

УДК 004.942, 533.17, 536.46

Решение задачи горения водорода в сверхзвуковом потоке с помощью модуля Ansys CFX

Платонов И.М.

*Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), МАИ, Волоколамское шоссе, 4, Москва, А-80, ГСП-3, 125993, Россия
e-mail: platonov@mai.ru*

Аннотация

В работе представлена математическая модель, описывающая процесс горения водорода в сверхзвуковом потоке воздуха. Верификация модели проведена по результатам экспериментальной работы, выполненной в Институте теоретической и прикладной механики СО РАН Забайкиным В.А.. Приведены результаты математического моделирования процессов горения водорода в сверхзвуковой воздушной струе с учетом диссоциации воздуха.

Ключевые слова: гиперзвуковое течение, уравнения Навье-Стокса, уравнения химической кинетики, горение водорода

Введение

При разработке и проектировании новой авиационной и ракетно-космической техники бывает целесообразным провести предварительный расчет конструкции

применительно к условиям ее будущего функционирования. Это позволяет выявить проблемные места конструкции и недочеты организации рабочего процесса на раннем этапе реализации проекта.

В данной работе решается задача, которая позволяет оценить эффективность различного вида организации впрыска топлива. Для решения поставленной задачи составляется математическая модель, в которую входят уравнения Навье-Стокса, уравнения химической кинетики и уравнения модели турбулентности. При рассмотрении процессов химической кинетики учитывались реакции горения водорода и диссоциация воздуха. Горение водорода описывалось семью простейшими уравнениями реакций. Диссоциация воздуха задавалась пятью уравнениями. Такое количество уравнений позволяет учесть до 80% вклада реакций в общую картину течения, что допустимо при проведении предварительного расчета. В качестве модели турбулентности была выбрана модель Ментера – SST, в виду своей универсальности при описании, как пристеночных течений, так и свободного истечения. Для решения задачи численными методами была построена расчетная сетка, размером 500 тыс. ячеек. Задача решалась в квазистационарной постановке.

Верификация математической модели происходила по данным эксперимента, проведенного в лаборатории горения в Институте Теоретической и Прикладной Механики СО РАН под руководством П.К. Третьякова. В качестве топлива использовался водород. Исследования проводились для спутной и сверхзвуковой подачи горючего в камеру ГПВРД. Экспериментальная установка состояла из

профилированного сверхзвукового сопла, через которое подавался горячий воздух. На оси симметрии сопла устанавливался пилон, через который в поток подавался водород.

Результаты, полученные при численном моделировании сверхзвукового горения, хорошо согласуются с данными эксперимента. На этом основании можно утверждать, что с помощью данной математической модели может быть выполнено математическое моделирование процессов горения в камерах ГПВРД.

Математическая модель

В общем случае для решения задач газовой динамики используется система осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье-Стокса[2][3][4], которая включает в себя следующие уравнения:

уравнение неразрывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j) = 0; \quad (1)$$

уравнение импульса:

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

уравнение энергии:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho I) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho u_j \left(I + \frac{p}{\rho} \right) + q_j - u_i \tau_{ij} \right] = 0; \quad (3)$$

уравнение состояния:

$$p = \rho RT; \quad (4)$$

уравнение сохранения массы химического компонента s :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho C_s) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho C_s u_j + g_{s,j}) = \omega_s, \quad s = 1, 2, \dots, N-1. \quad (5)$$

Здесь: ρ - плотность газовой смеси; u_j - компонента скорости в j -ом направлении; p - давление; τ_{ij} - тензор напряжений; q - плотность теплового потока колебательной энергии, учитывающая перенос тепла за счет теплопроводности и диффузии; C_s - массовая доля компонента s ; ω_s - скорость образования компонента s в результате химических реакций; g_s - диффузионный поток компонента s ; N - количество компонентов газовой смеси; T - температура; R - газовая постоянная;

$$I = \sum_{i=1}^n I_i C_i - \text{полная энтальпия смеси};$$

$$I_i = i_i + h_{xi} - \text{полная энтальпия } i\text{-го компонента};$$

$$i_i = \int_{T_0}^T c_{pi} dT - \text{энтальпия нагрева до температуры смеси}; \quad h_{xi} - \text{энтальпия образования } i\text{-го}$$

компонента;

Система уравнений дополняется уравнениями для химической кинетики [5] и модели турбулентности [6].

Решению уравнений Навье-Стокса численными методами посвящено достаточное количество работ – поэтому в данной работе этот вопрос рассматриваться не будет. Основное внимание будет уделено вопросам горения топлива в сверхзвуковом потоке и влиянию геометрических параметров сопла на величину тягового импульса.

Химическая кинетика

Для N компонентов и M элементарных химических реакций можно записать следующую систему уравнений:

$$\sum_{k=1}^N v'_{kj} \Psi_k = \sum_{k=1}^N v''_{kj} \Psi_k, \quad j=1, M, \quad (6)$$

где: Ψ_k – символ для компоненты k ;

v'_{kj}, v''_{kj} – молярные стехиометрические коэффициенты

компонента k в реакции j .

Система (6) должна удовлетворять уравнению сохранения массы:

$$\sum_{k=1}^N v_{kj} W_k = 0, \quad j=1, M, \quad (7)$$

где: $v_{kj} = v''_{kj} - v'_{kj}$;

W_k – молярная масса компонента k .

Скорость образования компонента k в реакции j :

$$\omega_{kj} = r_j W_k v_{kj}, \quad (8)$$

где: r_j - скорость протекания реакции j .

Общая скорость ω_k образования компонента k записывается как сумма всех скоростей M элементарных реакций:

$$\omega_k = \sum_{j=1}^M \omega_{kj} = W_k \sum_{j=1}^M r_j v_{kj}. \quad (9)$$

Из (7) и (9) можно записать

$$\sum_{j=1}^M \omega_{kj} = \sum_{j=1}^M \left(r_j \sum_{k=1}^N W_k v_{kj} \right). \quad (10)$$

Скорость протекания реакции r_j находится как разность между скоростями протекания прямой и обратной реакций:

$$r_j = r_{f,j} - r_{b,j}, \quad (11)$$

где:

$$r_{f,j} = K_{f,j} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{v_{kj}}, \quad (12)$$

$$r_{b,j} = K_{b,j} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{v_{kj}^*}. \quad (13)$$

Скорости прямой и обратной реакции, $K_{f,j}$ и $K_{b,j}$, находятся по закону Аррениуса:

$$K_{f,j} = A_{f,j} T^{n_{f,j}} \exp\left(-\frac{E_{f,j}}{RT}\right). \quad (14)$$

В формуле (14) представлены следующие параметры:

$A_{f,j}$ – предэкспоненциальный коэффициент;

$T^{n_{f,j}}$ – температурный коэффициент;

$E_{f,j}$ – энергия активации;

R – универсальная газовая постоянная;

T – температура газа.

Скорость обратной реакции $K_{b,j}$ находится обычно из скорости прямой реакции и константы равновесия:

$$K_{b,j} = K_{f,j} \left[\left(\frac{p_a}{RT} \right)^{\sum_{k=1}^N v_{kj}} \exp\left(\frac{\Delta S_j^0}{R} - \frac{\Delta H_j^0}{RT} \right) \right]^{-1} \quad (15)$$

где: p_a - окружающее давление;

$\Delta S_j^0, \Delta H_j^0$ - изменение энтропии и энтальпии в результате реакции.

Реакции диссоциации и рекомбинации воздуха [7], горения водорода [8], а также коэффициенты скоростей химических реакций [9], использованные при моделировании горения в сверхзвуковом течении, приведены в табл. 1. Причем М – это любое третье тело, участвующие в реакции.

Таблица 1. Используемые уравнения и коэффициенты реакций

Реакция	$A_{f,j}$, см ³ /моль·с	$n_{f,j}$	$E_{f,j}$, К
Реакции диссоциация воздуха			
$O_2 + M \rightarrow 2O + M$	$2 \cdot 10^{21}$	-1.5	59500
$N_2 + M \rightarrow 2N + M$	$7 \cdot 10^{21}$	-1.6	113200
$NO + M \rightarrow N + O + M$	$5 \cdot 10^{15}$	0	75500
$N + O_2 \rightarrow NO + O$	$8.4 \cdot 10^{12}$	0	19400
$N_2 + O \rightarrow NO + N$	$5.7 \cdot 10^{12}$	0.42	42938
Реакции горения водорода			
$H_2 + O_2 \rightarrow OH + OH$	$0.17 \cdot 10^{14}$	0	2424
$H + O_2 \rightarrow OH + O$	$8.65 \cdot 10^{14}$	0.24	8220
$O + H_2 \rightarrow OH + H$	$1.5 \cdot 10^7$	2	3800
$OH + H_2 \rightarrow H_2O + H$	$2.53 \cdot 10^8$	1.48	1700
$OH + OH \rightarrow H_2O + O$	$1.5 \cdot 10^9$	1.14	50
$H + H + M \rightarrow H_2 + M$	$9.72 \cdot 10^{16}$	-0.6	0
$H + OH + M \rightarrow H_2O + M$	$2 \cdot 10^{20}$	-1	0

Модель турбулентности

На сегодняшний день существует большое количество различных моделей турбулентности, таких как, например, k-ε, k-ω и SST. Каждая из них имеет свои особенности и области применения.

Модель переноса касательных напряжений (Shear Stress Transport, SST) Ментера является комбинацией моделей k-ε и k-ω. Для пристеночного слоя используется k-ω, а для внешнего региона - k-ε. Это придает модели турбулентности SST свойство универсальности. Именно поэтому она была использована в данной работе. Математическое выражение SST-модели турбулентности описывается следующими уравнениями:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j k)}{\partial x_j} = P - \beta^* \rho \omega k + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \sigma_k \mu_t) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right], \quad (16)$$

$$\frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j \omega)}{\partial x_j} = \frac{\gamma}{\nu_t} P - \beta \rho \omega^2 + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \sigma_\omega \mu_t) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + 2(1 - F_1) \frac{\rho \sigma_{\omega 2}}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}, \quad (17)$$

где:

$$P = \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}, \quad (18)$$

$$\tau_{ij} = \mu_t \left(2S_{ij} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij}, \quad (19)$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (20)$$

$$\mu_t = \frac{\rho k}{\omega}. \quad (21)$$

Обозначая обобщенным параметром ϕ_1 набор констант оригинальной модели $k-\omega$ с индексами 1 и соответственно 2 аналогичный набор констант трансформированной $k-\varepsilon$ модели, получаем:

$$\phi = F_1\phi_1 + (1 - F_1)\phi_2. \quad (22)$$

Верификация математической модели

Для верификации математической модели результаты численного эксперимента были сопоставлены с результатами, полученными при проведении реального эксперимента В.А. Забайкиным. Серия экспериментов проводилась в лаборатории ИТПМ СО РАН под руководством П.К. Третьякова. В экспериментах проводилось исследование влияния способа подачи горючего на полноту и интенсивность его сгорания, горение в каналах различной формы и влияние волновой структуры потока на задержку воспламенения и стабилизацию пламени. Для этого организовывался впрыск водорода в сверхзвуковую воздушную струю в затопленное пространство, а также в каналы различной конфигурации. Для подачи воздуха использовалось профилированное сопло, на оси которого устанавливался пилон для подачи горючего. Фотография экспериментальной установки представлена на рис. 1.



Рис.1 Экспериментальная установка.

Эксперименты проводились при начальных условиях, представленных в таблице 2.

Таблица 2. Начальные условия

Параметр	Набегающий поток	Впрыск горючего
Диапазон температур, К	1400-2200	270-300
Диапазон Чисел Маха	1,4 – 2,2	1-2,7
Давление, Па	$0,6-1,1 \cdot 10^5$	$0,3-1,1 \cdot 10^5$
Расход, г/с	600-800	1,4-10

В среде Workbench программного комплекса Ansys была построена твердотельная геометрия и расчетная сеточная модель в форме тетраэдров. Далее, в среде CFX задавались начальные и граничные условия, затем производился расчет. На рисунках 2-5 представлены некоторые результаты численного моделирования.

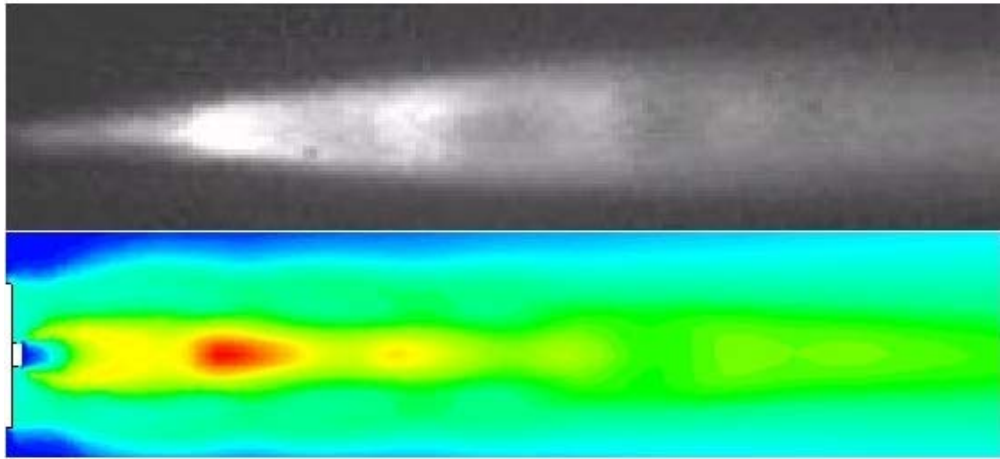


Рис.2. Фотография факела и расчетные поля температур для $M_{\text{возд}}=2,2$; $M_{\text{H}_2}=1$,
 $T_0=1850\text{K}$, $T_{\text{H}_2}=240\text{K}$, $P_0=0,5$ МПа, $n=0.6$.

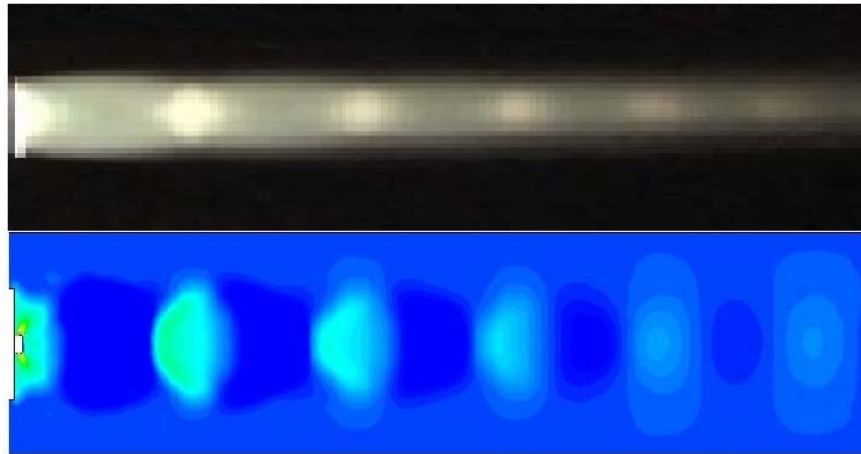


Рис. 3. Фотография и расчетные значения давления струи. $M_{\text{возд}}=2,2$; $M_{\text{H}_2}=1,45$;
 $T_0=2000\text{K}$, $T_{\text{H}_2}=194\text{K}$,

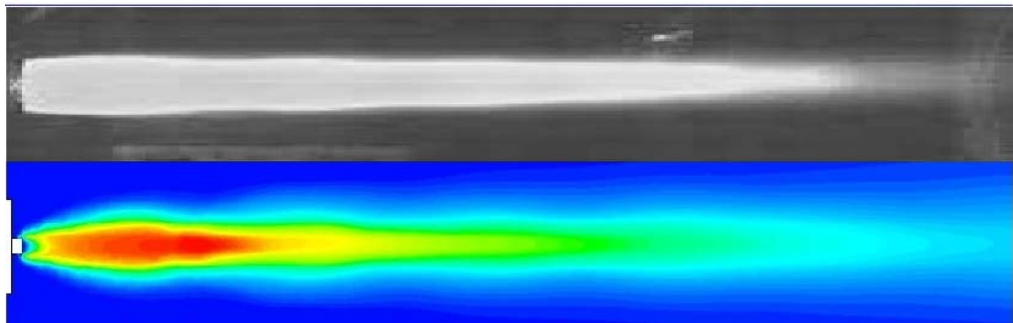


Рис.4. Фотография факела и поля температур при условиях: $P_0=7,4$ ат, $T_0=1900$
 K , $M_{\text{возд}}=2,2$; $M_{\text{H}_2}=1$.

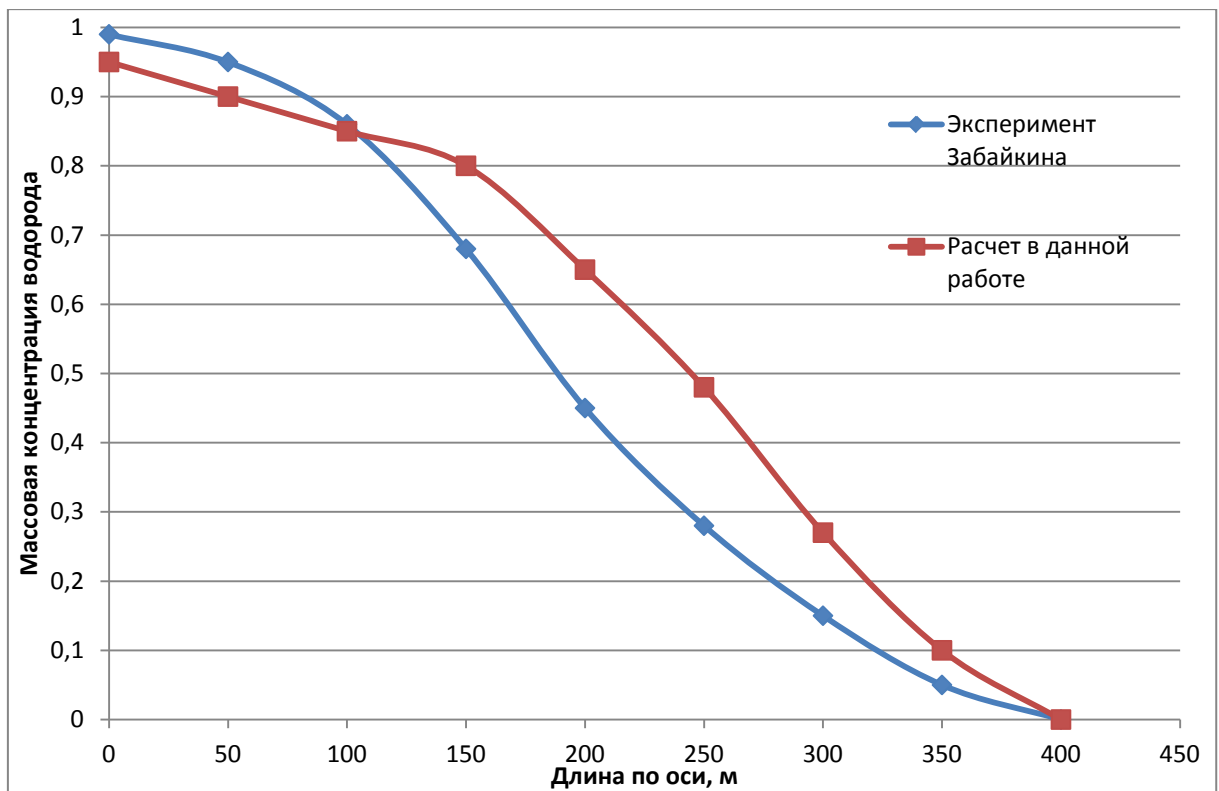


Рис. 5. Массовая концентрация водорода в эксперименте и при расчете.

$$M_{\text{возд}}=2,2; M_{\text{H}_2}=1, T_0=1850\text{K}, T_{\text{H}_2}=240\text{K}, P_0=0,5 \text{ МПа}, n=0,6.$$

Выводы

В работе представлена математическая модель, описывающая процесс горения водорода в сверхзвуковом потоке воздуха. Для верификации математической модели результаты численного эксперимента были сопоставлены с результатами, полученными при проведении реального эксперимента. Сопоставление полученных результатов расчетов с данными экспериментальных исследований В.П. Забайкина позволяет сделать вывод о том, что рассматриваемая в данной работе математическая модель достаточно достоверно описывает физико-химические процессы, протекающие в КС.

Библиографический список

1. E.T. Curran, S.N.B. Murthy. Scramjet Propulsion // Progress in Astronautics and Aeronautics. 2000. Vol. 189. 1336 pages.
2. Абрамович Г.Н. Прикладная газовая динамика. – М.: Наука, 1969. - 600 с.
3. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. – М.: Дрофа, 2003. - 846 с.
4. Основы теплопередачи в авиационной и ракетно-космической теплотехнике / Под ред. В.С. Авдуевского, В.К. Кошкина. – М: Машиностроение, 1992. - 528 с.
5. Франк-Каменецкий Д. А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. – М.: Наука, 1987 (3-е изд.). - 502 с.
6. Аникеев А.А., Молчанов А.М., Янышев Д.С. Основы вычислительного теплообмена и гидродинамика. - М.: МАИ, 2010, -149 с.
7. Candler, G.V. “The Computation of Weakly Ionized Flows in Thermo-Chemical Nonequilibrium” PhD. Thesis, Stanford University, 1988. С. 36-43.
8. Молчанов А.М., Быков Л.В., Донских В.В. Расчет высотных струй реактивных двигателей с учетом колебательной релаксации // Вестник Московского авиационного института. 2012. Т.19. № 5. С.51-60.
9. Быков Л.В., Завелевич Ф.С., Молчанов А.М. Расчет теплового излучения струй реактивных двигателей // Тепловые процессы в технике. 2011. Т.3. № 4. С.164-176.
10. Забайкин В.А. Газодинамика горения в открытом потоке и каналах переменной геометрии: Дисс. ...д.т.н. – Новосибирск. 2012. 256 с.