



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«МОСКОВСКИЙ АВИАЦИОННЫЙ ИНСТИТУТ
(национальный исследовательский университет)»

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой 806 _____ Крылов С.С.
(№ каф.) (подпись) (инициалы, фамилия)
_____ 20 г.

**ОТЧЕТ
О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ**

по теме:

Численное моделирование течения струй газа с неравновесным химическим
процессом

Научный руководитель
к.ф.-м.н., доцент

О.Л. Демидова

Исполнитель

А.А. Садаков

Москва 2025

РЕФЕРАТ

Научно-исследовательская работа состоит из 19 страниц, 5 рисунков, 1 таблицы, 5 использованных источников.

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ, МЕТОД КРАНКА-НИКОЛСОНА, ЖЁСТКИЕ СИСТЕМЫ, ХИМИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА, ТУРБУЛЕНТНОСТЬ, ВЯЗКОСТЬ, РЕЙНОЛЬДС

Объектом исследования является моделирование турбулентных течений.

Цель работы — разработка программы для моделирования уравнений газовой динамики в турбулентных и ламинарных потоках.

Значительный прогресс в понимании природы и свойств турбулентности произошёл в последние десятилетия благодаря успехам теории динамических систем, позволившим понять как хаотическое поведение возникает в детерминированных системах.

Также развитие численных методов решения систем дифференциальных уравнений и увеличение расчётных мощностей современных компьютеров позволяют применять различные современные модели турбулентности и усовершенствовать их на основании результатов численных экспериментов.

В процессе работы были созданы отдельные модули для решения задач химической кинетики, моделирования ламинарных и турбулентных потоков и генерации отчётов решения/моделирования. Так же были созданы модули для графического отображения результатов и взаимодействия с пользователем.

В качестве основного решателя используется схема Кранка-Николсона, решающая систему уравнений итеративно. На каждой итерации отдельно решается система дифференциальных уравнений для моделирования горения химических компонент с использованием явной схемы Рунге-Кутты 4-го порядка.

В дальнейшем результаты работы можно использовать для научных расчётов и моделирования физических процессов течения струй.

СОДЕРЖАНИЕ

ТЕРМИНЫ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ	4
ПЕРЕЧЕНЬ СОКРАЩЕНИЙ И ОБОЗНАЧЕНИЙ	5
ВВЕДЕНИЕ	6
1 АКТУАЛЬНОСТЬ ТЕМЫ	8
2 ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ РАБОТЫ	10
2.1 Задачи проекта	10
2.2 Научная новизна и практическая значимость работы	11
3 МЕТОДИКА РАСЧЁТА И ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ	12
3.1 Графический пользовательский интерфейс	13
3.2 Реализация методов решения СДУ	14
3.3 Схема Кранка-Николсона	14
3.4 Ввод данных по профилю	15
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	17
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	19

ТЕРМИНЫ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ

В настоящей научно-исследовательской работе применяют следующие термины с соответствующими определениями:

Жёсткая система — ОДУ, численное решение которого явными методами является неудовлетворительным из-за резкого увеличения числа вычислений или из-за резкого возрастания погрешности при недостаточно малом шаге

Методы Рунге-Кутты — большой класс численных методов решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений и их систем

Условие химического равновесия — равенство полных химических потенциалов исходных веществ и продуктов

Химическая кинетика — раздел физической химии, изучающий закономерности протекания химических реакций во времени, зависимости этих закономерностей от внешних условий, а также механизмы химических превращений

Критерий Рейнольдса — отношение инерционных сил к вязким, определяющее этапы перехода от ламинарных течений к турбулентным

Турбулентность — сложное, неупорядоченное во времени и пространстве поведение диссипативной среды (или поля), детали которого не могут быть воспроизведены на больших интервалах времени при сколь угодно точном задании начальных и граничных условий

Ламинарный поток — упорядоченное течение жидкости или газа, при котором жидкость или газ перемещается как бы слоями, параллельными направлению течения

ПЕРЕЧЕНЬ СОКРАЩЕНИЙ И ОБОЗНАЧЕНИЙ

В настоящей научно-исследовательской работе применяют следующие сокращения и обозначения:

ДУ — дифференциальное уравнение

ПО — программное обеспечение

ОДУ — обыкновенное дифференциальное уравнение

СДУ — система дифференциальных уравнений

СНУ — система нелинейных уравнений

САУ — система алгебраических уравнений

СЛАУ — система линейных алгебраических уравнений

ρ — плотность, $\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$

t — время, с

P — давление, Па

U — осевая потока, м/с

V — радиальная скорость, м/с

W — тангенциальная скорость, м/с

T — температура, К

$V_{\text{об}}$ — объём, м³

R — универсальная газовая постоянная, $\frac{\text{Дж}}{\text{К} \cdot \text{моль}}$

U_E — внутренняя энергия, $\frac{\text{Дж}}{\text{кг}}$

J — энтальпия, Дж

μ — вязкость, Дж

Pr — число Прандтля

Sc — число Шмидта

Le — число Льюиса

μ_{Σ} — молекулярный вес смеси, Дж

G — потенциал Гиббса, $\frac{\text{Дж}}{\text{кг}}$

N — число компонент смеси

ВВЕДЕНИЕ

При всём разнообразии теплоэнергетических устройств процесс сжигания топлива происходит практически по единой схеме, которую можно иллюстрировать на примере газового факела. Для рассматриваемого течения характерно наличие двух разделённых до некоторого момента многокомпонентных потоков газа с разными физическими (температура, скорость) и химическими (молекулярный вес, концентрации компонентов) свойствами, причем потоки могут состоять не только из топлива и окислителя в чистом виде, но и представлять готовую горючую смесь или продукты сгорания. Скорости потоков могут быть дозвуковыми (энергетические установки) и сверхзвуковыми (реактивные двигатели), а сам процесс истечения может быть ламинарным или турбулентным в зависимости от конкретных параметров горелки.

Задачу моделирования течения спутных струй с газовой смесью можно условно разделить на 2 подзадачи: моделирование течения потока и моделирование горения химических компонент. Первая подзадача связана с решением уравнений Навье–Стокса или их упрощённых аналогов, учитывающих турбулентность, сжимаемость и другие физические эффекты. Вторая подзадача требует описания кинетики химических реакций, включая процессы диссоциации, рекомбинации и горения, которые часто протекают в условиях значительного отклонения от термодинамического равновесия.

Современные вычислительные методы и алгоритмы позволяют проводить комплексное моделирование таких течений, однако остаются открытыми вопросы, связанные с повышением точности, устойчивости и эффективности расчётов. В данной работе рассматриваются подходы к численному моделированию неравновесных химических процессов в струйных течениях, а также анализируются их преимущества и ограничения.

В рамках данной работы была разработана программа для численного моделирования течений газа, учитывающая как ламинарные, так и турбулентные режимы. Программа основана на решении усреднённых уравнений Навье–Стокса с использованием моделей турбулентности (например, $k - \epsilon$, SST и так далее), а также включает модуль расчёта химических реакций в приближении конечной скорости. Для верификации алгоритма проведено сравнение с экспериментальными данными для

различных конфигураций струй, включая случаи с закритическими давлениями и высокоскоростными течениями. Результаты демонстрируют хорошее соответствие расчётных и экспериментальных распределений температуры, концентраций компонент и скорости потока. Помимо этого был реализован отдельный модуль для работы с СДУ при помощи множества методов семейства Рунге-Кутты. В работе реализовано 18 явных методов до 6 порядка точности, 9 вложенных, включая схему Дормана-Принса 4-5 порядка, 19 неявных до 6 порядка. Для решения СНУ при итерировании в неявных схемах используются схемы первого порядка (простой итерации, Зейделя) и второго порядка (метод Ньютона), причём для обращения матрицы применялся метод LU-разложения. Для дифференцирования функции при построении матрицы Якоби для метода Ньютона использовались формулы с 4 порядком точности. При необходимости можно использовать формулы с меньшим порядком.

Разработанный программный комплекс позволяет проводить расчёты с приемлемой точностью при умеренных вычислительных затратах, что делает его применимым как для научных исследований, так и для инженерных расчётов. Дальнейшее развитие работы может быть связано с внедрением более детальных моделей турбулентности, учётом радиационного теплообмена и оптимизацией вычислительных алгоритмов для расчёта сложных химических кинетик.

1 АКТУАЛЬНОСТЬ ТЕМЫ

Турбулентность остается одним из наиболее сложных объектов исследования механики жидкости и газа. За почти столетнюю историю ее изучения предложены десятки различных подходов, почти всегда отражающие наиболее активно развиваемые перспективные направления математики и физики соответствующего периода времени. Статистическая физика и теория вероятности, теория размерности, математический анализ и прямые численные методы, теория динамических систем, теория фракталов - вот далеко не полный перечень областей науки, которые давали основные идеи исследователям турбулентности. Примером турбулентности могут выступать самые обычные потоки воздуха, обтекающие объект, представленные на рисунке 1. Поток воздуха при варьирующихся параметрах ведёт себя по-разному.

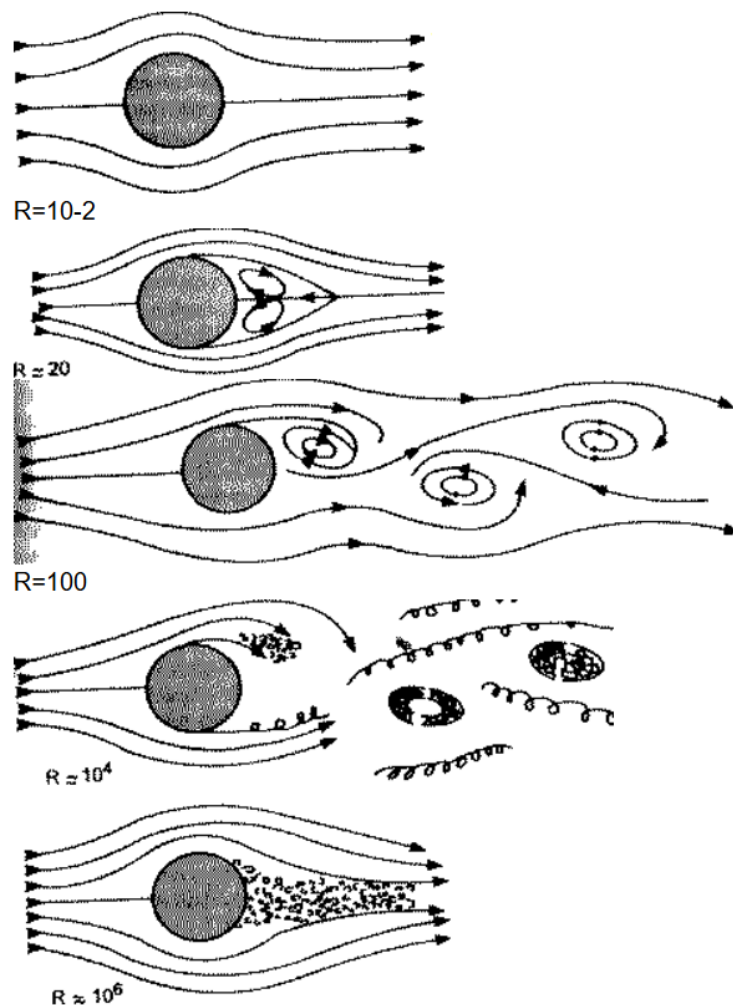


Рисунок 1 – Примеры турбулентных потоков при разном критерии Рейнольдса

В качестве объекта исследования выбраны течения свободных струй газа, которые наблюдаются в энергетических установках таких как реактивные двигатели, камеры сгорания промышленных печей, горелочные устройства, испытательные стенды и т. д.. На рисунке 2 изображена примерная схема таких установок.

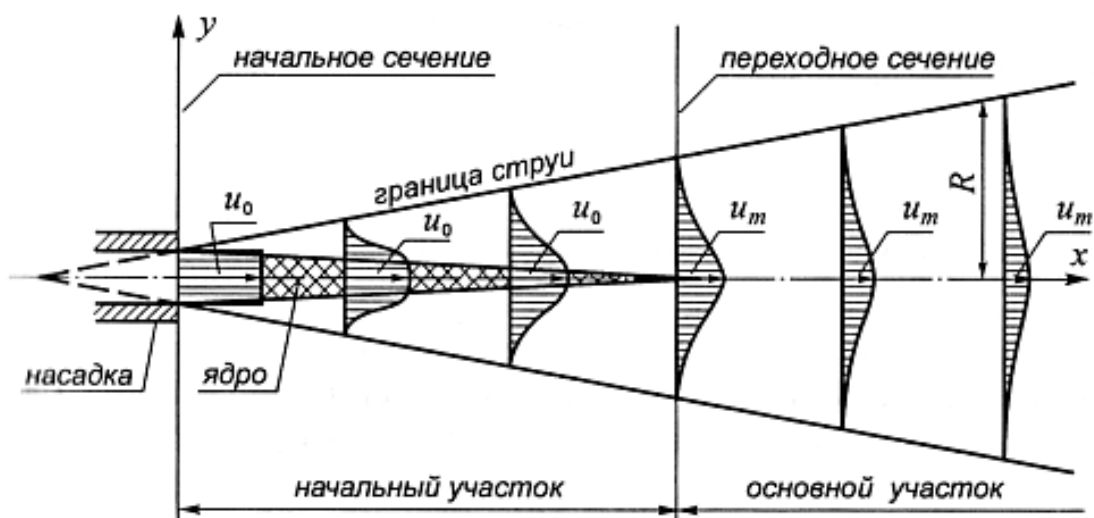


Рисунок 2 – Объект исследования

В связи с исключительной практической важностью надёжного расчётного предсказания характеристик сложных турбулентных течений для многих областей науки и техники (большинство представляющих интерес течений являются турбулентными), построению таких моделей, разработке методов расчета и проведению численных исследований различных течений на их основе посвящено огромное число работ.

2 ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ РАБОТЫ

Основной целью данной работы является разработка численной модели и программного обеспечения для расчёта течения реактивных струй газа с учётом неравновесной химической кинетики, а также верификация модели на основе сравнения с экспериментальными данными.

Конкретные аспекты, на которые направлено исследование:

- моделирование ламинарных и турбулентных течений с химическими реакциями;
- учёт неравновесных процессов (диссоциация, рекомбинация, горение);
- обеспечение приемлемой точности расчётов при разумных вычислительных затратах;
- проверка адекватности модели путём сопоставления с известными экспериментальными и численными данными.

2.1 Задачи проекта

Для достижения поставленной цели в работе решаются следующие задачи:

- а) Анализ существующих математических моделей:
 - 1) Обзор уравнений Навье–Стокса и их модификаций для описания течений с химическими реакциями;
 - 2) Анализ кинетических схем для описания неравновесных химических процессов;
- б) Разработка численного алгоритма:
 - 1) Реализация методов расчёта турбулентного перемешивания и химических реакций;
 - 2) Оптимизация вычислительных процедур для снижения ресурсоёмкости;
- в) Создание программного обеспечения:
 - 1) Разработка программы на основе выбранных математических моделей;
 - 2) Обеспечение возможности моделирования как ламинарных, так и турбулентных режимов течения;
 - 3) Реализация визуализации результатов (поля скорости,

температуры, концентрации компонент);

г) Анализ результатов и выводы:

- 1) Исследование влияния различных факторов (скорость истечения, состав смеси, температура) на структуру течения;
- 2) Определение границ применимости модели;
- 3) Формулировка рекомендаций для дальнейшего развития метода.

2.2 Научная новизна и практическая значимость работы

Научная новизна исследования заключается в следующем:

- разработана комплексная модель, сочетающая методы расчёта турбулентных течений и неравновесной химической кинетики;
- предложены оптимизированные алгоритмы, позволяющие проводить расчёты с приемлемой точностью без чрезмерных вычислительных затрат;
- проведено сравнение точности параболизированной системы уравнений и полного Навье-Стокса на широком наборе тестовых случаев.

Результаты работы, при дальнейшем развитии, могут быть использованы:

- при проектировании реактивных двигателей и сопловых аппаратов;
- в задачах моделирования горения и смесеобразования в энергетических установках;
- в научных исследованиях, связанных с неравновесными газодинамическими процессами.

Таким образом, данная работа направлена на создание инструмента для численного моделирования сложных газодинамических процессов, что позволит улучшить понимание физики течений с химическими реакциями и оптимизировать инженерные расчёты.

3 МЕТОДИКА РАСЧЁТА И ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ

В данном разделе перечислены основные алгоритмы и структуры, которые использовались в остальных модулях.

LU алгоритм

LU-разложение матрицы [1] A представляет собой разложение матрицы A в произведение нижней и верхней треугольных матриц, т.е. $A = LU$, где L — нижняя треугольная матрица на диагонали которой стоят единицы, U — верхняя треугольная матрица.

$$\det(A) = \det(L)\det(U) = \left(\prod_{i=1}^n L_{ii}\right)\left(\prod_{i=1}^n U_{ii}\right) = \prod_{i=1}^n U_{ii}, \quad (1)$$

где n — размер квадратной матрицы.

Метод Гаусса

Метод Гаусса — это прямой численный метод решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) вида:

$$Ax = b, \quad (2)$$

где A — матрица коэффициентов размера $n \times n$, x — вектор неизвестных, b — вектор правых частей.

При сравнении производительности методов Гаусса с выбором главного элемента и LU-разложения для решения системы вида 2, было установлено, что метод Гаусса обладает лучшей устойчивостью и скоростью решения.

Дифференцирование

Для численного дифференцирования была разработана функция, получающая в качестве аргументов функцию для дифференцирования, точку, в которой необходимо продифференцировать функцию и схему дифференцирования:

$$y' = \frac{a_1 y_{i-n+1} + a_2 y_{i-n+2} + \dots + a_{2n-1} y_{i+n-1}}{ch^p} \quad (3)$$

где n — количество точек аппроксимации.

При таком представлении все схемы можно реализовать при помощи

одномерного массива коэффициентов.

$$[a_1, a_2, \dots, a_{2n-1}, c, p],$$

где a_i — коэффициенты для точек, c — коэффициент перед шагом в знаменателе, p — степень шага.

Данное представление позволяет ”на ходу” выбирать предпочтительную точность производной.

3.1 Графический пользовательский интерфейс

Для ввода задачи была реализована специальная форма с использованием библиотеки *OpenGL*. Её внешний вид представлен на рисунке 3.

По окончании вычислений, все результаты сохраняются в отдельный файл, поэтому решать тестовые наборы достаточно один раз (если не планируется их дальнейшее изменение).

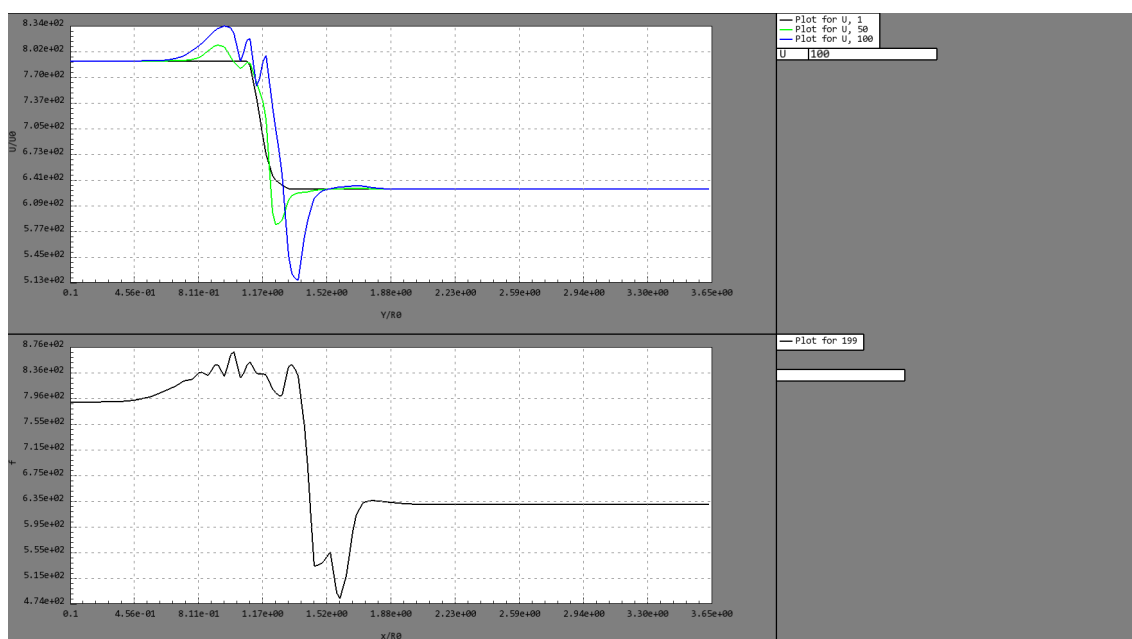


Рисунок 3 – Вид интерфейса для ввода анализа решения

При желании, можно посмотреть результаты работы по каждой переменной отдельно, а так же запустить короткую анимацию, чтобы проследить за изменением выбранной переменной на протяжении всего расчёта.

3.2 Реализация методов решения СДУ

Все методы семейства Рунге-Кутты можно представить в виде таблиц Бутчера [2; 3; 4]. В связи с этим появилась идея реализовать алгоритм, принимающий в качестве аргументов задачу и таблицу Бутчера и возвращающий решение в виде таблицы с координатами. Благодаря этому алгоритму добавлять новые методы не вызывает никаких сложностей. Используемые методы перечислены на рисунке 4. Всего в данной работе используется 62 схемы со 2 по 6 порядок точности.

Явные

- ☐ Классические методы Рунге-Кутты (15 схем)
- ☐ Вложенные методы Рунге-Кутты (9 схем)
- ☐ Многошаговые методы Адамса (4 схемы)
- ☐ Многошаговые методы Адамса в режиме предиктор-корректор (4 схемы)

Неявные

- ☐ Методы Гаусса (3 схемы)
- ☐ Методы Радо (3 схемы)
- ☐ Методы Лобатто (12 схем)
- ☐ Диагональные методы (4 схемы)
- ☐ Многошаговые методы Адамса (4 схемы)
- ☐ Многошаговые методы Куртиса (4 схемы)

Рисунок 4 – Методы решения

По желанию пользователя можно добавить другой метод при помощи специального конструктора.

Эти методы использовались при решении задачи горения химических компонент в ламинарном и турбулентном потоках.

3.3 Схема Кранка-Николсона

Для аппроксимации исходной системы уравнений при моделировании течения спутных струй выбран неявный шеститочечный шаблон типа Кранка-Николсона с весами. На рисунке 5 демонстрируется проблема использования чисто явной или чисто неявной схемы. Решение полученной системы нелинейных алгебраических уравнений определяется методом Гаусса.

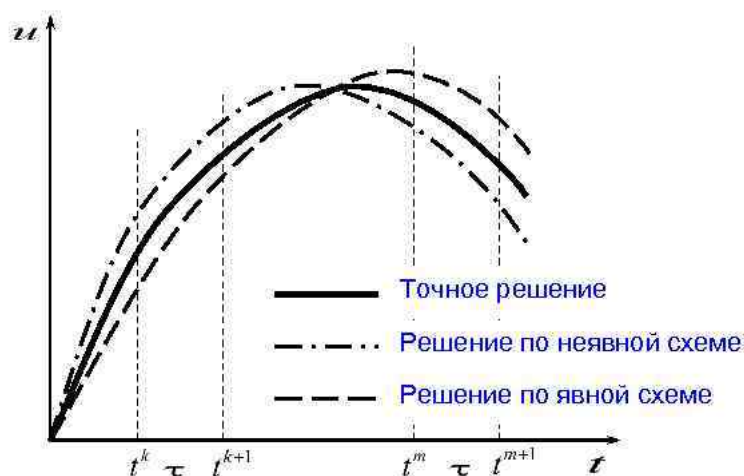


Рисунок 5 – Неявно-явные схемы с весами. Схема Кранка-Николсона

К методам численного интегрирования уравнений [5] обычно предъявляется ряд требований по времени и точности, выполнение которых желательно для создания эффективных программ расчета параметров течения. Перечисленными свойствами обладает маршевый метод интегрирования с применением неявной разностной схемы на шеститочечном шаблоне типа Кранка-Николсона с весами. Он обладает вторым порядком точности по поперечной координате и первым или вторым порядком, в зависимости от параметра численной схемы, по продольной координате и относится к наиболее часто применяемым методам для решения задач параболизированного типа.

3.4 Ввод данных по профилю

Для корректного моделирования струйных течений необходимо точное задание начальных профилей параметров потока на входе в расчетную область. В работе используется ступенчатый профиль.

Ввод данных происходит посредством чтения таблицы профильных величин из тестового файла и чтения нулевых значений для перевода из профильных величин в физические.

Таблица 1 – Таблица профильных величин

Y	U	V	W	T	P
0.100	1.000	0.000	0.000	1.000	1.000
0.200	1.000	0.000	0.000	1.000	1.000
0.300	1.000	0.000	0.000	1.000	1.000
0.400	1.000	0.000	0.000	1.000	1.000
0.500	1.000	0.000	0.000	1.000	1.000
0.600	1.000	0.000	0.000	1.000	1.000
0.700	1.000	0.000	0.000	1.000	1.000
0.800	1.000	0.000	0.000	1.000	1.000
0.900	1.000	0.000	0.000	1.000	1.000
1.000	1.000	0.000	0.000	1.000	0.455
1.100	1.000	0.000	0.000	1.000	0.182
1.200	0.820	0.000	0.000	0.740	0.036
1.300	0.797	0.000	0.000	0.433	0.036
1.400	0.797	0.000	0.000	0.433	0.036
1.500	0.797	0.000	0.000	0.433	0.045
1.600	0.797	0.000	0.000	0.433	0.054
1.700	0.797	0.000	0.000	0.433	0.061
1.800	0.797	0.000	0.000	0.433	0.061
1.900	0.797	0.000	0.000	0.433	0.061

При отображении результатов они переводятся уже из профильных в физические. Данное упрощение позволяет слегка улучшить точность вычислений.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе проведено исследование численного моделирования течения струй газа с неравновесными химическими процессами. Разработана математическая модель и программный комплекс, позволяющий рассчитывать как ламинарные, так и турбулентные режимы течения с учетом химических реакций. Основные результаты работы заключаются в следующем:

- 1) Разработана и реализована параболизированная модель струйных течений, позволяющая существенно сократить вычислительные затраты при сохранении приемлемой точности расчетов. Показано, что в области развитого течения ($x/d > 10$) погрешность модели не превышает 5 – 8% по сравнению с полной системой уравнений Навье-Стокса и экспериментальными данными.
- 2) Создано программное обеспечение, дополненное модулями для расчета химической кинетики. Программа обеспечивает:
 - 1) Моделирование многослойных струйных течений
 - 2) Учет сложных механизмов химических реакций
 - 3) Визуализацию полей скорости, температуры и концентраций
- 3) Проведена верификация модели на ряде тестовых случаев, включая:
 - 1) Сравнение с экспериментальными данными по структуре турбулентных струй
 - 2) Анализ чувствительности к параметрам турбулентности и химической кинетики
 - 3) Оценку погрешностей в различных областях течения
- 4) Выявлены границы применимости параболизированного подхода:
 - 1) Модель дает хорошие результаты для дальнего поля струи ($x/d > 10$)
 - 2) Требуется осторожного применения в зонах с обратными течениями
 - 3) Эффективна для инженерных расчетов при ограниченных ресурсах
- 5) Разработан пользовательский интерфейс для отображения результатов в удобном виде

Отдельно стоит уделить внимание модулю для работы с СДУ при

помощи множества методов семейства Рунге-Кутты. В работе реализовано 62 схемы со 2 по 6 порядок точности. Из них 18 явных со 2 по 6 порядок точности, 9 вложенных, включая схему Дормана-Принса 4(5) порядка, 22 неявных, в том числе схемы Радо, Гаусса и Лобатто для полных и неполных матриц. Помимо этого, протестирован один L-стабильный диагональный метод. Для неявных схем используются схемы решения САУ первого порядка (простой итерации, Зейделя) и второго порядка (метод Ньютона), причём для обращения матрицы применялся метод LU-разложения. Для дифференцирования функции при построении матрицы Якоби для метода Ньютона использовались формулы с 4 порядком точности. При необходимости можно использовать формулы с меньшим порядком.

Перспективы дальнейших исследований:

- Внедрение более точных моделей турбулентного горения
- Учет радиационного теплообмена
- Оптимизация вычислительных алгоритмов для работы с большими химическими механизмами
- Разработка гибридных методов, сочетающих параболизированный подход с полным CFD-моделированием в критических областях

Практическая значимость работы заключается в создании инструмента для инженерных расчетов реактивных струй, который может быть использован при проектировании двигательных установок, систем сгорания и других устройств, где важны точные прогнозы параметров течения с химическими реакциями.

Таким образом, проведенное исследование демонстрирует возможность эффективного моделирования сложных неравновесных процессов в струйных течениях при разумных вычислительных затратах, что открывает перспективы для дальнейшего совершенствования методов численного анализа в этой области.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Скворцов Л. М. Диагонально- неявные методы Рунге–Кутты для жестких задач // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 2006. — Т. 46, № 12. — С. 2209—2222. — DOI: 10.1134/S0965542506120098.
2. John C. Butcher. Numerical methods for ordinary differential equations: early days // The Birth of Numerical Analysis / под ред. A. Bultheel, R. Cools. — World Scientific, 2009. — С. 35—44. — DOI: 10.1142/9789812836267_0003. — URL: https://doi.org/10.1142/9789812836267%5C_0003.
3. Hairer E., Norsett S., Wanner G. Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems. Т. 8. — 01.1993. — ISBN 978-3-540-56670-0. — DOI: 10.1007/978-3-540-78862-1.
4. Hairer E., Wanner G. Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems. Т. 14. — 01.1996. — DOI: 10.1007/978-3-662-09947-6.
5. Леонов В. В. Самохина С. И. Исследование на жесткость системы обыкновенных дифференциальных уравнений, соответствующей математической модели деформационного упрочнения сплавов со сверхструктурой L12 // Инноватика - 2020 : сборник материалов XVI Международной школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых, 23-25 апреля 2020 г., г. Томск, Россия. Томск. — 2020. — С. 384—387.