

# Multiscale Simulation of Gas-Particle Flows in Combustion Chambers of Solid Rocket Motors

Nikita Brykov, Konstantin Volkov, Vladislav Emelyanov, Alexey Efremov

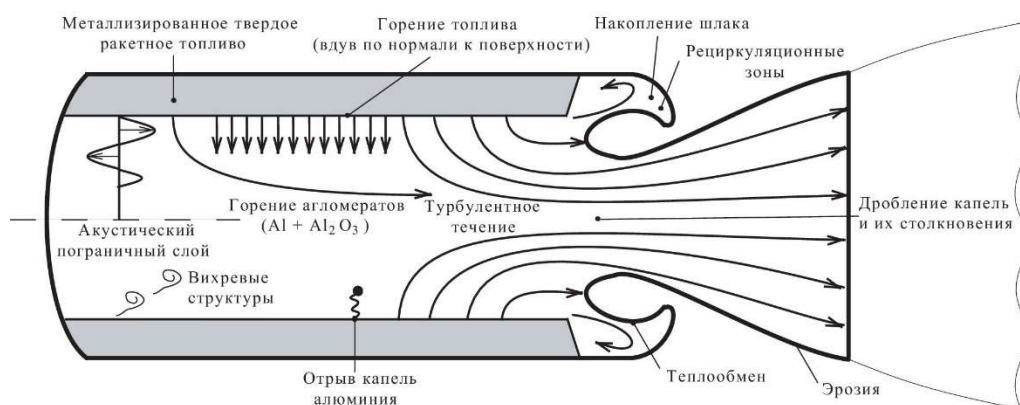
*Baltic State Technical University, St Petersburg, 190005, Russia*

[dsci@mail.ru](mailto:dsci@mail.ru)

## Abstract

The development and application of numerical simulation to the study of intra-chamber processes occurring in solid propellant rocket motors (SRM) is discussed. A characteristic of internal flows in the channels and nozzles of SRM is the presence of condensed phase particles having a non-spherical shape. Mathematical problems in this area is the simultaneous occurrence of processes on many time and spatial scales, which describe the formation of agglomerate particles, their combustion and transport in flow of combustion products in internal channels and nozzles. One of the approaches to solving these problems is a multilevel multiscale approach that combines models describing the state of the system at the micro-, meso- and macro-scales. An overview of models varying in complexity and level of detail is given. The construction of multiscale models is considered in relation to the simulation of two-phase flows with metal-oxide agglomerates formed in the propellant channel and representing drops of molten metal with oxide particles attached to their surface. The capabilities of the developed approach are demonstrated by the calculations of flows of combustion products containing agglomerate particles in the channels and nozzles of propulsion systems.

Keywords: multiscale simulation, combustion chamber, solid rocket motor, computational gas dynamics, channel, nozzle, turbulence, particle, non-spherical shape, drag, heat transfer.



Intra-chamber processes in solid rocket motor

УДК 532.529

# Многомасштабный подход к моделированию течений газа с частицами в камерах сгорания двигательных установок

Н. А. Брыков, К. Н. Волков, В. Н. Емельянов, А. В. Ефремов

*Балтийский государственный технический университет «ВОЕНМЕХ» им. Д.Ф. Устинова,  
Санкт-Петербург, 190005, Россия*

[dsci@mail.ru](mailto:dsci@mail.ru)

## Аннотация

Обсуждается развитие и применение методов численного моделирования для исследования газодинамических процессов, протекающих в ракетных двигателях твердого топлива (РДТТ). Характерной чертой внутренних течений в каналах и соплах РДТТ является наличие частиц конденсированной фазы, имеющих несферическую форму. Особенностью математических задач в данной области является одновременное протекание процессов на многих временных и пространственных масштабах, которые описывают формирование частиц-агломератов, их горение и перенос потоком продуктов сгорания во внутренних каналах и соплах. Одним из подходов к решению таких задач является многоуровневый многомасштабный подход, сочетающий модели, описывающие состояние системы на микро-, мезо- и макро-масштабах. Дается обзор различных по сложности и уровню детализации моделей. Рассматривается построение многомасштабных моделей применительно к моделированию двухфазных течений с металл-оксидными агломератами, формирующимися в канале заряда и представляющими собой капли расплавленного металла с присоединенными к их поверхности частицами окиси металла. Возможности разработанного подхода демонстрируются на примере расчетов течений продуктов сгорания, содержащих частиц-агломераты, в каналах и соплах двигательных установок.

Ключевые слова: многомасштабное моделирование, камера сгорания, двигатель, вычислительная газовая динамика, канал, сопло, турбулентность, частица, несферическая форма, сопротивление, теплообмен.

## 1. Введение

Развитие современных компьютерных технологий, направленных на увеличение мощности компьютерной техники, в сочетании с новыми методами и подходами к численному моделированию обуславливают новый уровень проведения научных исследований сложных физических объектов [1]. Многомасштабное моделирование предполагает не только моделирование объекта на различных уровнях его детализации, но и возможность применения результатов моделирования, полученных на одном уровне, в качестве исходных данных для исследования объекта на следующем уровне масштабирования. При этом возникает проблема взаимосогласованности моделей различного уровня, что требует разработки теоретических основ их объединения [2].

Многие из известных методов моделирования двухфазных течений, в том числе и те, которые реализованы в коммерческих пакетах, используют модели, основанные на переносе пробных частиц, или континуальные модели, удобные для моделирования отдельных явлений, но малоприспособленные для описания сложных переходных процессов и образующихся раз-

номасштабных структур. Существенное отличие многомасштабного моделирования двухфазных течений от других задач заключается в том, что в данном случае модель на микроуровне является континуальной, а не моделью, основанной на методе частиц.

Традиционный подход к моделированию течений газозвеси заключается в том, чтобы использовать на макроуровне законы для коэффициента сопротивления, полученные на микроуровне. Такие зависимости обычно имеют вид зависимости коэффициента сопротивления от числа Рейнольдса, вычисленного по относительной скорости движения газа и частицы. Однако полуэмпирические соотношения для коэффициента сопротивления не учитывают, как правило, несферическую форму частицы, нестационарные эффекты, отношение плотностей газовой и дисперсной фазы и другие эффекты [3].

В вычислительной газовой динамике к многомасштабным подходам относятся вихре-разрешающие методы моделирования турбулентности, в частности, комбинированные LES/RANS подходы [4]. Традиционный подход к многомасштабному моделированию в вычислительной газовой динамике заключается в использовании на макроуровне континуальных моделей, описываемых уравнениями Навье – Стокса, и метода молекулярной динамики, метода статистических испытаний или метода решеточных уравнений Больцмана (Lattice Boltzmann Method, LBM) на микроуровне [1]. Мезомасштабные модели воспроизводят поведение системы на некоторых промежуточных пространственных и временных масштабах [5, 6]. Применительно к двухфазным течениям модели такого типа учитывают взаимодействие группы частиц или движение кластера частиц. Вопросы, связанные с согласованием моделей на различном уровне, обсуждаются в работах [7, 8], включая моделирование двухфазных течений с низким и высоким содержанием дисперсной фазы [9, 10].

В работе [11] для многомасштабного моделирования истечения газовой струи в вакуум используется подход, сочетающий решение уравнений квазигазодинамики и молекулярной динамики в рамках метода расщепления по физическим процессам. Для описания задачи на макроскопическом уровне применяются квазигазодинамические уравнения. На микроуровне эволюция системы микрочастиц (молекул) описывается уравнениями Ньютона. В работе [12] для описания течения жидкости с пузырьками газа применяется метод прямого численного моделирования, в то время как учет присутствия пузырьков и пленки на стенках канала производится при помощи точных решений. Взаимодействие между процессами турбулентного переноса, процессами горения и испарением капель топлива рассматривается в работе [13] на основе многомасштабного подхода, учитывающего влияние потока, испарения и взаимодействия капель друг на друга. Многомасштабное описание газок капельных течений при помощи метода прямого численного моделирования и методов разрешения поверхности раздела фаз проводится в работе [14].

Многомасштабный подход для моделирования течений двухфазных сред в сложных технических системах предлагается в работе [15]. В основе многомасштабного подхода лежит как разделение расчетной области на подобласти с собственной системой уравнений, так и расщепление исходной системы уравнений на несколько подсистем для каждого из рассматриваемого масштабов. Для расчетов двухфазных течений в работе [16] привлекается метод прямого численного моделирования для описания взаимодействия несущего потока с частицами и метод дискретных элементов – для учета взаимодействия между частицами и замыкания двухжидкостной модели.

В работе [17] развивается многомасштабный подход, предназначенный для прямого численного моделирования турбулентных течений с каплями. Особое внимание уделяется влиянию капель на производство и ослабление турбулентных пульсаций несущего потока каплями жидкости. Производство и ослабление турбулентной кинетической энергии несущей фазы происходят одновременно, поскольку на различных пространственных и временных масштабах действуют разные механизмы. Подавление турбулентности в потоке с частицами объясняется дополнительной диссипацией, возникающей из-за сопротивления частиц,

и большей эффективной вязкостью. С другой стороны, производство турбулентности является следствием колебаний скорости, возникающих из-за динамики следа и вихреобразования за отдельными частицами, а также неустойчивости потока, вызванной изменением плотности [18]. Вычисления выполняются на двух масштабных уровнях. Расчеты на мелкомасштабном уровне производятся на репрезентативных элементах объема (RVE). Результатом такого моделирования является набор данных, представленных в безразмерном виде, которые позволяют найти поправку к тензору напряжений в газовой фазе, связанную с влиянием частиц на газ [19]. Для обеспечения быстроты доступа к данным, соответствующим набору RVE, при решении задачи на макромасштабном уровне данные хранятся в виде древовидной структуры.

В данной работе описывается многомасштабный подход для решения задач, связанных с исследованием внутрикамерных процессов и моделированием двухфазных течений в каналах и соплах РДТТ. В многомасштабном подходе применяется три уровня детализации (макро-, мезо- и микро-уровни). На основе разработанного подхода проводится моделирование двухфазных течений с металл-оксидными агломератами, которые формируются в канале заряда и представляют собой капли расплавленного металла с присоединенными к их поверхности частицами окиси металла.

## 2. Временные и пространственные масштабы

Физическим объектам свойственна иерархическая организация структуры (иерархия, начинающаяся от всего объекта в целом, до его элементов и подэлементов, вплоть до микроскопического уровня). Выделяется определенная шкала пространственных масштабов объекта и ряд временных диапазонов протекания соответствующих процессов. При этом каждый уровень пространственных и временных масштабов отличается своими особенностями, а также различными свойствами и параметрами (рис. 1).

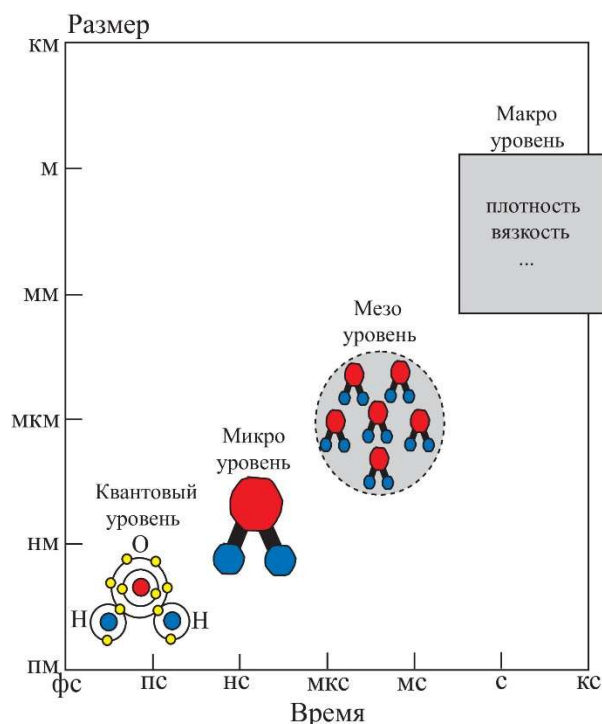


Рис. 1. Временные и пространственные масштабы (для простоты на микро-уровне изображается молекула воды)

Газ обычно рассматривается как сплошная среда или совокупность огромного числа молекул, что влечет за собой различные подходы к математическому описанию, основанному

на решении уравнений Навье – Стокса или уравнения Больцмана. Находят применение также гибридные методы, сочетающие в себе расчеты на основе микроскопических модельных уравнений с макроскопическими расчетами. Параметром, определяющим выбор математической модели, является число Кнудсена  $Kn = l/L$ , представляющее собой отношение средней длины свободного пробега молекул в газе  $l$  к характерному размеру течения  $L$ .

При  $Kn \gg 1$  газодинамические характеристики рассчитываются, не рассматривая столкновения молекул между собой, а учитывая лишь удары молекул о твердую поверхность (свободно-молекулярное течение). Практически такие методы становятся применимыми и используются при  $Kn \sim 1$ . При  $Kn \ll 1$  справедливо основное предположение механики жидкости и газа о сплошности (континуальности) среды, а при расчете течения используются уравнения Эйлера или уравнениями Навье – Стокса с соответствующими граничными условиями. Эти методы справедливы и используются при  $Kn \sim 10^{-3}$ . В интервале значений числа Кнудсена  $10^{-3} < Kn < 1$  реализуются различные промежуточные между свободномолекулярным и континуальным режимы течения (переходный режим) разреженного газа с новыми граничными условиями.

Необходимость моделирования процессов на микро- и нано-уровне приводит к отказу от гипотезы сплошной среды и понятия жидкой частицы. Уравнения Навье – Стокса, являющиеся наиболее общей моделью динамики вязкого сжимаемого газа, выводятся из уравнения Больцмана и имеют нижний предел применимости по времени от  $10^{-5}$  до  $10^{-4}$  с и более. На меньших временах применяется решение уравнения Больцмана, которое описывает движение газа на временах с нижним пределом до  $10^{-9}$  с. В кинетической теории газов не учитываются линейные масштабы, меньшие длины свободного пробега молекул, которая составляет примерно  $10^{-7}$  м при нормальных условиях.

Детальное описание молекулярных процессов достигается при помощи метода молекулярной динамики (Molecular Dynamics, MD). Поведение молекул газа описывается системой детерминированных уравнений Ньютона или Гамильтона с заданным потенциалом взаимодействия. Метод молекулярной динамики применим для времен порядка  $10^{-15}$  с и шагом примерно  $10^{-13}$  с, позволяющим учесть в дифференциальных уравнениях резкое изменение потенциала взаимодействия на расстояниях порядка  $10^{-15}$  м. При этом время прохождения молекулой своего диаметра при нормальной температуре составляет порядка  $10^{-13}$  с. Метод молекулярной динамики применяется до времен  $10^{-8} \div 10^{-7}$  с. Далее его использование становится невыгодным, что стимулирует переход к броуновской или ланжевеновской динамике.

В случае классической молекулярной динамики существующее программное обеспечение и суперкомпьютеры позволяют исследовать системы с пространственными размерами до нескольких микрометров [20] или на временах до десятков микросекунд [21]. В случае квантовой молекулярной динамики при использовании суперкомпьютеров с повышенной связностью узлов доступны системы до тысяч атомов и времена до десятков пикосекунд [22].

Математические модели сложных систем, состоящих из большого числа взаимодействующих объектов, написанные на языке уравнений их движения, представляют собой основу для применения методов частиц. Методы частиц приводят к системам стохастических дифференциальных уравнений. Методы прямого статистического моделирования Монте Карло (Direct Simulation Monte Carlo, DSMC) позволяют решить ряд сложных задач динамики разреженного газа (особенно для сверхзвуковых течений). Несмотря на несомненные достоинства, эти методы имеют и недостатки. С их помощью сложно решать нестационарные задачи, а расчет дозвуковых течений требует высоких затрат вычислительных ресурсов из-за статистического шума.

Наиболее точное описание межатомного взаимодействия дают квантово-механические расчеты (*ab initio*). В них используются только базовые постулаты квантовой механики и не вводится какой-либо дополнительной информации. Однако подход, в котором в моделировании используются макро-, микро- и нано-модели, вплоть до квантовомеханических, вряд ли реализуем в полном объеме в ближайшее время.

Выбор математической модели на различных уровнях моделирования определяет совокупность безразмерных параметров задачи (рис. 2). Характерными параметрами задачи, определяющими уровень физической и математической сложности задачи, являются числа Кнудсена и Рейнольдса.

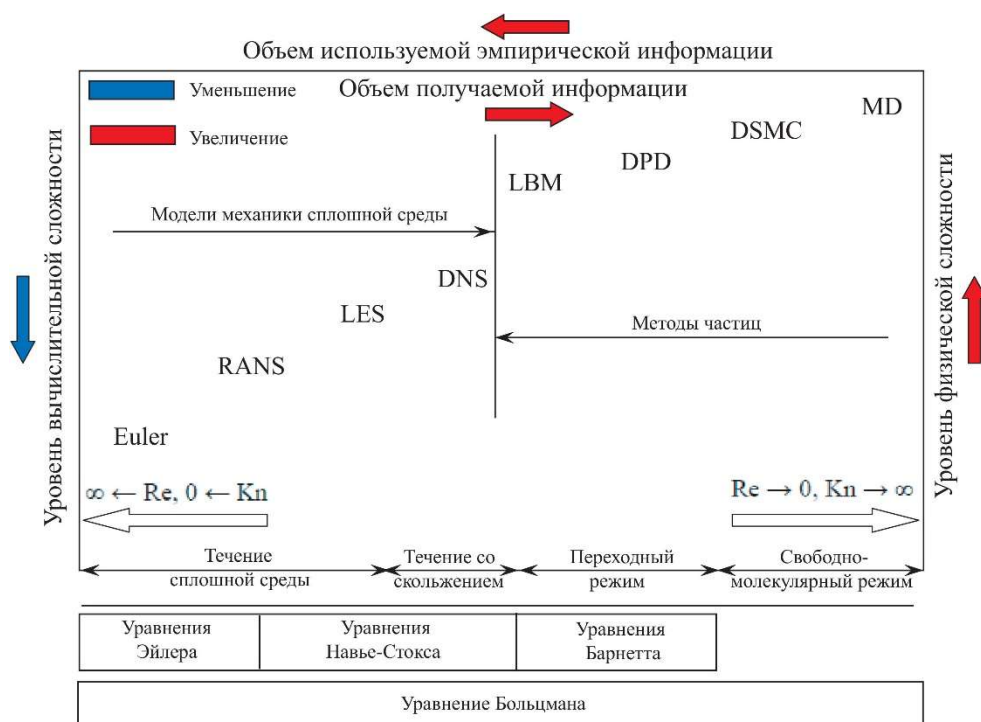


Рис. 2. Выбор математической модели в многомасштабном подходе

Турбулентность характеризуется широким спектром пространственных масштабов, начиная от размеров энергосодержащих вихрей (интегральный масштаб турбулентности,  $l_t$ ) и заканчивая размерами мелких вихрей, ответственных за диссипацию турбулентной энергии (колмогоровский микромасштаб,  $l_k$ ) [23]. Соотношение между размерами крупных и мелких вихрей зависит от турбулентного числа Рейнольдса  $l_t/l_k \sim Re_t^{3/4}$ . При этом соответствующие временные масштабы соотносятся как  $Re_t^{1/2}$ . Детальный механизм протекающих химических реакций включает сотни и тысячи элементарных химических реакций, каждая из которых характеризуется своим пространственным и временным масштабом. Турбулентное число Дамкелера определяется как отношение турбулентного масштаба времени к характерному времени химических процессов. При этом достаточно сложно выделить пространственные масштабы, характеризующие структуру турбулентного пламени. Движение дисперсной фазы определяется числами Стокса, представляющими собой отношение времен динамической и тепловой релаксации частицы к характерному времени течения.

### 3. Категории многомасштабных моделей

Многомасштабные методы разделяются на две категории: последовательные, имеющие иерархическую структуру, и параллельные. Последовательные многомасштабные подходы предполагают проведение микромасштабных расчетов в качестве этапа предварительной обработки данных для макромасштабной модели. В таких подходах на микромасштабном уровне выделяются параметры, необходимые для завершения описания в рамках модели макромасштаба, после чего предполагается, что микромасштабная модель больше не требуется. В параллельном подходе микромасштабная модель используется для вывода основных уравнений для макромасштаба. Применение как последовательных, так и параллельных методов

многомасштабного моделирования предоставляет широкие возможности для изучения различных процессов в технических и природных системах [24, 25].

Реализация многомасштабного метода предполагает выделение ряда пространственных/временных уровней, характерных для конкретной задачи. На каждом из таких уровней выбирается система координат. Связь между микро-, мезо- и макро-уровнями достигается с использованием представительного элемента объема (Representative Volume Element, RVE). Выбор RVE и определение его свойств представляет собой нетривиальную задачу. Особенности RVE определяются на микроструктурном уровне компонентами микронапряжений и микродеформаций. Мезоскопические напряжения определяются осреднением по объему RVE с использованием методов гомогенизации.

Для случая периодической структуры представительный элемент представляет собой такой минимальный элемент объема, с помощью параллельного переноса которого по координатным осям достигается реконструкция исследуемой структуры (рис. 3). После выбора представительного элемента выполняется решение задач на каждом иерархическом уровне. В общем случае элементы системы описываются математическими моделями, основанными на положениях разных научных дисциплин. В ходе решения задачи организуется обмен данными между масштабами путем либо последовательного решения задач от одного иерархического уровня к другому, либо одновременного решения задач на всех выбранных уровнях.

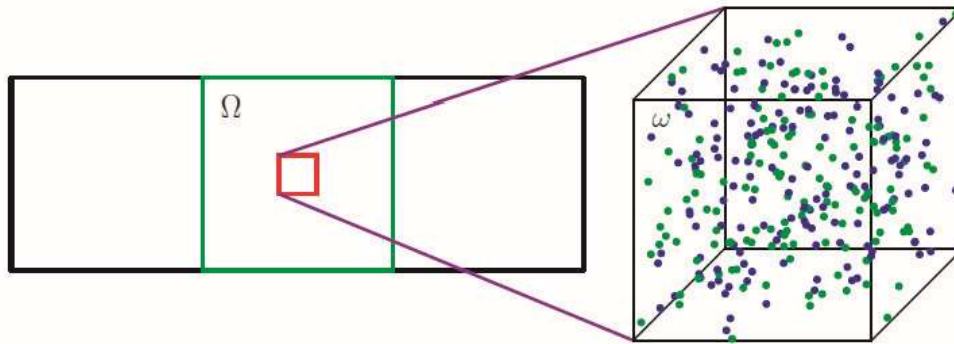


Рис. 3. Создание RVE для перехода от макро- к микромасштабному уровню

#### 4. Согласование моделей различного уровня

Одним из классических методов построения математических моделей в механике двухфазных течений, позволяющим получить макроскопические законы и параметры на основе локальных вычислений, является метод усреднения. Однако такой подход обычно основан на ряде предварительно сформулированных допущений. В отличие от метода усреднения, многомасштабный подход предполагает двухсторонний обмен информацией между моделями на микро- и макромасштабах [25].

В задачах, решаемых на макроуровне, часто присутствуют области, в которых нельзя обойтись без микроскопического описания. В этом случае возникает проблема выделения соответствующих подобластей (декомпозиция области) и согласования алгоритмов, имеющих различную как физическую, так и вычислительную основу. Эффективность таких иерархических алгоритмов во многом зависит от качества переходных математических моделей (мезо-уровень).

Для реализации многомасштабного моделирования течений газа применяется три различных подхода: метод декомпозиции на подобласти (Domain Decomposition Method, DDM), гетерогенный многомасштабный метод (Heterogeneous Multiscale Method, HMM) и многомасштабный метод для внутренних течений (Internal-flow Multiscale Method, IMM).

Наиболее популярным методом является метод DDM [26, 33], в котором неравновесные области, моделируемые при помощи методов частиц (например, метода DSMC), и равновесные области, моделируемые при помощи методов CFD (решаются уравнения Навье – Стокса),

разделяются. Обмен информацией между подобластями реализуется через область перекрытия. Помимо DDM, имеются два других подхода для реализации многомасштабного подхода: гетерогенный многомасштабный метод (НММ) и многомасштабный метод для моделирования внутренних течений (ИММ).

Метод НММ представляет собой метод точечной связи, подходящий для моделирования сложных течений жидкости и газа, в которых существует разница в пространственных масштабах. Метод ИММ разработан для моделирования внутренних течений, в которых расчетная область вытянута в одном из координатных направлений. Связь между подобластями обеспечивается ограничениями, налагаемыми макроскопическими законами сохранения. Метод НММ, предложенный и развитый в работах [28–30], или метод ИММ, развиваемый в работах [31, 32], находят применение для решения частных задач.

Реализацию метод DDM поясняет рис. 4. Расчетная область разделяется на отдельные области, в каждой из которых применяется свой метод решения (например, DSMC и CFD). Вычислительная эффективность достигается за счет ограничения вычислений на основе метода DSMC только областями, в которых это необходимо. Точность расчетов в существенной степени зависит от положения границы, разделяющей области равновесного (уравнения Навье – Стокса) и неравновесного (уравнение Больцмана) течений, выбора сопряжения решений и методологии обмена информацией между подобластями [27, 34]. Обмен информацией между решения обычно происходит в области перекрытия подобластей, в которой применимы как газодинамический, так и кинетический подходы. Переход от молекулярной к континуальной подобласти достигается путем извлечения макроскопических полей из моделирования на молекулярном уровне. Обмен информацией из континуальной в молекулярную область происходит с помощью буферных ячеек, заполненных частицами.

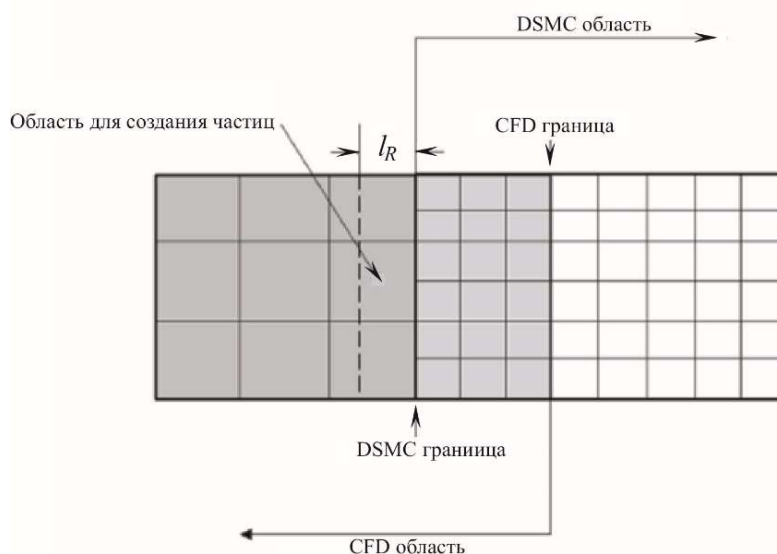


Рис. 4. Реализация метода DDM

В методе НММ сначала выбирается неполная макромасштабная модель, а затем оцениваются необходимые данные для макромасштабной схемы исходя из моделирования на микроуровне. Течение на крупных масштабах находится с большим шагом по времени и интерполируется на более подробную сетку, задавая начальные и граничные условия для расчета течения на мелких масштабах. Мелкомасштабные расчеты проводятся только для нескольких выборочных пространственных точек на коротком периоде времени.

В отличие от метода DDM, в котором область разбивается на ряд подобластей, с потоком и частицами, в методе НММ сетка, связанная с несущим потоком, покрывает всю расчетную область. Моделирование частиц производится в узлах вычислительной сетки и пре-



доставляет информацию, необходимую для решения гидродинамических уравнений (рис. 5). Для решения уравнений на микро-уровне используется информация из ограниченного числа макро-узлов (ячеек сетки). Решение уравнений на микро-уровне используется для уточнения параметров потока, необходимых для решения уравнений на макро-уровне, а не для моделирования некоторой обособленной части поля течения [29].

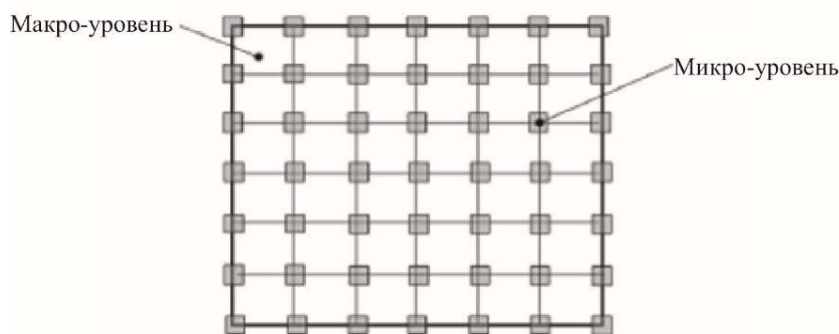


Рис. 5. Микро- и макро-области в методе НММ

Метод НММ обычно применяется в тех случаях, когда определяющие соотношения являются неизвестными или имеются трудности в формулировке точных граничных условий. В частности, моделирование на микро-уровне предоставляет на макро-уровень информацию о напряжениях и коэффициентах переноса, таких как коэффициенты вязкости или диффузии, когда определяющие соотношения в объеме потока остаются неизвестными. С другой стороны, моделирование на микро-уровне находит также применение в пристеночной области для нахождения или уточнения граничных условий на стенке. Разделение пространственных масштабов достигается за счет того, что подобласти на микро-уровне остаются достаточно малыми по сравнению с размерами ячеек сетки, расчетную область.

Метод IMM представляет собой развитие метода НММ применительно к моделированию течений в каналах, когда размер расчетной области в направлении потока превосходит ее размер в поперечном направлении. В обоих подходах используется разделение области течения на макро- и микро-подобласти. В отличие от метода НММ, в котором микро-подобласть является точкой в макро-области, в методе IMM микро-подобласти представляют собой двумерный «срез» потока в поперечном сечении (рис. 6).



Рис. 6. Микро- и макро-области в методе IMM

В методе IMM моделирование на микро-уровне предоставляет информацию о массовом расходе для макро-области, а решение на макро-уровне предоставляет информацию о плотности и эффективном градиенте давления на гранях подобластей для решения на микро-уровне. Обмен информацией между макро- и микро-областями происходит итерационным образом до тех пор, пока не достигается сходимость и не обеспечивается условие сохранения массы во всех подобластях [31].

## 5. Математическая модель

Имеющиеся подходы к моделированию двухфазных течений основаны на эйлеровом или лагранжевом описании частиц. Такие модели реализуют расчеты двухфазных течений с помощью численного решения соответствующих уравнений. При этом все коэффициенты этих уравнений, а также параметры уравнений состояния и граничных условий рассчитываются по приближенным формулам. В наиболее распространенном подходе предполагается, что используемые в расчетах приближенные формулы для коэффициентов и параметров получены либо экспериментальным, либо теоретическим путем и подтверждены многочисленными исследованиями. Преимуществом такого подхода является высокая скорость вычислений и отсутствие необходимости в подтверждении правильности используемых зависимостей. Недостаток состоит в том, что не всегда различные коэффициенты и параметры согласуются между собой. В результате рассогласования численная процедура в целом оказывается либо неустойчивой, либо дает решение с ошибкой.

Для преодоления проблемы рассогласования зависимостей используется другой подход. Он предполагает использование базы данных, которая подготовлена заранее с помощью расчетов, выполненных для необходимого диапазона параметров. При использовании базы данных для получения необходимого значения того или иного коэффициента или параметра применяется интерполяция. Это позволяет повысить точность и гарантировать устойчивость вычислений, а также уменьшить объем оперативной памяти для хранения базы данных в широком диапазоне условий. В целом использование подготовленной базы данных и высокоточных алгоритмов интерполяции существенно уменьшает общее время вычислений и решает проблему рассогласования, поскольку в этом случае все зависимости получаются из расчетов эволюции частиц на микро-уровне.

Модель реализует расчеты двухфазных течений на трех обобщенных уровнях: макроскопическом, мезомасштабном и микроскопическом. На макроскопическом уровне численно решаются уравнения газовой динамики двухфазных течений. На микроскопическом уровне интегрируются уравнения, описывающие эволюцию отдельных частиц. К мезомасштабному уровню относятся модели, которые основаны на применении статистических методов, что позволяет существенно расширить границы моделирования. Общий алгоритм решения состоит в чередовании макро- и микроскопических расчетов на каждом шаге интегрирования и реализуется в рамках метода расщепления по физическим процессам. Такой подход самостоятельно обеспечивает всеми необходимыми данными полный цикл вычислений и позволяет согласовывать процессы на микро- и макроуровнях, а также производить расчеты для определенного конкретного набора условий и одновременно накапливать базу данных на случай повторных вычислительных экспериментов.

Моделирование двухфазных течений с частицами несферической формы требует применения разномасштабных моделей, каждая из которых действует в своем диапазоне временных и пространственных масштабов. С другой стороны, для согласованного учета движения капель в потоке продуктов сгорания требуется расщепить описание газодисперсного потока на две системы, действительные для своих масштабов: континуальную и дискретную, описываемую в переменных Лагранжа. На макроуровне применяются нестационарные трехмерные уравнения Навье–Стокса для турбулентных сверх-, транс- и дозвуковых течений сжимаемой газочапельной смеси, включая уравнения сохранения массы, импульса и энергии, переноса турбулентных величин, компонент смеси, капель, а также описание механизмов взаимодействия газа и частиц (горение, обмен импульсом и энергией). Движение частиц на микроуровне описывается с помощью системы обыкновенных дифференциальных уравнений, составленных для каждой из частиц, которая включает в себя уравнения движения центра масс частицы, изменения массы, импульса и энергии.

Реализацию параллельного подхода к моделированию течений с частицами или каплями поясняет рис. 7. На каждом шаге по времени производится обмен данными между областями, характеризующими задачу на микро- и макро-уровне. Расчеты на макро-уровне

дают распределения характеристик потока в области, выделенной для решения задачи на микро-уровне. После решения задачи на микро-масштабе найденные значения силы сопротивления и теплового потока используются для расчета траекторий частиц в выделенной области течения. В рамках последовательного подхода вместо решения задачи на микро-уровне для нахождения коэффициентов сопротивления и теплоотдачи применяется кусочно-гладкая интерполяция накопленной заранее информации.



Рис. 7. Реализация многомасштабного подхода к моделированию двухфазных течений

Для нахождения силы сопротивления, действующей на одиночную частицу, проводится прямое численное моделирование поля течения около одиночной частицы и малого количества частиц (рис. 8). Для передачи информации от мелких масштабов к более крупным используется осреднение по достаточно репрезентативному числу частиц. На макроуровне влияние наличие частиц учитывается через источникные члены в основных уравнениях, описывающих эволюцию потока.

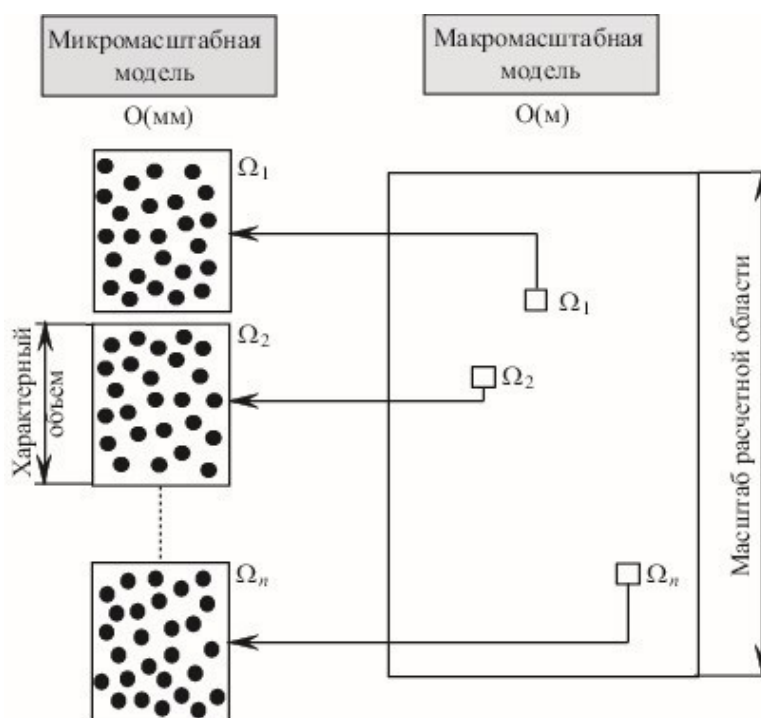


Рис. 8. Группа частиц

## 6. Основные уравнения

Разбиение задачи, связанной с моделирование двухфазных течений, на различные масштабные уровни поясняет рис. 9. На микромасштабном уровне рассматривается течение около индивидуальных частиц. В мезомасштабной модели совокупность частиц рассматривается как континуум, что позволяет определить при помощи метода локального осреднения источниковые члены, ответственные за межфазное взаимодействие. На микро-уровне движение частиц моделируется при помощи лагранжевого подхода.



Рис. 9. Разбиение задачи на различные масштабные уровни

Двухфазные течения описываются системой уравнений, включающей в себя уравнения для газа и уравнения для частиц, которые связаны при помощи источниковых членов, учитывающих межфазное взаимодействие.

В декартовой системе координат  $(x, y, z)$  нестационарное течение вязкого сжимаемого газа описывается следующим уравнением, записанным в консервативных переменных

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z} = H_p \quad (1)$$

Уравнение (1) дополняется соотношением, устанавливающим связь между давлением и удельной полной энергией

$$p = (\gamma - 1) \rho \left[ e - \frac{1}{2} (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) \right]$$

Вектор консервативных переменных  $Q$  и вектора потоков  $F_x, F_y, F_z$  имеют следующий вид:

$$Q = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho v_x \\ \rho v_y \\ \rho v_z \\ \rho e \end{pmatrix}, \quad F_x = \begin{pmatrix} \rho v_x \\ \rho v_x v_x + p - \tau_{xx} \\ \rho v_x v_y - \tau_{xy} \\ \rho v_x v_z - \tau_{xz} \\ (\rho e + p) v_x - v_x \tau_{xx} - v_y \tau_{xy} - v_z \tau_{xz} + q_x \end{pmatrix},$$

$$F_y = \begin{pmatrix} \rho v_y \\ \rho v_y v_x - \tau_{yx} \\ \rho v_y v_y + p - \tau_{yy} \\ \rho v_y v_z - \tau_{yz} \\ (\rho e + p) v_y - v_x \tau_{yx} - v_y \tau_{yy} - v_z \tau_{yz} + q_y \end{pmatrix}, \quad F_z = \begin{pmatrix} \rho v_z \\ \rho v_z v_x - \tau_{zx} \\ \rho v_z v_y - \tau_{zy} \\ \rho v_z v_z + p - \tau_{zz} \\ (\rho e + p) v_z - v_x \tau_{zx} - v_y \tau_{zy} - v_z \tau_{zz} + q_z \end{pmatrix}$$

Здесь  $t$  – время;  $\rho$  – плотность;  $u_x, u_y, u_z$  – составляющие скорости в координатных направлениях  $x, y, z$  соответственно;  $p$  – давление;  $e$  – полная энергия единицы массы;  $T$  – температура;  $\gamma$  – отношение удельных теплоемкостей. Представление источникового члена  $H_p$ , учитывающего влияние дисперсной фазы, зависит от принятой модели двухфазного течения [3].

Компоненты тензора вязких напряжений и составляющие вектора теплового потока находятся из соотношений

$$\tau_{ij} = \mu_e \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right), \quad q_i = -\lambda_e \frac{\partial T}{\partial x_i}$$

Уравнения, записанные в виде (1), пригодны для описания как ламинарных, так и турбулентных течений. При моделировании турбулентных течений молекулярные коэффициенты переноса заменяются их эффективными значениями. Для расчета вихревой вязкости имеются полуэмпирические модели различной степени сложности [23]. Для получения значений молекулярной вязкости в зависимости от температуры используется закон Сазерленда

$$\frac{\mu}{\mu_*} = \left( \frac{T}{T_*} \right)^{3/2} \frac{T_* + S_0}{T + S_0},$$

где  $\mu_* = 1.68 \times 10^{-5}$  кг/(м·с),  $T_* = 273$  К и  $S_0 = 110.5$  К для воздуха. Коэффициент молекулярной теплопроводности выражается через вязкость и число Прандтля ( $\lambda = c_p \mu / \text{Pr}$ ). Молекулярному числу Прандтля присваивается постоянное значение (для воздуха  $\text{Pr} = 0.72$ ).

Уравнение, описывающее движение частицы сферической формы, имеет вид

$$m_p \frac{d\mathbf{v}_p}{dt} = \frac{1}{2} C_D \rho S_m (\mathbf{v} - \mathbf{v}_p) + \mathbf{f}_p \quad (2)$$

К уравнению (2) добавляется кинематическое соотношение, позволяющее вычислить радиус-вектор центра масс частицы

$$\frac{d\mathbf{r}_p}{dt} = \mathbf{v}_p \quad (3)$$

Здесь  $m_p$  – масса частицы;  $\rho$  – плотность газа;  $S_m$  – площадь миделевого сечения частицы;  $C_D$  – коэффициент сопротивления. Слагаемое  $\mathbf{f}_p$  в уравнении (2) включает силы различной природы, но отличные от силы сопротивления, учет или не учет которых зависит от конкретной задачи. Температура частицы влияет на ее движение через поправку к коэффициенту сопротивления. Во многих режимах течения такая поправка мала и не учитывается [3].

Уравнения (2) и (3) интегрируются вдоль траектории частицы и требуют задания начальных условий – координат и скорости частицы в момент времени  $t = 0$ .

Скорость газа в уравнении (2) вычисляется в точках, лежащих на траектории частицы  $\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{r}_p)$ . Скорость газа находится из решения уравнений газовой динамики в контрольных объемах эйлеровой сетки, узлы которой не совпадают с положением частицы. Это приводит к необходимости восполнения (интерполяции) газодинамических параметров несущего потока, что требует локализации частицы и нахождения ячейки сетки, в которой находится частица в данный момент времени [3].

Взаимодействие частицы с турбулентными молями приводит к хаотизации движения примеси, а положение частицы в данный момент времени определяет лишь вероятность ее пребывания в совокупности возможных состояний в каждый последующий момент времени. Получение статистически достоверной осредненной картины движения примеси требует расчета достаточно большого числа пробных частиц [3].

## 7. Внутрикамерные процессы и их моделирование

В многоуровневой модели РДТТ представляется конечным набором элементов и систем, взаимосвязанных между собой (модель макро-уровня). Модели отдельных элементов двигателя, в силу своей сложности, сами представляют отдельные модели (мезо-уровень). Макроскопические модели основаны на уравнениях газовой динамики с необходимыми замыкающими соотношениями. Микроскопические модели описывают взаимодействие между отдельной частицей и несущим потоком. Мезоскопические модели представляют собой промежуточное звено между моделями микро- и макро-уровня. Работа РДТТ характеризуется взаимосвязью и взаимовлиянием физических, химических, термодинамических процессов и процессов теплопереноса, развивающихся на фоне общей газодинамической обстановки в рабочем пространстве внутрикамерного объема (рис. 10).

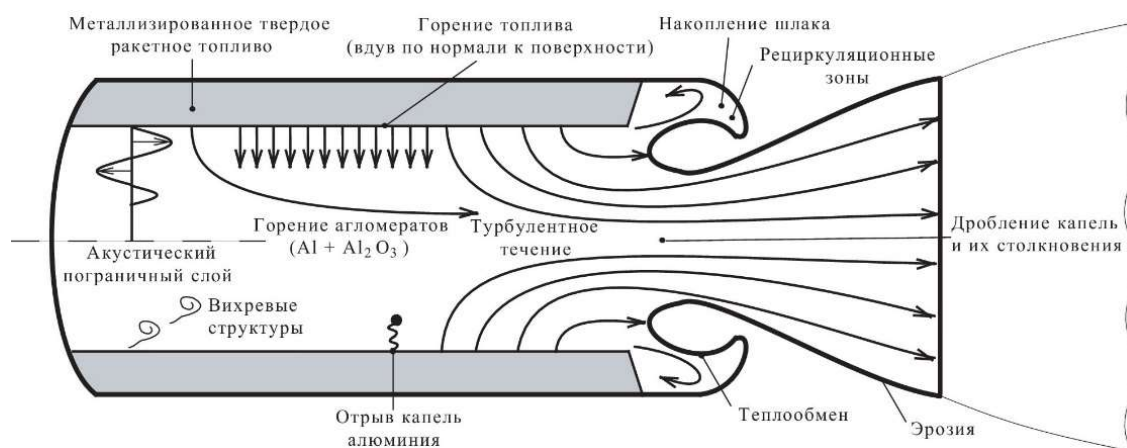


Рис. 10. Внутрикамерные процессы в РДТТ

Металлические добавки в виде высокодисперсного порошка алюминия призваны обеспечить достижение требуемого уровня энергетических характеристик и демпфирование неуправляемых акустических колебаний параметров рабочего тела в камерах сгорания [39, 40]. Следствием введения металла в рецептуру топлива является наличие конденсированной фазы в продуктах сгорания. Одной из особенностей горения смесового твердого топлива с добавками алюминия является слияние (агломерация) расплавленных частиц металла и его оксида в поверхностном слое горящего топлива в капли, размер которых на порядок превышает размеры исходных частиц металла [41]. Взаимодействие компонентов зависит не только от их свойств, но и от взаимного расположения дисперсных компонентов внутри топлива и на поверхности горения.

При горении смесового твердого топлива входящие в их состав частицы металлов претерпевают ряд сложных физико-химических превращений, начиная от плавления и агломерации капель на горячей поверхности заряда и заканчивая испарением, горением, дроблением и химическим взаимодействием металла и оксида с образованием газообразных продуктов реакции и их выносом в газовую фазу (рис. 11). Между температурой поверхности топлива (1200 К) и его начальной температурой (300 К) находятся две характерные температуры – температура плавления алюминия (930 К) и температура разложения связующего.

При моделировании рабочих процессов в РДТТ горение топлива обычно схематизируется, причем уровень схематизации изменяется в зависимости от постановки задачи. В задачах выхода двигателя на режим, где существенными являются процессы подключения поверхности и распространения пламени по заряду, используются детализированные модели горения, требующие сопряжения газодинамической части задачи с задачей прогрева, воспламенения и горения топлива. В упрощенном подходе используется предположение о том, что процессы горения происходят в узкой области, прилегающей к поверхности заряда. С математической точки зрения, такое предположение приводит к постановке условия нормального

вдува рабочего тела, параметры которого определяются из термодинамического расчета и условия равновесия.

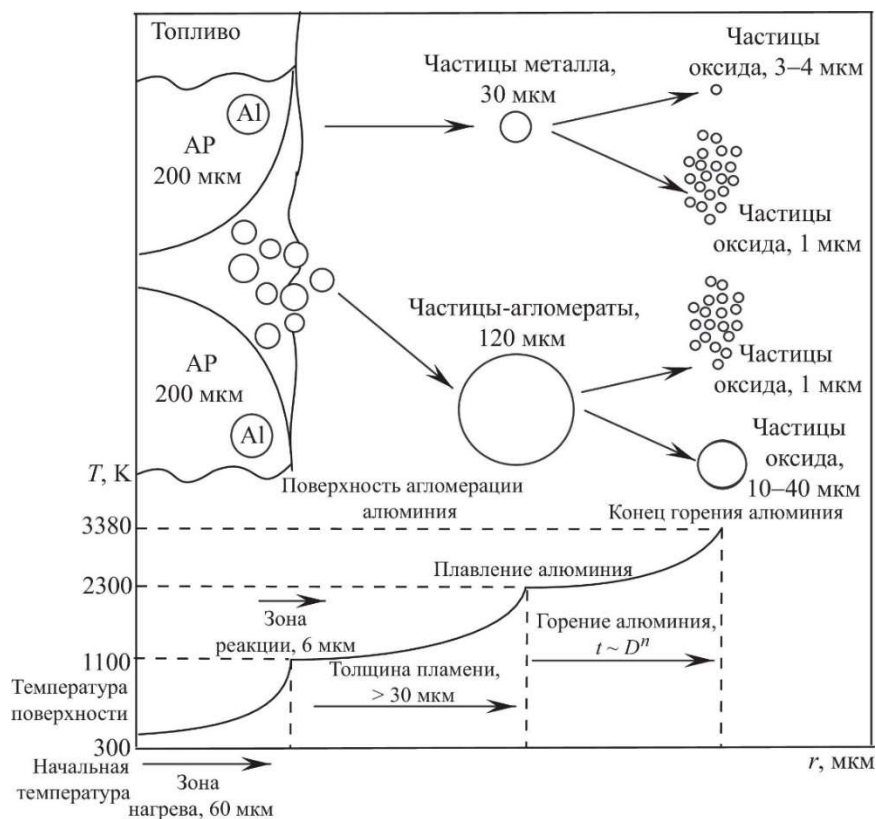


Рис. 11. Физико-химические превращения частиц алюминия

На поверхности топлива образуется каркасный слой, состоящий из продуктов разложения связки и расплавленного алюминия, толщиной от 100 до 500 мкм (с понижением давления толщина каркасного слоя увеличивается до 700 мкм). В том случае, когда частицы окислителя существенно крупнее частиц металла, пространство между частицами окислителя заполнено горячим связующим, содержащим частицы металла. При горении такого состава ячейки горючего с вкраплениями металла и остатками связки отрываются от поверхности топлива, затем происходит выгорание связки и образование агломерата, размер которого определяется средним расстоянием между частицами окислителя (плотностью упаковки).

В зависимости от особенностей внутреннего строения агломераты разделяются на два типа. К первому типу относятся «матричные» агломераты, состоящие из частиц оксида алюминия ( $Al_2O_3$ ) сферической формы, в которые внедрены отдельные частицы алюминия. Агломераты второго типа представляют собой капли алюминия, на поверхности которых в том или ином количестве в виде частицы находится окись алюминия, называемая «нашлепкой» окиси (рис. 12). Содержание окиси в составной частице достигает 50 % и более. Свойства таких образований близки к равновесным, при которых поверхностная энергия стремится к минимальному значению. Размер оксидных отложений на поверхности частицы металла зависит от состава газовой среды, в которой происходит горение.

Разрабатываются специальные математические модели и алгоритмы для моделирования движения и горения составных агломератов в потоке продуктов сгорания твердого топлива [41]. В общем случае такие модели характеризуются достаточно большой сложностью и в существенной степени зависят от принятой схематизации процесса горения. Температура воспламенения частиц алюминия обычно полагается равной температуре плавления оксида алюминия (2300 К), при которой происходит разрушение оксидной пленки, покрывающей частицу металла.

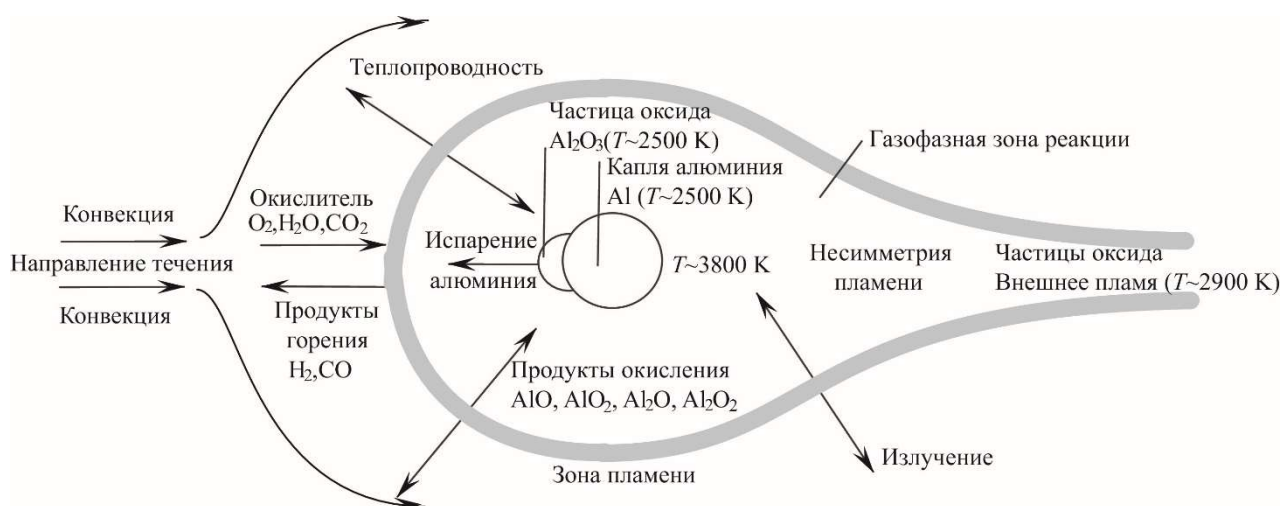


Рис. 12. Физико-химические превращения частицы алюминия

## 8. Результаты расчетов

Изменение размера капли алюминия и присоединенной к ней частицы окиси показывает рис. 13. В конечный момент времени размер частицы конденсированной окиси составляет примерно 70 % от начального размера капли алюминия.

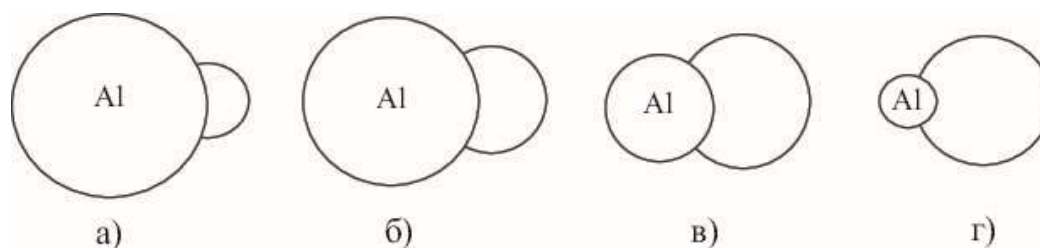


Рис. 13. Размер капли алюминия и присоединенной частицы окиси в моменты времени 2 мс (а), 25 мс (б), 70 мс (в), 120 мс (г)

Закон горения частицы обычно имеет вид  $D^2 = D_0^2 - kt$ , где  $D$  – текущий диаметр частицы,  $D_0$  – начальный диаметр частицы,  $t$  – время,  $k$  – скорость горения. Время горения капли алюминия показывает рис. 14 в сравнении с теоретическими зависимостями, соответствующими показателям степени 2 (линия 1) и 1.8 (линия 2). Наблюдается существенное отклонение времени горения агломерата алюминия от теоретических зависимостей.

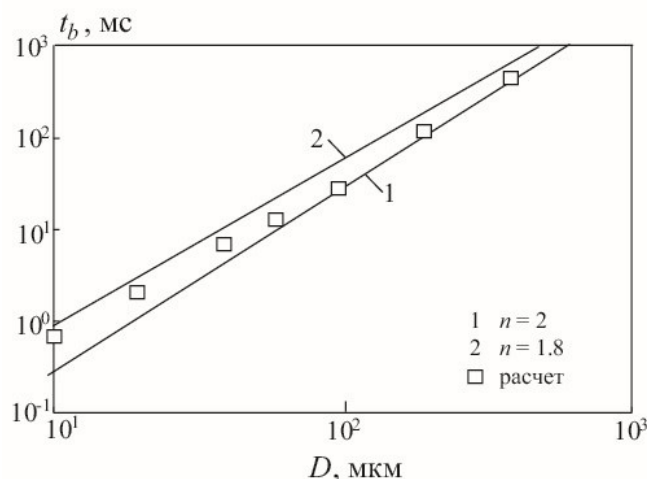


Рис. 14. Время горения частицы



Пространственная и временная структура вихревого течения в канале с проницаемыми стенками отличается от той, которая наблюдается в канале с твердыми стенками. Вблизи поверхности вдува образуются крупномасштабные вихревые структуры, которые описываются компонентой завихренности в направлении оси  $z$ . Вихри вытянуты в поперечном направлении и наклонены к стенке канала под острым углом (наклон имеет место в направлении, противоположном направлению среднего течения – в сторону левого торца канала). В средней части канала течение имеет структуру, близкую к двумерной. При высоких числах Рейнольдса, рассчитанных по осевой скорости, возникает гидродинамическая неустойчивость потока. Двумерные вихревые структуры сносятся вниз по потоку и разрушаются на более мелкие вихри, имеющие трехмерный характер. Разрушение вихрей (примерно при  $x/h \sim 34$ ) приводит к увеличению производства турбулентности и скорости ее диссипации. Переход к турбулентному режиму течения возникает на существенно большем удалении от стенки, чем в канале с твердыми стенками. Максимум интенсивности турбулентности имеет тенденцию к перемещению по направлению к стенке канала при удалении от его левого закрытого торца несмотря на то, что вдув со стенок этому препятствует.

Переход к турбулентному режиму течения имеет место при  $x/h = 20 \div 34$ , на что указывает наполнение профиля продольной скорости в поперечном сечении (рис. 15). Неустойчивость течения возникает в точке А. Заштрихованная область соответствует области максимума производства турбулентности.

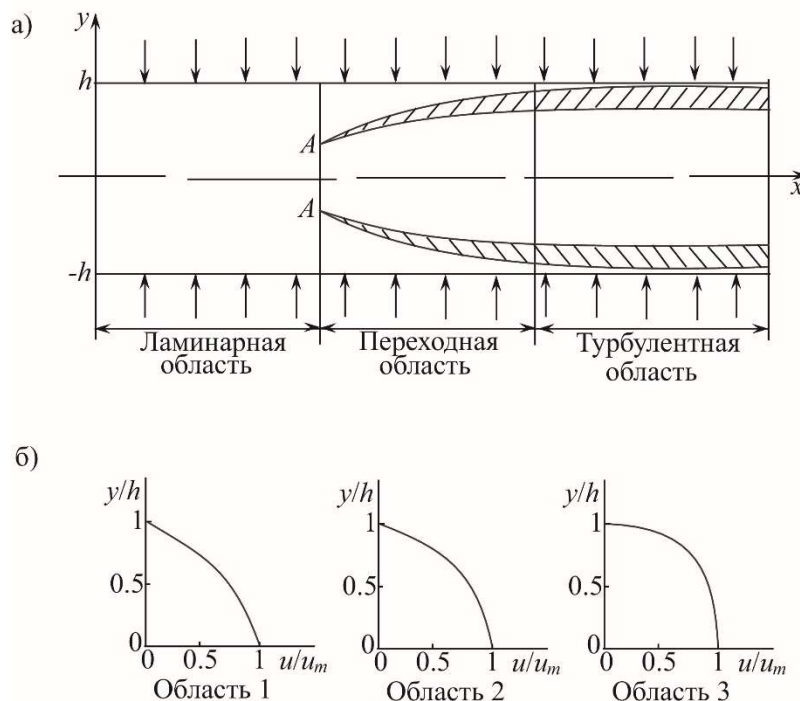


Рис. 15. Режимы течения в канале с проницаемыми стенками (а) и профили продольной скорости (б)

В плоском канале ламинарный режим имеет место при  $0 < x/h < 20$ , переходный режим – при  $20 < x/h < 30$ , турбулентный режим – при  $30 < x/h < L/h$ . Увеличение уровня псевдотурбулентности на массоподводящей поверхности канала приводит к более раннему переходу ламинарного режима течения в турбулентный.

Механизм перехода в существенной степени отличается от того, который имеет место в канале с твердыми стенками. Переход к турбулентному режиму течения в канале с твердыми стенками связывается с неустойчивостью Тейлора–Гертлера, а двумерные вихревые структуры в потоке отсутствуют. Вдув жидкости увеличивает толщину пристеночного слоя

и уменьшает сдвиговые напряжения, препятствуя проникновению жидкости из центральной части канала к стенке. Влияние вдува сказывается на увеличении угла наклона вихревых образований к проницаемой стенке. Положение максимума интенсивности турбулентности сдвигается по направлению к стенке от сечения  $y/h \sim 0.6$  при  $x/h = 20$  до сечения  $y/h \sim 0.83$  при  $x/h = 46$ . Однако увеличение скорости вдува вниз по потоку вследствие сжимаемости препятствует проникновению пульсаций скорости к массоподводящей поверхности, в результате чего положение максимума интенсивности турбулентности по поперечной координате при  $x/h > 34$  остается практически неизменным.

Траектории частиц различных размеров в канале со вдувом показывает рис. 16 (скорость вдува со стенок канала полагается равной 5 м/с). Линии 1 соответствуют линиям тока несущего потока, а линии 2 и 3 – частицам-агломератам и сферическим частицам равного объема. Приведенные результаты показывают, что пренебрежение сопротивлением составных частиц приводит к различию траекторий движения.

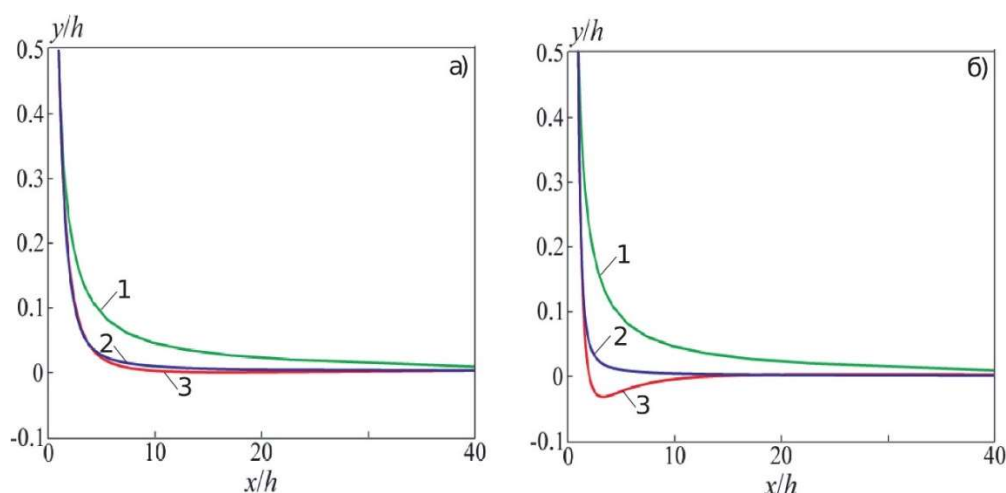


Рис. 16. Траектории частиц диаметром  $d_p = 50$  мкм (а) и  $d_p = 100$  мкм (б) в канале со вдувом

В начальный момент времени задается профиль продольной скорости, имеющий место в вихревом течении вязкой несжимаемой жидкости. Скорость в направлении оси  $z$  полагается равной нулю. На верхней стенке выставляются граничные условия нормального вдува со скоростью  $v_w$ , а на нижней стенке – условия прилипания и непротекания. Левая торцевая стенка канала полагается непроницаемой. На границе, через которую газ покидает расчетную область, используются неотражающие граничные условия. В направлении оси  $z$  задаются периодические граничные условия (условия повторения течения). Скорость вдува изменяется во времени по гауссовскому закону, но остается постоянной в пространстве. Частицы инжектируются в канал с верхней стенки по нормали к поверхности со скоростью, равной скорости вдува. Влияние турбулентности учитывается при помощи введения случайных флуктуаций скорости в уравнение движения пробной частицы.

Результаты расчетов движения и рассеивания частиц окиси алюминия ( $r_p = 5 \div 50$  мкм) в канале показаны на рис. 17 для различных размеров частиц (чисел Стокса). В начальный момент времени частица находится на верхней стенке канала. Расчеты проводятся, начиная с точки  $x/p_0 = 3$ , с шагом  $\Delta x = 3$ . Расчет заканчивается либо при выходе частицы за пределы расчетной области (при  $x/p > 30$ ), либо при выпадении частицы на нижнюю стенку канала.

Степень вовлечения частицы в пульсационное движение определяется соотношением между временем динамической релаксации частицы и характерным временным масштабом турбулентности. Неоднородность поля турбулентности несущей фазы для частиц мелких фракций ( $r_p = 2 \div 8$  мкм) приводит к появлению турбулентной миграции частицы (силы турбофореза), направленной в сторону уменьшения пульсационной энергии газа.

Для частиц крупных фракций ( $r_p \sim 30 \div 50$  мкм) пульсации скорости не оказывают существенного влияния на движение примеси на всем участке развития потока в силу инерционности таких частиц. Слабая миграция частиц, направленная в сторону уменьшения пульсационной энергии газа, наблюдается лишь для частиц, инжектируемых в канал на достаточно большом удалении от левого торца канала (при  $x_{p0} > 10$ ). Степень рассеивания (дисперсия смещения частицы) тем сильнее, чем меньше размер частицы ( $r_p \sim 5 \div 15$  мкм) и чем дальше от левой границы расчетной области она инжектируется в канал. Кинетическая энергия турбулентности и среднеквадратическая скорость несущего потока изменяются вдоль оси канала по закону, близкому к параболическому.

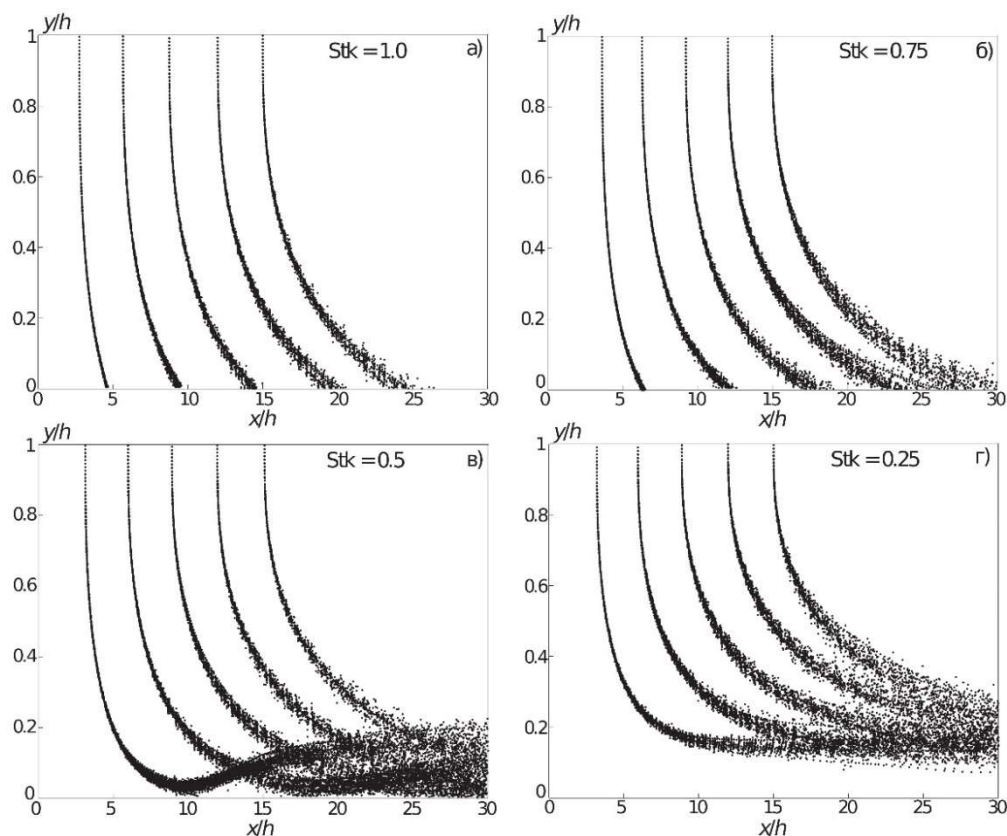


Рис. 17. Траектории частиц в канале при  $Stk = 1.0$  (а);  $0.75$  (б);  $0.5$  (в);  $0.25$  (г)

Распределение частиц по поперечному сечению канала с твердыми стенками в фиксированный момент времени показывает рис. 18 (при  $Re_\tau = 160$ ). По поперечному сечению канала частицы распределяются неравномерным образом, имея тенденцию к накоплению в пограничном слое на нижней и верхней стенках канала.



Рис. 18. Распределение частиц по поперечному сечению канала в момент времени  $t = 10$  при  $Stk = 25$

Наблюдается накопление частиц в вязком подслое, что связывается со структурой пристеночной турбулентности и формированием вихрей в турбулентном пограничном слое. В

таких вихрях касательные компоненты тензора мгновенных рейнольдсовых напряжений являются отрицательными ( $v' < 0$  и  $w' > 0$ ), а их уровень – достаточно высоким, что приводит к генерации турбулентности. Вихревые структуры ориентированы по направлению потока. Перенос частиц по направлению к стенке канала и их накопление вблизи стенки происходят в тех областях, в которых продольная скорость потока оказывается меньше средней скорости

Мгновенные распределения концентрации монодисперсных частиц диаметром 1 мкм в комбинированном вихре показывает рис. 19 (общее число частиц составляет  $10^5$ ). Сплошная линия соответствует границе ядра вихря. В начальный момент времени распределение концентрации частиц является однородным (фрагмент а). В дальнейшем частицы выбрасываются в периферийные области вихря за счет действия центробежных сил, а затем наблюдается их накопление на границе расчетной области (фрагмент б). В конечный момент времени ядро вихря является практически свободным от частиц (фрагмент в).

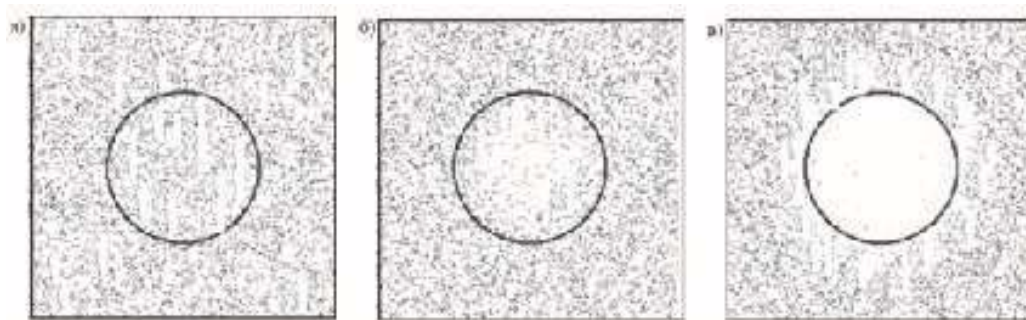


Рис. 19. Распределения концентрации монодисперсных частиц в моменты времени 0 (а), 0.3 с (б), 1 с (в)

Картина течения в канале заряда, имеющем круглую форму поперечного сечения в плане, и в утопленном сопле при нулевом угле поворота показана на рис. 20 (в качестве характерной скорости выбирается скорость вдува). В канале заряда течение остается существенно дозвуковым, что позволяет использовать приближение вязкой несжимаемой жидкости (учет сжимаемости является важным в достаточно длинных каналах). На выходе из сопла число Маха равняется 2.1 (фрагмент а). Генерация кинетической энергии турбулентности начинается в сечении  $x/L \sim 0.6$  (фрагмент б), а генерация турбулентной вязкости – в сечении  $x/L \sim 0.25$  (фрагмент в).

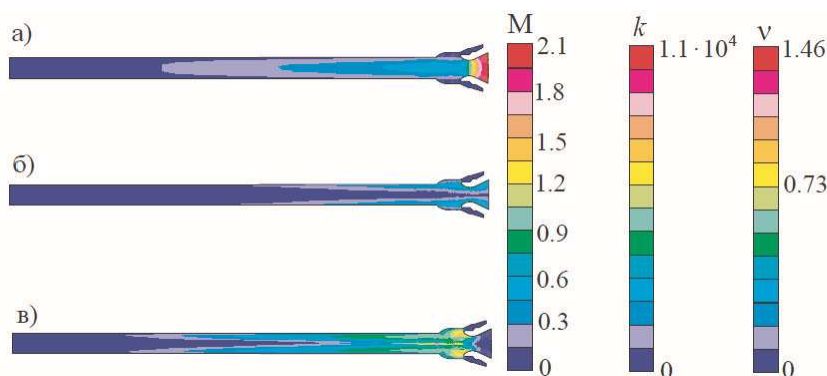


Рис. 20. Линии уровня числа Маха (а), кинетической энергии турбулентности (б) и турбулентной вязкости (в)

Погружение сопла внутрь предсоплового объема уменьшает продольный размер двигателя, но порождает ряд проблем, связанных с обтеканием сопла высокотемпературным двухфазным потоком и являющихся следствием сложной газодинамической обстановки в предсопловом объеме [42]. Траектории частиц для различных конфигураций расчетной области

показаны на рис. 21. Сплошные линии показывают линии тока течения газа, а утолщенные линии – траектории частиц. При вводе пробных частиц конденсированной фазы в расчетную область принимается, что в точке старта скорость частицы равняется скорости газа. В некоторых случаях это приводит к завышению доли частиц, выпадающих на поверхность утолщенного сопла. Особенно этот факт важен для частиц, поступающих из области канального потока. Результаты расчетов позволяют определить предельную траекторию частиц, разделяющую область течения на две подобласти, которые заняты частицами и свободны от частиц конденсированной фазы.

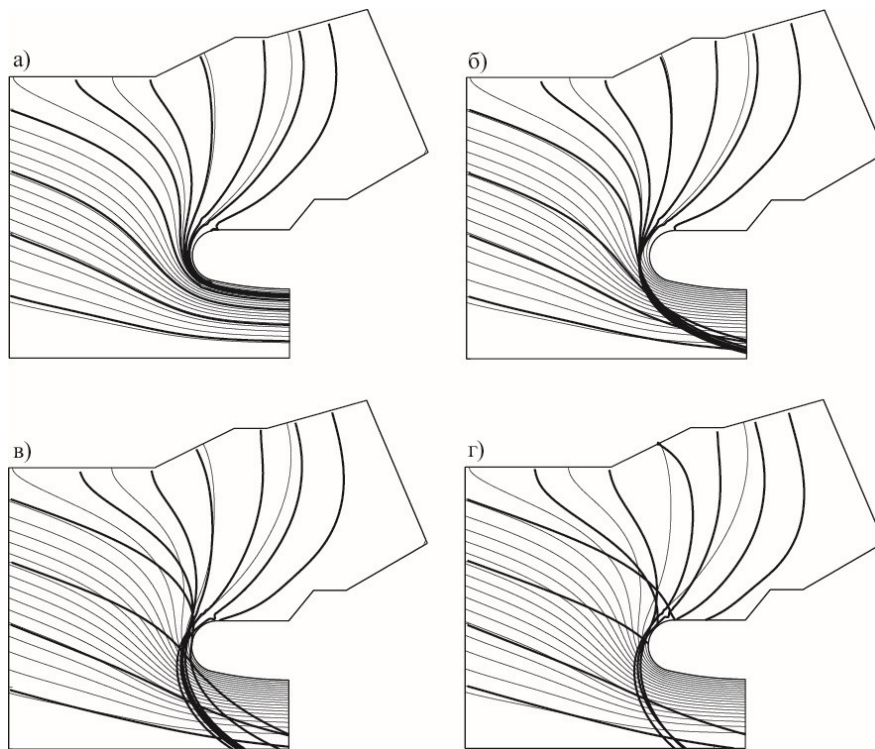


Рис. 21. Линии тока и траектории частиц в предсопловом объеме при  $d_p = 2$  (а); 20 (б); 50 (в); 80 мкм (г)

При погружении части заряда в предсопловый объем, который стесняет пространство и пережимает потоки, распределение давления по поверхности крышки соплового блока и торца канала изменяется, в частности, на торце под сопловым входом появляется зона разрежения. При этом условия затекания потока в сопло ухудшаются, что сопровождается появлением в критическом сечении сопла обширной зоны с потерями полного давления. С появлением факторов несимметрии (отклонение сопла или его смещение) размер зон натекания и их положение изменяются. Отдельные участки натекания исчезают, и происходит увеличение и объединение зон.

Визуализацию поля течения в поперечном сечении расчетной области при смещении сопла в радиальном направлении показывает рис. 22. Отклонение сопла от осесимметричного положения приводит к достаточно сильному возмущению поля течения. Среди газодинамических характеристик потока наименее слабые изменения претерпевает давление. Вследствие несимметричной геометрии соплового блока в окрестности сопловой крышки образуются сложные трехмерные вихревые течения, характеризующиеся низкими скоростями. Имеет место неравномерное смещение вихревых структур в межщелевой части заряда. Нарушается симметрия парной вихревой структуры, а также наблюдается увеличение и укрупнение вихревых структур в предсопловом объеме. Характер натекания потока на торец заряда усложняется (появляются критические точки типа фокуса). В случае канала звездообразной

формы линейное отклонение сопла приводит также к нарушению симметричности предельных линий тока вблизи лучей заряда и изменению структуры предельных линий тока на входной поверхности утолщенного сопла (симметричная структура нарушается, образуется одна особая точка).

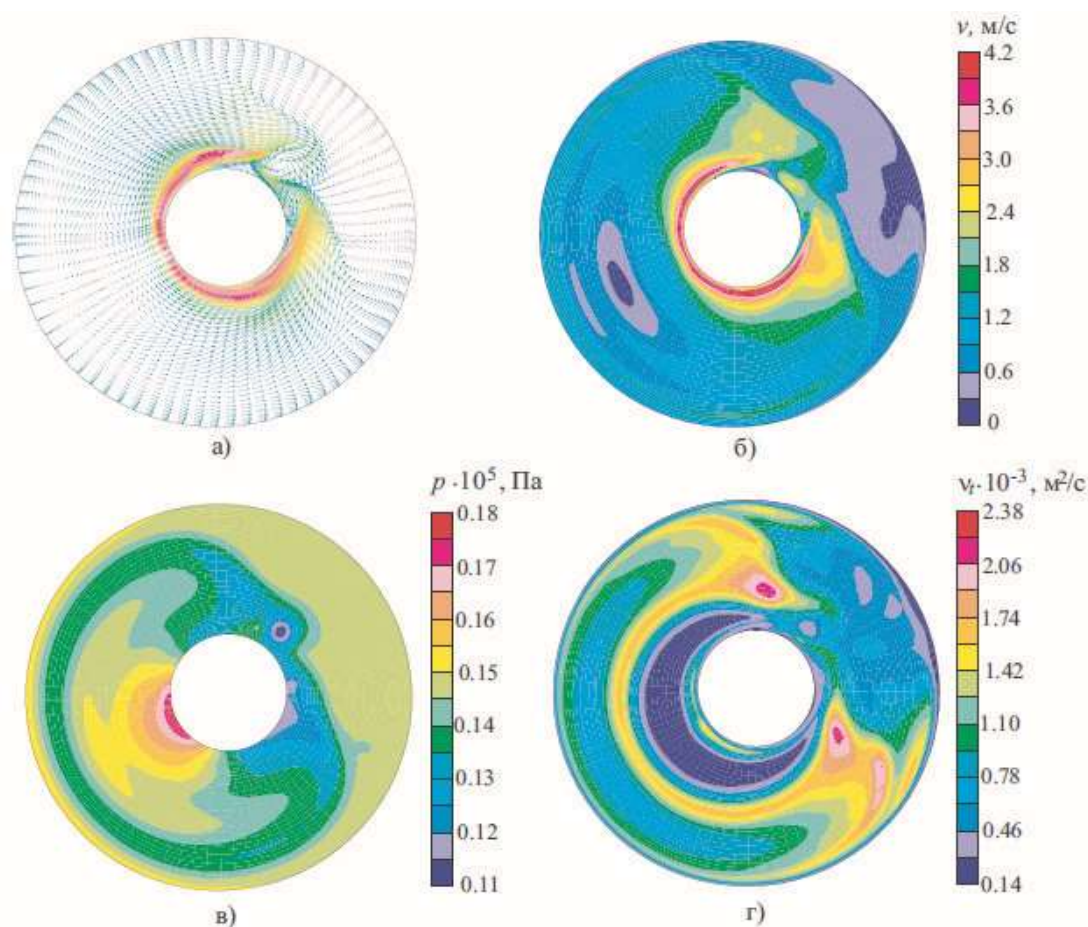


Рис. 22. Картина обтекания сопла, обработанная в виде векторного поля скорости (а), линий уровня модуля скорости (б), линий уровня давления (в) и линий уровня турбулентной вязкости (г)

## 9. Заключение

Проектирование технических систем и обеспечение их правильного функционирования предполагает использование имитационных моделей для прогнозирования их функционально-параметрических показателей. К математическим моделям и программному обеспечению, разрабатываемым в рамках направления, связанного с моделированием внутрикамерных процессов в РДТТ, предъявляются требования, обусловленные особенностями эксплуатации: точность, быстродействие, надежность и мультифизичность. Требование мультифизичности сопряжено с многосторонностью эксплуатируемой технической системы, выражающееся в разнообразии протекающих в ней процессов, характеризующихся разбросом масштабов определяющих физических величин.

Показана целесообразность построения совокупности моделей, которые различаются по уровню пространственной и временной детализации, позволяющих описать взаимовлияние процессов различной природы на динамику системы. Разработан многомасштабный трехуровневый подход к решению задач внутрикамерной газодинамики РДТТ с помощью современных вычислительных технологий. Реализация подхода основана на расщеплении по физическим процессам. В основе подхода лежит разделение расчетной области на подобласти с собственной системой уравнений, а также расщепление исходной системы уравнений

на несколько подсистем для каждого из рассматриваемого масштабов. Математические модели и вычислительные алгоритмы охватывают три масштабных уровня: макроскопический, мезоскопический и микроскопический. На макроуровне детализации происходит описание течений продуктов сгорания твердого топлива. На микроуровне учитывается несферическая форма частиц-агломератов, образующихся при горении топлива. На мезоскопическом уровне добавляется учет взаимодействия частиц конденсированных продуктов сгорания с турбулентностью несущего потока. Введение в рассмотрение мезоскопического уровня позволяет проследить детальное поведение отдельных частиц при их движении в канале заряда с учетом заданных распределений скорости и температуры газового потока. Моделирование процессов на соответствующих масштабных уровнях проводится как по отдельности, так и в комплексе.

## Благодарности и ссылки на гранты

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 21-19-00657), <https://rscf.ru/project/21-19-00657/>.

## Литература

1. Drikakis D., Frank M., Tabor G. Multiscale computational fluid dynamics // *Energies*. 2019. Vol. 12. 3272 (17 pages).
2. Абгарян К.К., Гаврилов Е.С., Марасанов А.М. Информационная поддержка задач многомасштабного моделирования композиционных материалов // *International Journal of Open Information Technologies*. 2017. Т. 5, № 12. С. 24–29.
3. Волков К.Н., Емельянов В.Н. Течения газа с частицами. М.: Физматлит, 2008. 598 с.
4. Chen S., Wang M., Xia Z. Multiscale fluid mechanics and modeling // *Procedia IUTAM*. 2014. Vol. 10. Pp. 100–114.
5. Kalweit M., Drikakis D. Multiscale methods for micro/nano flows and materials // *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*. 2008. Vol. 5, no. 9. Pp. 1923–1938.
6. Kalweit M., Drikakis D. Multiscale simulation strategies and mesoscale modelling of gas and liquid flows // *IMA Journal of Applied Mathematics*. 2011. Vol. 76, no. 5. Pp. 661–671.
7. Hadjiconstantinou N.G. Hybrid atomistic-continuum formulations and the moving contact-line problem // *Journal of Computational Physics*. 1999. Vol. 154. Pp. 245–265.
8. Werder T., Walther J.H., Koumoutsakos P. Hybrid atomistic-continuum method for the simulation of dense fluid flows // *Journal of Computational Physics*. 2005. Vol. 205, no. 1. Pp. 373–390.
9. Xu Y., Subramaniam S. A multiscale model for dilute turbulent gas-particle flows based on the equilibration of energy concept // *Physics of Fluids*. 2006. Vol. 18. 033301 (17 pages).
10. Tsuji Y. Multi-scale modeling of dense phase gas-particle flow // *Chemical Engineering Science*. 2007. Vol. 62, no. 13. Pp. 3410–3418.
11. Подрыга В.О., Поляков С.В. Многомасштабное моделирование истечения газовой струи в вакуум // *Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша*. 2016. № 81. 52 с.
12. Tryggvason G., Aboulhasanzadeh B., Dabiri S., Lu J. Multiscale issues in DNS of multiphase flow // *Proceedings of the 15th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-15)*, 12–17 May 2013, Pisa, Italy. 2013, no. 685 (9 pages).
13. Luo K.H., Xia J., Monaco E. Multiscale modeling of multiphase flow with complex interactions // *Journal of Multiscale Modelling*. 2009. Vol. 1, no. 1. Pp. 125–156.
14. Ling Y., Zaleski S., Scardovelli R. Multiscale simulation of atomization with small droplets represented by a Lagrangian point-particle model // *International Journal of Multiphase Flow*. 2015. Vol. 76. Pp. 122–143.
15. Крапошин М.В. Многомасштабный подход к моделированию сложных переходных процессов движения жидкостей в технических системах // *Труды ИСП РАН*. 2018. Т. 30. № 6. С. 275–292.

16. Baltussen M.W., Buist K.A., Peters E.A.J.F., Kuipers J.A.M. Multiscale modelling of dense gas–particle flows // *Advances in Chemical Engineering*. 2018. Vol. 53. Pp. 1–52.
17. Gimenez J.M., Idelsohn S.R., Onate E., Lohner R. Multiscale approach for the numerical simulation of turbulent flows with droplets // *Archives of Computational Methods in Engineering*. 2021. Vol. 28. Pp. 4185–4204.
18. Balachandar S., Eaton J.K. Turbulent dispersed multiphase flow // *Annual Review of Fluid Mechanics*. 2010. Vol. 42, no. 1. Pp. 111–133.
19. Idelsohn S.R., Gimenez J.M., Nigro N., Onate E. The pseudo-direct numerical simulation method for multi-scale problems in mechanics // *Computational Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2021. Vol. 380. 113774.
20. Germann T.C., Kadau K. Trillion-atom molecular dynamics becomes a reality // *International Journal of Modern Physics C*. 2008. Vol. 19, no. 9. Pp. 1315–1319.
21. Freddolino P.L. Ten-microsecond molecular dynamics simulation of a fast-folding WW domain // *Biophysical Journal*. 2008. Vol. 94, no. 10. Pp. L75–L77.
22. Hutter J., Curioni A. Car-Parrinello molecular dynamics on massively parallel computers // *Chem-PhysChem*. 2005. Vol. 6, no. 9. Pp. 1788–1793.
23. Волков К.Н., Емельянов В.Н. Моделирование крупных вихрей в расчетах турбулентных течений. М.: Физматлит, 2008. 364 с.
24. Li W.-L., Ouyang Y., Gao X.-Y., Wang C.-Y., Shao L., Xiang Y. CFD analysis of gas–liquid flow characteristics in a microporous tube-in-tube microchannel reactor // *Computers and Fluids*. 2018. Vol. 170. Pp. 13–23.
25. Ngo S.I., Lim Y.-I. Multiscale Eulerian CFD of chemical processes: a review // *Chemical Engineering*. 2020. Vol. 4. 23 (26 pages).
26. Xu X., Wang X., Zhang M., Zhang J., Tan J. A parallelized hybrid N-S/DSMC-IP approach based on adaptive structured/unstructured overlapping grids for hypersonic transitional flows // *Journal of Computational Physics*. 2018. Vol. 5. Pp. 409–433.
27. John B., Damodaran M. Computation of head-disk interface gap micro flowfields using DSMC and continuum atomistic hybrid methods // *International Journal for Numerical Methods in Fluids*. 2009. Vol. 61. Pp. 1273–1298.
28. Weinan E., Ming P., Zhang P. Analysis of the heterogeneous multiscale method for elliptic homogenization problems // *Journal of the American Mathematical Society*. 2005. Vol. 18, no. 1. Pp. 121–156.
29. Ren W.Q., Weinan E. Heterogeneous multiscale method for the modeling of complex fluids and microfluidics // *Journal of Computational Physics*. 2005. Vol. 204, no. 1. Pp. 1–26.
30. Docherty S.Y., Borg M.K., Lockerby D.A., Reese J.M. Coupling heterogeneous continuum-particle fields to simulate non-isothermal microscale gas flows // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2016. Vol. 98. Pp. 712–727.
31. Patronis A., Lockerby D.A. Multiscale simulation of non-isothermal microchannel gas flows // *Journal of Computational Physics*. 2014. Vol. 270. Pp. 532–543.
32. John B., Lockerby D.A., Patronis A., Emerson D.R. Simulation of the head-disk interface gap using a hybrid multiscale method // *Microfluidics and Nanofluidics*. 2018. Vol. 22. 106.
33. Zhang J., John B., Pfeiffer M., Fei F., Wen D. Particle-based hybrid and multiscale methods for nonequilibrium gas flows // *Advances in Aerodynamics*. 2019. Vol.1, no. 2. Pp. 1–15.
34. Wijesinghe H.S., Hadjiconstantinou N.G. Discussion of hybrid atomistic-continuum methods for multiscale hydrodynamics // *International Journal for Multiscale Computational Engineering*. 2004. Vol. 2. Pp. 189–202.
35. Волков К.Н., Емельянов В.Н. Газовые течения с массоподводом в каналах и трактах энергоустановок. М.: Физматлит, 2011. 464 с.
36. Gallier S. Heterogeneous solid propellants: from microstructure to macroscale properties // *Progress in Propulsion Physics*. 2011. Vol. 2. Pp. 21–34.



37. Волков К.Н., Емельянов В.Н., Тетерина И.В., Яковчук М.С. Газовые течения в соплах энергоустановок. М.: Физматлит, 2016. 336 с.
38. Stewart D.S., Tang K.C., Yoo S., Brewster Q., Kuznetsov I.R. Multiscale modeling of solid rocket motors: computational aerodynamics methods for quasi-steady burning // *Journal of Propulsion and Power*. 2006. Vol. 22, no. 6. Pp. 1382–1388.
39. Emelyanov V.N., Teterina I.V., Volkov K.N., Garkushev A.U. Pressure oscillations and instability of working processes in the combustion chambers of solid rocket motors // *Acta Astronautica*. 2017. Vol. 135. Pp. 161–171.
40. Emelyanov V.N., Teterina I.V., Volkov K.N. Dynamics and combustion of single aluminium agglomerate in solid propellant environment // *Acta Astronautica*. 2020. Vol. 176. Pp. 682–694.
41. Волков К.Н., Емельянов В.Н., Тетерина И.В. Соппротивление и теплообмен металл-оксидных агломератов в потоке продуктов сгорания твердого топлива // *Физико-химическая кинетика в газовой динамике*. 2020. Т. 21, вып. 1. <http://chemphys.edu.ru/issues/2020-21-1/articles/893/>
42. Волков К.Н., Емельянов В.Н., Курова И.В. Течение и движение частиц конденсированной фазы в предсопловом объеме РДТТ // *Инженерно-физический журнал*. 2012. Т. 85. № 4. С. 667–674.

## References

1. Drikakis D., Frank M., Tabor G., Multiscale computational fluid dynamics, *Energies*, 2019, vol. 12, no. 17, 3272. <https://doi.org/10.3390/en12173272>
2. Abgaryan K. K., Gavrilov E. S., Marasanov A. M., Information support of tasks of multiscale modeling of composite materials, *International Journal of Open Information Technologies*, 2017, vol. 5, no. 12, pp. 24–29 [in Russian].
3. Volkov K. N., Emelyanov V. N., *Gas flows with particles*, М.: Физматлит, 2008, 598 p. [in Russian].
4. Chen S., Wang M., Xia Z., Multiscale fluid mechanics and modeling, *Procedia IUTAM*, 2014, vol. 10, pp. 100–114. <https://doi.org/10.1016/j.piutam.2014.01.012>
5. Kalweit M., Drikakis D., Multiscale methods for micro/nano flows and materials, *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 2008, vol. 5, no. 9, pp. 1923–1938. <https://doi.org/10.1166/jctn.2008.906>
6. Kalweit M., Drikakis D., Multiscale simulation strategies and mesoscale modelling of gas and liquid flows, *IMA Journal of Applied Mathematics*, 2011, vol. 76, no. 5, pp. 661–671. <https://doi.org/10.1093/imamat/hxr048>
7. Hadjiconstantinou N. G., Hybrid atomistic-continuum formulations and the moving contact-line problem, *Journal of Computational Physics*, 1999, vol. 154, pp. 245–265. <https://doi.org/10.1006/jcph.1999.6302>
8. Werder T., Walther J. H., Koumoutsakos P., Hybrid atomistic-continuum method for the simulation of dense fluid flows, *Journal of Computational Physics*, 2005, vol. 205, no. 1, pp. 373–390. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2004.11.019>
9. Xu Y., Subramaniam S., A multiscale model for dilute turbulent gas-particle flows based on the equilibration of energy concept, *Physics of Fluids*, 2006, vol. 18. 033301. <https://doi.org/10.1063/1.2180289>
10. Tsuji Y. Multi-scale modeling of dense phase gas-particle flow, *Chemical Engineering Science*, 2007, vol. 62, no. 13, pp. 3410–3418. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2006.12.090>
11. Podryga V. O., Polyakov S. V., Multiscale modeling of the outflow of a gas jet into a vacuum, *Preprints of IAM*, 2016, no. 81, 52 p. [in Russian].
12. Tryggvason G., Aboulhasanzadeh B., Dabiri S., Lu J., Multiscale issues in DNS of multiphase flow, Proceedings of the 15<sup>th</sup> International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-15), 12–17 May 2013, Pisa, Italy. 2013, no. 685.

13. Luo K. H., Xia J., Monaco E., Multiscale modeling of multiphase flow with complex interactions, *Journal of Multiscale Modelling*, 2009, vol. 1, no. 1, pp. 125–156. <https://doi.org/10.1142/S1756973709000074>
14. Ling Y., Zaleski S., Scardovelli R., Multiscale simulation of atomization with small droplets represented by a Lagrangian point-particle model, *International Journal of Multiphase Flow*, 2015, vol. 76, pp. 122–143. <https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2015.07.002>
15. Kraposhin M. V., Multiscale approach to modeling complex transient processes of fluid movement in technical systems, *Proceedings of ISP RAS*, 2018, vol. 30, no. 6, pp. 275–292 [in Russian].
16. Baltussen M. W., Buist K. A., Peters E. A. J. F., Kuipers J. A. M., Multiscale modelling of dense gas-particle flows, *Advances in Chemical Engineering*, 2018, vol. 53, pp. 1–52. <https://doi.org/10.1016/bs.ache.2018.02.001>
17. Gimenez J. M., Idelsohn S. R., Onate E., Lohner R., Multiscale approach for the numerical simulation of turbulent flows with droplets, *Archives of Computational Methods in Engineering*, 2021, vol. 28, pp. 4185–4204. <https://doi.org/10.1007/s11831-021-09614-6>
18. Balachandar S., Eaton J. K., Turbulent dispersed multiphase flow, *Annual Review of Fluid Mechanics*, 2010, vol. 42, no. 1, pp. 111–133. <https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.010908.165243>
19. Idelsohn S. R., Gimenez J. M., Nigro N., Onate E., The pseudo-direct numerical simulation method for multi-scale problems in mechanics, *Computational Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2021, vol. 380. 113774. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2021.113774>
20. Germann T. C., Kadau K., Trillion-atom molecular dynamics becomes a reality, *International Journal of Modern Physics C*, 2008, vol. 19, no. 9, pp. 1315–1319. <https://doi.org/10.1142/S0129183108012911>
21. Freddolino P. L., Ten-microsecond molecular dynamics simulation of a fast-folding WW domain, *Biophysical Journal*, 2008, vol. 94, no. 10, pp. L75–L77. <https://doi.org/10.1529/biophysj.108.131565>
22. Hutter J., Curioni A., Car-Parrinello molecular dynamics on massively parallel computers, *Chem-PhysChem*, 2005, vol. 6, no. 9, pp. 1788–1793. <https://doi.org/10.1002/cphc.200500059>
23. Volkov K. N., Emelaynov V. N., *Large-eddy simulation of turbulent flows*, M.: Fizmatlit, 2008, 364 p. [in Russian].
24. Li W.-L., Ouyang Y., Gao X.-Y., Wang C.-Y., Shao L., Xiang Y., CFD analysis of gas-liquid flow characteristics in a microporous tube-in-tube microchannel reactor, *Computers and Fluids*, 2018, vol. 170, pp. 13–23. <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2018.04.022>
25. Ngo S. I., Lim Y.-I., Multiscale Eulerian CFD of chemical processes: a review, *Chemical Engineering*, 2020, vol. 4. 23. <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:216298818>
26. Xu X., Wang X., Zhang M., Zhang J., Tan J., A parallelized hybrid N-S/DSMC-IP approach based on adaptive structured/unstructured overlapping grids for hypersonic transitional flows, *Journal of Computational Physics*, 2018, vol, pp. 409–433. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.05.021>
27. John B., Damodaran M., Computation of head-disk interface gap micro flowfields using DSMC and continuum-atomistic hybrid methods, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 2009, vol. 61, pp. 1273–1298. <https://doi.org/10.1002/flid.1999>
28. Weinan E., Ming P., Zhang P. Analysis of the heterogeneous multiscale method for elliptic homogenization problems, *Journal of the American Mathematical Society*, 2005, vol. 18, no. 1, pp. 121–156.
29. Ren W. Q., Weinan E., Heterogeneous multiscale method for the modeling of complex fluids and microfluidics, *Journal of Computational Physics*, 2005, vol. 204, no. 1, pp. 1–26. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2004.10.001>
30. Docherty S. Y., Borg M. K., Lockerby D. A., Reese J. M., Coupling heterogeneous continuum-particle fields to simulate non-isothermal microscale gas flows, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2016, vol. 98, pp. 712–727. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.03.040>
31. Patronis A., Lockerby D. A., Multiscale simulation of non-isothermal microchannel gas flows, *Journal of Computational Physics*, 2014, vol. 270, pp. 532–543. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2014.04.004>

32. John B., Lockerby D. A., Patronis A., Emerson D. R., Simulation of the head-disk interface gap using a hybrid multiscale method, *Microfluidics and Nanofluidics*, 2018, vol. 22. 106.  
<https://doi.org/10.1007/s10404-018-2126-5>
33. Zhang J., John B., Pfeiffer M., Fei F., Wen D., Particle-based hybrid and multiscale methods for non-equilibrium gas flows, *Advances in Aerodynamics*, 2019, vol.1, no. 2, pp. 1–15.  
<https://doi.org/10.1186/s42774-019-0014-7>
34. Wijesinghe H. S., Hadjiconstantinou N. G., Discussion of hybrid atomistic-continuum methods for multiscale hydrodynamics, *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 2004, vol. 2, pp. 189–202. DOI: 10.1615/IntJMultCompEng.v2.i2.20
35. Volkov K. N., Emelaynov V. N., *Gas flows induced by fluid injection in energy systems*, М.: Fizmatlit, 2011, 464 p. [in Russian].
36. Gallier S., Heterogeneous solid propellants: from microstructure to macroscale properties, *Progress in Propulsion Physics*, 2011, vol. 2, pp. 21–34. DOI:10.1051/eucass/201102021
37. Volkov K. N., Emelyanov V. N., Teterina I. V., Yakovchuk M. S., *Gas flows in nozzle of energy systems*, М.: Fizmatlit, 2016, 336 p. [in Russian].
38. Stewart D. S., Tang K. C., Yoo S., Brewster Q., Kuznetsov I. R. Multiscale modeling of solid rocket motors: computational aerodynamics methods for quasi-steady burning, *Journal of Propulsion and Power*, 2006, vol. 22, no. 6, pp. 1382–1388. <https://doi.org/10.2514/1.16111>
39. Emelyanov V. N., Teterina I. V., Volkov K. N., Garkushev A. U., Pressure oscillations and instability of working processes in the combustion chambers of solid rocket motors, *Acta Astronautica*, 2017, vol. 135, pp. 161–171. <https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2016.09.029>
40. Emelyanov V. N., Teterina I. V., Volkov K. N., Dynamics and combustion of single aluminium agglomerate in solid propellant environment, *Acta Astronautica*, 2020, vol. 176, pp. 682–694. <https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2020.03.046>
41. Volkov K. N., Emelyanov V. N., Teterina I. V., Drag and heat transfer of metal and oxide agglomerates in flow of combustion products of solid propellant, *Physical and Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2020, vol. 21, no. 1, pp. 1–24 [in Russian].
42. Volkov K. N., Emelyanov V. N., Kurova I. V., Flow and motion of condensed-phase particles in the prenozzle space of solid-propellant rocket motors, *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, 2012, vol. 85, no. 4, pp. 723–731. <https://doi.org/10.1007/s10891-012-0707-9>

Статья поступила в редакцию 15 января 2024 г.