

**ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ТЕОРИИ
СОПЛА ЛАВАЛЯ ПРИМЕНИТЕЛЬНО К ДВУМЕРНЫМ
НЕРАВНОВЕСНЫМ ТЕЧЕНИЯМ СОВЕРШЕННОГО ГАЗА**

В. Ф. КОЛМОГОРОВ

(Москва)

Описан метод расчета и представлены результаты численного решения обратной задачи теории сопла Лавали применительно к двумерным стационарным течениям совершенного газа с химическими реакциями, при этом по единой схеме рассчитываются равновесные, неравновесные и замороженные течения в до-, транс- и сверхзвуковой областях. Численное решение обратной задачи проводится с использованием неявной трехточечной схемы с переменным шагом на слое. Уравнения химической кинетики численно интегрируются с использованием неявной разностной схемы, предложенной в [2] и приспособленной для решения релаксационных уравнений с малым параметром при старшей производной.

Представлена некоторая модификация схемы [2]. С использованием предложенного метода в осесимметричном сопле Лавали проведен расчет течения реагирующей смеси совершенных газов, содержащих атомы С, Н, О, N элементов, для случаев равновесного, неравновесного и замороженного протекания химических реакций. Описаны качественные особенности течения.

Из работ, посвященных двумерным неравновесным течениям, отметим [3-8], в которых методом характеристик рассчитывалась лишь сверхзвуковая область течения.

1. Течение реагирующего газа без учета вязкости, теплопроводности, диффузии в переменных (x, ψ) [1] описывается следующей системой уравнений:

$$(1.1) \quad \partial y^{\nu+1} / \partial \psi = (\nu+1) / \rho u$$

$$(1.2) \quad \partial (p y^{\nu+1}) / \partial \psi = (\nu+1) / \rho u - y \partial v / \partial x$$

$$(1.3) \quad 1/2 \partial w^2 / \partial x + \rho^{-1} \partial p / \partial x = 0$$

$$(1.4) \quad 1/2 w^2 + \sum_{k=1}^{km} (J_k(T) \alpha_k - J_0(\psi)) = 0$$

$$(1.5) \quad f(\partial \alpha_k / \partial x) = e(\varphi_k - \alpha_k \Phi_k), \quad k=1, 2, \dots, d$$

$$(1.6) \quad \alpha_k = A_k + \sum_{i=1}^d B_{ki} \alpha_i, \quad k=d+1, \dots, km$$

$$(1.7) \quad 1/\rho = T/p\mu, \quad 1/\mu = \sum_{k=1}^{km} \alpha_k$$

$$(1.8) \quad v = w \frac{\partial y}{\partial x} / \sqrt{1 + \left(\frac{\partial y}{\partial x} \right)^2}, \quad u = (w^2 - v^2)^{1/2}$$

В системе (1.1)–(1.8) уравнение (1.1) – следствие уравнения неразрывности, (1.2), (1.3) – уравнений движения, (1.4) – уравнения энергии, (1.5) – уравнения химической кинетики, (1.6) – уравнения материального баланса, (1.7) – уравнение состояния, (1.8) – уравнение линии тока.

В системе (1.1)–(1.8) ψ – функция тока, p – давление, T – температура, u, v – проекция вектора скорости w на оси прямоугольной декартовой системы координат x и y соответственно, ρ – плотность, μ – молекулярный вес смеси, α_k – количество молей k -й химической компоненты в единице массы смеси, $J_0(\psi)$ – энтальпия торможения единицы массы газа, $J_k(T)$ – мольная энтальпия единицы массы k -й компоненты, A_k – число молей k -го химического элемента в единице массы газа, B_{ki} – число атомов k -го химического элемента, входящее в i -ю компоненту, km – число компонент в смеси, a – число различных химических элементов, присутствующих в смеси, $d = km - a$. Пусть $q = 0, 1, 2$, для химических реакций, протекающих соответственно замороженно, равновесно, неравновесно. Тогда параметры $f = |1 - q|$ и $e = \text{sign}(q)$ определяют вид уравнений (1.5) для химических реакций, протекающих замороженно, равновесно, неравновесно; $v = 0, 1$ для плоского и осесимметричного случаев соответственно.

Функции Φ_k и $\alpha_k \Phi_k$ записываются в виде

$$\Phi_k = \frac{1}{\rho u} \sum_{r=1}^{rm} (c_{rk}^- - c_{rk}^+) k_r^+ \prod_{i=1}^{km} (\rho \alpha_i)^{c_{ri}^+}$$

$$\alpha_k \Phi_k = \frac{1}{\rho u} \sum_{r=1}^{rm} (c_{rk}^- - c_{rk}^+) k_r^- \prod_{i=1}^{km} (\rho \alpha_i)^{c_{ri}^-}$$

где rm – число реакций в смеси, c_{rk}^+, c_{rk}^- – стехиометрические коэффициенты k -го компонента в r -й химической реакции, k_r^+, k_r^- – константы скорости r -й реакции. Функции $J_k(T)$, $k_r^+ = k_r^+(T)$, $k_r^- = k_r^-(T)$ считаются заданными. Вид этих функций может быть определен, в частности, из [7, 8].

Отметим, что уравнение (1.2) в отличие от соответствующего уравнения работы [1] записано таким образом, чтобы устранить особенность на оси симметрии. Энтальпия торможения в общем случае может зависеть от ψ , т. е. концентрации компонент в начальном сечении могут различаться, при этом функция $J_0(\psi)$ может быть разрывной.

Система уравнений (1.1)–(1.8) применялась для исследования течений в соплах Лавала численным методом. В предлагаемом численном методе последовательно используются методы [1, 2] для расчетов двумерных неравновесных течений. В [2] решение системы уравнений химической кинетики и газовой динамики в одномерном приближении проводится вдоль линий тока при заданном распределении давления вдоль этой линии тока. В то же время метод, описанный в [1], позволяет находить двумерное поле течения, форму линий тока и распределение давления на них. Последовательное применение методов [1, 2] позволяет рассчитывать двумерные течения в соплах с химическими реакциями.

Действительно, по известной форме линии тока и распределению давления на ней с помощью уравнений (1.1) и (1.2) определяется форма следующей линии тока и распределение давления на ней. Интегрируя затем вдоль линии тока при известном распределении давления систему (1.3)–(1.7), определяем остальные параметры течения. Граничные условия должны задаваться в некотором сечении сопла $x = x_0$ для решения системы (1.3)–(1.7) и на некоторой линии тока $\psi = \psi_0$ для решения системы (1.1), (1.2). При этом часть граничных условий приходится на область, течение в которой близко к равновесному. Этот факт накладывает жесткие требования на точность и согласованность граничных условий при расчете неравновесных течений, невыполнение которых либо приводит к большим

потерям счетного времени на установление согласованных граничных условий, либо вообще лишает возможности решать задачу.

В связи с этим в данной работе схема, описанная в работе [2], при сохранении основных идей несколько модифицирована. Это необходимо еще и по той причине, что при решении двумерных задач приходится рассчитывать течение вдоль достаточно большого числа линий тока, причем параметры на каждой линии тока в отличие от [2] теперь уже будут определяться в результате некоторого итерационного процесса. Модификация связана с более корректной подготовкой граничных условий для системы (1.3)–(1.7). Кроме того, применение метода Ньютона для расчета значений функций в каждом «новом» узле разностной сетки при неявной схеме требует обращения новой матрицы. Однако если принять на некотором отрезке интегрирования обращенную матрицу неизменной, то время расчета существенно сокращается. При этом величина отрезка интегрирования с неизменной матрицей эффективно контролируется числом итераций, потребовавшихся для сходимости итерационного процесса к решению.

Рассмотрим порядок задания граничных условий для системы уравнений (1.1)–(1.7). Пусть на отрезке $[x_0, x_n]$ некоторой линии тока $\psi = \psi_0$ заданы функции $y(x, \psi)$, $p(x, \psi)$. Тогда поиск недостающих функций граничного условия на линии тока $\psi = \psi_0$ сводится к решению задачи Коши вдоль линии тока $\psi = \psi_0$ для системы (1.3)–(1.8), в результате решения которой определяются величины u , T , α_k , μ , ρ , v как функции x и ψ_0 при соответствующем значении параметра q . Граничные условия, необходимые для интегрирования системы (1.3)–(1.8), определяются в предположении равновесности протекания химических реакций и одномерности потока в этой равновесной области для всех p таких, что $p_k \geq p \geq p(x_0, \psi)$, где p_k — давление торможения.

Для расчета равновесного состава и газодинамических параметров равновесного течения использовался метод, аналогичный описанному в [9]. Так, для заданной энтальпии торможения $J_0(\psi)$ и известных атомарных концентраций химических элементов в смеси при $p = p_k$ $u = v = 0$ для параметра $q = 1$, из уравнений (1.5), (1.6), представляющих собой в этом случае систему трансцендентных алгебраических уравнений, определяются значения $\alpha_k(p_k)$, $T(p_k)$. Далее решается задача Коши на полуинтервале $(p_k, p(x_0, \psi))$ для системы уравнений (1.3)–(1.8) при значении параметра $q = 1$ относительно $u(p, \psi)$, $T(p, \psi)$, $\alpha_k(p, \psi)$, $\mu(p, \psi)$, $\rho(p, \psi)$, $v(p, \psi)$ с использованием в качестве граничных условий $p = p_k$, $u = v = 0$, $\alpha_k(p_k)$ и $T(p_k)$. Значения функций, полученные в результате расчета равновесного течения в точке $p(x_0, \psi)$, выбираются в качестве граничных условий для расчетов замороженного, равновесного и неравновесного течений, т. е. принимается, что

$$(1.10) \quad u(x_0, \psi)_q = u[p(x_0, \psi)]_1, \quad T(x_0, \psi)_q = T[p(x_0, \psi)]_1 \dots \\ \dots, \quad v(x_0, \psi)_q = v[p(x_0, \psi)]_1, \quad q = 0, 1, 2$$

2. Система уравнений (1.1)–(1.8) решалась конечно-разностным методом. Для записи уравнений (1.1)–(1.3) в конечно-разностном виде применялась неявная разностная схема второго порядка точности [1], для дифференциальных уравнений химической кинетики — неявная «параметрическая» разностная схема [2] с параметром схемы $s = 0.4$. Значения производных $\partial v / \partial x$ из (1.2) и $\partial y / \partial x$ из (1.8) на линии тока $\psi = \psi_n$ вычислялись соответственно как

$$\partial L_{2v} / \partial x = L_{2v}'(x, \psi_n), \quad \partial L_{2y} / \partial x = L_{2y}'(x, \psi_n)$$

где L_2 — полином Лагранжа второго порядка. Узлы разностной сетки на слое ψ_n выбирались неравноотстоящими в соответствии [1], что обеспечило устойчивое решение некорректной задачи Коши в эллиптической области.

Пусть n — номер линии тока ($n = 0, 1, \dots$), i — номер точки на линии тока ($i = 0, 1, \dots, im$), k — номер итерации линии тока n ($k = 0, 1, \dots$), j — номер итера-

дии при решении уравнений в точке i на линии тока n ($j=0, 1, \dots$). Отсутствие указателя итерации у какого-либо параметра означает, что значение данного параметра не меняется в процессе итераций.

Пусть на слое ψ_{n-1} известны все параметры течения. Тогда y и p на слое ψ_n определяются из разностных соотношений, составленных для уравнений (1.1) и (1.2).

Пусть в точке $i=0$ слоя ψ_n известны $[w, T, a_k]_n$. Тогда w, T, a_k на слое ψ_n определяется из соотношений

$$(2.1) \quad (f_3)_{n,k}^{i,j} = (w^2)_{n,k}^{i,j} + \Delta p (T/p\mu)_{n,k}^{i,j-1} - (w^2 + \Delta p T/p\mu)_{n,k}^{i-1} = 0$$

$$(2.2) \quad (f_4)_{n,k}^{i,j} = [1/2 w^2 + J(a_k, T)]_{n,k}^{i,j} - J(\psi_n) = 0$$

$$(2.3) \quad (f_a)_{n,k}^{i,j} = a_{n,k}^{i,j} - a_{n,k}^{i-1} + h[s\Phi_{n,k}^{i-1} + (1-s)\Phi_{n,k}^{i,j} - a_{n,k}^{i-1}(s\Phi_{n,k}^{i-1} + (1-s)\Phi_{n,k}^{i,j})] / (1+h(1-s)\Phi_{n,k}^{i,j}) = 0$$

$$a = a_1, a_2, \dots, a_d, \quad \Delta\psi = \psi_n - \psi_{n-1}, \quad \Delta p = p_n^i - p_n^{i-1}, \quad h = x^i - x^{i-1}$$

Уравнения для нахождения μ и a_k , определяемых из условия материального баланса, записывались соответственно в виде (1.7), (1.6) для точки поля течения (i,n) в итерациях (j, k) . Из уравнений (1.8) имеем

$$(2.4) \quad v_{n,k}^i = [wL_{2y}'(x_i, \psi_n) / \sqrt{1 + [L_{2y}'(x_i, \psi_n)]^2}]_{n,k}^i \quad u_{n,k}^i = (\sqrt{w^2 - v^2})_{n,k}^i$$

На отрезке $[x_0, x_{im}]$ линии тока ψ_0 задавался конкретный вид функций $y(x_i, \psi_0)$ и $p(x_i, \psi_0)$ ($i=0, 1, \dots, im$). По соотношениям (2.1)–(2.4) на линии тока определялись все остальные неизвестные величины.

Для заданного шага $\Delta\psi$ значения функций нулевой итерации слоя n полагались равными значениям соответствующих функций на предыдущем слое.

Из разностных соотношений для уравнений (1.1), (1.2) методом Ньютона для всех точек $i=0, 1, \dots, im$ в итерациях по индексу $j=1, 2, \dots$ определялись $y_{n,k}^{i,j}$ и $p_{n,k}^{i,j}$. Итерации в точке (i, n) проводились до выполнения заданной относительной точности. Далее находилось граничное условие на линии тока $\psi = \psi_n$ в сечении $x = x_0$ аналогично (1.10).

Из уравнений (2.1)–(2.3) методом Ньютона для всех точек $i=1, 2, \dots, im$ в итерациях по индексу $j=1, 2, \dots$ определялись $w_{n,k}^{i,j}, T_{n,k}^{i,j}, a_{n,k}^{i,j}$. Итерации проводились в точке (i, n) до тех пор, пока не выполнялась заданная относительная точность искомых функций и невязка не становилась меньше заданной.

Из уравнений (2.4) для всех точек $i=0, 1, \dots, im$ определялись $v_{n,k}^i$ и $u_{n,k}^i$.

После нахождения всех функций на линии тока n в k -й итерации определялось наибольшее значение из максимальных относительных приращений функций y, p, w, T . В случае, если это значение оказывалось больше заранее заданной величины, приводилась следующая итерация слоя n по индексу k .

Расчет по слоям проводился до тех пор, пока минимальное значение радиуса кривизны линии тока в некоторой ее точке, отнесенное к величине y в этой точке, не становилось меньше заранее заданной величины \bar{R}^* .

В результате расчета в области $[x, \psi] x_0 \leq x \leq x_{im}, \psi_0 \leq \psi \leq \psi_{nm}$, где nm — номер линии тока, минимальный радиус кривизны которой уже меньше заданного \bar{R}^* на совокупности точек $\{(i, n); i=0, 1, \dots, im, n=0, 1, \dots, nm\}$, для заданного параметра q определялись значения геометрических газодинамических и химических параметров течения $[y, p, u, T, a_k, v]_n^i$.

Для контроля точности счета в сечениях $x_i, i=0, 1, \dots, im$ вычислялась функция расхода

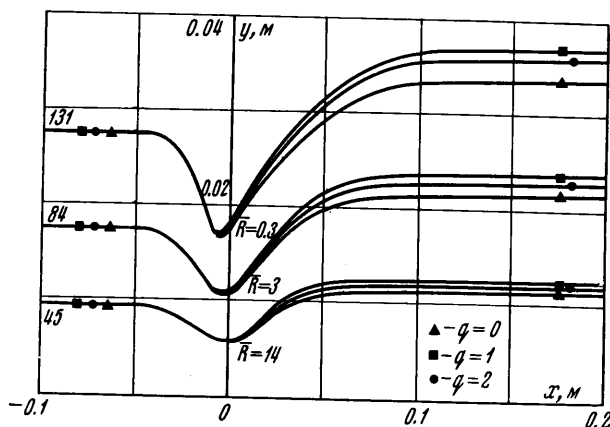
$$\psi_n^{*i} = \int_{y_0^i}^{y_n^i} \rho u y^v dy$$

и проверялось выполнение закона сохранения количества движения. Время расчета одной линии тока на машинах типа БЭСМ-4 при итерациях по k менялось в пределах от 30 (для итераций выше первой и параметра $q=0, 1$) до 80 сек (для первой итерации и параметра $q=2$). Время расчета одного варианта сошла с $\bar{R}^*=0.3$ –0.5 составляло 30–40 мин при $q=0, 80$ –100 мин при $q=1, 2$ –2.5 час при $q=2$.

Каждая из рассчитанных линий тока может быть принята за контур сопла. При этом в случае неравновесного течения в отличие от случаев равновесного и замороженного течений контур сопла в относительных координатах (длина и радиус отнесены к радиусу минимального сечения) зависит от величины абсолютного давления в камере сгорания и размера критического сечения. Очевидно, что предлагаемый метод позволяет рассчитывать неравновесные течения в плоских, осесимметричных и кольцевых соплах.

3. На примере расчета одного из вариантов опишем особенности двумерных течений в соплах с химическими реакциями.

Уравнения (1.5) записывались для некоторой системы стехиометрических соотношений, содержащей реакции диссоциации и обменные реак-



Фиг. 1

ции. Константы скорости реакций выбирались из работы [7]. Значения функций $y(x, \psi_0)$ на отрезке $[0.1, 0.2]$ оси сопла задавались равными нулю, а $p(x, \psi_0)$ вычислялось по формуле [1]

$$p(x, \psi_0) = p_k \left[\pi_1 + \frac{(\pi_0 - \pi_1)(\pi_1 - \pi_n)(a - c)}{(\pi_0 - \pi_1)c + (\pi_1 - \pi_n)a} \right]$$

$$a = \exp(-x/b), \quad c = 1 \quad (x > 0) \quad a = 1, \quad c = \exp(x/b) \quad (x \leq 0)$$

$$\pi_1 = (2/(\kappa + 1))^{\kappa/(\kappa - 1)}, \quad \kappa = 1.25, \quad b = 0.8, \quad \pi_0 = 0.97, \quad \pi_n = 0.04, \quad p_k = 5 \text{ бар}$$

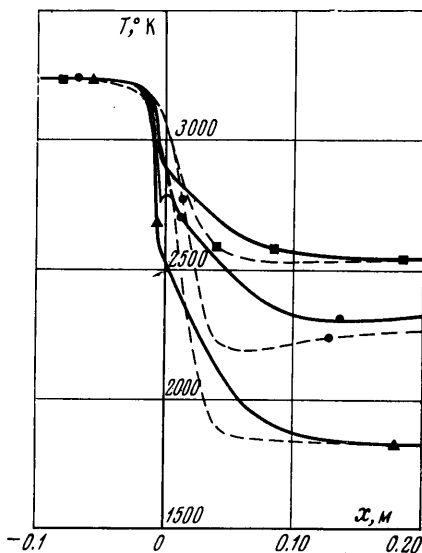
Рассматривалась смесь газов H_2 и O_2 при коэффициенте избытка окислителя [9], равном 1.0, с значениями энтальпий соответственно -3828 и -398 кДж/кг . Результаты расчета представлены на фиг. 1–4, где для химических реакций, протекающих замороженно ($q=0$) все функции отмечены треугольником, равновесно ($q=1$) — квадратом и неравновесно ($q=2$) — кружком.

На фиг. 1 представлена геометрия 45, 84, 131 линий тока с указанным на них значением минимального радиуса кривизны. Как нетрудно видеть, форма линий тока вблизи оси слабо зависит от типа механизма протекания химических реакций. С удалением от оси влияние типа механизма протекания химических реакций на форму линий тока особенно в сверхзвуковой области возрастает, но положение линий тока замороженного и равновесного течений остается предельным для положения линии тока неравновесного течения. Ввиду того что разница площадей сечения сопла с большим относительным расширением для равновесного и замороженного течений остается значительной, при профилировании сверхзвуковой части такого сопла необходимо проводить расчеты неравновесных течений. Форма линий тока в дозвуковой части сопла мало зависит от типа механизма протекания химических реакций.

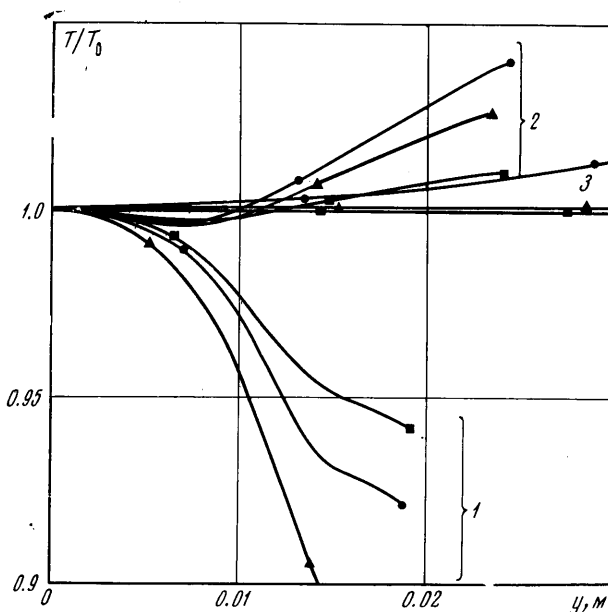
На фиг. 2 в зависимости от координаты x вдоль оси сопла представлено распределение температуры на оси (пунктирная линия) и 131 линии тока (сплошная линия) для замороженного, равновесного и неравновесного течений. Влияние неравновесности и двумерности потока начинает сказываться еще в дозвуковой области, так что вблизи трансзвуковой области течения это отличие существенно. Значения функций $T(x)$ для неравновесного течения на оси и 131-й линии тока в дозвуковой и сверхзвуковой областях течения находятся между соответствующими значениями температуры для равновесного и замороженного течений.

Однако в закритической части трансзвуковой области неравновесного течения при малых радиусах кривизны линий тока наблюдается повышение температуры, сопровождающееся положительным градиентом давления. Это связано с предшествующим области повышения температуры большим отрицательным

градиентом давления, который вызывает резкое замораживание химических реакций, идущих с небольшими скоростями. При последующем переходе к небольшим градиентам давления в результате интенсивного про-



Фиг. 2

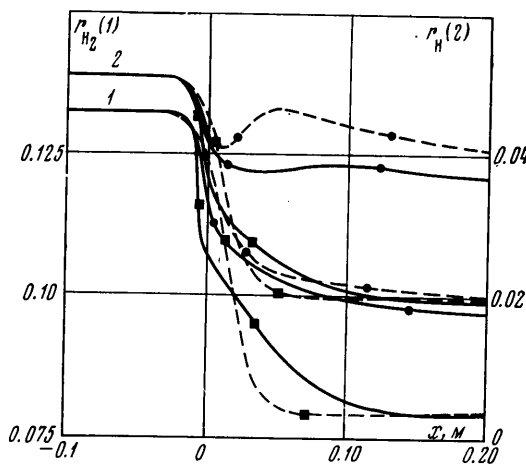


Фиг. 3

текания замороженных ранее реакций происходит повышение температуры. Ввиду того что на выходе из сопла величина производной $|\partial p/\partial x|$ близка к нулю, для всех линий тока неравновесного течения наблюдается

изменение температуры в сторону ее равновесных значений, т. е. в отсутствие ускорения потока неравновесное состояние химической системы стремится к локальному равновесному.

Влияние двумерности на параметры течения удобно рассматривать по отношению к одномерному потоку. На фиг. 3 приведено распределение



Фиг. 4

температуры T в сечениях $x = -0.00267$ м (кривые 1), $x = -0.021$ м (кривые 2), $x = 0.2$ м (кривые 3), отнесенной к температуре на оси T_0 в этих же сечениях для замороженного, равновесного и неравновесного течений, как функции координаты y . Двумерность потока оказывает наибольшее влияние на распределение температуры в области критического сечения сопла, и это влияние увеличивается с увеличением расстояния от оси, при этом значения температуры для всех типов течений ниже значений температуры в соответствующих точках на оси сопла. При движении

вниз по потоку влияние двумерности на поведение температуры падает так, что в выходном сечении сопла оно составляет несколько процентов соответствующей величины в околоскритической области течения. На фиг. 4 в зависимости от координаты x вдоль оси сопла приведено распределение молярных концентраций компонент r_{H_2} (кривые 1) и r_H (кривые 2) для равновесного и неравновесного течений на оси (пунктирные линии) и 131-й линии тока (сплошные линии). Как и для температуры, наибольшее влияние двумерности потока на величины концентраций наблюдается в сверхзвуковой околоскритической области течения.

Поступила 2 III 1973

ЛИТЕРАТУРА

1. Пирумов У. Г. Расчет течения в сопле Лавала. Изв. АН СССР, МЖГ, 1967, № 5.
2. Камзолов В. Н., Пирумов У. Г. Расчет неравновесных течений в соплах. Изв. АН СССР, МЖГ, 1966, № 6.
3. Cleaver J. W. The two-dimensional flow of an ideal dissociating gas. Coll. Aeronaut., Cranfield, 1959, Rept No. 123.
4. Broer L. J. F. Characteristics of equations of motion of a reacting gas. J. Fluid Mech., 1958, vol. 4, pt. 3.
5. Кацкова О. Н., Крайко А. Н. Расчет плоских и осесимметричных сверхзвуковых течений при наличии необратимых процессов. ПМТФ, 1963, № 4.
6. Дубинская Н. В., Гжеляк Р. А., Иголина И. В. Расчет течения Прандтля - Майера с учетом неравновесной диссоциации воздуха. В сб. «Численные методы в газовой динамике». М., Изд. МГУ, 1965.
7. Кондратьев В. Н. Константы скорости газофазных реакций. Справочник. М., «Наука», 1970.
8. Гурвич Л. В., Хачкурузов Г. А., Медведев В. А. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочник. М., Изд-во АН СССР, 1962.
9. Алемасов В. Е., Дрегаллин А. Ф., Тишин А. П. Теория ракетных двигателей. М., «Машиностроение», 1969.