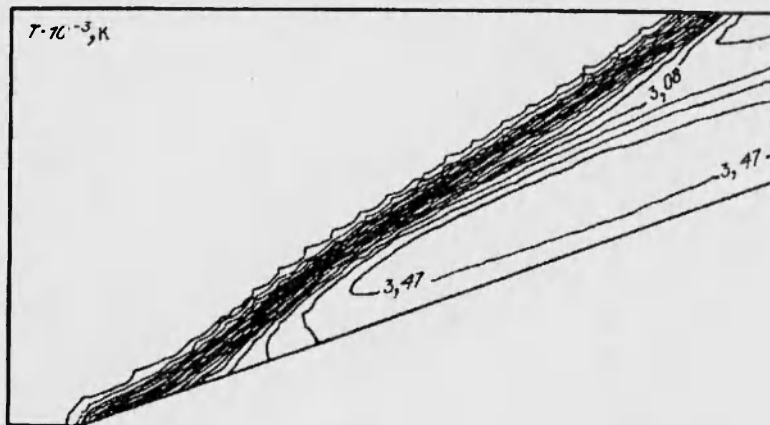


Рис. 5. Поле температуры (задача 2).

Итоговая картина представлена на рис. 5. Вариация  $\varphi$  приводит к тому, что фронт ДВ слегка изгибается, при этом локальный угол наклона фронта близок к тому, который можно получить из обычных расчетов на основе законов сохранения при данном составе смеси (т. е. при данном  $\varphi$ ). Никаких особых эффектов (таких, как выравнивание состава смеси за фронтом ДВ) не наблюдается.

**3. Задача об отошедшей ДВ на клине.** В камеру сгорания втекает однородно перемешанная водородовоздушная смесь. При натекании смеси на клин образуется УВ, переходящая в детонационное горение. Для моделирования стенок камеры на нижней и верхней границах ставилось условие типа «твердая стенка». Использовалась довольно грубая расчетная сетка (размер ячеек примерно  $4 \times 4$  мм), поэтому возможны ошибки в представлении процесса развития горения и в определении положения фронта пламени. Однако было желательно посмотреть общий характер течения в возможно большей области: измельчение сетки привело бы к весьма значительному росту времени счета.

Процесс, анализируемый в данной задаче, существенно нестационарный. Дело в том, что при заданных параметрах число Маха  $M$  втекающего потока меньше значения, соответствующего режиму Чепмена — Жуге (которое определяет скорость самоподдерживающейся ДВ относительно непрореагировавшей газовой смеси). Таким образом, любая ДВ, возникающая в расчетной области, должна распространяться вверх по течению.



Рис. 6. Поле давления (задача 3):

*a* — нерегулярное отражение ДВ; *b* — образование прямой ДВ.

Процесс развивается следующим образом. На клине образуется скачок уплотнения, который постепенно начинает отклоняться от клина, приближаясь к стационарному положению. По истечении периода индукции смесь загорается, зона горения догоняет скачок и сливается с ним, формируя фронт ДВ. В начальный момент очень хорошо видна  $\lambda$ -структура (см. рис. 4). Но, поскольку присоединенная ДВ при этих параметрах невоз-

можно, детонационная волна движется вперед, и постепенно участок, где скачок уплотнения отделен от фронта пламени, исчезает. ДВ все больше отклоняется от клина. Когда она достигает верхней стенки, то наблюдается отражение от нее. Отраженная волна — обычный скачок уплотнения потому, что он возникает в уже прореагировавшей смеси. Отклоняясь от верхней стенки, этот скачок догоняет ДВ, возникает нерегулярное (маховское) отражение (рис. 6,а). ДВ к этому моменту отходит от клина, и течение за ней становится в основном дозвуковым, а все УВ, возникающие за ней, оказываются нестационарными. Скачок уплотнения отражается от клина, причем отражение постепенно также становится нерегулярным. В поле течения за ДВ образуются сложные нестационарные ударно-волновые структуры, которые нагоняют ДВ, усиливая ее. ДВ все дальше отходит от клина, угол наклона ее растет, и наконец она переходит в прямую ДВ (рис. 6,б).

**4. Задача о ДВ на клине с изменяющимся углом наклона.** Рассмотрим клин с углом наклона  $\theta$ , на который натекает сверхзвуковой поток однородно перемешанной водородовоздушной смеси с заданным  $M_0$ . Предположим, что известен тепловой эффект при сгорании данной смеси  $q = Q/c_{p0}T_0$ , тогда ему соответствует скорость самоподдерживающейся ДВ относительно набегающего потока —  $M_{CJ}$  (число Маха в режиме Чепмена — Жуге):

$$M_{CJ} = \sqrt{A + \sqrt{A^2 - (\alpha_2/\alpha_1)^2}}, \quad A = \frac{(\alpha_2^2 - 1)q + \alpha_2^2/\alpha_1 - 1}{\alpha_1 - 1},$$

где  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  — значения показателя адиабаты до и после сгорания смеси.

Режим Чепмена — Жуге реализуется при угле клина  $\theta_{CJ}$ :

$$\operatorname{tg} \theta_{CJ} = \frac{\operatorname{tg} \beta_{CJ} \cdot (1 - \xi)}{1 + \xi \operatorname{tg}^2 \beta_{CJ}}, \quad \xi = \frac{(1 + \alpha_1 M_{CJ}^2) \cdot \alpha_2 / \alpha_1}{(1 + \alpha_2) M_{CJ}^2},$$

$\beta_{CJ} = \operatorname{arcsin} \frac{M_{CJ}}{M_0}$  — угол наклона ДВ в самоподдерживающемся режиме.

Если  $\theta > \theta_{CJ}$ , то ДВ, возникающая на клине, пересжатая. Режим пересжатой волны достаточно ясен. Если  $\theta$  не очень велик, то реализуется присоединенная ДВ, и с помощью законов сохранения легко рассчитать  $\beta_{CJ}$  и параметры за ДВ. При угле клина, большем критического, возникает отошедшая ДВ.

Однако неясно, что получится при  $\theta < \theta_{CJ}$ . Если реакция протекает с бесконечной скоростью ( $\tau_{хим} = 0$ ), можно предложить такое решение: самоподдерживающаяся ДВ, разворачивающаяся волна разрежения, возвращающая течение к направлению, задаваемому клином (рис. 7,а). Кроме того, поворот потока на угол  $\theta < \theta_{CJ}$ , в принципе, может быть осуществлен в недосжатой ДВ с  $\beta > \beta_{CJ}$  (рис. 7,б): течение по нормали к такой волне всюду сверхзвуковое.

Однако чисто газодинамически создать такую волну невозможно; для этого необходимо какое-нибудь внешнее воздействие, стимулирующее горение, например поджигание газа лазерным лучом [15].

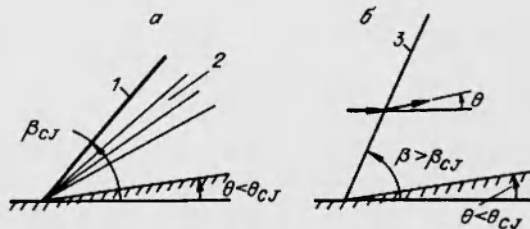


Рис. 7. Варианты течения при  $\theta < \theta_{CJ}$  (бесконечная скорость химических реакций):

1 — детонация Чепмена — Жуге; 2 — волна разрежения; 3 — недосжатая детонация.

Рассмотрим случай, когда скорость реакции конечна. Пусть вначале  $\theta > \theta_{СД}$ , и на клине возникла пересжатая ДВ. При приближении  $\theta$  к  $\theta_{СД}$  ДВ, очевидно, будет стремиться к режиму Чепмена — Жуге. Ситуация  $\theta < \theta_{СД}$  интересна для теории и практики. Например, в камере сгорания детонационного ГПВРД клин может использоваться для стабилизации горения. Но в условиях реального полета возможно непредсказуемое изменение скорости потока, натекающего на клин, а рост  $M_0$  при  $\theta = \text{const}$  эквивалентен уменьшению  $\theta$  при  $M_0 = \text{const}$ .

Для ответа на вопрос, будет ли стабилизироваться при этом горение и сохранится ли его локализация на клине, проведен численный расчет. Вначале задан угол клина  $\theta = 20^\circ$ , заведомо больший  $\theta_{СД}$  (для рассматриваемой смеси  $\theta_{СД} \sim 10^\circ$ ). Сделано 500 итераций по времени по схеме Родионова, в результате чего получено установившееся решение — пересжатая ДВ, соответствующая данному углу. Далее началось медленное (квазистационарное) уменьшение угла клина с такой скоростью, что за 1000 итераций угол должен уменьшиться до  $5^\circ$ , что меньше  $\theta_{СД}$ . Это позволило проследить все протекающие при этом явления.

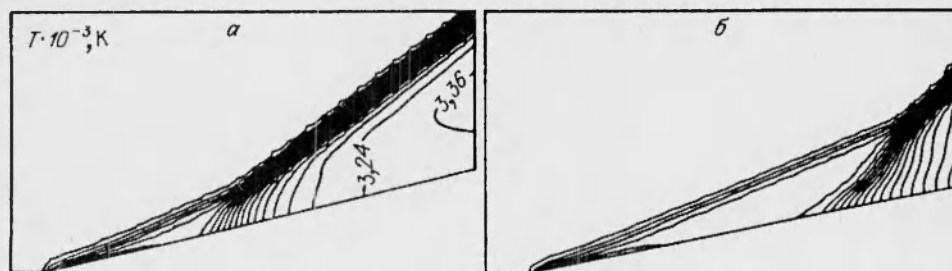


Рис. 8. Поле температуры (задача 4) при угле клина  $\theta = 13,4$  (а) и  $11,24^\circ$  (б).

Установлено, что решающую роль в эволюции течения играет  $\lambda$ -структура (см. рис. 4). Если бы ДВ начиналась прямо от вершины клина (т. е. автомодельное решение), тогда возможны два решения, описанные выше. Но реальная ДВ не автомодельна. У поверхности клина зона горения отделена от скачка уплотнения. При уменьшении  $\theta$  скачок уплотнения ослабляется, температура за ним падает, период индукции (экспоненциально зависящий от температуры) увеличивается, и зона горения уходит вниз по течению (и в конце концов покидает расчетную область). Стабилизации пламени нет. (При этом, если зафиксировать угол клина, то решение будет стационарным.) Два последовательных момента счета показаны на рис. 8. К сожалению, полученные результаты не позволяют пока дать точный ответ на вопрос, что при этом реализуется вдали от поверхности клина? Однако, исходя из решающей роли  $\lambda$ -структуры в формировании картины течения, можно высказать следующие предположения.

В зоне горения зарождаются волны сжатия, которые догоняют скачок уплотнения. В результате скачок искривляется, температура за ним растет, и зона горения все сильнее приближается к скачку. Между скачком уплотнения и зоной горения линии тока искривлены, а за зоной горения они параллельны поверхности клина (рис. 9). В случае  $\theta = \theta_{СД}$  в определенный момент искривляющийся скачок уплотнения достиг бы угла наклона  $\beta_{СД}$ , и реализовалась бы детонация Чепмена — Жуге. При этом по нормали к скачку уплотнения за зоной горения  $M = 1$ , волны сжатия перестают догонять скачок (распространяются параллельно ему), и развитие процесса

прекращается. Но в данном случае  $\theta < \theta_{CJ}$ , поэтому по мере искривления скачка уплотнения еще до того, как его угол наклона станет равным  $\beta_{CJ}$ , наступит момент, когда линии тока за зоной горения начнут отклоняться на угол, больший угла клина. Следовательно, за зоной горения возникнут волны разрежения, возвращающие поток к углу, задаваемому клином. Но режим Чепмена — Жуге еще не достигнут, число Маха по нормали к скачку уплотнения меньше единицы, следовательно, эти волны разрежения будут доходить до скачка и противодействовать его дальнейшему искривлению.

Далее можно предположить два варианта развития процесса.

1. Волны разрежения уравнивают волны сжатия, идущие из зоны горения, и скачок уплотнения перестает отклоняться. В дальнейшем скачок уплотнения параллелен фронту пламени, при этом линии тока за фронтом всюду параллельны поверхности клина (рис. 10). Однако данная картина течения противоречива. Действительно, распишем уравнение сохранения массы, импульса и энергии для контура  $ABCD$ . Поскольку на линии  $AB$  поток всюду имеет  $\theta = 0$ , а на линии  $CD$   $\theta < \theta_{CJ}$ , то законы сохранения, очевидно, дадут решение, соответствующее режиму недосжатой ДВ. Однако в этом режиме число Маха по нормали к волне за зоной горения  $M_{2n}$  должно быть больше единицы, а в данном случае  $M_{2n} < 1$ . Кроме того, угол наклона недосжатой ДВ  $\beta > \beta_{CJ}$ , а режим Чепмена — Жуге еще не достигнут. Следовательно, этот вариант невозможен.

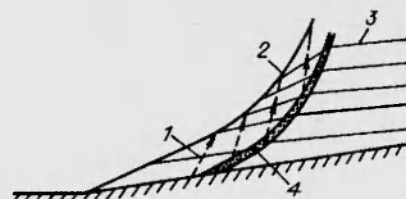


Рис. 9. Схема течения вблизи поверхности клина:

1 — волны сжатия; 2 — скачок уплотнения; 3 — линии тока; 4 — фронт пламени.

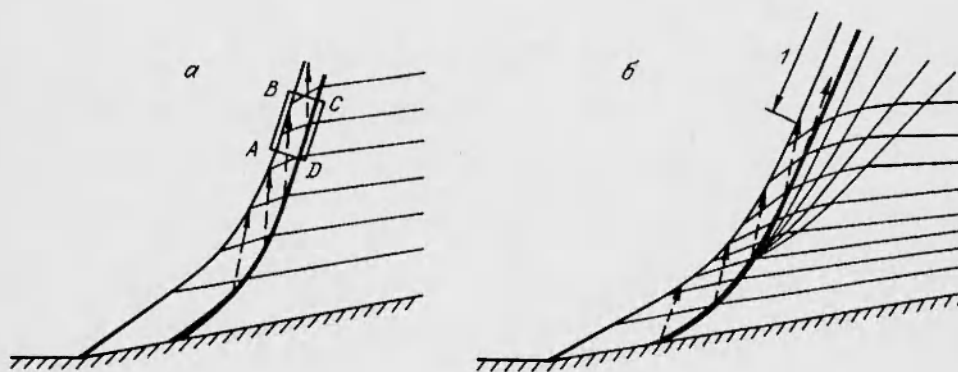


Рис. 10. Первый (а) и второй (б) варианты решения вдали от клина при  $\theta < \theta_{CJ}$ .

2. Волны сжатия преобладают, скачок продолжает отклоняться, несмотря на возникающее за ним разрежение. Тогда в определенный момент он достигнет значения  $\beta_{CJ}$ , и реализуется самоподдерживающаяся детонация Чепмена — Жуге,  $M_{2n} = 1$ . После этого течение будет совпадать с решением, предложенным выше для  $\tau_{хим} = 0$ . Приблизительная картина течения изображена на рис. 10, б, где 1 — режим Чепмена — Жуге. По-видимому, реализуется именно этот вариант решения.

### Заключение

Итак, на основе описанного выше численного метода создан работающий комплекс программ, предназначенный для расчета двумерных течений невязкого реагирующего газа. Структура комплекса и ряд дополняющих его сервисных программ делают его использование достаточно простым и удобным. Комплекс пригоден для решения как задач прикладного плана, так и представляющих общий научный интерес, но не поддающихся аналитическому решению, в которых необходимо учитывать взаимодействие газодинамических эффектов с химической кинетикой.

С помощью комплекса SOLVER 2 проведен численный расчет ряда задач, где рассматриваются течения с косою ДВ на клине. Результаты расчетов показывают, что:

1) присоединенная ДВ на клине не является автомодельным решением. В районе вершины клина возникает  $\lambda$ -структура, в которой зона горения отделена от ударного фронта;

2) при наличии значительной вариации состава смеси, натекающей на клин ( $0,5 < \varphi < 2$ ), возможна стабилизация горения в ДВ на клине. Фронт ДВ незначительно изгибается в зависимости от  $\varphi$ . Никаких специфических эффектов, не предсказываемых элементарной теорией детонации, не обнаружено;

3) если угол клина меньше угла Чепмена — Жуге, горение не стабилизируется на клине, при уменьшении угла клина зона горения уходит вниз по течению. Это связано с неавтомодельностью ДВ и наличием  $\lambda$ -структуры.

Проведен расчет сложного нестационарного течения с отошедшей ДВ, демонстрирующий возможности численного моделирования неустановившихся течений. Все перечисленные результаты получены в рамках модели невязкого газа. Эффекты вязкости и турбулентности могут привести к изменению картины течения.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Menees G. P., et al. Wave combustors for transatmospheric vehicles // 9th Intern. Symp. on Airbreathing engines. Sept. 1989.
2. Пензин В. И. К вопросу о месте детонационного ГПВРД в семействе прамоторных двигателей. М., 1992. (Препр. ЦАГИ; № 59).
3. Лапин Ю. В., Стрелец М. Х. Внутренние течения газовых смесей. М.: Наука, 1989.
4. Moretti G. A new technique for the numerical analysis of nonequilibrium flows // AIAA J. 1965. V. 3, N 2.
5. Tannehill J., Ievalts J., Prabhu D., Lawrence S. An upwind parabolized Navier — Stokes code for chemically reacting flows // AIAA. Conf. June 27–29, 1988. San Antonio, Texas.
6. Родионов А. В. Монотонная схема 2-го порядка аппроксимации для сквозного расчета неравновесных течений // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1987. Т. 27, № 4, С. 585–593.
7. Roe P. Approximate Riemann solvers, parameter vectors and difference schemes // J. Comput. Phys. 1981. V. 43. P. 357–372.
8. Liu Y., Vinokur M. Upwind algorithms for general thermo-chemical nonequilibrium flows. AIAA. Pap. N 0201. 1989.
9. Куприянова Т. В., Михайлов Ю. Я., Чинилов А. Ю. Построение приближенной задачи о распаде разрыва в газе с произвольным уравнением состояния // Аэротермодинамика воздушно-космических систем. М.: ЦАГИ, 1992. Ч. 2.
10. Колган В. П. Применение принципа минимальных значений производной к построению конечно-разностной схемы для расчета разрывных решений газовой динамики // Учен. зап. ЦАГИ. 1972. Т. 3, № 6. С. 68–77.

11. Harten A. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws // J. Comput. Phys. 1983. V. 49, N 3.
12. Тилляева Н. И. Обобщение модифицированной схемы С. К. Годунова на произвольные нерегулярные сетки // Учен. зап. ЦАГИ. 1986. Т. 17, № 2. С. 18-26.
13. Беляев А. В., Босняков С. М., Михайлов С. В. и др. К вопросу об обтекании ЛА сверх- и гиперзвуковым потоком идеального газа // Аэротермодинамика воздушно-космических систем. М.: ЦАГИ, 1992. Ч. 2.
14. Оран Э., Борис Дж. Численное моделирование реагирующих потоков. М.: Мир, 1990.
15. Зверев И. Н., Смирнов Н. Н. Газодинамика горения. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1987.

*Поступила в редакцию 15/XI 1993 г.*

---