
УДК 629.7.036.54-63-225.5

ТЕРМОХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕИЗОЭНТРОПИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В КАМЕРАХ СГОРАНИЯ И СОПЛАХ РАКЕТНЫХ ДВИГАТЕЛЕЙ

© 2020 г. Д. М. Борисов^{1, *}, В. В. Миронов¹, Ю. А. Шураев¹

¹ГНЦ ФГУП “Исследовательский Центр им. М.В. Келдыша”, Москва, Россия

*e-mail: borisovdm62@mail.ru

Поступила в редакцию 26.12.2019 г.

После доработки 13.01.2020 г.

Принята к публикации 14.01.2020 г.

Сформулирован подход к решению проблемы термохимического моделирования неизоэнтропических сдвиговых течений в камерах сгорания и соплах ракетных двигателей. Для расчета химического равновесия продуктов сгорания топлива создана методика определения массовых скоростей образования компонентов смеси в неизоэнтропическом течении. В рамках сформулированного подхода, в качестве примера, проведен расчет пограничного слоя на стенке камеры сгорания и сопла кислородно-водородного ракетного двигателя. Выполнено тестирование полученного численного решения и проведены параметрические исследования процессов течения и теплообмена.

Ключевые слова: неизоэнтропические сдвиговые течения, химическое равновесие продуктов сгорания топлива, массовые скорости образования компонент смеси, камера сгорания и сопло ракетного двигателя

DOI: 10.31857/S0002331020010033

ВВЕДЕНИЕ

Одним из основных направлений развития средств выведения современных ракетно-космических систем является совершенствование энергомассовых характеристик двигательных установок и обеспечение их работоспособности. Рабочие процессы, протекающие в камерах сгорания и соплах ракетных двигателей, характеризуются высокой тепловой напряженностью и химической активностью продуктов сгорания топлива.

Термохимическому и газодинамическому моделированию камер сгорания и сопел ракетных двигателей посвящено большое число теоретических и экспериментальных исследований, по результатам которых созданы отраслевые методики и программные комплексы для определения различных характеристик двигательных установок [1–4] и т.д.

Наибольшее распространение для термодинамического расчета камер сгорания и сопел ракетных двигателей получила модель равновесного течения с замораживанием [4], согласно которой в областях с малой скоростью протекания химических реакций процессы химических превращений не рассматриваются. В качестве критерия для определения областей замороженного течения берется величина статической температуры продуктов сгорания. Для топлив с углеводородным горючим данная величина полагается равной $T_{\text{зам}} \leq 2000$ К. В случае топливной пары кислород-водород принимается $T_{\text{зам}} \leq 1600–1800$ К. Однако указанная методика, как и все более ранние, основана на расчете термохимических процессов в идеальном газе [1]. Вместе с тем тече-

ние в пристенном пограничном слое двигательной установки не является идеальным вследствие наличия вязкой диссипации кинетической энергии и интенсивного теплообмена продуктов сгорания топлива со стенкой сопла. По указанной причине применение методов расчета химических равновесий [1] для моделирования термохимических процессов в пристенном пограничном слое является приближенным допущением.

В настоящей работе сформулирован подход к решению проблемы термохимического моделирования неизоэнтропических сдвиговых течений. Для расчета химического равновесия продуктов сгорания топлива создана методика определения массовых скоростей образования компонентов смеси в неизоэнтропическом течении. В рамках предложенного подхода, в качестве примера, проведен расчет пограничного слоя на стенке камеры сгорания и сопла кислородно-водородного ракетного двигателя. Выполнено тестирование полученного численного решения и проведены параметрические исследования процессов течения и теплообмена.

ТЕРМОХИМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РАБОЧЕГО ПРОЦЕССА В КАМЕРЕ СГОРАНИЯ И СОПЛЕ РАКЕТНОГО ДВИГАТЕЛЯ

За начало отсчета энтальпии принимается состояние вещества при выбранных стандартной температуре и давлении ($T = T^0, p = p^0$) и устойчивом агрегатном состоянии, соответствующем данным условиям.

Если завершена химическая реакция

$$\sum_i \nu_i A_i = \sum_i \nu_i B_i$$

протекает при произвольных постоянных температуре и давлении (T, p), то уравнение первого начала термодинамики для указанной реакции записывается следующим образом

$$\Delta h = \Delta q + \Delta q_x,$$

$$\sum_i \nu_i \left[\int_{T^0}^{T_{пл_i}} c_{ТВ_i} dT + q_{пл_i}(T_{пл_i}) + \int_{T_{пл_i}}^{T_{исп_i}} c_{ж_i} dT + q_{исп_i}(T_{исп_i}) + \int_{T_{исп_i}}^T c_{р_i} dT \right] = \Delta q(T, p) - \sum_i \nu_i q_{x_i},$$

или

$$\Delta q(T, p) = \sum_i \nu_i \left[\int_{T^0}^{T_{пл_i}} c_{ТВ_i} dT + q_{пл_i}(T_{пл_i}) + \int_{T_{пл_i}}^{T_{исп_i}} c_{ж_i} dT + q_{исп_i}(T_{исп_i}) + \int_{T_{исп_i}}^T c_{р_i} dT + q_{x_i} \right], \quad (1)$$

где

Δq – внешний приток тепла к термодинамической системе, равный по величине тепловому эффекту химической реакции;

$\Delta q_x = -\sum_i \nu_i q_{x_i}$ – суммарное изменение химической энергии всех участвующих в реакции веществ;

q_{x_i} – химическая энергия i -го компонента.

Здесь принято правило суммирования, согласно которого стехиометрические коэффициенты ν_i , вступающих в реакцию веществ (реагентов), считаются отрицательными, а продуктов реакции – положительными.

Пусть все вещества находятся в стандартных условиях ($T = T^0, p = p^0$ и устойчивом агрегатном состоянии при данных температуре и давлении). Тогда уравнение первого начала термодинамики (1) принимает вид

$$\sum_i \nu_i q_{x_i} = \Delta q^0(T^0, p^0). \quad (2)$$

Если химическое соединение $i = i^*$ образовано простыми веществами ($q_{x_i} = 0, i \neq i^*$), находящимися в стандартных условиях, то выполняется равенство

$$q_{x_{i^*}} = 1/\nu_{i^*} \Delta q^0(T^0, p^0) = \Delta q_{i^*}^0(T^0, p^0),$$

где $\Delta q_{i^*}^0(T^0, p^0)$ – тепловой эффект химической реакции образования соединения $i = i^*$ из простых веществ в стандартном состоянии, отнесенный к одному молю соединения. Указанная величина называется теплотой образования соединения $i = i^*$, или энтальпией образования. Из чего следует, что химическая энергия вещества $q_{x_{i^*}}$ совпадает с его теплотой образования и после определения стандартного состояния является величиной постоянной.

Из последнего соотношения и уравнения (2) следует, что для любой химической реакции между любыми веществами в стандартных условиях справедливо равенство

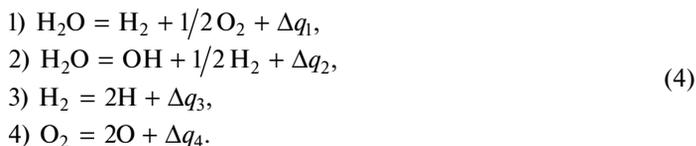
$$\sum_i \nu_i \Delta q_i^0(T^0, p^0) = \Delta q^0(T^0, p^0), \quad (3)$$

выражающее закон Гесса, согласно которого тепловой эффект произвольной химической реакции между произвольными веществами в стандартном состоянии определяется величинами теплоты образования участвующих в реакции веществ.

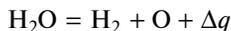
Сформулированный в настоящей работе подход к термохимическому моделированию неизоэнтропических процессов в пристенном пограничном слое, в качестве иллюстрации, применяется для расчета течения в камере сгорания и сопле кислородно-водородного ракетного двигателя.

Считается, что равновесный состав продуктов сгорания топлива определяется шестью ($m = 6$) компонентами: H_2O , O_2 , H_2 , OH , O , H , образованными двумя химическими элементами – атомарным кислородом и водородом ($n = 2$).

Согласно фундаментальному термохимическому правилу в данной смеси могут протекать $m - n = 4$ независимых химических реакций, в качестве которых выбираются следующие завершённые реакции



Остальные возможные реакции являются следствием выбранных уравнений. Например, одна из возможных реакций



является суммой первого и умноженного на 0.5 четвертого уравнений, а поскольку при алгебраических операциях над термохимическими уравнениями тепловые эффекты реакций складываются, то включать данную реакцию в систему (4) не следует, так как это приведет к линейной зависимости уравнений.

Указанное свойство термохимических уравнений является следствием закона сохранения энергии (2), записанного для каждой из указанных реакций

$$\sum_{i=1}^m \nu_{ji} q_{x_i} = \Delta q_j^0(T^0, p^0), \quad j = 1, \dots, m-n. \quad (5)$$

Полученная система из $m-n$ уравнений имеет m неизвестных q_{x_i} . Данная система будет удовлетворяться при назначении любым n неизвестным произвольных значе-

ний, в качестве которых выбираются нулевые величины. Компоненты, химическая энергия которых полагается равной нулю, называются простыми веществами.

По соглашению [5] в качестве простых веществ выбираются газообразные H_2 , O_2 , N_2 , Cl_2 и др., твердый углерод C и металлы. Следуя принятому соглашению, в качестве простых веществ для рассматриваемой системы принимаются молекулярный кислород O_2 и водород H_2 . После чего величины химической энергии остальных $m-n$ компонентов смеси берутся из справочных данных.

Поскольку уравнения (5) являются линейно независимыми, то величины химической энергии указанных $m-n$ компонентов смеси могут быть определены непосредственно из решения системы и должны совпадать со справочными данными.

В качестве уравнений (4) предпочтительно выбирать реакции диссоциации веществ, поскольку, как будет показано ниже, в таком случае вид соответствующих уравнений для массовых скоростей образования компонентов смеси получается универсальным для любого вида ракетного топлива, состав продуктов сгорания которого содержит указанные вещества.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ МНОГОКОМПОНЕНТНОГО ПОГРАНИЧНОГО СЛОЯ НА СТЕНКЕ КАМЕРЫ СГОРАНИЯ И СОПЛА РАКЕТНОГО ДВИГАТЕЛЯ

В случае многоскоростного течения реагирующей газовой смеси рассматриваются m индивидуальных объемов веществ $V_i(t)$, совпадающих в момент времени t между собой и с индивидуальным объемом смеси $V(t) \equiv V_i(t)$.

Уравнение неразрывности для i -го компонента имеет вид

$$\frac{d}{dt} \oint_{V_i(t)} \rho_i dV_i = \oint_{V_i(t)} \dot{m}_i dV_i, \quad \frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla_k \rho_i v_i^k = \dot{m}_i, \quad (6)$$

где \dot{m}_i – массовая скорость образования вещества в результате химических превращений. Здесь индекс i применяется для обозначения химического вещества и не является тензорным.

Из уравнения неразрывности для компонента смеси можно получить формулу дифференцирования элементарной частицы δm_i сплошной среды

$$\left(\frac{d\delta m_i}{dt} \right)_i = \left(\frac{d\rho_i \delta V_i}{dt} \right)_i = \left(\frac{d\rho_i}{dt} \right)_i \delta V_i + \rho_i \left(\frac{d\delta V_i}{dt} \right)_i = \left[\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho_i}{\partial x^k} v_i^k \right] \delta V_i + \rho_i \nabla_k v_i^k \delta V_i = \dot{m}_i \delta V_i. \quad (7)$$

Здесь использовано выражение [6] для производной элементарного объема по времени $(d\delta V_i/dt)_i = \nabla_k v_i^k \delta V_i$. Индекс i у знака производной показывает, что данная величина относится к индивидуальному бесконечно малому объему $\delta V_i(t)$, движущемуся со скоростью \vec{v}_i .

Везде по тексту символ δ обозначает дифференциал величины массы, объема, числа молей или меры химической реакции в бесконечно малой частице сплошной среды и вводится для удобства чтения формул дифференцирования.

Для массы компонента δm_i в объеме $\delta V(t)$, который движется со скоростью \vec{v} , можно записать

$$\frac{d\delta m_i}{dt} = \frac{d\rho_i \delta V}{dt} = \frac{d\rho_i}{dt} \delta V + \rho_i \frac{d\delta V}{dt} = \left[\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho_i}{\partial x^k} v^k + \rho_i \nabla_k v^k \right] \delta V = \left[\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla_k \rho_i v^k \right] \delta V,$$

где скорость смеси \vec{v} определяется выражением $\rho v^k = \sum_i \rho_i v_i^k$.

Если ввести в рассмотрение скорость диффузии $v_{Di}^k = v_i^k - v^k$, то производная $(d\delta m_i/dt)_i$ записывается следующим образом

$$\left(\frac{d\delta m_i}{dt}\right)_i = \left[\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla_k \rho_i v^k\right] \delta V_i + \nabla_k \rho_i v_{Di}^k \delta V_i,$$

или с учетом предыдущего равенства

$$\left(\frac{d\delta m_i}{dt}\right)_i = \frac{d\delta m_i}{dt} + \nabla_k \rho_i v_{Di}^k \delta V_i. \quad (8)$$

Последнее слагаемое в правой части представляет дивергенцию диффузионного потока компонента смеси.

Для закона сохранения внутренней энергии индивидуального объема сплошной среды принимается общее уравнение [6]

$$\frac{d}{dt} \oint_{V(t)} e^{\text{BH}} dV = \oint_{V(t)} p^{ij} \nabla_j v_i dV - \oint_{V(t)} \nabla_k q^k dV + \oint_{V(t)} q_V dV,$$

где

e^{BH} – внутренняя энергия единицы объема среды,

$p^{ij} \nabla_j v_i$ – работа внутренних поверхностных сил в единице объема,

\bar{q} – тепловой поток процесса теплопроводности,

q_V – мощность объемных источников энергии.

Выражение работы внутренних поверхностных сил преобразуется к виду

$$\begin{aligned} p^{ij} \nabla_j v_i &= \left(-p g^{ij} + \lambda g^{ij} \nabla_k v^k + 2\mu e^{ij}\right) \nabla_j v_i = -p \nabla_k v^k + \left(\lambda g^{ij} \nabla_k v^k + 2\mu e^{ij}\right) \nabla_j v_i = \\ &= -\left(\partial p / \partial t + \nabla_k p v^k\right) + dp/dt + \left(\lambda g^{ij} \nabla_k v^k + 2\mu e^{ij}\right) \nabla_j v_i. \end{aligned}$$

С учетом приведенного равенства для уравнения внутренней энергии получается следующее выражение

$$\frac{d}{dt} \oint_{V(t)} h dV = \oint_{V(t)} \left[dp/dt + \left(\lambda g^{ij} \nabla_k v^k + 2\mu e^{ij}\right) \nabla_j v_i\right] dV - \oint_{V(t)} \nabla_k q^k dV + \oint_{V(t)} q_V dV,$$

здесь $h = e^{\text{BH}} + p$ – энтальпия единицы объема среды.

В случае течения химически реагирующей смеси уравнение внутренней энергии принимает вид

$$\frac{d}{dt} \sum_i \oint_{V_i(t)} n_i h_i dV_i = \oint_{V(t)} a_\tau dV - \oint_{V(t)} \nabla_k q^k dV - \frac{d}{dt} \sum_i \oint_{V_i(t)} n_i q_{x_i} dV_i,$$

согласно введенным обозначениям

n_i – число молей вещества в единице объема,

h_i – энтальпия одного моля вещества,

$a_\tau = dp/dt + \left(\lambda g^{ij} \nabla_k v^k + 2\mu e^{ij}\right) \nabla_j v_i$ – работа сил давления и вязких напряжений,

q_{x_i} – химическая энергия одного моля вещества,

$\frac{d}{dt} \sum_i \oint_{V_i(t)} n_i q_{x_i} dV_i$ – суммарная мощность источников энергии, возникающих в индивидуальных объемах компонент, вследствие химических превращений.

Левая часть уравнения внутренней энергии, с учетом равенства (6), преобразуется следующим образом

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \sum_i \oint_{V_i(t)} n_i h_i dV_i &= \frac{d}{dt} \sum_i \oint_{V_i(t)} \rho_i h_i^* dV_i = \sum_i \oint_{V_i(t)} \left(\frac{\partial \rho_i h_i^*}{\partial t} + \nabla_k \rho_i h_i^* v_i^k \right) dV_i = \\ &= \sum_i \oint_{V_i(t)} \left(h_i^* \dot{m}_i + \rho_i \frac{\partial h_i^*}{\partial t} + \rho_i v_i^k \nabla_k h_i^* \right) dV_i. \end{aligned}$$

Здесь и ниже по тексту индекс “*” применяется для обозначения массовой плотности величины.

Суммарная мощность химических источников энергии записывается в виде

$$\frac{d}{dt} \sum_i \oint_{V_i(t)} n_i q_{x_i} dV_i = \sum_i \oint_{V_i(t)} \left(\frac{\partial \rho_i q_{x_i}^*}{\partial t} + \nabla_k \rho_i q_{x_i}^* v_i^k \right) dV_i = \sum_i \oint_{V_i(t)} q_{x_i}^* \dot{m}_i dV_i.$$

При выводе данного соотношения учтено, что после определения стандартного состояния химическая энергия вещества q_{x_i} является величиной постоянной.

После подстановки полученных соотношений в исходное уравнение и принимая во внимание, что в рассматриваемый момент времени $V(t) \equiv V_i(t)$, $i = 1, \dots, m$ для закона сохранения внутренней энергии окончательно может быть записано следующее выражение

$$\sum_i \rho_i \frac{dh_i^*}{dt} = a_\tau - \nabla_k q^k - \sum_i H_i^* \dot{m}_i - \sum_i f_{Di}^k \nabla_k h_i^*, \quad (9)$$

где

$H_i^* = h_i^* + q_{x_i}^*$ – полная энтальпия единицы массы вещества,

$f_{Di}^k = \rho_i v_{Di}^k$ – диффузионный поток компонента смеси.

Несложно убедиться в том, что полученное уравнение является инвариантным относительно определения стандартного состояния.

Производная энтальпии может быть представлена в виде

$$\begin{aligned} \frac{dh_i^*}{dt} &= \frac{d}{dt} \left[\int_{T^0}^{T_{пл_i}} c_{ТВ_i}^* dT + q_{пл_i}^* (T_{пл_i}) + \int_{T_{пл_i}}^{T_{исп_i}} c_{ж_i}^* dT + q_{исп_i}^* (T_{исп_i}) + \int_{T_{исп_i}}^T c_{p_i}^* dT \right] = \\ &= \frac{d}{dt} \int_{T_{исп_i}}^T c_{p_i}^* dT = \lim_{\Delta T \rightarrow 0} \left[\int_{T_{исп_i}}^{T+\Delta T} c_{p_i}^* dT - \int_{T_{исп_i}}^T c_{p_i}^* dT \right] \frac{1}{\Delta T} = c_{p_i}^* \frac{dT}{dt}. \end{aligned}$$

При выводе данного выражения принято во внимание, что величины энтальпии, теплоты плавления и испарения, а также теплоемкости всех фаз компонентов смеси слабо зависят от давления и являются функциями только температуры.

Тогда для левой части уравнения внутренней энергии является справедливым равенство

$$\sum_i \rho_i \frac{dh_i^*}{dt} = \sum_i \rho_i c_{p_i}^* \frac{dT}{dt} = \rho c_p^* \frac{dT}{dt}, \quad c_p^* = \sum_i c_i c_{p_i}^*,$$

которое не зависит от выбора стандартного состояния.

Третье слагаемое в правой части, с учетом формулы дифференцирования элементарной частицы сплошной среды (7), преобразуется следующим образом

$$\begin{aligned} \sum_i H_i^* \dot{m}_i &= \sum_i H_i^* \frac{1}{\delta V_i} \left(\frac{d\delta m_i}{dt} \right)_i = \frac{1}{\delta V} \sum_i H_i \left(\frac{d\delta n_i}{dt} \right)_{\text{хим}} = \frac{1}{\delta V} \sum_i H_i \left(\frac{\Delta \delta n_i}{\Delta t} \right)_{\text{хим}} = \\ &= \frac{1}{\delta V} \sum_i \sum_j H_i \left(\frac{\Delta \delta n_{ij}}{\Delta t} \right)_{\text{хим}} = \frac{1}{\delta V} \sum_i \sum_j \nu_{ij} H_i \left(\frac{\Delta \delta n_{ij}}{\nu_{ij}} \frac{1}{\Delta t} \right)_{\text{хим}} = \frac{1}{\delta V} \sum_i \sum_j \nu_{ij} H_i \left(\frac{\Delta \delta \xi_j}{\Delta t} \right)_{\text{хим}} = \\ &= \frac{1}{\delta V} \sum_j \left(\frac{\Delta \delta \xi_j}{\Delta t} \right)_{\text{хим}} \sum_i \nu_{ij} H_i = \frac{1}{\delta V} \sum_j \tilde{\Delta} H_j(T) \left(\frac{d\delta \xi_j}{dt} \right)_{\text{хим}}, \end{aligned}$$

где согласно принятым обозначениям

δn_i – число молей i -го компонента в элементарном объеме $\delta V_i(t)$,

$\Delta \delta n_{ij}$ – изменение числа молей i -го компонента в бесконечно малом объеме $\delta V_i(t)$ вследствие протекания j -ой химической реакции,

$\Delta \delta n_i = \sum_j \Delta \delta n_{ij}$ – изменение числа молей i -го компонента в элементарном объеме $\delta V_i(t)$ вследствие протекания всех, идущих в смеси, химических реакций,

$\tilde{\Delta} H_j(T) = \sum_i \nu_{ij} H_i(T)$ – изменение полной энтальпии в завершённой j -ой химической реакции, идущей при текущем значении температуры T , и равное тепловому эффекту реакции $\tilde{\Delta} H_j(T) = \Delta q_j(T)$,

$(d\delta \xi_j/dt)_{\text{хим}}$ – скорость изменения меры j -ой химической реакции в бесконечно малом объеме смеси $\delta V(t)$, совпадающем в рассматриваемый момент времени с элементарными объемами компонент $\delta V(t) \equiv \delta V_i(t)$.

Тепловой эффект химической реакции $\Delta q_j(T)$ и скорость изменения меры химической реакции $(d\delta \xi_j/dt)_{\text{хим}}$ не зависят от выбора начала отсчета энтальпии по определению, следовательно, не зависят от выбора стандартных условий и третье слагаемое в правой части уравнения энергии $\sum_i H_i^* \dot{m}_i$.

Для диффузионного члена является справедливым инвариантное равенство

$$\sum_i f_{Di}^k \nabla_k h_i^* = \sum_i f_{Di}^k \frac{dh_i^*}{dT} \frac{\partial T}{\partial x^k} = \sum_i f_{Di}^k c_{pi}^* \frac{\partial T}{\partial x^k},$$

из чего следует, что уравнение (9) является инвариантным к определению стандартного состояния.

С учетом приведенных выше выкладок для закона сохранения энергии может быть получено следующее выражение

$$\rho c_p^* \frac{dT}{dt} = \frac{dp}{dt} + (\lambda g^{ij} \nabla_k v^k + 2\mu e^{ij}) \nabla_j v_i - \nabla_k q^k - \sum_i H_i^* \dot{m}_i - \sum_i f_{Di}^k c_{pi}^* \frac{\partial T}{\partial x^k},$$

которое представляет температурную форму уравнения внутренней энергии сплошной среды.

Использование в численных расчетах сдвиговых течений температурной формы уравнения энергии является предпочтительным, поскольку позволяет в достаточно простом виде поставить граничные условия и реализовать алгоритм метода решения задач сопряженного теплообмена [7, 8] на теплопроводящей стенке. Кроме того, наличие в правой части слагаемого с известным продольным градиентом давления оказывает стабилизирующее действие на процесс численного счета.

С учетом полученных соотношений система уравнений модели неизоэнтропического сдвигового течения в камере сгорания и сопле ракетного двигателя в криволинейной

системе координат, связанной с линиями кривизны обтекаемой поверхности [9], записывается следующим образом:

уравнение неразрывности

$$\frac{1}{\sqrt{g_{22}}} \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} + \left[\frac{1}{2} \frac{1}{g} \frac{1}{\sqrt{g_{22}}} \frac{\partial g}{\partial x} - \frac{1}{2} \frac{1}{g_{22} \sqrt{g_{22}}} \frac{\partial g_{22}}{\partial x} \right] \rho u = 0,$$

уравнение движения

$$\frac{1}{g_{22}} \rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{\sqrt{g_{22}}} \rho v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{1}{g_{22}} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{\sqrt{g_{22}}} \mu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{1}{\sqrt{g_{22}}} \left[2\mu \Gamma_{23}^2 + \frac{\partial \mu}{\partial y} \right] \frac{\partial u}{\partial y},$$

уравнения диффузии

$$\frac{1}{\sqrt{g_{22}}} \rho u \frac{\partial c_i}{\partial x} + \rho v \frac{\partial c_i}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left[\left(\frac{\mu_m}{Sc_m} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial c_i}{\partial y} \right] + \dot{m}_i, \quad i = 1, 6, \quad (10)$$

уравнение энергии

$$\frac{1}{\sqrt{g_{22}}} c_p \rho u \frac{\partial T}{\partial x} + c_p \rho v \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{1}{\sqrt{g_{22}}} u \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 + \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial y} \left[\sqrt{g} \left(\frac{\mu_m}{Pr_m} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) c_p \frac{\partial T}{\partial y} \right] - \sum_i H_i \dot{m}_i + \sum_i \left(\frac{\mu_m}{Sc_m} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) c_{pi} \frac{\partial c_i}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial y},$$

уравнение состояния

$$p = \rho RT,$$

где согласно принятым обозначениям

g, g_{ij}, Γ_{ij}^k – определитель, компоненты метрического тензора и символы Кристоффеля 2-го рода используемой криволинейной системы координат,

$\mu = \mu_m + \mu_t$ – коэффициент эффективной вязкости,

Pr_m, Pr_t, Sc_m, Sc_t – молекулярное и турбулентное числа Прандтля и Шмидта.

УРАВНЕНИЯ МАССОВЫХ СКОРОСТЕЙ ОБРАЗОВАНИЯ КОМПОНЕНТОВ СМЕСИ

Приведенная выше система уравнений химически реагирующего пограничного слоя не является замкнутой. Для замыкания полученной модели указанную систему необходимо дополнить шестью ($m = 6$) соотношениями для массовых скоростей образования компонентов смеси \dot{m}_i , которые в случае равновесного течения могут быть определены из условий химического равновесия продуктов сгорания топлива в элементарном объеме смеси $\delta V(t)$, совпадающем в рассматриваемый момент времени с элементарными объемами компонентов $\delta V(t) \equiv \delta V_i(t)$, $i = 1, \dots, m$.

Следуя выбранной модели горения кислородно-водородного топлива считается, что равновесный состав продуктов сгорания определяется шестью ($m = 6$) компонентами: H_2O – (1), O_2 – (2), H_2 – (3), OH – (4), O – (5), H – (6), образованными двумя химическими элементами – атомарным кислородом и водородом ($n = 2$).

В качестве протекающих в смеси независимых химических реакций выбираются $m - n = 4$ незавершенных реакции (4).

Выражение для константы равновесия j -ой реакции, записанное для бесконечно малого объема сплошной среды δV , имеет вид

$$K_{pj} = \prod_i \delta n_i^{v_{ij}} (\bar{p}/\delta n) \sum_i^{v_{ij}},$$

где

δn_i – число молей компонента смеси в элементарном объеме δV ,

$\delta n = \sum_i \delta n_i$ – суммарное число молей компонентов смеси в бесконечно малом объеме δV ,

$\bar{p} = p/p^0$ – давление смеси, отнесенное к величине стандартного давления.

В соответствии с приведенным выражением, для константы равновесия первой химической реакции ($j = 1$) можно записать

$$v_{11} = -1, \quad v_{31} = 1, \quad v_{21} = 1/2, \quad \sum_i v_{i1} = 1/2, \quad K_{p1} = \frac{\delta n_3 \sqrt{\delta n_2}}{\delta n_1} \sqrt{\bar{p}/\sum_i \delta n_i}.$$

Полная производная константы равновесия по времени для бесконечно малого объема сплошной среды $\delta V(t)$, движущегося со скоростью смеси \vec{v} , определяется выражением

$$\frac{dK_{p1}}{dt} = \sum_i \frac{\partial K_{p1}}{\partial \delta n_i} \frac{d\delta n_i}{dt} + \frac{\partial K_{p1}}{\partial p} \frac{dp}{dt}.$$

Частная производная $\partial K_{p1}/\partial \delta n_1$ записывается в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial K_{p1}}{\partial \delta n_1} &= -\frac{1}{(\delta n_1)^2} \delta n_3 \sqrt{\delta n_2} \sqrt{\bar{p}/\sum_i \delta n_i} - \frac{\delta n_3 \sqrt{\delta n_2}}{\delta n_1} 0.5 / \sqrt{\bar{p}/\sum_i \delta n_i} \bar{p} / \left(\sum_i \delta n_i \right)^2 = \\ &= -\frac{\delta n_3 \sqrt{\delta n_2}}{\delta n_1} \sqrt{\bar{p}/\sum_i \delta n_i} \left(1/\delta n_1 + 0.5/\sum_i \delta n_i \right) = -K_{p1} \left(1/\delta n_1 + 0.5/\sum_i \delta n_i \right) = \\ &= -K_{p1} \left(M_{m1}/\delta m_1 + 0.5/\sum_i \delta m_i/M_{mi} \right) = -\frac{K_{p1}}{\rho} \left(M_{m1}/c_1 + 0.5/\sum_i c_i/M_{mi} \right) \frac{1}{\delta V}. \end{aligned}$$

Остальные частные производные константы равновесия вычисляются аналогично.

С учетом полученных соотношений и формул дифференцирования элементарной частицы сплошной среды (7, 8), полную производную по времени константы равновесия первой химической реакции можно представить в виде

$$\begin{aligned} \frac{dK_{p1}}{dt} &= \sum_i \frac{\partial K_{p1}}{\partial \delta n_i} \frac{d\delta n_i}{dt} + \frac{\partial K_{p1}}{\partial p} \frac{dp}{dt} = \sum_i \frac{\partial K_{p1}}{\partial \delta n_i} \frac{1}{M_{mi}} \frac{d\delta m_i}{dt} + \frac{\partial K_{p1}}{\partial p} \frac{dp}{dt} = \\ &= \sum_i \frac{1}{M_{mi}} \frac{\partial K_{p1}}{\partial \delta n_i} \dot{m}_i \delta V_i + \frac{\partial K_{p1}}{\partial p} \frac{dp}{dt} = -\frac{1}{M_{m1}} \frac{K_{p1}}{\rho} \left(M_{m1}/c_1 + 0.5/\sum_i c_i/M_{mi} \right) \dot{m}_1 + \\ &+ \frac{1}{M_{m2}} \frac{1}{2} \frac{K_{p1}}{\rho} \left(M_{m2}/c_2 - 1/\sum_i c_i/M_{mi} \right) \dot{m}_2 + \frac{1}{M_{m3}} \frac{K_{p1}}{\rho} \left(M_{m3}/c_3 - 0.5/\sum_i c_i/M_{mi} \right) \dot{m}_3 - \\ &- \frac{1}{M_{m4}} \frac{1}{2} \frac{K_{p1}}{\rho} 1/\sum_i c_i/M_{mi} \dot{m}_4 - \frac{1}{M_{m5}} \frac{1}{2} \frac{K_{p1}}{\rho} 1/\sum_i c_i/M_{mi} \dot{m}_5 - \\ &- \frac{1}{M_{m6}} \frac{1}{2} \frac{K_{p1}}{\rho} 1/\sum_i c_i/M_{mi} \dot{m}_6 + \frac{K_{p1}}{2p} \frac{dp}{dt}. \end{aligned}$$

С другой стороны, константа равновесия реакции идеального газа является функцией только температуры. Следовательно, является справедливым равенство

$$\frac{dK_{p1}}{dt} = \frac{dK_{p1}}{dT} \frac{dT}{dt}.$$

После подстановки данного равенства в предыдущее выражение получается первое уравнение для массовых скоростей образования компонентов смеси

$$\begin{aligned} & -\left(1/c_1 + 0.5/\sum_i M_{m1}/M_{mi}c_i\right)\dot{m}_1 + \frac{1}{2}\left(1/c_2 - 1/\sum_i M_{m2}/M_{mi}c_i\right)\dot{m}_2 + \\ & + \left(1/c_3 - 0.5/\sum_i M_{m3}/M_{mi}c_i\right)\dot{m}_3 - 0.5/\sum_i M_{m4}/M_{mi}c_i \dot{m}_4 - \\ & - 0.5/\sum_i M_{m5}/M_{mi}c_i \dot{m}_5 - 0.5/\sum_i M_{m6}/M_{mi}c_i \dot{m}_6 = \frac{1}{K_{p1}} \frac{dK_{p1}}{dT} \rho \frac{dT}{dt} - \frac{\rho}{2p} \frac{dp}{dt}. \end{aligned}$$

Стоящая в правой части выражения производная dK_{p1}/dT является известной величиной и определяется из справочных данных. После чего полученное уравнение может быть решено совместно с системой уравнений пограничного слоя (10).

Повторив все приведенные выше выкладки для каждого из трех оставшихся уравнений химических реакций, можно записать еще три уравнения массовых скоростей образования компонентов.

Недостающие два уравнения для массовых скоростей получаются из условия сохранения вещества каждого атомарного элемента (кислорода и водорода) в бесконечно малой частице сплошной среды, которые в данном случае имеют вид

$$\begin{aligned} \dot{m}_1 + \frac{M_{m1}}{M_{m3}} \dot{m}_3 + \frac{1}{2} \frac{M_{m1}}{M_{m4}} \dot{m}_4 + \frac{1}{2} \frac{M_{m1}}{M_{m6}} \dot{m}_6 &= 0, \\ \dot{m}_1 + 2 \frac{M_{m1}}{M_{m2}} \dot{m}_2 + \frac{M_{m1}}{M_{m4}} \dot{m}_4 + \frac{M_{m1}}{M_{m5}} \dot{m}_5 &= 0. \end{aligned}$$

В результате система уравнений модели неизоэнтропического химически равновесного течения в пограничном слое на стенке камеры сгорания и сопла ракетного двигателя (10) замыкается шестью соотношениями для массовых скоростей образования продуктов сгорания топлива

$$\sum_{i=1}^6 a_{ij} \dot{m}_i = b_j, \quad j = 1, \dots, 6 \quad (11)$$

которые решаются совместно.

Уравнения системы (11) получены в предположении малости диффузионного переноса компонентов смеси. В случае, когда диффузионным переносом пренебречь нельзя, полная производная по времени константы равновесия химической реакции для бесконечно малого объема $\delta V(t)$, движущегося со скоростью смеси \vec{v} , с учетом формул дифференцирования элементарной частицы сплошной среды (7, 8), записывается в виде

$$\begin{aligned} \frac{dK_{pj}}{dt} &= \sum_i \frac{\partial K_{pj}}{\partial \delta n_i} \frac{d\delta n_i}{dt} + \frac{\partial K_{pj}}{\partial p} \frac{dp}{dt} = \sum_i \frac{\partial K_{pj}}{\partial \delta n_i} \frac{1}{M_{mi}} \frac{d\delta m_i}{dt} + \frac{\partial K_{pj}}{\partial p} \frac{dp}{dt} = \\ &= \sum_i \frac{1}{M_{mi}} \frac{\partial K_{pj}}{\partial \delta n_i} \left(\dot{m}_i + \nabla_k f_{Di}^k \right) \delta V_i + \frac{\partial K_{pj}}{\partial p} \frac{dp}{dt}, \end{aligned}$$

где слагаемое с дивергенцией диффузионного потока в приближении пограничного слоя определяется выражением

$$\nabla_k f_{Di}^k = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial \sqrt{g} f_{Di}^k}{\partial x^k} \approx \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial \sqrt{g} f_{Di}^3}{\partial x^3} = -\frac{\partial}{\partial x^3} \left[\left(\frac{\mu_m}{Sc_m} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial c_i}{\partial x^3} \right].$$

Проделав все выкладки аналогично предыдущему случаю и учитывая, что константа равновесия реакции идеального газа является функцией только температуры, можно получить четыре алгебраических уравнения для массовых скоростей образования компонентов смеси

$$\sum_{i=1}^6 a_{ij} \dot{m}_i = b_j, \quad j = 1, \dots, 4. \quad (12)$$

В случае наличия интенсивного диффузионного переноса получить недостающие два уравнения для массовых скоростей из условия сохранения вещества каждого атомарного элемента (кислорода и водорода) не представляется возможным, поскольку общее число атомов указанных элементов в бесконечно малом объеме смеси $\delta V(t)$ в процессе расширения изменяется и является отличным от исходного.

В данном случае для замыкания термохимической модели в системе уравнений (12) следует перейти от неизвестных массовых скоростей образования продуктов сгорания топлива \dot{m}_i , ($i = 1, \dots, 6$), к неизвестным скоростям изменения степеней диссоциации веществ $d\alpha_j/dt$, ($j = 1, \dots, 4$), число которых совпадает с числом независимых химических реакций. После чего указанная алгебраическая система может быть решена совместно с уравнениями пограничного слоя.

Неизвестные величины \dot{m}_i выражаются через скорости изменения степеней диссоциации веществ $d\alpha_j/dt$ следующим образом.

Массовая скорость образования H_2O

Суммарное изменение числа молей первого компонента смеси H_2O в первой и второй химических реакциях в бесконечно малом индивидуальном объеме $\delta V_1(t)$ за время Δt определяется равенством

$$\Delta \delta n_1 = \Delta \delta n_{11} + \Delta \delta n_{12},$$

где

$\Delta \delta n_1$ – суммарное изменение числа молей H_2O в первой и второй реакциях,

$\Delta \delta n_{11}$ – изменение числа молей H_2O в первой реакции,

$\Delta \delta n_{12}$ – изменение числа молей H_2O во второй реакции.

Тогда для изменения степеней диссоциации рассматриваемых химических реакций можно записать следующие выражения

$$\Delta \alpha_1 = \Delta \delta n_{11} / \delta n_1, \quad \Delta \alpha_2 = \Delta \delta n_{12} / \delta n_1,$$

а суммарное изменение числа молей первого вещества выразить в виде

$$\Delta \delta n_1 = \delta n_1 (\Delta \alpha_1 + \Delta \alpha_2),$$

или

$$\Delta \delta m_1 = \delta m_1 (\Delta \alpha_1 + \Delta \alpha_2), \quad \delta m_1 = \rho_1 \delta V_1.$$

После деления последнего равенства на Δt и перехода к пределу получается соотношение, выражающее производную бесконечно малой частицы сплошной среды движущейся со скоростью компонента смеси \vec{v}_1

$$\left(\frac{d\delta m_1}{dt}\right)_1 = \delta m_1 \left(\frac{d\alpha_1}{dt} + \frac{d\alpha_2}{dt}\right).$$

Учитывая формулу дифференцирования элементарной частицы сплошной среды (7), приходим к искомому равенству, выражающему массовую скорость образования H_2O через скорости изменения степеней диссоциации

$$\dot{m}_1 = \rho_1 \left(\frac{d\alpha_1}{dt} + \frac{d\alpha_2}{dt}\right).$$

Массовая скорость образования O_2

Суммарное изменение числа молей второго компонента смеси O_2 в первой и четвертой химических реакциях в бесконечно малом индивидуальном объеме $\delta V_2(t)$ за время Δt определяется равенством

$$\Delta\delta n_2 = \Delta\delta n_{21} + \Delta\delta n_{24},$$

где

$\Delta\delta n_2$ – суммарное изменение числа молей O_2 в первой и четвертой реакциях,

$\Delta\delta n_{21}$ – изменение числа молей O_2 в первой реакции,

$\Delta\delta n_{24}$ – изменение числа молей O_2 в четвертой реакции.

Для меры первой химической реакции $\Delta\delta\xi_1$, протекающей за время Δt в элементарном объеме $\delta V_2(t)$, справедливо равенство

$$\Delta\delta\xi_1 = \frac{\Delta\delta n_{21}}{v_{21}} = \frac{\Delta\delta m_{11}}{v_{11}},$$

тогда приращение числа молей второго компонента в результате протекания данной реакции за указанный промежуток времени определяется выражением

$$\Delta\delta n_{21} = \frac{v_{21}}{v_{11}} \Delta\delta m_{11} = \frac{v_{21}}{v_{11}} \delta n_1 \Delta\alpha_1.$$

Изменение степени диссоциации четвертой реакции составляет

$$\Delta\alpha_4 = \Delta\delta n_{24} / \delta n_2,$$

откуда

$$\Delta\delta n_{24} = \delta n_2 \Delta\alpha_4.$$

Тогда суммарное приращение числа молей O_2 вследствие протекания первой и четвертой химических реакций определяется равенством

$$\Delta\delta n_2 = \frac{v_{21}}{v_{11}} \delta n_1 \Delta\alpha_1 + \delta n_2 \Delta\alpha_4,$$

или

$$\frac{1}{M_{m2}} \Delta\delta m_2 = \frac{1}{M_{m1}} \frac{v_{21}}{v_{11}} \delta m_1 \Delta\alpha_1 + \frac{1}{M_{m2}} \delta m_2 \Delta\alpha_4.$$

После деления полученного уравнения на Δt и перехода к пределу получается соотношение, выражающее производную бесконечно малой частицы сплошной среды движущейся со скоростью компонента смеси \bar{v}_2

$$\left(\frac{d\delta m_2}{dt}\right)_2 = \frac{M_{m2} v_{21}}{M_{m1} v_{11}} \delta m_1 \frac{d\alpha_1}{dt} + \delta m_2 \frac{d\alpha_4}{dt}.$$

Учитывая формулу дифференцирования элементарной частицы сплошной среды (7), приходим к искомому равенству, выражающему массовую скорость образования O_2 через скорости изменения степеней диссоциации

$$\dot{m}_2 = \frac{M_{m2} v_{21}}{M_{m1} v_{11}} \rho_1 \frac{d\alpha_1}{dt} + \rho_2 \frac{d\alpha_4}{dt}.$$

Аналогично определяются выражения для массовых скоростей образования оставшихся четырех компонентов продуктов сгорания топлива.

После подстановки найденных соотношений в уравнения (12) получается система из четырех алгебраических уравнений относительно четырех неизвестных скоростей изменения степеней диссоциации веществ $d\alpha_j/dt$

$$\sum_{i=1}^4 \hat{a}_{ij} \frac{d\alpha_i}{dt} = \hat{b}_j, \quad j = 1, \dots, 4 \quad (13)$$

которые решаются совместно с уравнениями пограничного слоя.

КОНЕЧНО-РАЗНОСТНАЯ АППРОКСИМАЦИЯ И ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ ХИМИЧЕСКИ РАВНОВЕСНОГО ПОГРАНИЧНОГО СЛОЯ

Конечно-разностная аппроксимация системы уравнений пограничного слоя (10) выполняется по неявной несимметричной разностной схеме с первым порядком точности по продольной координате и со вторым по поперечной. Численное решение системы осуществляется методом простой итерации. Продольная компонента скорости течения определяется из уравнения движения. Температура, плотность, поперечная компонента скорости и массовые концентрации определяются последовательно из решения уравнений энергии, состояния, неразрывности и диффузии. Массовые скорости образования компонентов смеси, или скорости изменения степеней диссоциации находятся из уравнений (11, 12, 13).

Для линеаризации системы на первой итерации используется решение с предыдущего шага по продольной координате. Для дальнейшего уточнения численного решения берутся результаты расчета с предыдущей итерации.

С целью обеспечения устойчивости численного решения, уравнения (11) необходимо преобразовать следующим образом

$$\begin{aligned} \sum_i a_i \dot{m}_i &= \frac{1}{K_{p1}} \frac{dK_{p1}}{dT} \rho \frac{dT}{dt} - \frac{\rho}{2p} \frac{dp}{dt}, \\ \frac{1}{K_{p1}} \frac{dK_{p1}}{dT} \rho \frac{dT}{dt} - \frac{\rho}{2p} \frac{dp}{dt} &= \frac{1}{K_{p1}} \frac{dK_{p1}}{dT} \frac{1}{c_p} \left(\rho c_p \frac{dT}{dt} \right) - \frac{\rho}{2p} \frac{dp}{dt} = \\ &= \frac{1}{K_{p1}} \frac{dK_{p1}}{dT} \frac{1}{c_p} \left[\frac{1}{\sqrt{g_{22}}} u \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 + \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial y} \left[\sqrt{g} \left(\frac{\mu_m}{Pr_m} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) c_p \frac{\partial T}{\partial y} \right] - \right. \\ &\quad \left. - \sum_i H_i \dot{m}_i + \sum_i \left(\frac{\mu_m}{Sc_m} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) c_{pi} \frac{\partial c_i}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial y} \right] - \frac{\rho}{2p} \frac{dp}{dt}. \end{aligned}$$

Тогда первое уравнение может быть записано в виде

$$\begin{aligned} & \sum_i \left(a_{li} + \frac{1}{K_{pl}} \frac{dK_{pl}}{dT} \frac{1}{c_p} H_i \right) \dot{m}_i = \\ & = \frac{1}{K_{pl}} \frac{dK_{pl}}{dT} \frac{1}{c_p} \left[\frac{1}{\sqrt{g_{22}}} u \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 + \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial y} \left[\sqrt{g} \left(\frac{\mu_m}{Pr_m} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) c_p \frac{\partial T}{\partial y} \right] + \right. \\ & \quad \left. + \sum_i \left(\frac{\mu_m}{Sc_m} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) c_{pi} \frac{\partial c_i}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial y} \right] - \frac{\rho}{2p} \frac{dp}{dt}, \end{aligned}$$

или

$$\sum_i \tilde{a}_{li} \dot{m}_i = \tilde{b}_1.$$

Аналогично преобразуются второе, третье и четвертое уравнения (11, 12, 13).

В областях химически замороженного течения величины всех массовых скоростей \dot{m}_i полагаются равными нулю и расчет пограничного слоя выполняется по общему алгоритму. В качестве критерия для определения областей химически замороженного течения используется величина статической температуры продуктов сгорания топлива, которая в случае топливной пары кислород-водород принимается равной $T_{зам} \leq 1600-1800$ К.

Для численного расчета уравнения обезразмериваются в соответствие со следующей системой масштабов переменных

$$\begin{aligned} u_s &= u_{кр}, \quad \rho_s = \rho_{кр}, \quad p_s = \rho_s u_s^2, \quad c_{ps} = c_{кр}, \quad T_s = u_s^2 / c_{ps}, \quad R_{gas_s} = c_{ps}, \\ x_s &= L, \quad R_{nozzle_s} = x_s, \quad \mu_s = \mu_{mol,кр}, \quad Re = \rho_s u_s x_s / \mu_s, \quad v_s = u_s / \sqrt{Re}, \quad y_s = x_s / \sqrt{Re}, \\ \Gamma_{23_s}^2 &= 1/y_s, \quad g_{11_s} = R_{nozzle_s}^2, \quad g_{22_s} = 1, \quad g_s = R_{nozzle_s}^2, \quad \dot{m}_{i_s} = \rho_s u_s / x_s, \quad h_{i_s} = H_{i_s} = u_s^2. \end{aligned}$$

В принятой системе масштабов переменных размерный и безразмерный вид уравнений совпадают.

Все вычисления выполняются с удвоенной точностью. Выбор величин шагов дискретной сетки и другие особенности численного решения системы уравнений турбулентного пограничного слоя рассмотрены в работе [7]. Для решения задач сопряженного теплообмена в работах [7, 8] предложены консервативные конечно-разностные схемы аппроксимации слагаемого с дивергенцией теплового потока, которые обеспечивают выполнение условия сохранения теплового потока на поверхностях разрыва теплофизических характеристик среды в точках границы газ-стенка.

РЕЗУЛЬТАТЫ ПАРАМЕТРИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ И ТЕСТИРОВАНИЕ ПОЛУЧЕННОГО ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ

В качестве апробации предложенной термохимической модели неизэнтропического сдвигового течения был выполнен расчет пограничного слоя на стенке камеры сгорания и сопла кислородно-водородного ракетного двигателя.

Верификация полученного численного решения осуществлялась посредством сравнения величин расчетных параметров течения на внешней границе пограничного слоя с величинами указанных параметров, вычисленными по пакету программ [1] для равновесного изоэнтропического расширения в сопле. Данный метод тестирования основан на том, что внешняя граница пограничного слоя мало подвержена действию вязких сил и диффузионному переносу, вследствие чего величины параметров течения в указанной области должны быть близки к величинам параметров изоэнтропического расширения.

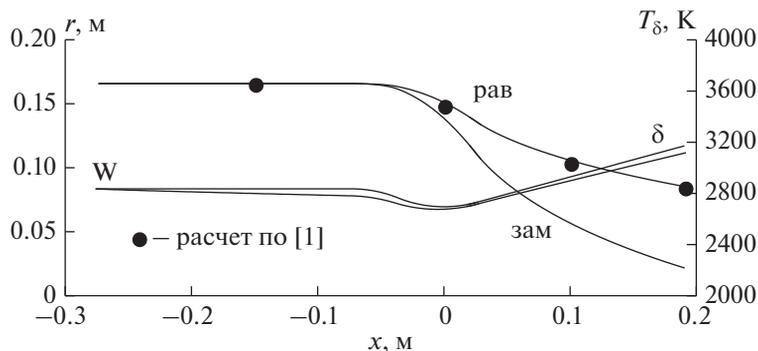


Рис. 1. Продольные распределения статической температуры на внешней границе пограничного слоя для равновесного и полностью замороженного течения.

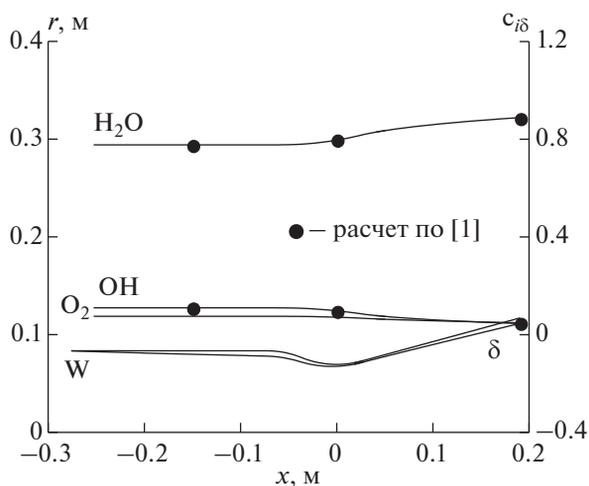


Рис. 2. Продольные распределения массовых концентраций на внешней границе равновесного пограничного слоя.

Верификационный расчет был выполнен для сопла с адиабатической стенкой, при значении полной энтальпии компонентов топлива на входе в камеру сгорания равной нулю $H_{\text{кам}} = 0$ и $\alpha_{\text{кам}} = 1$.

На графике (рис. 1) представлены продольные распределения статической температуры на внешней границе пограничного слоя для равновесного и полностью замороженного течения. Точками изображены результаты расчета равновесного изоэнтропического расширения, выполненные по программе [1]. Из сравнения полученных результатов непосредственно следует, что найденные значения статической температуры на внешней границе равновесного пограничного слоя с хорошей точностью совпадают с параметрами изоэнтропического расширения.

Продольные распределения величин массовых концентраций продуктов сгорания на внешней границе пограничного слоя даны на рис. 2. Точками изображены резуль-

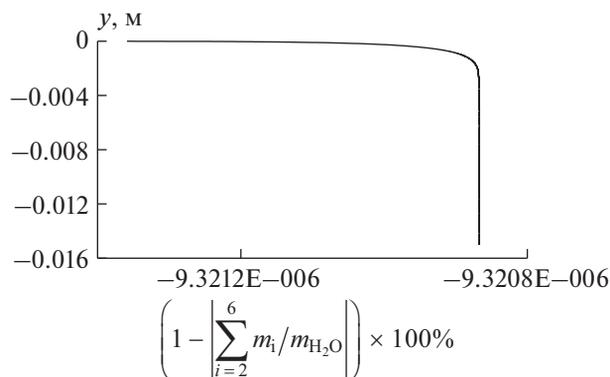


Рис. 3. Распределение относительной погрешности определения массовых скоростей образования компонент продуктов сгорания топлива в выходном сечении сопла.

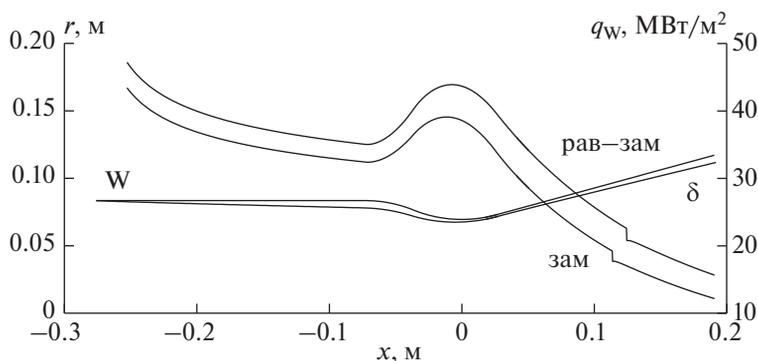


Рис. 4. Продольные распределения теплового потока в стенку сопла для равновесного течения с замораживанием и полностью замороженного пограничного слоя.

таты расчета равновесного изоэнтропического расширения по программе [1]. Как и в предыдущем случае наблюдается хорошее совпадение величин сравниваемых параметров.

Верификация определения массовых скоростей образования продуктов сгорания топлива проводилась на основе проверки выполнения равенства $\sum_i \dot{m}_i = 0$ в точках произвольно выбранного поперечного сечения пограничного слоя. На графике (рис. 3) приведено распределение относительной погрешности выполнения данного равенства в выходном сечении сопла. Величина погрешности составляет миллионные доли процента.

В качестве параметрического исследования был выполнен расчет течения в сопле с охлаждаемой стенкой постоянной температуры $T_w = 800 \text{ K}$, при неизменных условиях на входе в камеру сгорания $H_{\text{кам}} = 0$ и $\alpha_{\text{кам}} = 1$.

Продольные распределения теплового потока в стенку сопла для равновесного течения с замораживанием и полностью замороженного пограничного слоя даны на рис. 4.

На графике (рис. 5) представлен профиль статической температуры в выходном сечении сопла для равновесного течения с замораживанием. Из графика следует, что в окрест-

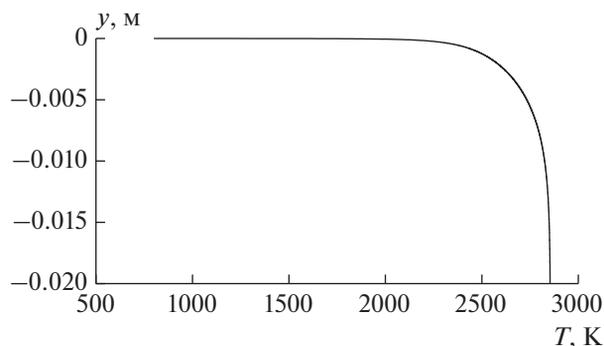


Рис. 5. Профиль статической температуры в выходном сечении сопла для равновесного течения с замораживанием.

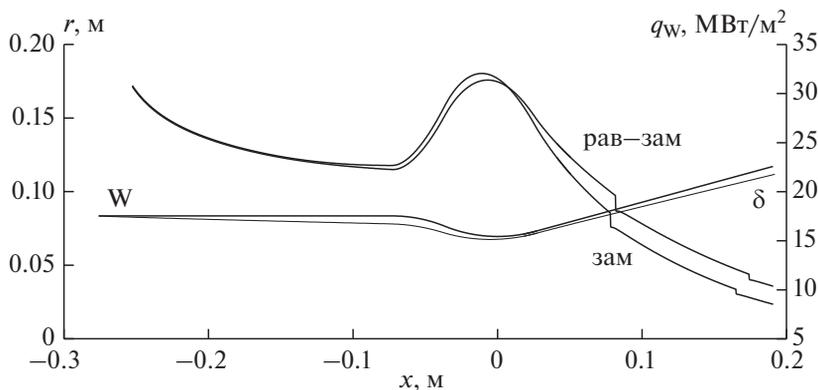


Рис. 6. Продольные распределения теплового потока в стенку сопла для равновесного течения с замораживанием и полностью замороженного пограничного слоя при наличии газовой завесы.

ности охлаждаемой стенки сопла существует тонкий подслой газа $\delta_{\text{зам}} \approx 20$ мкм с низкой температурой $T \leq 1800$ К. Скорости химических реакций в данном температурном диапазоне незначительны и течение в указанном подслое считается химически замороженным – массовые скорости образования продуктов сгорания топлива полагаются равными нулю $\dot{m}_i \equiv 0$. Замораживание пристенного слоя приводит к уменьшению теплового потока в стенку сопла, вследствие чего максимальные величины теплового потока при равновесном течении с замораживанием и полностью замороженным пограничным слоем (рис. 4) имеют небольшое различие (~ 10 – 15%).

Вторая серия параметрических расчетов была выполнена для сопла с охлаждаемой стенкой постоянной температуры $T_w = 800$ К и завесой охлаждения $\alpha_{\text{зав}} = 0.25$, при неизменных условиях на входе в камеру сгорания $H_{\text{кам}} = 0$ и $\alpha_{\text{кам}} = 1$.

Продольные распределения теплового потока в стенку сопла для равновесного течения с замораживанием и полностью замороженного пограничного слоя даны на рис. 6.

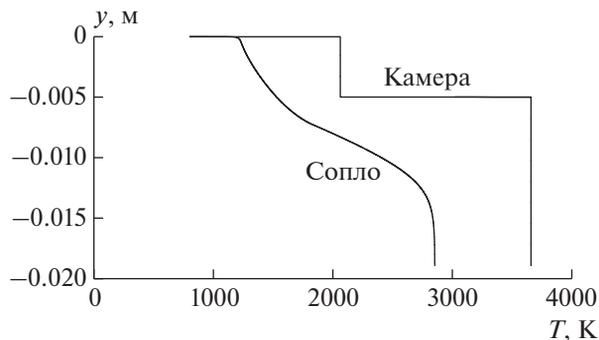


Рис. 7. Профили статической температуры на входе в камеру сгорания и в выходном сечении сопла для равновесного течения с замораживанием при наличии газовой завесы.

Профили статической температуры на входе в камеру сгорания и в выходном сечении сопла для равновесного течения с замораживанием приведены на рис. 7. Наличие охлаждающей завесы приводит к увеличению толщины пристенного слоя газа с низкой температурой $T \leq 1800$ К более чем на два порядка $\delta_{\text{зам}} \approx 7$ мм. Вследствие чего максимальные величины теплового потока в стенку сопла для химически равновесного течения с замораживанием и полностью замороженного пограничного слоя (рис. 6) практически не отличаются.

Представленные результаты исследований позволяют сделать вывод о том, что расчет процессов течения и теплообмена в камерах сгорания и соплах ракетных двигателей в условиях наличия регенеративного и завесного охлаждения, которые характерны для всех типов жидкостных ракетных двигателей, можно проводить по модели полностью замороженного пограничного слоя.

Использование модели химически равновесного течения с замораживанием является необходимым только в случае обтекания неохлаждаемой поверхности камеры сгорания и сопла двигателя, который соответствует тепловому режиму работы твердотопливных ракетных двигателей.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Сформулирован подход к решению проблемы термохимического моделирования неизэнтропических сдвиговых течений в камерах сгорания и соплах ракетных двигателей. Для расчета химического равновесия продуктов сгорания топлива создана методика определения массовых скоростей образования компонентов смеси в неизэнтропическом течении. В рамках сформулированного подхода, в качестве примера, проведен расчет пограничного слоя на стенке камеры сгорания и сопла кислородно-водородного ракетного двигателя. Выполнены параметрические исследования процессов течения и теплообмена. Полученные результаты позволяют сделать вывод о том, что расчет процессов течения и теплообмена в камерах сгорания и соплах жидкостных ракетных двигателей, при наличии регенеративного и завесного охлаждения, можно проводить по модели полностью замороженного пограничного слоя. Использование модели химически равновесного течения с замораживанием является необходимым только в случае обтекания неохлаждаемой поверхности камеры сгорания и сопла двигателя, который соответствует тепловому режиму работы твердотопливных ракетных двигателей.

Результаты тестирования подтверждают высокую точность полученного численного решения и позволяют рекомендовать предложенный подход для термохимического моделирования неизоэнтропических процессов в рабочих объемах и проточных трактах энергодвигательных установок.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Трусов Б.Г.* Моделирование химических и фазовых равновесий при высоких температурах (Астра-4/рс). М.: Изд. МВТУ им. Э. Баумана, 1991.
2. *Мельников Д.А., Пирумов У.Г., Сергиенко А.А., Семичастнов В.М. и др.* Руководство для конструкторов по проектированию сверхзвуковых осесимметричных круглых сопел реактивных двигателей. М.: Изд. ОНТИ, 1964.
3. *Кацкова О.Н.* Расчет равновесных течений газа в сверхзвуковых соплах. М.: Изд. ВЦ АН СССР, 1964.
4. *Лебединский Е.В., Калмыков Г.П., Мосолов С.В. и др., под ред. Академика РАН Коротеева А.С.* Рабочие процессы в жидкостном ракетном двигателе и их моделирование. М.: Машиностроение, 2008.
5. *Гурвич Л.В., Вейц И.В., Медведев В.А. и др.* Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание в 4-х томах. М.: Наука, 1978.
6. *Седов Л.И.* Механика сплошной среды, том 1. Москва. "Наука". Главная редакция физико-математической литературы, 1983.
7. *Борисов Д.М., Шураев Ю.А., Миронов В.В.* О некоторых особенностях численного моделирования систем регенеративного охлаждения энергодвигательных установок. // Изв. РАН. Энергетика. 2015. № 4. С. 152–157.
8. *Борисов Д.М., Шураев Ю.А., Миронов В.В.* Об определении теплового состояния профилированных сопловых насадков радиационного охлаждения. // Изв. РАН. Энергетика. 2018. № 5. С. 59–66.
9. *Шевелев Ю.Д.* Пространственные задачи вычислительной аэрогидродинамики. Москва. "Наука", 1986.

Thermochemical Modeling of Nonisoentropic Processes in Combustion Chambers and Nozzles of Rocket Engines

D. M. Borisov^{a, *}, V. V. Mironov^a, and Y. A. Shuraev^a

^aSSC FSUE "Research Center named after M.V. Keldysh", Moscow, Russia

*e-mail: borisovdm62@mail.ru

An approach is formulated to solve the problem of thermochemical modeling of nonisoentropic shear flows in combustion chambers and nozzles of rocket engines. To calculate the chemical equilibrium of the fuel combustion products, a method has been developed for determining the mass formation rates of the components of the mixture in an nonisoentropic flow. In the framework of the formulated approach, as an example, the boundary layer on the wall of the combustion chamber and the nozzle of an oxygen-hydrogen rocket engine was calculated. The obtained numerical solution was tested and parametric studies of the processes of flow and heat transfer were carried out.

Keywords: nonisoentropic shear flows, chemical equilibrium of fuel combustion products, mass formation rate of the components of the mixture, combustion chamber and nozzle of a rocket engine