

На правах рукописи



Гидаспов Владимир Юрьевич

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ВЫСОКОСКОРОСТНЫХ МНОГОФАЗНЫХ ТЕЧЕНИЙ С
ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИМИ ПРЕВРАЩЕНИЯМИ**

Специальность 01.02.05 – «Механика жидкости, газа и плазмы»

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Москва – 2019

Работа выполнена на кафедре «Вычислительная математика и программирование» федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)»

Научный консультант: **Ревизников Дмитрий Леонидович,**
доктор физико-математических наук, профессор, профессор федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)»

Официальные оппоненты: **Голуб Виктор Владимирович,**
доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией физической газовой динамики Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур РАН
Марков Владимир Васильевич,
доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник отдела механики Федерального государственного бюджетного учреждения науки Математического института им. В.А.Стеклова РАН
Стасенко Альберт Леонидович,
доктор технических наук, профессор, главный научный сотрудник Федерального государственного унитарного предприятия Центрального аэрогидродинамического института имени Н.Е.Жуковского

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем механики им. А. Ю. Ишлинского Российской академии наук

Защита состоится 27 декабря 2019 года в 10⁰⁰ часов на заседании диссертационного совета Д212.125.14 Московского авиационного института по адресу: 125993, г. Москва, А-80, ГСП-3, Волоколамское шоссе, д. 4.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Московского авиационного института по адресу: 125993, г. Москва, А-80, ГСП-3, Волоколамское шоссе, д. 4. или на сайте МАИ по ссылке: https://mai.ru/events/defence/doctor/index.php?ELEMENT_ID=107501

Автореферат разослан ____ _____ 2019 г.

Отзывы в 2-х экземплярах, заверенные печатью, просим отправлять по адресу: 125993, г. Москва, А-80, ГСП-3, Волоколамское шоссе, д. 4, Ученый совет МАИ.

Ученый секретарь диссертационного совета Д212.125.14, доктор физико-математических наук, доцент



Колесник С.А.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования. В настоящее время в России и за рубежом проводятся интенсивные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования высокоскоростных многофазных потоков, связанные с созданием разноцелевых энергетических и технологических установок, исследованием детонации, атмосферными явлениями и т.д. Результаты исследований многофазных потоков представлены в авторитетных журналах ("Теплофизика высоких температур", "Физика горения и взрыва", "Химическая физика", "Математическое моделирование", "Механика жидкости и газа", "Combustion Science and Technology", "An International Journal on Shock Waves, Detonations and Explosions" и др.), докладываются на большом числе международных симпозиумов, конференций и семинаров, отражены в ряде монографий. Теоретическую основу для данной работы составляют работы Российских ученых Я.Б. Зельдовича, А.Н. Крайко, В.А. Левина, Р.И. Нигматуллина, У.Г. Пирумова, Х.А.Рахматуллина, Р.И. Солоухина, К.П. Станюковича, А.Л. Стасенко, Л.Е. Стернина, В.М. Фомина, Г.Г. Черного. Автору посчастливилось стать в 1985 году участником научной школы, созданной на кафедре "Вычислительная математика и программирование" МАИ У.Г. Пирумовым. Непосредственным научным руководителем автора в то время был В.А.Волков, который наряду с У.Г.Пирумовым являлся постановщиком задач и идеологом их решения. Для численного моделирования многофазных течений с физико-химическими превращениями в отраслевых институтах и институтах РАН используются как универсальные пакеты моделирования многомерных течений, так и собственные разработки. Необходимо отметить, что пока еще не созданы модели и методики моделирования, охватывающие все особенности физико-химических процессов, протекающих в многофазных средах. В последнее время в России и мире наблюдается рост интереса к моделированию одномерных нестационарных течений. Созданная в работе методика моделирования, с одной стороны, является упрощенной (рассматриваются квазиодномерные нестационарные течения), а, с другой стороны, позволяет с высокой точностью и за разумные времена моделировать ряд тонких аспектов рассматриваемых течений. Например реализовать модель с детальной кинетикой химических превращений или кинетикой неравновесной гомогенной конденсации; промоделировать течение при наличии областей с различными временными масштабами (в частности, в одной зоне достигнуто химическое равновесие, а в другой, отделенной контактными разрывом, протекают неравновесные химические реакции). Также одномерная нестационарная модель позволяет построить на больших временах полную циклограмму процесса с правильным учетом скоростей распространения возмущений. Отработанные на одномерных моделях методики расчета химических и фазовых превращений, межфазного сопротивления и теплообмена успешно используются при многомерном моделировании.

Целью диссертационной работы является разработка физико-математических моделей, вычислительных алгоритмов и комплексов программ для моделирования высокоскоростных многофазных течений с физико-химическими превращениями.

В работе не рассматриваются вопросы, связанные с влиянием турбулентности и излучения на протекания рассматриваемых физико-химических процессов; вязкость, теплопроводность и диффузия газовых смесей используются только в моделях межфазного обмена импульсом и теплообмена. Тем не менее, данные процессы учитываются в главе 6 в комплексах программ многомерного численного моделирования, в разработке которых принимал участие автор.

Задачами исследования являются:

- разработка комплексной модели высокоскоростных многофазных течений с физико-химическими превращениями;
- разработка методов расчета равновесных и неравновесных физико-химических процессов в многофазных средах;
- разработка прецизионного сеточно-характеристического метода для расчета высокоскоростных многофазных течений с физико-химическими превращениями;
- проведение широкомасштабных вычислительных экспериментов по моделированию высокоскоростных течений газовых, газокапельных и металлогазовых горючих смесей;
- интегрирование вычислительных алгоритмов расчета равновесных и неравновесных процессов в методики моделирования многомерных течений.

Методы исследования. Основным методом исследования является математическое моделирование.

Научная новизна. В диссертационной работе получены следующие новые результаты:

1. Предложена комплексная физико-математическая модель высокоскоростных течений многокомпонентного газа и частиц при наличии равновесных и неравновесных, описываемых многостадийными кинетическими механизмами, химических превращений в газовой фазе и на поверхности частиц, обеспечивающая переход системы в состояние термодинамического равновесия при условии неубывания энтропии.

2. Разработан сеточно-характеристический метод для моделирования многофазных течений с физико-химическими превращениями в каналах. Метод позволяет рассчитывать течения с явным выделением присутствующих в них сильных и слабых разрывов, таких как: ударные волны; контактные разрывы; характеристики, являющиеся границами вееров разрежения; граничные траектории распространения частиц и всех взаимодействий между ними. В рамках модели многолистной газовой динамики рассмотрен случай бесстолкновительного пересечения траекторий частиц.

3. Разработаны вычислительные алгоритмы расчета состояния термодинамического равновесия многофазных многокомпонентных смесей. Численно решены задачи: о распаде разрыва в газах с произвольными, термодинамически допустимыми уравнениями состояния, а для модели смеси совершенных газов - в случаях “замороженного”, “равновесного” и “равновесно-замороженного” составов; о стационарной детонационной волне в канале переменного сечения со сверхзвуковым потоком на входе и выходе для случая, когда топливо и продукты сгорания представляют собой смесь совершенных газов в предположении, что течение до детонационной волны “замороженное”, а за детонационной волной “равновесное”.

4. Разработана модификация метода У.Г.Пирумова для численного интегрирования жестких систем уравнений химической кинетики и межфазного обмена импульсом, массой и энергией, обеспечивающая автоматическое выполнение законов сохранения элементного состава. С использованием данного метода решен ряд задач (в том числе и многомерных) моделирования высокоскоростных течений газофазных, газокапельных и металлогазовых горючих смесей.

5. В автомодельной и неавтомодельной постановках численно решена задача о распаде произвольного разрыва в детонирующих газовых и газокапельных горючих смесях в случае, когда продукты сгорания представляют собой смесь совершенных газов при учете равновесного и неравновесного протекания химических реакций. Получена детальная картина образования и распространения ударных и детонационных волн.

6. Исследована тонкая структура стационарных волн детонации и дефлаграции в газовых, газокапельных и металлогазовых горючих смесях. В предположении, что продукты испарения участвуют в газофазных химических реакциях, а в случае металлогазовых смесей химические превращения протекают на поверхности капель металлов и приводят к образованию окислов, при этом в составе газовой фазы допускается наличие конденсированных компонент. Используемая модель обеспечивает непрерывный переход параметров течения от неравновесного состояния к равновесному - точке на равновесной адиабате горючей смеси.

7. Развита квазихимическая модель гомогенной конденсации. Разработаны численные методы для расчета равновесных функций распределения как в стабильной, так и в метастабильной областях. Разработан уточненный метод и вычислительный алгоритм решения уравнений кинетики конденсации – численного расчета функции распределения кластеров по размерам, обеспечивающий корректный расчет кластеров со сверхмалыми концентрациями. Рассчитаны неравновесные функции распределения по размерам кластеров аргона, меди, свинца, воды, серебра в условиях, характерных для технологических установок, в том числе и в присутствии инертных газовых смесей.

8. Разработанные автором численные методы, вычислительные алгоритмы и программные коды для расчета равновесного состава, решения уравнений химической кинетики и кинетики конденсации, межфазного обмена импульсом и тепломассообмена, были интегрированы в программные комплексы многомерного моделирования (разработанные соавторами) и использованы при решении ряда задач физической динамики многофазных сред.

Научная и практическая значимость работы состоит в том, что разработанные вычислительные алгоритмы и программы могут использоваться для экспресс-анализа реагирующих многофазных течений в энергетических и технологических установках, а также в качестве элементов в составе комплексов программ многомерного моделирования. Предложенные в диссертации методики математического моделирования позволяют рассчитывать многофазные течения с физико-химическими превращениями в каналах, использоваться при моделировании таких явлений как горение, детонация, конденсация, образование токсичных компонент, позволяют определять детальную картину протекания неравновесных физико-химических процессов от их инициирования до перехода в равновесное состояние.

Достоверность результатов обеспечивается строгостью математических постановок, разработкой адекватных физико-математических моделей, устойчивостью и сходимостью используемых численных методов, тестированием вычислительных алгоритмов, а также согласованием результатов численного моделирования с результатами экспериментальных и расчетно-теоретических исследований других авторов.

Апробация результатов исследования. Основные результаты диссертационной работы докладывались на большом количестве научных семинаров, российских и международных конференциях. Среди них 2nd Japan-Soviet Union joint symposium on computational fluid dynamics (Tsukuba, 1991); IX школа по пакетам прикладных программ (Иркутск, 1991); X - XXI Международные конференции по Вычислительной механике и современным прикладным программным системам (1999-2019 гг.); I - XI Международные конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (1995-2016); XX, XXIV, XXIX, XXXI научные чтения по космонавтике (Москва, 1996, 2000, 2005, 2007); XI-XVI Международные научно-технические семинары "Современные технологии в задачах управления, автоматизации и обработки информации" (Алушта, 2002- 2007); Международная конференция "Математические модели и чис-

ленные методы механики сплошных сред" (Новосибирск, 1996); 2-nd International Seminar: Fire-and-explosion hazard of substances and venting of deflagrations (Moscow, 1997); XIX, XXI, XXIII, XXV семинары по струйным, отрывным и нестационарным течениям (2002, 2007, 2012, 2018); Workshop Nonequilibrium Processes in Combustion and Plasma Based Technologies (Minsk, Belarus, 2004); Physics of Shock Waves, Combustion, Detonation and Non-Equilibrium Processes. Soloukhin Memorial (Belarus, 2005); IX-XII Всероссийские съезды по теоретической и прикладной механике (2006-2019); XIII, XV Всероссийские семинары "Динамика многофазных сред" (Новосибирск, 2013, 2015); 6-8th International Symposium on Nonequilibrium Processes, Plasma, Combustion, and Atmospheric Phenomena (Sochi, 2014-2018); XII Международная конференция по прикладной математике и механике в аэрокосмической отрасли (Алушта, 2018); XIV-XVII Международные конференции "Авиация и космонавтика" (Москва, 2015-2018).

Личный вклад. Все результаты диссертационной работы получены лично соискателем в ходе научно-исследовательской деятельности. Автором реализованы используемые численные методы решения задач, проведены вычислительные эксперименты и выполнен анализ полученных расчетных данных.

Публикации. Основные результаты диссертации опубликованы в 42 работах в журналах, входящих в перечень ВАК, в 4 монографиях и в более чем 100 статьях и тезисах докладов в материалах тематических конференций, зарегистрированы 11 программ для ЭВМ.

Структура и объем работы. Работа состоит из введения, шести глав, заключения и списка литературы. Полный объем диссертации составляет 413 страниц с 354 рисунками и 21 таблицей. Список литературы состоит из 315 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы, сформулированы концепция и основные положения диссертационной работы.

В первой главе представлена физико-математическая модель многофазных течений в каналах при наличии межфазного обмена импульсом, тепломассообмена, а также газофазных и жидкофазных химических реакций. Считается, что в выражениях для гидродинамических потоков вещества, импульса и энергии можно пренебречь слагаемыми, описывающими диффузию, вязкость и теплопроводность, и ограничиться только слагаемыми, описывающими конвективный перенос. Вязкость, теплопроводность и диффузия учитываются в слагаемых, описывающих взаимодействие несущей и дисперсной фаз друг с другом.

Система уравнений в частных производных, описывающая течение многофазной смеси в каналах с пологими стенками в областях непрерывности течения, при сделанных предположениях записываются в следующем виде:

$$\frac{\partial(\rho + n_s m_s)F}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u + n_s m_s u_s)F}{\partial x} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial(\rho u + n_s m_s u_s)F}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p + n_s m_s u_s^2)F}{\partial x} = p \frac{dF}{dx}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho F(e + \frac{u^2}{2}) + n_s m_s F(e_s + \frac{u_s^2}{2})}{\partial t} + \frac{\partial \rho u F(e + \frac{p}{\rho} + \frac{u^2}{2}) + n_s m_s u_s F(e_s + \frac{u_s^2}{2})}{\partial x} = 0, \quad (3)$$

$$\frac{\partial(\rho \gamma_i + n_s m_s \gamma_{is})F}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u \gamma_i + n_s m_s u_s \gamma_{is})F}{\partial x} = F W_i, \quad i = 1, \dots, N \quad (4)$$

$$\frac{\partial n_s F}{\partial t} + \frac{\partial n_s u_s F}{\partial x} = 0, \quad (5)$$

$$\frac{\partial n_s F m_{si}}{\partial t} + \frac{\partial n_s u_s F m_{si}}{\partial x} = F n_s \dot{m}_{si} = F W_i \mu_i, \quad i = N+1, \dots, N+N_s, \quad (6)$$

$$\frac{\partial n_s u_s m_s F}{\partial t} + \frac{\partial n_s u_s^2 m_s F}{\partial x} = n_s F (\dot{u}_s m_s + m_s \dot{u}_s), \quad (7)$$

$$\frac{\partial n_s m_s e_s F}{\partial t} + \frac{\partial n_s m_s u_s e_s F}{\partial x} = n_s F (\dot{e}_s m_s + e_s \dot{m}_s), \quad (8)$$

$$m_s = \sum_{i=N+1}^{N_s} m_{si}, \quad m_{si} = m_s \gamma_{is} \mu_i$$

Здесь $\rho, u, p, e, \gamma_i, \mu_i$ - плотность, скорость, давление, внутренняя энергия, мольно-массовые концентрации и молекулярный вес компонентов; $F=F(x)$ - площадь канала; $n_s, u_s, m_s, e_s, \gamma_{is}, m_{si}$ - число частиц в единице объема, скорость, масса, внутренняя энергия частиц, число молей i -ого вещества в килограмме массы частицы, масса i -ого вещества в частице соответственно; $\dot{m}_s, \dot{u}_s, \dot{e}_s, \dot{m}_{si}$ - выражения, описывающие скорость изменения массы, скорости, внутренней энергии, массы i -ого вещества в частице соответственно; W_i - число молей i -ого вещества, образующегося в единице объема в единицу времени за счет протекания химических реакций и фазовых переходов. В системе уравнений (1)-(8) в список веществ в газовой фазе могут входить конденсированные компоненты. Вещества, входящие в состав дисперсной частицы, для удобства будем нумеровать индексами $N+1, \dots, N+N_s$.

Уравнения (4) и (6) описывают кинетику химических и фазовых превращений, в которых выражения для W_i получаются по обычным правилам химической кинетики. Также рассматривается два предельных случая протекания газофазных химических реакций - случай "замороженных" реакций, когда полагают: $W_i = 0, \quad i = 1, \dots, N$, а γ_i находят из уравнений (4) и случай "равновесного" протекания реакций. В последнем случае полагают, что реакции протекают настолько быстро, что химическое равновесие в реагирующем газе успевает установиться в каждый текущий момент времени. В условиях химического равновесия концентрации химических компонентов удовлетворяют уравнениям материального баланса и условию: $W_i(p, T, \gamma) = 0, i = 1, \dots, N$

Наряду с областями плавного изменения параметров двухфазного потока в поле течения могут существовать сравнительно тонкие зоны резкого изменения параметров газа, которые обычно аппроксимируют поверхностями разрыва. Примерами таких зон могут служить контактные разрывы (КР) и ударные волны (УВ). На поверхностях разрыва выполняются соотношения типа Ренкина-Гюгонио

$$[\rho(D-u)] = 0; \quad [P + \rho(D-u)^2] = 0; \quad [(D-u)(e + \frac{p}{\rho} + \frac{(D-u)^2}{2})] = 0; \quad (9)$$

$$[u_s] = 0, \quad [e_s] = 0, \quad [m_s] = 0$$

Квадратные скобки означают разность между значениями, заключенных в них, комплексов, перед и за разрывом, т.е. они являются непрерывными на разрывах. Контактный разрыв характеризуется дополнительным соотношением: $[D-u] = 0$, следовательно, на контактном разрыве: $[u] = 0, \quad [p] = 0$. В случае ударной волны соотношения дополняются условиями непрерывности концентраций компонентов: $[\gamma_i] = 0, i = 1, \dots, N$. На граничных траекториях частиц, отделяющих зону, занятую

чистым газом, от газодисперсной смеси, параметры, характеризующие газовую фазу, непрерывны, а число частиц в единице объема n_s , терпит разрыв (равно нулю в точке со стороны чистого газа).

Для замыкания системы уравнений используют термические и калорические уравнения состояния, вид которых определяется используемой моделью термодинамических свойств веществ, а именно заданием вида потенциала Гиббса для всех используемых газообразных, жидких и твердых компонентов. Уравнения состояния в этом случае получаются в результате дифференцирования потенциала Гиббса по давлению и температуре.

$$e = e(P, T, \gamma); \quad \rho = \rho(P, T, \gamma); \quad e_s = e_s(P, T, \gamma); \quad \rho_s = \rho_s(P, T, \gamma). \quad (10)$$

В работе используется химическая кинетика общего вида. Механизм химических реакций и фазовых переходов при участии, в том числе, и жидких компонентов, может быть записан в следующем виде:

$$\sum_{i=1}^{N+N_s} \bar{v}_i^{(r)} M_i \xrightleftharpoons[\bar{w}^{(r)}]{\bar{w}^{(r)}} \sum_{i=1}^{N+N_s} \bar{v}_i^{(r)} M_i, \quad r = 1, \dots, N_r + N_{rs}. \quad \text{Здесь } \bar{v}_i^{(r)} \text{ - стехиометрические}$$

коэффициенты, M_i - символ молекулы i -ого вещества. Число молей i -ого вещества, образующегося в единицу времени в единице объема смеси, записывается традиционным образом $W_i = \sum_{r=1}^{N_r+N_{rs}} (\bar{v}_i^{(r)} - \bar{v}_i^{(r)}) (\bar{W}^{(r)} - \bar{W}^{(r)})$. В случае реакций на поверхности частиц и фазовых переходов ($r = N_r + 1, \dots, N_r + N_{rs}$) выполняется соотношение

$$W_i = \dot{m}_i^r n_s \frac{1}{\mu_i} = (\bar{v}_i^{(r)} - \bar{v}_i^{(r)}) (\bar{W}^{(r)} - \bar{W}^{(r)}), \quad \dot{m}_i = \sum_{r=N_r}^{N_r+N_{rs}} \dot{m}_i^r$$

В работе используется термодинамический подход, согласно которому решаемая система уравнений должна обеспечивать непрерывный переход рассматриваемых процессов из неравновесного состояния в состояние термодинамического равновесия. Для описания межфазного обмена импульсом и тепломассообмена в континуальном режиме используется два подхода. Первый - предложенный Франк-Каменецким, в рамках которого эффекты, связанные с изменением температуры, концентраций, а, следовательно, и всех теплофизических свойств газа поперек условного пограничного слоя капли, учитываются приближенно. Для этой цели, в частности, используются средневзвешенные значения температуры, концентраций и других параметров, которые выражаются через их же значения у поверхности капли и в набегающем потоке. Второй - кинетический, в рамках которого для определения скорости межфазного массообмена используются полуэмпирические формулы, подбираемые из условий согласия с экспериментальными данными. Особенностью применяемой модели является то, что частица считается многокомпонентной, и из уравнения энергии для частиц находится её энтальпия (H_s). При наличии химических реакций уравнение для нахождения температуры частицы имеет вид:

$$\frac{dm_s H_s}{dt} = Q + \sum_{r=N_r}^{N_r+N_{rs}} \sum_{i=1}^N (\bar{v}_i^{(r)} - \bar{v}_i^{(r)}) (\bar{W}^{(r)} - \bar{W}^{(r)}) \frac{H_i}{n_s} H_i(T_s), \quad \text{здесь } Q \text{ - тепловой поток за счет}$$

разности температур газа и частиц, второй комплекс описывает изменение энтальпии за счет поверхностных реакций и реакций испарения-конденсации. В процессе теплообмена материалы, входящие в состав частицы, могут переходить из твердого агрегатного состояния в жидкое и обратно. В работе считается, что процессы плавления и кристаллизации протекают равновесно. В этом случае суммарная энтальпия частиц

может быть записана в виде: $H_s(T) = \sum_{i=1}^{N_s} (\gamma_i^s H_i^s(T) + \gamma_i^l H_i^l(T))$. Здесь верхние индексы относятся “s” к твердой и “l” к жидкой фазам, при этом содержание i -ого компонента в частице равно сумме соответствующих концентраций: $\gamma_i = \gamma_i^s + \gamma_i^l = \frac{m_{si}}{m_s \mu_i}$. Также в первой главе приводятся система уравнений (1)-(9), записанная в характеристической форме, и используемые в работе одномерные модели течений.

Во второй главе представлены используемые в работе методы решения задач расчета термодинамического равновесия и кинетики химических реакций. В частности, приводятся разработанные алгоритмы расчета термодинамического равновесия, основанные на нахождении безусловного и условного минимума функционалов, параметрами в котором являются величины, имеющие физический смысл приведенного химического потенциала атомарных компонент Z_k , $k=1, 2, \dots, N_e$. В этом случае при расчете всех задач термодинамического равновесия всегда используется система уравнений, включающая законы сохранения элементарного состава и условие электронейтральности

$\sum_{i=1}^N A_k^i \gamma_i = \gamma_k^0$, $k=1, \dots, N_e - 1$, $\sum_{i=1}^N A_{N_e}^i \gamma_i = 0$, а также условия химического равновесия $\varphi_i = \sum_{K=1}^N A_K^i Z_K$, $i=1, \dots, N$ (φ_i - химический потенциал i -ого компонента).

Разработанные методики расчетов позволяют определить равновесные концентрации (и частные производные от них по термодинамическим параметрам), в том числе и при наличии конденсированной фазы. Приводятся результаты апробации оригинальных вычислительных моделей, позволяющих рассчитывать состояние термодинамического равновесия смесей произвольного фиксированного элементного состава при заданных плотности и температуре, плотности и внутренней энергии, давление и температуре, давлении и энтальпии, плотности и энтропии, на равновесной ударной адиабаты.

Разработанные алгоритмы и программные коды позволили построить алгоритм численного решения задачи о распаде произвольного разрыва в многокомпонентных средах с произвольными термодинамически допустимыми уравнениями состояния. Для смеси совершенных газов задача о распаде разрыва решена для случаев “замороженных”, “равновесных” и “равновесно-замороженного” течений. Пусть в начальный момент $t=0$ левое полупространство $X < 0$ характеризуется параметрами $u_L, P_L, T_L, \gamma_{L,i}, i=1, N$, а правое - $X > 0$, $u_\Pi, P_\Pi, T_\Pi, \gamma_{\Pi,i}, i=1, N$. Задача о распаде разрыва, как известно, сводится к решению нелинейного уравнения относительно давления на контактном разрыве:

$$F(P) = u_\Pi - u_L + f(p, p_L) + f(p, p_\Pi) = 0, \quad (11)$$

$$f(p, p_M) = \begin{cases} p < p_M : \int_{p_M}^p \frac{dp}{\rho a}, & S(p, T, \vec{\gamma}) = S_M \\ p > p_M : \sqrt{\left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_M}\right)(p - p_M)}, & e - e_M - \frac{1}{2}(p + p_M)\left(\frac{1}{\rho_M} - \frac{1}{\rho}\right) = 0 \end{cases}, M = L, \Pi \quad (12)$$

Если давление из (11), (12) найдено, то скорость газа на контактном разрыве может быть вычислена по формуле $u = \frac{1}{2}(u_\Pi + u_L - f(p, p_L) + f(p, p_\Pi))$, скорость ударной волны - $D = (\rho u - \rho_M u_M) / (\rho - \rho_M)$, скорость распространения крайней характеристики веера волн разрежения равна скорости звука относительно контактного разрыва.

Для нахождения плотности и скорости звука, входящих в подинтегральное выражение ($P < P_M$), которые являются функциями температуры, давления и концентраций химических компонент: $\rho = \rho(p, T, \vec{\gamma})$, $a = a(p, T, \vec{\gamma})$ используется условие изоэнтропичности. В равновесном случае концентрации можно рассматривать как неявно-заданные функции давления, температуры и элементного состава (они находятся из соответствующей задачи расчета термодинамического равновесия): $\gamma_i = \gamma_i(p, T, \vec{\gamma}_M)$. В случае $p > p_M$, вместо условия изоэнтропичности используется выражение для адиабаты Гюгонио. Уравнение (11) решается методом Ньютона, причем в случае наличия в конфигурации веера волн разрежения, интеграл, входящий в (12), на каждой итерации рассчитывается численно с контролем точности и уточнением по формуле Рунге-Ромберга. При этом для экономии вычислений интеграл вычисляется на участке значений давлений, полученных на текущей и предыдущей итерации. В случае "равновесно-замороженной" задачи концентрации перед ударной волной соответствуют начальному составу смеси газов, а за ударной волной удовлетворяют условиям термодинамического равновесия. При этом нелинейное уравнение (11) всегда имеет решение, однако, существует предельное давление, при котором решение имеет физический смысл. При давлении, меньшем предельного вычисленная скорость ударной волны будет превышать скорость звука относительно контактного разрыва, что в рассматриваемой газодинамической модели невозможно. Необходимо отметить, что равенство $D = u \pm a$, соответствует случаю распространения детонационной волны Чепмена-Жуге.

Для проверки работоспособности разработанного алгоритма была решена задача о распаде разрыва на границе "продукты сгорания горючей смеси водорода с кислородом"- "вода". Вода рассматривалась, как сжимаемая жидкость, свойства которой описываются известным выражением для потенциала Гиббса (Александров А.А., Григорьев Б.А., 1999), зависящим от 40 констант. В результате получены параметры, с которыми ударная волна распространяется в воде. Необходимо отметить, что решение задачи о распаде разрыва при одних и тех же начальных данных, но в различных постановках может приводить к существенно различным результатам. Так при моделировании распада разрыва в высокотемпературном воздухе при $u_L = u_{II} = 0$, $p_L = 10^4$ Па, $T_L = 300$ К, $p_{II} = 10^7$ Па, $T_{II} = 10000$ К. В случае, когда задача решалась с неизменным составом воздуха, было получено давление на КР – 1.18 МПа, температура слева от КР – 4951 К, справа – 6592 К. В случае, когда начальный состав слева и справа брался равновесным, и считалось, что он при переходе через веер волн разрежения и ударную волну не меняется, то соответствующие значения были равны: 1.39 МПа, 5727 К, 5669 К. В случае, когда состав считался всюду равновесным - 1.59 МПа, 4590 К, 8199 К. Данный факт необходимо учитывать при разработке приближенных решателей задачи Римана для многомерного моделирования.

Также во второй главе приводится разработанный автором алгоритм решения прямой задачи теории сопла с переходом через скорость звука в случае, когда продукты сгорания являются смесью совершенных газов. В камере сгорания считается, что реализуется термодинамическое равновесие. При определении потерь удельного импульса в сопле, как правило, решается обратная задача, при этом используются разной степени обоснованности, методики восстановления зависимости давления или плотности от продольной координаты. Решение прямой задачи позволяет избежать этой процедуры. Для решения прямой задачи необходимо подобрать расход газа во входном сечении сопла, обеспечивающий при численном интегрировании равенство скорости газа скорости звука в некотором сечении в расширяющейся

части сопла. Необходимо отметить, что на каждой итерации подбора расхода надо корректировать параметры во входном сечении сопла – выбирать их удовлетворяющими условиям термодинамического равновесия. Предлагается следующий алгоритм решения прямой задачи. Для интегрирования уравнений одномерной газовой динамики используется высокоточный метод, основу которого составляет модифицированный метод У.Г.Пирумова для решения жестких систем релаксационных уравнений. С высокой точностью итерационным методом находится максимальное значение расхода, обеспечивающего дозвуковое течение в сопле, и ближайшее к нему решение, приводящее к запирианию потока. Необходимо отметить, что на длительном участке траектории данные решения практически совпадают. Тем не менее, на заключительном участке кривые содержат существенные отличия. Дозвуковое решение содержит точку, в которой производная от скорости по продольной координате равна нулю, а при запириании потока соответствующая производная стремится к бесконечности. Про искомое решение нам известно то, что скорость потока должна непрерывно возрастать. В работе предлагается в качестве решения выбирать кривую, начинающуюся с дозвуковой ветви решения, удовлетворяющую условию: $udu/dx = \text{const} = u_1'$. Причем точку схода с дозвуковой ветви решения (x_l) выбирать таким образом, чтобы при дальнейшем интегрировании выполнялось условие неубывания энтропии смеси. Переход на решение прямой задачи осуществлялся при выполнении условий

$$M > 1 \text{ и } \frac{1}{u\rho^2 h_T} \sum_{i=1}^N (\rho_{yi} h_T - h_{yi} \rho_T) W_i + \frac{F_x}{F} > 0 . \quad (13)$$

Здесь нижним индексом обозначена частная производная по соответствующему параметру. Рассматривалось течение, реализующееся в сопле ЖРД ($R_* = 0.0196$ м, $R_0/R_* = 2.5$, $X_*/R_* = 14.93$, $R_K/R_* = 23.65$, $X_K/R_* = 79$), работающем на несимметричном диметилгидразине и азотном тетраоксиде. Давление в КС $P_K = 10^7$ Па, коэффициент избытка окислителя - $\alpha = 0.9$. Химические процессы в продуктах сгорания моделировались кинетическим механизмом, включающим 14 обратимых реакций, в которых участвовали 12 компонентов H_2O , H_2 , N_2 , CO_2 , CO , OH , O_2 , NO , C , H , O , N .

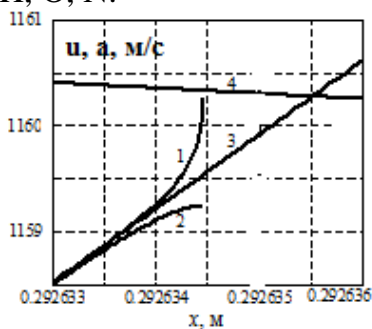


Рис. 1. Зависимость скорости (1-3) и скорости звука (4) от продольной координаты. 1 – режим запириания, 2 – дозвуковой режим течения, 3 – прохождение особой точки.

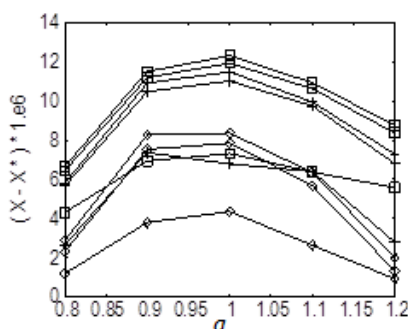


Рис. 2. Зависимость состояний от α . 1. $x_l x^*$; 2. достигалось значение $M = 1$. 3. $T. x_3 - x^*$, выполнения (12). Давление в камере сгорания: p_K , МПа: \diamond - 10, $+$ - 15, \square - 20.

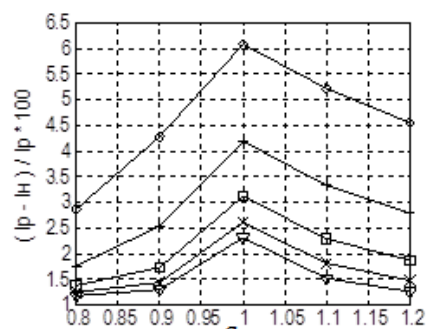


Рис. 3. Зависимость потерь удельного импульса на срезе сопла от α . Давление в камере сгорания: p_K , МПа: \diamond - 2, $+$ - 5, \square - 10, \times - 15, ∇ - 20.

На рис. 1 показывается прохождение особой точки. Число Маха, при котором происходил переход на решение обратной задачи, составляло 0.9985, расстояние, на

котором решалась обратная задача, в зависимости от P_K и α варьировалось в пределах $3-4 \cdot 10^{-6}$ м (рис. 2). На рис. 3 приведены рассчитанные потери удельного импульса, которые согласуются со справочными данными. Для верификации полученных результатов было проведено численное решение обратной задачи теории сопла (которое не содержит особенностей) с распределением давления, полученным в результате решения прямой задачи. Решения обеих задач совпали.

По материалам второй главы автором зарегистрированы 6 программ для ЭВМ.

В третьей главе диссертации описывается разработанный автором сеточно-характеристический метод, позволяющий рассчитывать квазиодномерные нестационарные многофазные течения с явным выделением произвольного числа взаимодействующих линий разрывов параметров течения. Используемые сеточные линии (расчетные точки) относятся к одному из следующих типов: траектория газа (ТГ); траектория частиц (ТЧ); фиксированная точка (ФТ); ударная волна (УВ); контактный разрыв (КР); граничная траектория частиц (ГТЧ); характеристика семейства $C+$ (ТХ+); характеристика семейства $C-$ (ТХ-); разрывная характеристика (РХ+, РХ-); твердая стенка (ТС), может быть как неподвижная, так и подвижная; левая (ЛГ) и правая (ПГ) границы расчетной области (могут быть как неподвижные, так и подвижные).

Приведем основные особенности предлагаемого алгоритма:

- расчетная точка характеризуется набором параметров, а именно: уникальный номер, тип точки, координата, скорость движения расчетной точки, скорость, давление, температура газа, тип газа, вектор мольно-массовых концентраций компонент, вычисляемые параметры поля газа (плотность, скорость звука, правые части, входящие в характеристические соотношения, и др.), признак нахождения в области, занятой частицами, число траекторий частиц для каждой траектории: тип вещества частиц; скорость; энтальпия; число частиц в единице объема; концентрации веществ, входящих в состав частицы; вычисляемые параметры поля частиц (температура, правые части, входящие в характеристические соотношения и др.);
- ударной волне, контактному разрыву, граничной траектории частиц соответствуют две расчетные точки, имеющие одинаковые координаты и скорости движения, но различный набор параметров;
- расчет ведется маршевым сеточно-характеристическим методом по слоям $t = \text{const}$. Параметры потока в точке определяются итерационно до достижения некоторой, наперед заданной точности. Если за максимально допустимое число итераций сходимость не достигается, то шаг по времени уменьшается;
- рассматриваемая область течения условно делится на подобласти непрерывности, границами которых являются линии разрывов параметров течения, а также левая и правая границы расчетной области. При расчете внутренней точки, принадлежащей подобласти непрерывности, используются точки, находящиеся только внутри этой подобласти;
- в случае обнаружения пересечения сеточных линий расчет слоя осуществляется с переменным шагом по времени. При этом шаг интегрирования на каждой итерации выбирается так, чтобы точка пересечения лежала на рассчитываемом слое. После расчета слоя происходит обработка пересечения в зависимости от его типа по специальному алгоритму;
- алгоритм расчета слоя устроен так, что внутри него осуществляется разделение на физические процессы, такие как определение параметров "чистого" газа, расчет концентраций химических компонент, определение параметров диспергированной фазы, вычисление коэффициентов, учитывающих взаимное влияние процессов;
- в зависимости от специфики решаемой задачи число расчетных точек может меняться в процессе численного моделирования, причем как увеличиваться, так и уменьшаться, при этом число узлов может быть скорректировано только после полного расчета слоя.

Процедура расчета одного временного слоя представляется в виде следующих этапов:

1. Определение шага интегрирования из условия устойчивости и контроля аппроксимации. Сравнение времени рассчитанного слоя с временем смены граничных условий. Если оно оказывается больше, то шаг интегрирования уменьшается, и устанавливается признак смены граничных условий.
2. Определение координат подвижных узлов на новом слое. Анализируется наличие пересечений сеточных линий между собой. Если пересечение имело место, то время ближайшего пересечения становится временем нового слоя, и пересчитывается шаг интегрирования.
3. Расчет параметров газа. Делается две итерации (в начале расчета слоя, далее одна итерация) по всем разрывам и внутренним точкам при фиксированных концентрациях химических компонент и параметрах частиц.
4. Расчет концентраций химических компонент и температуры смеси. Делается две итерации по всем разрывам и внутренним точкам при фиксированных параметрах газа и частиц.
5. Расчет параметров частиц на траекториях, а также на поверхностях разрыва, которые находятся внутри области распространения частиц. Делается две итерации при фиксированных параметрах газа и концентрациях химических компонент.
6. Вычисление комплексов, учитывающих взаимное влияние процессов "газ" - "химия" - "частицы".
7. Контроль точности. Если во всех точках разностной сетки заданная точность достигнута, то осуществляется переход к пункту 8, а если хотя бы в одной не достигнута - то делается еще одна итерация, т. е. осуществляется возврат к пункту 2.
8. Выполняется, если имело место пересечение сеточных линий (см. п. 2). Осуществляется обработка пересечения, вид которой зависит от типов пересекающихся линий (например, если произошло пересечение двух ударных волн, то решается задача Римана).
9. Выполняется, если был установлен признак смены граничных условий в п.1. Происходит пересчет параметров течения на границе, и меняется тип граничного условия.
11. Переход к расчету нового временного слоя.

При расчете параметров частиц в фиксированной точке пространства учитывается случай, когда расчетная точка попадает в область многозначности параметров частиц (рис. 4). То есть одной точке пространства может соответствовать либо одна (A^1B^1 , A^3B^3), либо две, либо три (A^2B^2 , A^2B , $A^2Г$) траектории частиц (вообще говоря, произвольное число траекторий частиц в случае наложения складок). Под складкой в работе понимается ситуация когда частицы, упорядоченные в начальный момент времени, в процессе расчета меняют порядок расположения (иначе говоря, траектории частиц пересекаются, при этом столкновений между частицами не происходит). На рис. 4. приведена ситуация, когда в процессе движения частица номер 6 обогнала частицы с номерами 7-11, частица 5 обогнала частицы с номерами 7-10 и т.д. При этом порядок в расположении частиц 1-6 и 9-12 не нарушился, а для частиц 6-9 поменялся на противоположенный. Таким образом, в точке пространства, где в данный момент находится частица 5, находятся частицы, которые были в начальный момент между частицами 1-6, 6-9 и 9-12. При этом они имеют различные, характеризующие их параметры. Данный факт учитывается при расчете комплексов, описывающих взаимное влияние фаз. Соответственно, при расчете точки с координатой A^2 , необходимо рассчитать три траектории частиц A^2B^2 , A^2B , $A^2Г$.

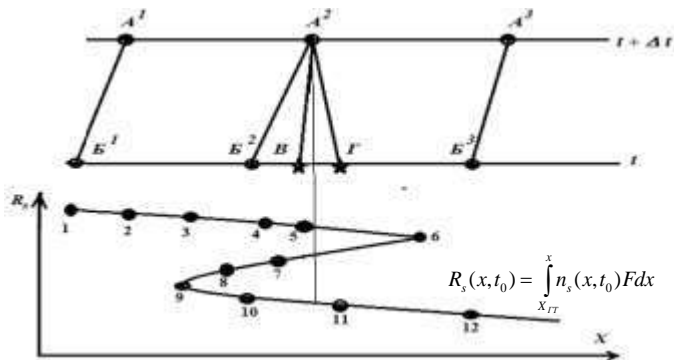


Рис.4. Особенности расчета траектории частиц

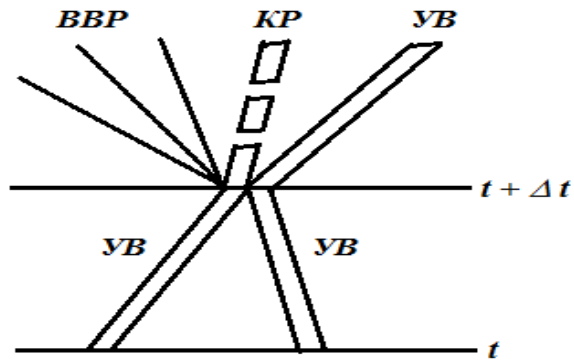


Рис. 5. Взаимодействие разрывов

На рис. 5 приведен случай взаимодействия двух ударных волн. Тогда после расчета временного слоя решается задача Римана с начальными параметрами слева – значения слева от левой УВ, справа – значения с права от правой ударной волны в момент времени $t + \Delta t$. В результате определялись начальные параметры образованных ударной волны, контактного разрыва и характеристик, образующих веер волн разрежения, которые становятся новыми сеточными линиями, начиная с момента времени $t + \Delta t$. Число образованных характеристик зависит от перепада давления в веере волн разрежения. Приведем таблицу всех учитываемых взаимодействий. Знаком “-” отмечены физически недопустимые взаимодействия, обнаружение которых в процессе расчета говорит о потере аппроксимации и необходимости корректировать расчетную сетку.

Таблица. 1. Взаимодействия между сеточными линиями.

№	линия	С П Р А В А														
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
	УВ+	+PP	+PP	+PP	+У,ПХ	+П	+П	+П	+П	+П	+П	+П	-	+О	-	+У,ОХ
	УВ-	-	+PP	-	-	+ОХ	-	+П	-	-	-	+П	-	-	-	+У
	КР	-	+PP	-	-	+П	-	+П	+П	+П	+П	+П	-	-	-	+У,ОХ
	ХС+	+ОХ	+П	+П,ОХ	-ЗУВ	+П	+П	+П	+П	+П	+П	+П	+П,ОХ	-	-	+У,ОХ
	ХС-	-	+У,ПХ	-ЗУВ	-	-ЗУВ	-ЗУВ	+П	+П	-	-	-	+ОХ	-	-	+У
С Л Е В А	ПГ	-	+П	-	-	+П	-	+П	+П	+П	+П	+П	-	-	-	+У
	ФТ	+П	+П	+П	+П	+П	+П	-	+П	+П	+П	-	-	-	-	-
	ГЧ	-	+П	+П	-	+П	+П	+П	+С	-	+ПС	+С	-	+У	-	+У
	ЛГТЧ	+П	+П	+П	+П	+П	+П	+П	+ПС	-	-	+ПС	-	+У	-	+У
	ПГТЧ	+П	+П	+П	+П	+П	+П	+П	-	-	-	+ПС	-	+У,В	-	+У
	СПЧ	+П	+П	+П	+П	+П	+П	-	+С	-	-	-	-	-	-	-
	ЛС	-	+О	-	-	+ОХ	-	-	+У	+У,В	+У	-	-	-	-	+У
	ПС	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	ЛСГ	+У	+У,ОХ	+У,ОХ	+У	+У,ОХ	+У	-	+У	+У	+У	-	-	+У	-	-
	ПСГ	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

PP – “распад произвольного разрыва”; П – “переброска параметров”; ПХ - “переброска параметров” с изменением семейства характеристики; О – отражение УВ от стенки; ОХ – отражение характеристики с изменением семейства; У – удаление сеточной линии; ЗУВ – зарождение УВ; С – складка или сборка в поле частиц; ПС - “складка или сборка в поле частиц с участием граничной траектории; В – выпадение частиц на стенку.

В разделе приводятся результаты тестирования разработанного сеточно-характеристического метода на задачах, имеющих аналитическое решение: задача о распаде произвольного разрыва, задача о снаряде с противодавлением, в которой перед снарядом образуется висячий скачек, задаче о сильном взрыве и др. Приводятся результаты сравнения с экспериментальными данными циклограммы процесса холодного пуска ГПВРД (Котов М.А. и др, 2015, рис. 6, 7). Важно отметить, что наблюдаемая в экспериментах отраженная УВ является результатом серии отражений и взаимодействий с КР, а не чистым отражением от стенки, что необходимо учитывать при анализе экспериментальных данных. Разработанная методика численного моделирования позволяет наглядно исследовать такие эффекты. Причем

наблюдается не только качественное, но и количественное соответствие результатов численных расчетов экспериментальным данным (рис. 6).

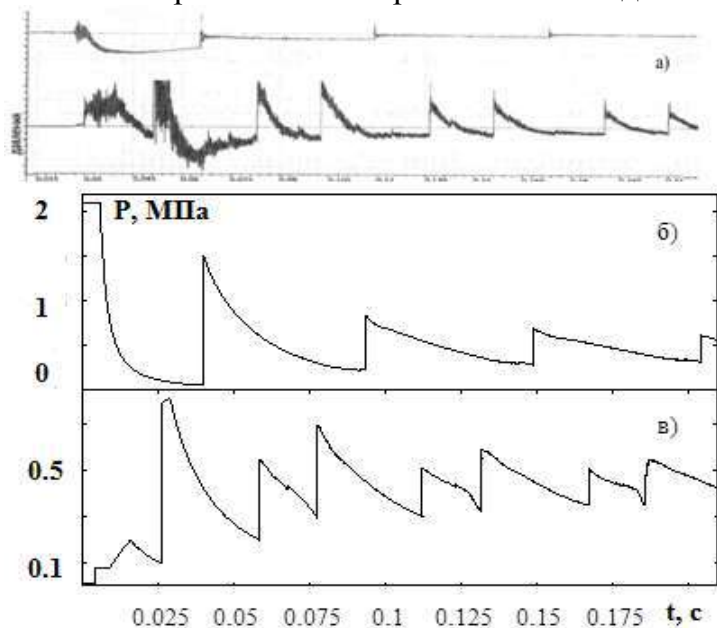
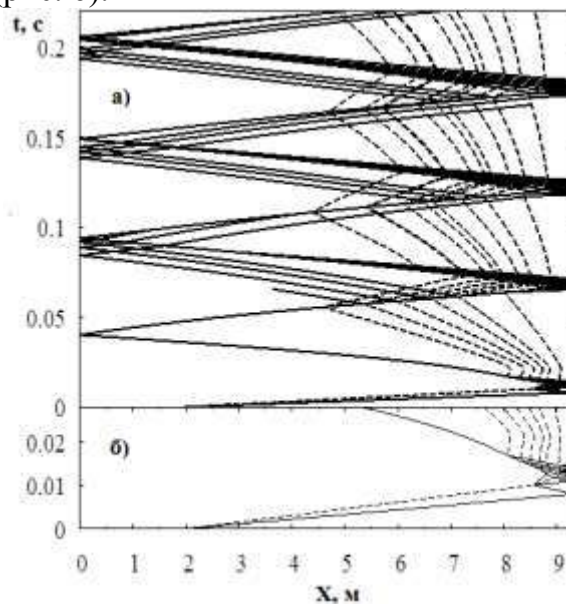


Рис. 6. Сравнение расчетов (б, в) с экспериментом (а) по показаниям датчиков давления.



Также приводятся результаты сравнения рассчитанных задержек времени воспламенения в ударной трубе за падающей ударной волной с измеренными. С целью отработки различных типов граничных условий, приводится расчет двух циклов двухфазного течения в установке детонационно-газового напыления. Один цикл, который включает стадии продувки канала ствола, заполнения канала горючей смесью, воспламенения и истечения продуктов сгорания и напыляемых частиц, а также стадию заполнения канала частицами.

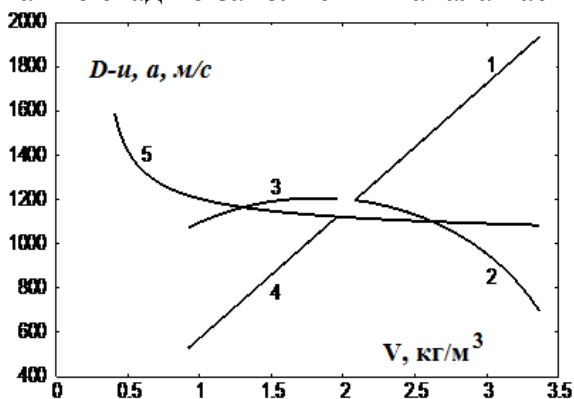


Рис. 8. Зависимость скорости (1, 4) и скорости звука (2,3) от удельного объема при слабой и сильной детонации (1, 2 – слабая детонация – $v_{ЧЖ} = 1934.87$ м/с, 3, 4 – сильная детонация – $v_{ЧЖ} = 1928.76$ м/с, 5 – изменение равновесной скорости звука вдоль равновесной адиабаты ($T_0 = 950$ К, $p_0 = 101325$ Па, $0.4 H_2 + 0.2 O_2 + 0.4 Ar$).

В четвертой главе приводятся результаты моделирования детонации. В разделе 4.1 рассматривается детонация предварительно перемешанных газовых горючих смесей, приводятся алгоритмы расчета неравновесных течений многокомпонентного газа, химические реакции в котором моделируются многостадийными кинетическими механизмами с обратимыми реакциями, эффекты вязкости теплопроводности и диффузии не учитываются. Рассмотрены случаи сильной и слабой детонации и дефлаграции. Показано, что равновесная адиабата представляет из себя множество точек достижимости таких течений. Причем верхняя ветвь равновесной ударной адиабаты соответствует расчету неравновесного течения за ударной волной, а нижняя самовоспламенению горючей смеси. В частности, показано, что из-за несовпадения значений замороженной и равновесной скоростей звука при самовоспламе-

нении горючей смеси в рассматриваемой постановке, достичь точку детонации Чепмена-Жуге невозможно (рис. 8).

В разделе 4.1.2 приводится решение в одномерной постановке задачи о стационарной детонационной волне в канале переменного сечения со сверхзвуковым потоком на входе и выходе для случая, когда горючая смесь и продукты сгорания представляют собой смесь совершенных газов. Течение до детонационной волны считается “замороженным”, а за детонационной волной “равновесным”. При сделанных предположениях рассчитываемые параметры течения зависят исключительно от отношения текущего радиуса к начальному. Основу алгоритма поиска решения задачи составляет свойство сохранения энтропии в замороженном и равновесном течении. Соответственно энтропия до детонационной волны имеет одно значение, а на детонационной волне увеличивается скачком и далее остается неизменной. Если параметры течения во входном сечении сопла заданы, то из условия, что в критическом сечении сопла скорость равна скорости звука (а) и, что в нем течение химически равновесное, может быть вычислена энтропия в критическом сечении. Координата детонационной волны в канале подбирается из условия равенства энтропии за детонационной волной энтропии в критическом сечении. Если такой ДВ не существует, то ищется значение R/R_0 , в котором при условии равновесного течения и равенства скорости газа скорости звука вычисленное значение скорости потока перед детонационной волной равно замороженной скорости потока. В этом случае справа от критики реализуется волна Чепмена-Жуге, и далее равновесный поток имеет возможность разогнаться до сверхзвуковых скоростей. Необходимо отметить, что детонационная волна Чепмена-Жуге может реализовываться в сопле при радиусе сопла, превышающем начальный.

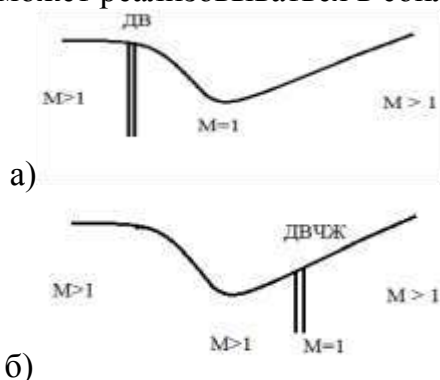


Рис. 9. Постановка задачи. Схематичное расположение стационарной ДВ в сужающейся (а) и расширяющейся (б) частях канала

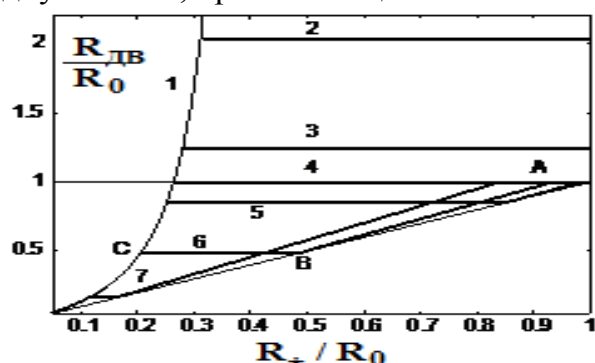


Рис. 10. RR-диаграмма ($p_0=101325$ Па, $T_0=400$ К, 1 – безразмерный радиус запырания течения; 2 - $u_0 = 1800$ м/с, 3 – 1900 м/с, 4 – 1955.1 м/с (детонация Чепмена-Жуге); 5 – 2000 м/с; 6 – 2200 м/с; 7 - 2800 м/с)

Рассмотрим стехиометрическую водородо-воздушную горючую смесь при заданных давлении и температуре, втекает в канал (рис. 9-10) со сверхзвуковой скоростью u_0 . Продукты сгорания включают 13 компонентов (H_2O , H_2 , N_2 , OH , O_2 , O_3 , HO_2 , H_2O_2 , NO , Ar , H , O , N). Для параметров на входе в сопло в предположении о термодинамическом равновесии и равенстве скорости потока скорости звука, может быть вычислена скорость детонации Чепмена-Жуге - $u_{чж}$, если скорость u_0 не больше чем $u_{чж}$, то решение возможно только справа от критики (линии 2, 3, 4). Рассмотрим случай, когда u_0 больше чем $u_{чж}$ на примере кривой АВС, помеченной цифрой 6. ($u_0=2200$ м/с). Если отношение радиуса критического сечения к начальному $R_* / R_0 > 0.92$ (правее т. А, рис. 10), то решение рассматриваемой задачи отсутствует

(звуковое течение в критическом сечении требует большей энтропии, чем может быть достигнута в ДВ). Участок АВ кривой 6 (рис. 9) соответствует пересжатой ДВ в расположенной слева от критического сечения канала в точке соответствующей $R_{ДВ} / R_0$, точка В отвечает режиму ЧЖ в критическом сечении $R_{ДВ} / R_0 = R_* / R_0 \approx 0.5$. При дальнейшем уменьшении критического радиуса сопла ДВ ЧЖ находится в расширяющейся части канала, при этом $R_{ДВ} / R_0 \approx 0.5$, точка С соответствует $R_* / R_0 \approx 0.2$, при $R_* / R_0 < 0.2$ происходит запираание потока. Необходимо отметить, что для корректности используемой модели температура потока перед ДВ должна быть ниже температуры самовоспламенения горючей смеси.

Полученное решение соответствует каналу произвольной формы при предположении, что он заканчивается соплом, в критическом сечении которого происходит переход через скорость звука, а слева от него радиус контура превышает радиус этого критического сечения. При этом пересжатая детонационная волна может находиться в любой точке слева от критики, в которой относительный радиус контура равен $R_{ДВ} / R_0$. В работах В.А.Левина, В.В.Маркова, И.С.Мануйловича, выполненных в рамках модели с постоянным тепловыделением в ДВ, показано, что детонационная волна устойчива в расширяющемся канале и неустойчива в сужающемся.

В разделе 4.1.3 рассмотрена задача о распаде разрыва в детонирующем газе. В начале, данная задача рассмотрена в описанной выше “равновесно-замороженной постановке”. Численно решается задача о распаде разрыва на границе, слева – гелий (He), находящийся под высоким давлением; справа - горючая смесь 8%(O₂+H₂)+92%Ar. При численном моделировании считается, что в состав продуктов сгорания входят 10 компонентов, а именно - H₂, OH, H₂O, O₂, O₃, HO₂, H₂O₂, H, O, Ar. Показано, что зависимость решения от абсолютного значения давления начинает проявляться только при начальном перепаде $p_{II} / p_I > 100$. Далее задача о распаде разрыва решалась в неравновесной нестационарной постановке. Численное моделирование проводилось оригинальным сеточно-характеристическим методом, описанным выше, с явным выделением всех образующихся разрывов. Для описания химических превращений использовались многостадийные кинетические механизмы. Рассмотрены распад разрыва на границе: гелий – стехиометрическая смесь водорода с кислородом; гелий – стехиометрическая смесь водорода с воздухом; гелий – смесь метана с воздухом, гелий - 8%(O₂+H₂)+92%Ar. В результате распада разрыва по горючей смеси распространялась УВ, по инертному газу – веер волн разрежения, отделял горючую смесь от инертного газа контактный разрыв, распространяющийся вслед за УВ. Во всех расчетах наблюдалась качественно похожая картина течения. Горючая смесь воспламенялась у контактного разрыва, возникала волна горения, которая переходила в пересжатую детонационную волна, которая распространялась вслед за ударной волной. Догоняла ее, в результате взаимодействия образовывалась пересжатая детонационная волна, которая распространялась по исходной горючей смеси. При этом интенсивность детонационной волны падала. Необходимо отметить, что в смесях, близких к стехиометрическим, наблюдались колебания скорости фронта головной ударной волны, имеющие как сеточную природу, так и физическую, связанную с неустойчивостью фронта детонационной волны. При моделировании течения сильно разбавленной аргоном смеси водорода с кислородом, с различными начальными давлениями, но с одинаковым перепадом давлений были получены решения, в которых скорость головной ударной волны стремилась к постоянному значению (кривые 1-5, рис. 11). Причем значение, к которому она стремились, было равно скорости пересжатой детонационной волны, полученной при решении

автомодельной задачи о распаде произвольного разрыва в детонирующем газе (кривая 6, рис.11а) с теми же начальными данными. Значения температур также близки (рис. 11б). В результате проведенных расчетов можно сделать вывод, что пока возмущения от левого закрытого конца канала не догонят детонационную волну, то начиная с некоторого расстояния от координаты распада разрыва, она движется в плоском канале в стационарном пересжатом режиме.

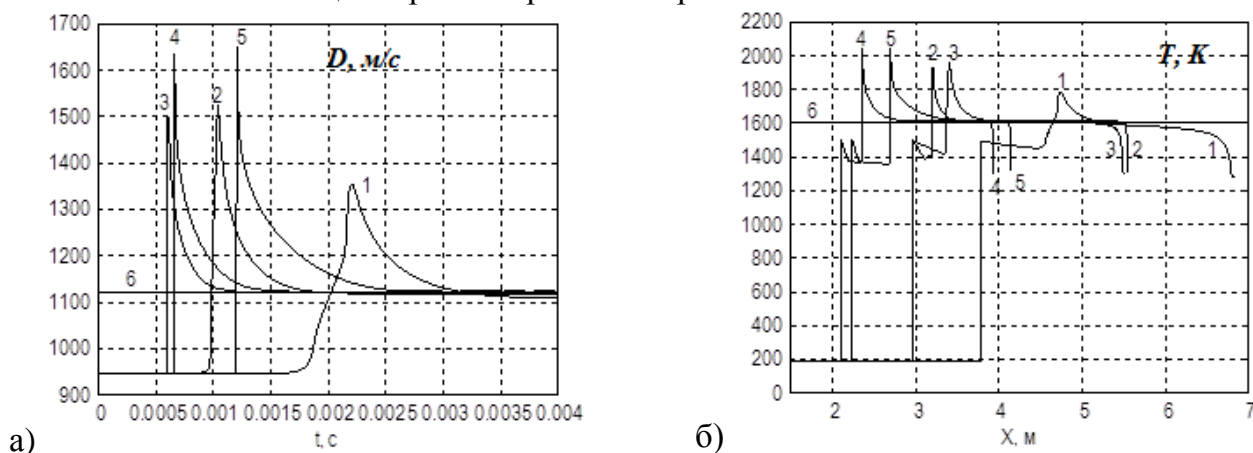
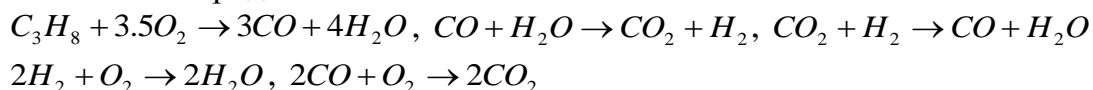


Рис. 11. Распределение параметров в зависимости от начального давления:

а) Зависимость скорости УВ от времени; б) Распределение температуры после выхода детонационной волны на режим распространения, близкий к стационарному. 1- $p_0=6079.5$ Па, 2- $p_0=12159$ Па, 3- $p_0=24318$ Па, 4- $p_0=36477$ Па, 5- $p_0=42556.5$ Па, 6- равновесный распад разрыва $p_1/p_0=32.9$.

В разделе 4.1.4 приводятся результаты сравнения расчетов, выполненных по развиваемым автором моделям с результатами экспериментальных исследований, выполненных В.А.Павловым в НИИ Механики МГУ. Моделирование экспериментов проводилось в двух постановках. По нестационарной методике (автором предложен способ подбора давления слева от начального разрыва), описанной в главе 3, и стационарной постановке, в соответствии с которой предполагалось, что по горючей смеси распространяется стационарная ударная волна со скоростью, измеренной в экспериментах. Результаты сравнения измеренных и рассчитанных значений времени задержки воспламенения близки при температурах за УВ более 950 К.

В разделе 4.1.5. предложен метод анализа глобальных кинетических механизмов на возможность моделирования с их помощью детонации. При моделировании течений с использованием упрощенных кинетических механизмов с ограниченным списком веществ получаемые с их использованием параметры детонации могут быть предсказаны до проведения многомерного моделирования путем решения модельных задач. Первая задача, которую необходимо решить, это рассчитать детонационную адиабату и параметры детонации Чепмена-Жуге. Данные параметры не должны зависеть от кинетики химических реакций, а являться функцией исключительно начального состояния и термодинамических свойств фигурирующих в них веществ. Вторая модельная задача – это задача о стационарной детонационной волне, которая позволяет получить задержку воспламенения в детонационной волне и, как следствие, сформировать представление о том, какой размер ячеек разностной сетки должен использоваться, чтобы разрешать структуру детонационных волн. Рассмотрим часто используемый при математическом моделировании брутто-механизм горения пропана в кислороде.



В механизме участвуют 6 веществ: $C_3H_8, O_2, CO, H_2O, CO_2, H_2$. При моделировании горения пропана с использованием детальных кинетических механизмов список веществ, входящих в состав продуктов сгорания, существенно шире и включает, например, 15 компонентов: $C_3H_8, O_2, CO, CO_2, H_2, H_2O, CH_4, C_2H_2, C_2H_4, OH, C_2H_6, C^*$ - сажа, C, H, O . Рассмотрим влияние учитываемых компонент на параметры детонации Чепмена-Жуге. На рис. 12 приведены результаты сравнения с экспериментальными данными, рассчитанных значений скорости детонации Чепмена-Жуге для 6 и 15 веществ и соответствующие зависимости температуры. В окрестности стехиометрии скорость детонации Чепмена-Жуге, рассчитанная с сокращенным списком веществ выше на 100-150 м/с (5-7 %), по температуре - на 400-500 К (10-12 %), что может существенно сказаться при определении тепловых эффектов, связанных со сгоранием пропана в кислороде.

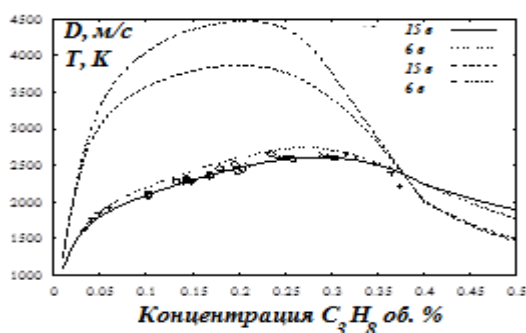


Рис. 12. Рассчитанные зависимости скорости детонации Чепмена – Жуге (нижние линии) и температуры (верхние линии) от мольной доли C_3H_8 в кислороде. Маркеры – экспериментальные данные ($p_0 = 101325$ Па, $T_0 = 293.15$ К).

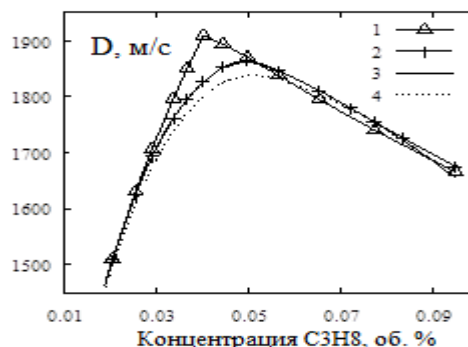


Рис. 13. Рассчитанные зависимости скорости детонации Чепмена – Жуге в зависимости от мольной доли C_3H_8 в воздухе (1 – необратимые химические реакции, 2 – обратимые, 3, 4 – равновесный расчет 7 и 18 веществ; $p_0 = 101325$ Па, $T_0 = 293.15$ К).

Также была рассмотрена горючая смесь пропана с воздухом при нормальных условиях. Стехиометрическое соотношение $x=0.04031$. В этом случае к сокращенному списку веществ добавляется N_2 , а к расширенному - NO, N_2, N . Отличие параметров детонации Чепмена-Жуге при моделировании с использованием сокращенного и расширенного набора веществ существенно ниже, чем для смеси пропан-кислород. Это связано с разбавлением горючей смеси азотом. Параметры детонации Чепмена-Жуге также могут быть получены в результате решения модельной задачи о стационарной детонационной волне с учетом неравновесного протекания химических реакций (рис.13). Использование механизма с необратимыми реакциями приводит к заметному завышению скорости детонации в окрестности стехиометрии.

В разделе 4.1.6 исследовались режимы распространения цилиндрической детонационной волны, образованной в результате распада разрыва на границе между “цилиндрическими камерами высокого давления” (КВД), заполненной гелием ($T_{квд} = 3000$ К), и низкого давления (КНД), заполненной стехиометрической водородно-воздушной смесью при нормальных условиях ($P_{кнд} = 101325$ Па, $T_{кнд} = 298.15$ К). Для описания химических превращений в горючей смеси использовались 8 обратимых химических реакций, в которых участвовали 7 компонентов: $H_2, OH, H_2O, O_2, N_2, H, O$. В начальный момент времени происходит распад разрыва при $x = 0.1$ м. Влево распространяется веер волн разрежения, вправо – ударная волна (УВ). Горючая смесь воспламеняется справа от контактного разрыва, образуется волна горения, которая

догоняет головную УВ и взаимодействует с ней. В результате образуется пересжатая детонационная волна, распространяющаяся по горючей смеси.

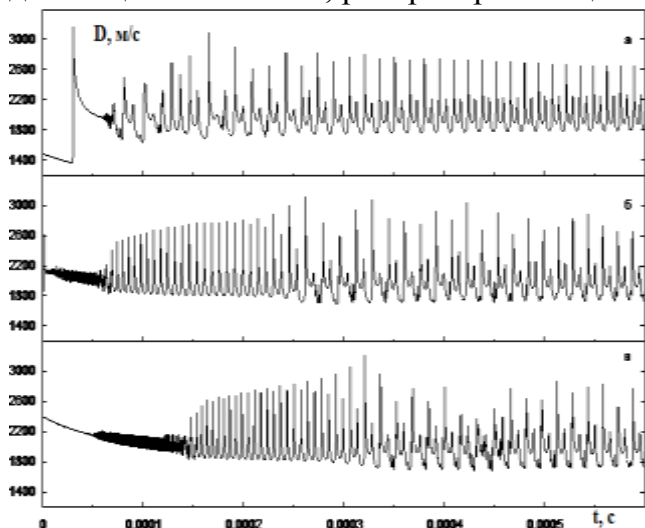


Рис. 14. Зависимость скорости головной ударной волны от времени а) $P_{\text{КВД}} = 3$ МПа, б) $P_{\text{КВД}} = 6$ МПа, в) $P_{\text{КВД}} = 10$ МПа.

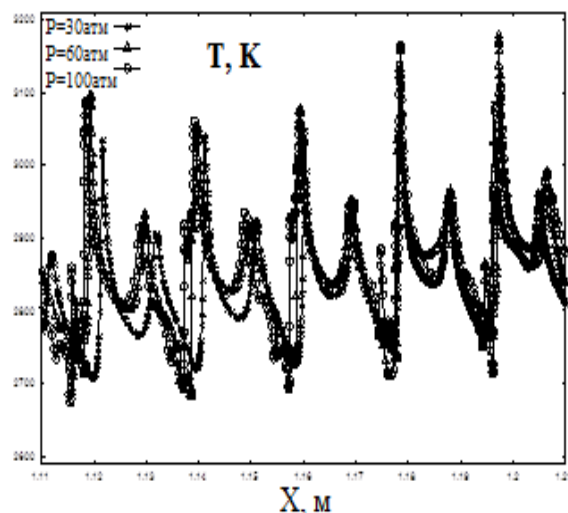


Рис. 15. Распределение температуры непосредственно за головной ударной волной

Необходимо отметить, что на момент окончания численного моделирования возмущения от стенки не достигли головной УВ. При приближении скорости головной УВ к скорости детонации Чепмена-Жуге (для рассматриваемой смеси $D_{\text{ЧЖ}} = 1976.9$ м/с) начинаются "высокочастотные" колебания скорости УВ (рис. 14). По мере продвижения детонационной волны "высокочастотные" колебания переходят в "низкочастотные". На расстоянии порядка 1 м от распада разрыва во всех рассмотренных вариантах наблюдается характерная регулярная структура колебаний скорости головной УВ, включающая комплексы с высокой и низкой амплитудой. При этом расстояния между точками с максимальной амплитудой во всех трех вариантах практически одинаковые и не меняются при измельчении расчетной сетки. Скорость головной ударной волны в точках минимума может быть на 10% ниже скорости детонации Чепмена-Жуге, при этом средняя скорость УВ ниже скорости детонации Чепмена-Жуге менее чем на 1%. В области за УВ наблюдаются соответствующие колебания температуры (рис. 15) и плотности. Необходимо отметить, что на все участки кривых приходится значительное число расчетных точек, которые отмечены маркерами. Ярко выраженные пики полученных при численном моделировании параметров связаны с тем, что узлами разностной сетки является непосредственно УВ и траектории газа, что обеспечивает отсутствие сеточных диффузии и теплопроводности. Расстояние между точками максимума на графиках температуры во всех рассмотренных вариантах составляет 19 ± 1 мм, что согласуется с экспериментальными данными о продольном размере детонационных ячеек в стехиометрических водородно-воздушных горючих смесях $15,9 \pm 2$ мм.

В разделе 4.2 рассматривается детонация газочапельных смесей. Приводится модель межфазного сопротивления и теплообмена углеводородного распыленного горючего и газообразного окислителя. В параграфе 4.2.1 приводятся результаты апробации модели и результаты численного моделирования высокоскоростного горения и детонации в смеси капель метанола и воздуха. Для моделирования химических превращений использовалось 56 обратимых реакций, в которых участвовало 15 компонентов: CH_3OH , CH_3O , CH_2O , CH_3 , CH_4 , HCO , H_2O , HO_2 , H_2O_2 , O_2 , OH , CO , CO_2 , H , O . Результаты сравнения показывают, что кинетический механизм достаточно точно

описывает экспериментальные данные, скорость испарения не сильно зависит от параметра модели тепломассообмена, за счет варьирования которого удается достичь согласия с экспериментальными данными. Рассматривалось течение за стационарной ударной волной газочапельной смеси метанола с воздухом. Для выявления влияния кинетического механизма на параметры течения были проведены расчеты, в которых предполагалось, что неравновесным является только процесс испарения, а химические реакции в газовой фазе протекают равновесно. При повышенных температурах и вблизи стехиометрии равновесные и неравновесные фазовые траектории близки ($M_l/M_v = 0.1$) и могут отличаться при понижении температуры или удалении от стехиометрии ($M_l/M_v = 0.3$). Из расчетов можно сделать вывод, что в высокотемпературной области для описания процессов в газовой фазе можно использовать равновесную модель.

В параграфе 4.2.2 приводятся результаты моделирования горения и детонации тяжелого углеводородного горючего в окислительной среде. Углеводородное горючее считается однокомпонентным "псевдовеществом", для которого с использованием справочных данных о теплоемкостях, плотности, кривой насыщения и теплоте испарения восстанавливается выражения для потенциала Гиббса "псевдовещества" в жидком и газообразном состояниях. Переносные и теплофизические свойства горючего заимствуются из специальной справочной литературы. При описании испарения углеводородного горючего используются два подхода. Согласно первому подходу, вещество с условной формулой горючего добавляется в состав продуктов сгорания и участвует в химических превращениях. Согласно второму подходу, горючее при испарении подвергается равновесному пиролизу на простейшие углеводороды, входящие в кинетический механизм. При описании химических превращений в газовой фазе в соответствии с развиваемым термодинамическим подходом предлагается использовать только обратимые химические реакции. Для этого необходимо модифицировать реакцию горения углеводородного топлива, входящую в часто используемые в практических расчетах брутто-механизмы: 1. $C_xH_y + \frac{2X+Y}{4}O_2 \rightarrow XCO + \frac{Y}{2}H_2O$; 2. $2H_2 + O_2 \Leftrightarrow 2H_2O$; 3. $2CO + O_2 \Leftrightarrow 2CO_2$; 4. $CO + H_2O \Leftrightarrow CO_2 + H_2$. Первая реакция обычно считается необратимой, а ее скорость записывается как $\vec{W}^{(1)} = \vec{K}^{(1)}(T, p) y_{C_xH_y} y_{O_2}$. Причем объемные концентрации входят в выражение для скорости в первой степени. Предлагается ее считать обратимой и для этого переписать в следующем виде $C_xH_y + O_2 \Leftrightarrow \frac{4X}{2X+Y}CO + \frac{2Y}{2X+Y}H_2O + (1 - \frac{4}{2X+Y})C_xH_y$, тогда в выражение скорости обратной реакции войдут объемные концентрации компонентов, стоящих в правой части в степенях, равным стехиометрическим коэффициентам. Для сохранения правильных значений времени задержки воспламенения (по которому обычно подбирается вид зависимости $\vec{K}^{(1)}(T, p)$), достаточно в расчетах использовать модифицированное значение $\vec{K}^{(1)}(T, p) = (2X+Y)/4 \vec{K}^{(1)}(T, p)$. Остальные реакции считались обратимыми.

В общем случае, если имеется брутто реакция вида: $\sum_{i=1}^N \vec{v}_i^{(r)} M_i \xrightarrow{\vec{w}^{(r)}} \sum_{i=1}^N \vec{v}_i^{(r)} M_i$, с известным из литературы выражением для скорости реакции: $\vec{W}^{(r)} = \vec{K}^{(r)}(T, p) \prod_{i=1}^N (\rho \gamma_i)^{b_i^{(r)}}$, то для случая $b_i^{(r)} > 0$, брутто реакция может быть заме-

нена на $\sum_{i=1}^N b_i^{(r)} M_i \Leftrightarrow \sum_{i=1}^N (b_i^{(r)} + a^{(r)}(\bar{v}_i^{(r)} - \bar{v}_i^{(r)})) M_i$, где $a^{(r)} = \min_{\substack{i=1, N \\ \bar{v}_i^{(r)} \neq 0}} (b_i^{(r)} / \bar{v}_i^{(r)})$. При этом

$\bar{K}^{(r)}(T, p) = \bar{K}^{(r)}(T, p) / a^{(r)}$ и все стехиометрические коэффициенты являются неотрицательными величинами.

Чтобы проверить допустимость моделирования высокоскоростного горения и детонации газочапельной смеси керосин-воздух применяется подход, описанный в предыдущем параграфе. Керосин моделировался "псевдовеществом" - $C_{9,32}H_{18,2}$. Рассматривается расширенный по сравнению с брутто-механизмом (включает 7 веществ) список веществ (включает 26 компонентов: $CO, CO_2, CH, CH_2, CH_3, CH_4, C_2H_2, C_2H_4, C_2H_6, HCO, CH_2O, H_2, OH, H_2O, O_2, H_2O_2, HO_2, NO, N_2, CN, HCN, C^*$ (сажа), C, H, O, N). Рассчитывались зависимости параметров детонации и дефлаграции от M_l / M_v . Расчеты показали, что при $M_l / M_v < 0.3$ скорости Чепмена-Жуге и температура в обеих смесях очень близки. Отличие результатов при $M_l / M_v > 0.3$ связано с появлением сажи в равновесном составе продуктов сгорания. Была проведена серия расчетов для определения влияния обратимости химических реакций на параметры в точке Чепмена-Жуге. Использовались "равновесная" (считались неравновесными межфазное сопротивление и теплообмен) и "неравновесная" модели, проводились расчеты для случаев, когда реакции 1-3 считались необратимыми и, когда все реакции считались обратимыми. Фазовые траектории для равновесной и неравновесной моделей заканчивались на детонационной адиабате, а для необратимой модели – нет. Достижимая в детонационной волне температура ($m_k / m_{air} = 0.1$, рис. 16) зависела от начального диаметра частиц, что не верно, причем абсолютная величина температуры отличалась более чем на 200 К. В целом, из приведенного выше исследования можно сделать вывод, что использование неравновесной модели с необратимыми реакциями может приводить к существенным ошибкам при численном моделировании.

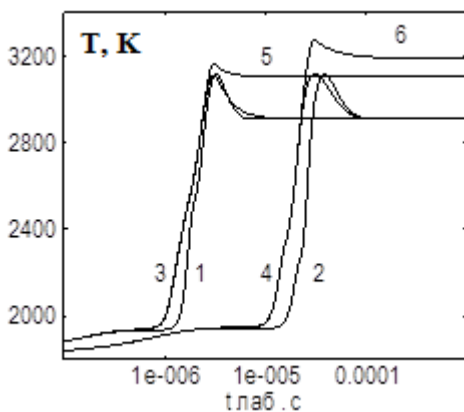


Рис. 16. Распределение температуры в ДВ. Модели: 1, 2 - "равновесная"; 3, 4 - "неравновесная обратимая"; 5, 6 - "неравновесная необратимая"; 1, 3, 5 - $d_s^0 = 10$ мкм; 2, 4, 6 - $d_s^0 = 50$ мкм

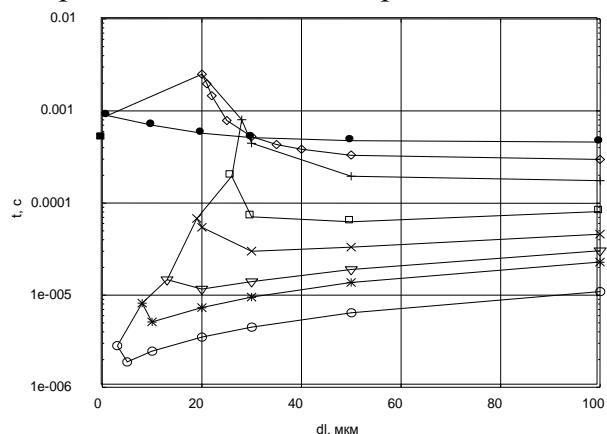


Рис. 17. Зависимость задержки воспламенения от диаметра капель воды при различной начальной массовой доли воды (\diamond - 0.05, \bullet - 0.01, $+$ - 0.1, \square - 0.2, \times - 0.3, ∇ - 0.4, $*$ - 0.5, \circ - 1.0).

Также в разделе приведены результаты исследования детонации бензино-воздушных и керосино-воздушных газочапельных смесей за падающими ударными волнами, образованными в результате распада разрыва на границе отделяющей инертный газ при высоком давлении от газочапельной горючей смеси. Для численного моделирования использовался сеточно-характеристический метод, разработанный автором, который приведен в третьей главе. При численном моделировании головная ударная

волна, контактный разрыв, граничные траектории частиц явно выделялись. Число расчетных узлов выбиралось из условия сходимости результатов и составляло, в зависимости от начальных данных, от 5 до 10 тысяч. При моделировании детонации бензина ($C_{8,12}H_{16,53}$) температура за ударной в момент распада разрыва составляла 2200 К. Для моделирования химических превращений в газовой фазе использовался кинетический механизм, включающий 70 обратимых реакций, в которых участвовали 26 компонент. Использовалась модель пиролиза бензина, в соответствии с которой он при испарении разваливался на простейшие углеводороды: ацетилен, этилен, метан и водород, которые участвовали в химических реакциях. В результате численного моделирования получена следующая качественная картина высокотемпературного инициирования детонации в газокапельной смеси. Процесс горения начинается у контактного разрыва и сопровождается ростом давления и температуры справа от него. Образуется фронт горения, которому предшествует волна сжатия, в результате фронт горения самоускоряется, образуется детонационная волна в сжатом газе, которая догоняет головную ударную волну, взаимодействует с ней, образуя пересжатую детонационную волну, которая распространяется по исходной горючей смеси. При этом в окрестности контактного разрыва справа образуется зона чистого газа (капли бензина полностью испарились). При моделировании детонации керосино-воздушной газокапельной горючей смеси используется рассмотренный в настоящем параграфе упрощенный механизм горения углеводородного топлива, в котором все реакции считаются обратимыми, при этом начальная температура за ударной волной составляла 1000 К. Исследовалось течение в ударной трубе, распад разрыва происходил на расстоянии 1 м от торца установки. Капли керосина равномерно заполняли область при $2 < X < 9$ м. После распада разрыва образовывалась ударная волна, которая при взаимодействии с облаком капель инициировала испарение капель керосина, воспламенение и детонацию горючей смеси. Исследовалась зависимость параметров течения от исходного отношения массы капель керосина к массе воздуха. Наблюдалась картина течения, во многом схожая с вышеописанной, только на существенно больших расстояниях от сечения распада разрыва. Отличия состояли в том, что после взаимодействия фронта горения с головной ударной волной, последняя ускори-лась, фронт воспламенения от нее несколько отстал. Ускорение ударной волны привело к росту температуры за ней и, как следствие этого, образование второго очага воспламенения непосредственно за ударной волной. После сливания двух фронтов воспламенения была образована уже классическая пересжатая детонационная волна, которая несколько замедлилась и в дальнейшем вышла на режим распространения со слабо меняющейся скоростью.

В разделе 4.2.3 приводятся результаты численного моделирования влияния капель воды на структуру детонационной волны в горючих смесях. Численно моделировался случай, когда газовая смесь содержит и горючее и окислитель, а впрыскиваемые капли воды используются для снижения температуры и прекращения горения. Рассматривалась стехиометрическая водородо-воздушная горючая смесь с добавлением капель воды. Изучалось влияние начального отношения массы капель воды к массе водородо-воздушной смеси (m_{H_2O}/m_T) на значения параметров в точках Чепмена-Жуге детонации и дефлаграции. Продукты сгорания включали 9 компонентов (H_2 , O_2 , H_2O , OH , HO_2 , H_2O_2 , H , O , N_2). В случае, если капли полностью испарились, равновесное состояние зависит только от m_{H_2O}/m_T и не зависит от диаметра впрыскиваемых капель. Увеличение массовой доли впрыскиваемой воды приводит к уменьшению скорости детонации Чепмена-Жуге. Учет влияния неравновесных процессов, таких как химические превращения и межфазное

сопротивление и тепломассообмен, приводил к тому, что при размерах впрыскиваемых капель более 30 мкм, зона существования стационарных режимов детонационных волн по сравнению с равновесным случаем расширялась, а при впрыске капель диаметром менее 20 мкм сужалась. При этом скорость детонации Чепмена-Жуге превосходила равновесные значения. Кроме этого, в многофазном расчете при диаметрах впрыскиваемых капель менее 30 мкм было обнаружено, что при m_{H_2O}/m_T , превышающих некоторые предельные значения, режима Чепмена-Жуге не наблюдалось. Отсутствие режима Чепмена-Жуге свидетельствует о том, что данной массы воды достаточно для затухания детонации. При уменьшении начального диаметра капель зона существования режима детонации существенно сокращается. Необходимо отметить, что при больших диаметрах капель (100 мкм) скорость детонации Чепмена-Жуге стремится к газофазной, а при малых (1 мкм) - к соответствующей равновесной скорости детонации.

Также было проведено исследование влияния на воспламенение и детонацию водородо-воздушных смесей капель воды, распыленной в объем, занимаемой горючей смесью. Рассматривается течение, возникающее в горючей смеси после распада разрыва на границе раздела: воздух – водородо-воздушная смесь с распыленными каплями воды. Для моделирования горения водорода в воздухе использовался кинетический механизм, включающий 19 обратимых реакций. Для решения системы уравнений в частных производных использовался сеточно-характеристический метод с явным выделением сильных разрывов, описанный в главе 3. Параметры газа и частиц рассчитывались на подвижной разностной сетке, совпадающей с траекториями газа и частиц, траектории ударной волны, контактного разрыва и граничной траектории частиц являлись “двойными” узлами. После распада разрыва горючая смесь воспламенялась, образовывалась детонационная волна, которая при достаточном количестве капель воды на некотором расстоянии затухала. При исследовании зависимости процесса воспламенения горючей смеси от m_{H_2O}/m_T и начального диаметра капель d_i^0 , были обнаружены различные режимы течения: образование незатухающей волны горения; подавление волны горения; отсутствие образования волны горения. На рис. 17 представлено влияние на процесс образования волны горения m_{H_2O}/m_T и диаметра капель воды d_i^0 , по оси ординат отложено время задержки воспламенения (момент резкого роста температуры вблизи контактного разрыва). Необходимо отметить, что при m_{H_2O}/m_T от 1.0 до 0.05 существовало предельное значение диаметра частиц (крайний левый маркер), при котором воспламенение имело место. При впрыске частиц меньшего диаметра воспламенение отсутствует. При m_{H_2O}/m_T от 1.0 до 0.2 время задержки воспламенения было меньше, чем время задержки воспламенения в чистом газе (обозначено как ■ на оси ординат). Данный эффект связан с локальным повышением температуры вблизи контактного разрыва из-за различия в скоростях газа и частиц за ударной волной. Необходимо отметить, что вопросы, связанные с образованием устойчивой волны горения после воспламенения, не рассматривались. Результаты проведенных исследований показали, что распыливание воды в водородо-воздушные смеси может привести как к подавлению воспламенения и детонации, так и к ускорению процесса воспламенения. Важную роль при этом играют массовая доля впрыскиваемой воды и начальный диаметр капель.

В разделе 4.3 приводятся результаты исследований стационарных волн детонации и дефлаграции в смесях алюминия, магния и бора с воздухом. Из обзора литературы следует, что экспериментально изучалась в основном детонация смесей мелкодисперсного алюминия в воздухе, детонация магниевых-воздушных смесей исследо-

валась в небольшом числе работ, анализ детонации боро-воздушных смесей практически отсутствует. В случае смесей магния и бора имеется значительное число экспериментальных и расчетно-теоретических исследований горения частиц в воздухе и кислороде. Необходимо отметить, что детонационная (равновесная ударная) адиабата для горючих смесей является объективной характеристикой процесса горения. Детонационная адиабата содержит точки Чепмена–Жуге детонации и дефлаграции, а также точки, соответствующие адиабатическому сгоранию топлива при заданных удельном объеме и давлении, что позволяет рассчитывать величину тепловыделения в соответствующих идеальных реакторах. Поэтому даже при отсутствии экспериментальных данных рассматриваемые модельные задачи представляют значительный интерес и позволяют более детально проводить анализ изучаемого процесса. Разработана упрощенная физико-математическая модель, позволяющая описывать процессы самовоспламенения, горения и детонации горючих металлогазовых смесей. Дисперсные частицы считаются многокомпонентными, учитываются процессы плавления, испарения материала частиц, а также поверхностные реакции, в которых могут участвовать как жидкие, так и газообразные компоненты. Несущий газ считается многокомпонентным, при этом в нем может протекать произвольное число химических реакций, также рассматривается случай, когда продукты сгорания находятся в состоянии термодинамического равновесия, при этом в них учитывается наличие мелкодисперсных частиц металлов, оксидов и нитридов металлов. Для описания межфазного массообмена и поверхностных реакций рассматриваются три реакции.

R1: $M^c \Leftrightarrow M$, R2: $M_x O_Y^c \Leftrightarrow M_x O_Y$ и реакции окисления металла:

R3: $XM^c + Y/2 O_2 \Leftrightarrow M_x O_Y^c$, M – символ молекулы металла, индекс “с” относится к твердой и жидкой фазам, X, Y – число атомов металла и кислорода в молекуле оксида. Скорости реакций R1-R2 в первом приближении можно найти по диффузионной модели. Для нахождения скорости реакции R3 можно использовать диффузионную и кинетическую модели. Кинетическая модель позволяет достаточно точно определить параметры воспламенения частиц, однако дает завышенное значение температуры горения. Диффузионная модель, наоборот, не позволяет корректно определять предельную температуру самовоспламенения, но дает достоверную температуру сгорания частиц при высоких температурах газа. В настоящей работе предлагается в качестве скорости притока кислорода к частице выбирать минимальную из рассчитанных по кинетической и диффузионной моделям (кинетически-диффузионная модель).

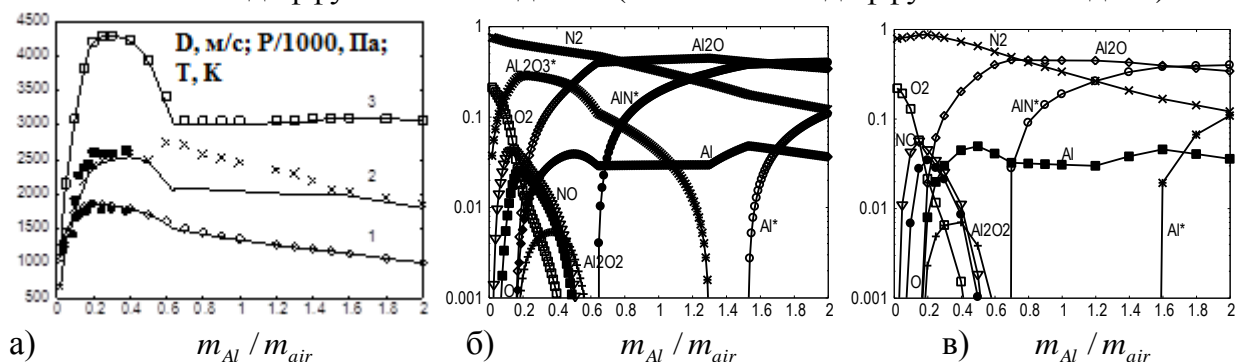


Рис.18. Зависимость параметров ДВ Чепмена-Жуге от m_{Al}/m_{Air} . а) 1 – скорость ДВ Чепмена-Жуге, 2 – давление/1000, 3 – температура (простые маркеры – двухфазный расчет, жирные маркеры – эксперимент [Л.П. Орленко, 2004]); б), в) Массовые концентрации компонент (б – равновесный расчет, в – двухфазный).

Рассматривалась горючая смесь, состоящая из воздуха и твердых частиц алюминия, продукты сгорания включали 14 компонент: AlO_2 , Al_2O_3 , Al_2O , Al_2O_2 , N_2 ,

O_2 , NO , AlN , $Al_2O_3(ж)$, $Al(ж)$, $AlN(ж)$, O , N , Al . На рис. 18 приведены результаты численного моделирования параметров детонации Чепмена-Жуге для смеси, состоящей из частиц алюминия и воздуха при нормальных условиях ($p_0 = 101325 \text{ Па}$, $T_0 = 298.15 \text{ К}$) для различных отношений начальных массовых расходов алюминия и воздуха - m_{Al}/m_{Air} . Полученные результаты хорошо согласуются с данными экспериментальных и расчетно-теоретических исследований. Графики параметров (рис. 18а) имеют максимум при m_{Al}/m_{Air} , близком к стехиометрическому. В рассмотренном диапазоне m_{Al}/m_{Air} в равновесном составе в газовой фазе (рис. 18б) могут присутствовать мелкодисперсные алюминий, нитрат алюминия и окись алюминия. Точка минимума на графике температуры (рис. 18а, кривая 2) при $m_{Al}/m_{Air} \sim 0.65$ связана с появлением в продуктах сгорания жидкого нитрата алюминия.

Исследовалось влияние на параметры детонации Чепмена-Жуге скоростной и температурной неравновесности газовой и дисперсной фаз. Рассчитанная минимальная скорость детонации (рис. 18а, кривая 1 – “◇”) и температура (рис. 18а, кривая 3 – “□”) отличается от равновесной (кривые 1, 3 – сплошные линии) менее чем 0.5%. Давление (кривая 2, “+”) в области $m_{Al}/m_{Air} > 0.5$ отличается более существенно, это связано с неполным испарением частиц. Рассчитывались зависимости параметров продуктов сгорания в пересжатой детонационной волне при соотношении алюминий – воздух, близком к стехиометрическому, от лабораторного времени. Расчет проводился до достижения состояния термодинамического равновесия. Скоростное и температурное равновесие наступало примерно через 10 мкс. Расход частиц в процессе расчета увеличивался, а газа уменьшался. Алюминий, содержащийся в частице через 30 мкс полностью израсходовался, при этом количество окисла в частице росло за счет конденсации из газовой фазы вплоть до выхода на равновесие. В равновесном составе в газовой фазе при $m_{Al}/m_{Air}=0.2$ в однофазном расчете) присутствует жидкий оксид алюминия, а в двухфазном – нет.

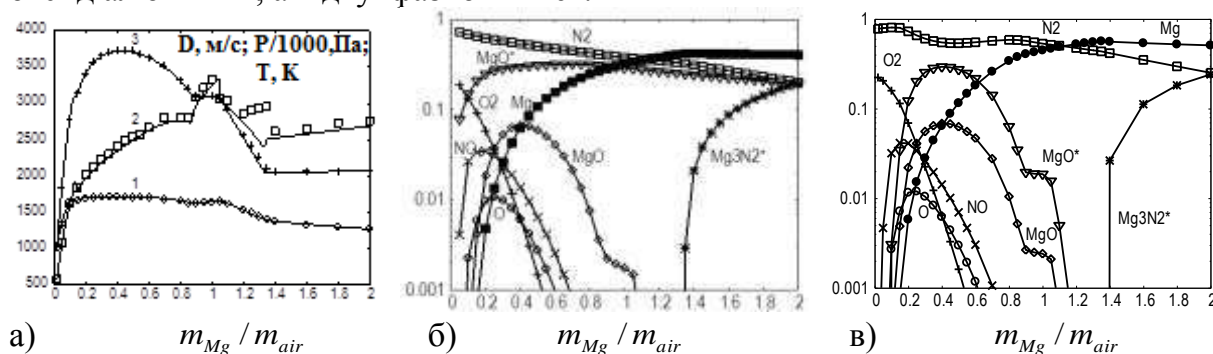


Рис. 19. Зависимость параметров ДВ Чепмена-Жуге от отношения расходов частиц магния и воздуха. а) 1 – скорость ДВ Чепмена-Жуге, 2 – давление/1000, 3 – температура (маркеры – двухфазный расчет); б), в) Массовые концентрации компонент (б – равновесный расчет, в – двухфазный). MgO^* , $Mg_3N_2^*$ - в жидком состоянии.

Изучалась горючая смесь, состоящая из воздуха и частиц магния, продукты сгорания включали 10 компонент: MgO , O_2 , N_2 , NO , $MgO(ж)$, $Mg(ж)$, $Mg_3N_2(ж)$, O , N , Mg . На рис. 19 приведены результаты расчетов параметров равновесной детонации Чепмена-Жуге для рассматриваемой смеси при нормальных условиях. Пиковые значения скорости детонации и температуры при сгорании частиц магния ниже, чем у алюминия, при этом, при большом массовом содержании металла скорость детонации выше в смеси магния с воздухом. В равновесных продуктах

сгорания магния (рис. 19б) присутствуют в виде мелких частиц оксид магния, а при $m_{Mg} / m_{Air} > 1.35$ нитрид магния, в неравновесных расчетах (рис. 19в) при $m_{Mg} / m_{Air} > 1.1$ мелкодисперсный оксид магния отсутствует.

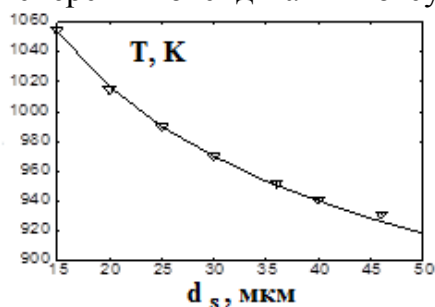


Рис. 20. Сравнение расчетных (сплошная кривая) и экспериментальных данных (маркер), приведенных в [К.А.Авдеев и др., 2008] предельных температур воспламенения сферических частиц магния разного размера ($p_0 = 101325$ Па, $T_0 = 293$ К).

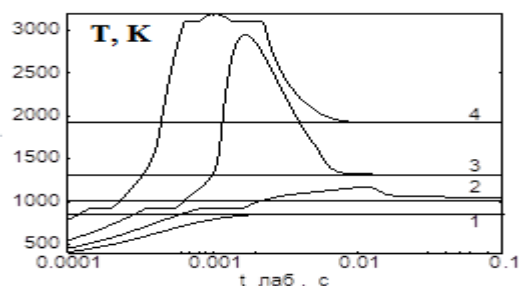


Рис. 21. Различные режимы воспламенения одиночной сферической частицы магния. 1 - $T_0 = 850$ К, 2 - 1016, 3 - 1300, 4 - 1920 ($p_0 = 101325$ Па, $d_s^0 = 20$ мкм, $T_{s0} = 298.15$ К).

Исследовалось влияние на параметры детонации Чепмена-Жуге скоростной и температурной неравновесности газовой и дисперсной фаз. Параметры кинетической модели массообмена подбирались из условия совпадения с экспериментальными данными. Для тестирования модели расчетным путем были воспроизведены три режима нагрева частиц магния [В.Н.Попов и др., 2007]: без воспламенения частиц (кривая 1); воспламенение с погасанием (кривая 2); воспламенение (кривые 3, 4). Исследовалось изменение параметров продуктов сгорания в пересжатой детонационной волне при соотношении магний – воздух, близком к стехиометрическому. Скоростное и температурное равновесие наступало примерно через 6 мкс. Магний, содержащийся в частице через 10 мкс полностью израсходовался, при этом количество оксида магния в частице выросло, а затем уменьшилось из-за испарения. В разделе также приведены результаты численного моделирования структуры волны дефлаграции в смесях частиц магния с воздухом.

Особенностью горения бора по сравнению с магнием и алюминием является то, что температуры плавления и кипения оксида бора ($T_m^{B_2O_3} = 723$ К, $T_b^{B_2O_3} = 1953$ К), образующегося в процессе окисления бора кислородом, существенно ниже температур плавления и кипения бора ($T_m^B = 2348$ К, $T_b^B = 3931$ К). Характерные температуры горения бора составляют 2700-3200 К (при детонации 3000-3700 К), при этом пиковые значения достигаются в узкой зоне в окрестности стехиометрии ($(m_B / m_{air})_{CT} = 0.105$). Таким образом, при избытке окислителя частица может либо полностью испариться, либо состоять из жидкого оксида бора, при недостатке окислителя на момент окончания горения частица будет состоять из трудно испаряющегося бора. При проведении математического моделирования считается, что продукты сгорания бора в воздухе включают 14 компонент: BO_2 , B_2O_3 , B_2O , N_2 , O_2 , NO , BN , $B_2O_3(ж)$, $B(ж)$, $BN(ж)$, O , N , B . В экспериментальных работах отмечается, что время воспламенения уменьшается при увеличении размера частицы. Для описания процесса воспламенения частицы предлагается использовать кинетическую модель, константы которой подбирались из условия совпадения рассчитанных минимальных температур воздуха, необходимых для самовоспламенения частиц, экспериментальным данным (рис. 22). Рассчитывался процесс самовоспламенения частиц бора различного диаметра в предположении о малости отношения массы бора к массе воздуха, скорость впрыскиваемых

частиц бора считается равной скорости потока воздуха. Характерная зависимость температуры частицы бора от времени представлена на рис. 23. В начале частица медленно нагревается до температуры газа, затем в результате экзотермической реакции окисления бора (R3) температура частицы начинает превышать температуру газа. Будем считать, что если затем следует резкий скачок температуры (кривые 1, 3, 5), то воспламенение происходит, если нет (кривые 2, 4, 6), то воспламенение не происходит. Особенностью воспламенения бора является двухэтапность процесса. Частица вначале прогревается до температуры газа, затем наступает этап медленного горения частицы с температурой, ненамного превышающей температуру газа, затем следует этап догорания с резким повышением температуры частиц (кривая 5, рис. 2). Разработанная модель также тестировалась путем моделирования горения бора в кислороде при различных давлениях. Полученные результаты хорошо согласуются с данными, приведенными в монографии Ягодникова Д.А. (2009), по значениям температуры и массовой концентрации конденсированного бора в продуктах сгорания. Рассчитывались параметры детонации Чепмена – Жуге по газовой равновесной и по двухфазной моделям (рис. 24). Параметры детонации близки при $m_B/m_{air} < 0.5$. Диапазон отношений расхода бора к расходу воздуха, при котором существует высокоскоростная детонация, существенно уже, чем в случае с алюминием и магнием. В состав продуктов сгорания, рассчитанных по однофазной модели (рис. 24б), входят конденсированные компоненты. При избытке окислителя B_2O_3 , при избытке горючего – BN и B . В окрестности стехиометрии существует зона, в которой состав продуктов сгорания полностью газовой. В двухфазном расчете в равновесном составе присутствует только конденсированный нитрид бора.

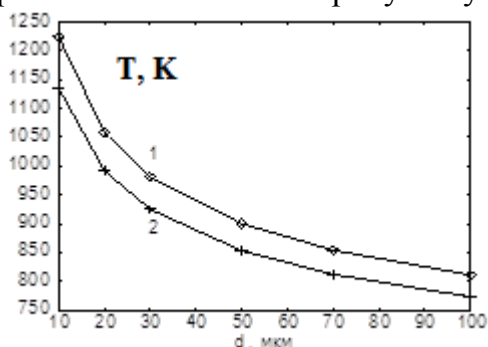


Рис. 22. Зависимость минимальной температуры самовоспламенения частицы бора от начального диаметра (1 – 101325Па, 2 – 202650 Па)

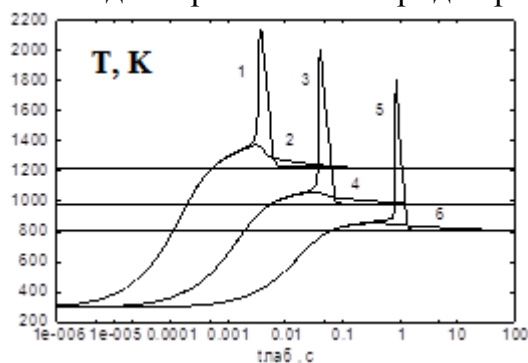


Рис. 23. Зависимость температуры частицы бора различного диаметра от времени при различных температурах воздуха ($p_0 = 101325$ Па, $d_s = 10$ мкм : 1-1222 К, 2 – 1221 -; $d_s = 30$: 3-980 К, 4 – 979, $d_s = 100$: 5-810 К, 6 – 809)

Рассчитывались зависимости параметров продуктов сгорания в пересжатой детонационной волне при соотношении ”бор – воздух”, близком к стехиометрическому, от лабораторного времени. Расчет проводился до достижения состояния термодинамического равновесия. Скоростное и температурное равновесие наступало примерно через 30 мкс. Расход частиц в процессе расчета сначала увеличивался из-за реакции окисления бора и образования оксида бора, а затем уменьшился до нуля, так как весь бор переходил в оксид бора, который испарялся. Также в разделе приведены результаты численного моделирования структуры волны дефлаграции в смесях частиц бора с воздухом.

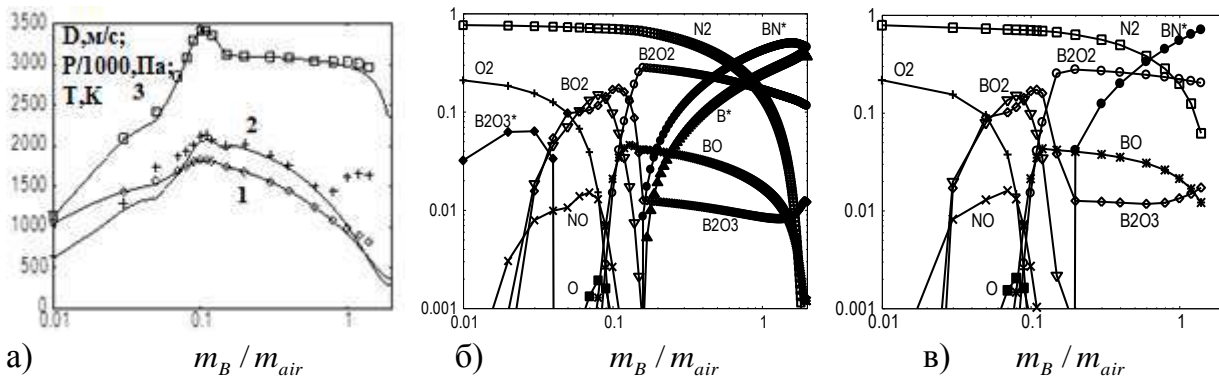


Рис.24. Зависимость параметров ДВ Чепмена-Жуге от m_B / m_{air} . а) 1 – скорость ДВ Чепмена-Жуге, 2 – давление/1000, 3 – температура (маркеры – двухфазный расчет); б), в) Массовые концентрации компонент (б – равновесный расчет, в – двухфазный)

При численном исследовании детонации смесей алюминия с воздухом и бора с воздухом при избытке металла полное равновесие наступает на значительных расстояниях от ударной волны, вблизи волны наблюдается состояние частичного равновесия, которое, по-видимому, более соответствует реальным значениям параметров, достигаемым при детонации. Так для смеси алюминий-воздух температура и давление в состоянии частичного равновесия на 4-7 % выше, чем при полном, диаметр частиц и концентрация мелкодисперсного алюминия существенно больше. Это связано с частичным испарением алюминия и окисла алюминия, как следствие, образованием Al_2O в потоке, а также с конденсацией нитрида алюминия (AlN). Для смеси бор-воздух при переходе от состояния частичного равновесия к полному наблюдается существенный рост температуры от 15 до 60 %, связанный с конденсацией нитрида бора. Данный факт указывает на то, что наблюдаемая температура при детонации частиц бора в воздухе (с избытком бора) должна быть существенно ниже, чем предсказывает равновесная теория.

Глава 5 диссертационной работы посвящена моделированию неравновесной гомогенной конденсации с использованием квазихимической модели. Интерес к конденсации (кластеризации) связан с тем, что эти явления имеют фундаментальное значение в физике атмосферы, астрономии, аэродинамике, атомной физике и материаловедении. Неравновесную кластеризацию необходимо учитывать при прогнозе погоды, при образовании аэрозолей, при расчете характеристик сопел и струй жидкостных и твердотопливных реактивных двигателей, при расчетах паровых турбин и ядерных реакторов. Развиваемая вычислительная методология, позволяющая моделировать процесс гомогенной конденсации с помощью квазихимической модели без введения понятия критического размера кластера, включает в себя ряд неотъемлемых составных частей:

- 1) Модель термодинамических свойств кластеров размером от единицы до бесконечности и методика расчета равновесных функций распределения при фиксированной паре термодинамических переменных.
- 2) Модель обратимой кинетики гомогенной конденсации в приближении, что количество мономеров превосходит число кластеров других размеров, включающая бесконечное число реакций присоединения мономера к n-меру. Причем константы скоростей прямых и обратных реакций связаны через константу равновесия.
- 3) Численный метод решения жесткой системы обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающих кинетику гомогенной конденсации, дополненной нелинейной системой алгебраических уравнений. Метод позволяет проводить расчеты от стабильной области, в которой концентрации кластеров размером более десяти, исче-

зающее малы, до метастабильной области, в которой с заметными концентрациями содержатся кластеры, включающие миллион и более молекул. В настоящей работе максимальное число точек разбиения функции распределения составляло $5 \cdot 10^6$ (т.е. вдоль траектории частицы конденсирующегося газа решалась система, включающая $5 \cdot 10^6$ обыкновенных дифференциальных уравнений).

В разделе 5.1 описаны модель термодинамических свойств кластеров и методы расчета равновесных функций распределения кластеров по размерам. Рассматривается смесь совершенных газов, компонентами которой являются мономеры, кластеры заданного размера и инертные газы. Термодинамические свойства смеси описываются заданием удельного потенциала Гиббса G :

$$G(p, T, \gamma) = \gamma_A (G_A(p, T) + RT \ln x_A) + \sum_{i=1}^{\infty} \gamma_i (G_i(p, T) + RT \ln x_i) \quad (14)$$

$$x_i = \gamma_i m_{\Sigma}, \quad x_A = \gamma_A m_{\Sigma}, \quad m_{\Sigma} = (\gamma_A + \sum_{i=1}^{\infty} \gamma_i)^{-1}, \quad \gamma_A = \sum_{i=1}^{N_{\gamma}} \tilde{\gamma}_i, \quad G_A(p, T) = \sum_{i=1}^{N_{\gamma}} \tilde{\gamma}_i \tilde{G}_i(p, T) / \gamma_A$$

Здесь p – давление смеси, T – температура, γ_j – вектор мольно-массовых концентраций, x_j – мольные доли ($j=A, 1, 2, \dots$), m_{Σ} – средняя молярная масса смеси, R – универсальная газовая постоянная, N_{γ} – число неконденсирующихся компонент в смеси, $\tilde{\gamma}_i$ – мольно-массовые концентрации неконденсирующихся компонентов в смеси. Части потенциалов Гиббса, не зависящие от концентраций для i -меров $G_i(p, T)$ и неконденсирующихся компонентов, $G_A(p, T)$ определяются по формулам

$$G_j(p, T) = RT \ln(p / p_0) + G_j^{\circ}(T), \quad j=A, 1, 2, \dots \quad (15)$$

где p_0 – стандартное давление, $G_j^{\circ}(T)$ – стандартные молярные потенциалы Гиббса инертного газа, мономеров и кластеров. Термодинамические свойства кластеров рассчитывались в рамках жидкокапельной модели, в частности $G_i^{\circ}(T) = iG_L^{\circ}(T) + \sigma_i(T)(36\pi)^{1/3} N_A^{1/3} (m_1 / \rho_L(T))^{2/3} i^{2/3}$, $i=2, 3, \dots$, где $G_L^{\circ}(T)$ – молярный потенциал жидкой фазы, $\sigma_i(T)$ – поверхностное натяжение i -мера, $\rho_L(T)$ – плотность жидкости, m_1 – молекулярная масса конденсирующегося газа, N_A – число Авагадро.

Необходимо отметить, что индекс i пробегает значения от 1 до бесконечности. При численных вычислениях бесконечные суммы заменяются на конечные, при этом индекс i используется для нумерации кластеров размером n_i . Функция $n(i)$ задает отображение множества $\{1, i_M\}$ в множество $\{1, n_M\}$, причем $n_M \geq i_M$ и $\frac{dn(i)}{di} = n_i' \geq 1$. В расчетах, проводимых автором, максимальное значение, которое принимало $i_M = 5 \cdot 10^6$, а $n_M = 10^{14}$. Частным случаем рассматриваемого отображения является случай тождественного отображения: $n_M = i_M$ и $\frac{dn(i)}{di} = 1$. Предполагается, что бесконечные суммы в формулах с участием некоторого термодинамического параметра A_i аппроксимируются следующим образом $\sum_{i=1}^{\infty} \gamma_i A_i \approx \sum_{j=1}^N n_j' \gamma_j A_j$. По известному потенциалу Гиббса смеси $G(p, T, \gamma)$ определяются все остальные термодинамические параметры.

Из условий равновесия между газовой и жидкой фазами при фазовом переходе, которое представляет собой равенство соответствующих химических потенциалов кластеров. В работе получены уравнения для расчета функции распределения кластеров конденсирующегося компонента по размерам в многокомпонентном инертном газе на кривой насыщения, а также при известной паре термодинамических

величин (давлении и температуре, давлении и энтропии, плотности и внутренней энергии и др.). В частности, функция распределения кластеров по размерам может быть рассчитана при фиксированных давлении и температуре из нелинейного уравнения, причем как в стабильной, так и в метастабильной области.

$$F(\ln x_1) = \sum_{i=1}^{i_M} n_i \left(1 + \frac{\gamma_A}{\gamma_0} n_i \right) \exp \left(n_i \ln x_1 + \frac{n_i G_1(p, T) - G_i(p, T)}{RT} \right) - 1 = 0, \quad (16)$$

$$x_i = \exp \left(n_i \ln x_1 + \frac{n_i G_1(p, T) - G_i(p, T)}{RT} \right).$$

Неизвестной здесь является мольная доля мономеров. Рассмотрим смесь, состоящую из азота (90 мас %) и воды (10 мас %), находящуюся при температуре 287 К, давление насыщения в ней составляет $P_H = 10669$ Па (рис. 25). Рассчитывается функция распределения, включающая кластеры размером до 100000 молекул. Цифрой 1 отмечена функция распределения, соответствующая стабильной области, точка $(T, p) = (287, 10000)$ лежит в стабильной области, вся масса воды содержится в кластерах размером меньше 10 молекул, рассчитанное значение пересыщения составляет 0.937. Цифрами 2 и 3 помечены результаты расчетов равновесных функций распределения в точках, лежащих левее кривой насыщения – в метастабильной области. Результаты расчетов равновесной функции распределения могут служить индикатором степени достоверности описания гомогенной конденсации конечной системой кластеров, в рассматриваемом случае это 10^5 . В данных расчетах остаточное пересыщение равно 1.204 и практически не зависит от давления. Если ввести функцию растяжения, то можно построить зависимость пересыщения s , являющегося решением (16) от n_M .

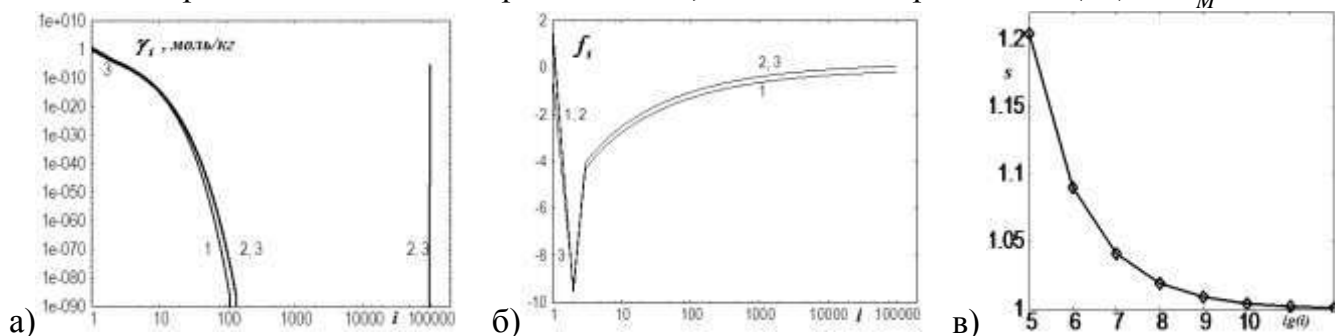


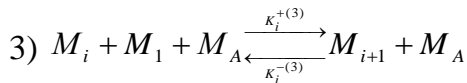
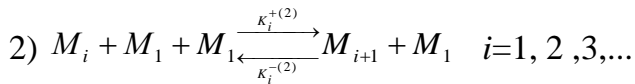
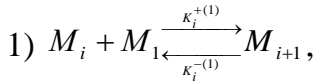
Рис. 25. Функция распределения кластеров воды по размерам - γ_i (а), массовая доля кластеров, содержащихся в размерах от 1 до i , (б) относительная функция распределения кластеров воды по размерам - f_i (в) при различных давлениях. 1 – 10000 Па, 2 – 20000 Па, 3 – 100000 Па.

В состоянии термодинамического равновесия давление мономеров должно быть равно давлению насыщения и соответствовать значению пересыщения равному единице. Таким образом, для корректного расчета равновесной функции распределения кластеров воды по размерам в метастабильной области необходимо чтобы максимальный размер учитываемого кластера превосходил 10^9 молекул, тогда остаточное пересыщение - менее чем 1.01. Необходимо отметить, что мольно-массовые концентрации кластеров при $i > 100$ меньше, чем 10^{-90} . В этом случае прямой расчет функции распределения кластеров невозможен. Поэтому в работе при проведении расчетов равновесных и неравновесных функций распределения кластеров по размерам используется новая переменная: f_i : $f_i = \ln(\gamma_i)$,

$$f_i = \ln(\gamma_i / \gamma_{i-1}) = \ln(x_i / x_{i-1}), \quad i=2,3,\dots,N. \quad \text{Соответственно,} \quad \gamma_i = e^{\sum_{j=1}^i f_j}, \quad \text{например,}$$

$\sum_{i=1}^{\infty} \gamma_i = \sum_{i=1}^{\infty} \prod_{j=1}^i e^{f_j}$. На рис. 25в приведена функция f_i , соответствующая γ_i , ее значения лежат в диапазоне от -10 до 2.

В разделе 5.2 приводится, развиваемая автором, квазихимическая модель гомогенной конденсации. Процесс кластеризации описывается кинетической моделью, в рамках которой предполагается, что количество мономеров в единице объема много больше, чем димеров, тримеров и т. д. При выполнении данного условия в кинетическом механизме, определяющем ход всего процесса конденсации, преобладают реакции присоединения мономеров к кластеру следующего вида:



где M_1 , M_i , M_A - символическое обозначение мономера, i -мера и молекулы инертного газа, $K_i^{+(r)}$, $K_i^{-(r)}$ ($r=1,2,3$) – константы скоростей соответствующих реакций. Маркеры плюс и минус соответствуют актам присоединения и отрыва мономера. В соответствии с жидкокапельной моделью в разделе приводятся выражения для констант скоростей прямых и обратных (связанных с прямыми через условия химического равновесия) реакций.

При наличии функции растяжения система уравнений, из которых может быть найдена неравновесная функция распределения, имеет вид:

$$\frac{d\gamma_i}{dt} = \frac{v_{\Sigma i-1} \gamma_{i-1}}{n_{i-1} n_i} - \left(\frac{v_{\Sigma i-1} \varepsilon_{i-1}}{n_{i-1} \varepsilon_i} + \frac{v_{\Sigma i}}{n_i} \right) \frac{\gamma_i}{n_i} + \frac{v_{\Sigma i} \varepsilon_i \gamma_{i+1}}{n_i n_i \varepsilon_{i+1}}; \quad i=2, 3, \dots, i_M, \quad \gamma_1 = \gamma^0 - \sum_{i=2}^{i_M} n_i n_i' \gamma_i$$

$$\gamma_i(t_0) = \gamma_i^0.$$

$$\text{Здесь } \varepsilon_i = \exp\left(n_i \ln x_i - \frac{G_i(p, T) - n_i G_1(p, T)}{RT}\right), \quad v_{\Sigma i} = (K_i^{+(1)} + K_i^{+(2)} \rho \gamma_1 + K_i^{+(3)} \rho \gamma_A) \rho \gamma_1.$$

Данная нелинейная система дифференциальных уравнений аппроксимируется по полунявной разностной схеме. Полученная система нелинейных алгебраических уравнений решается численно специально разработанным методом, на каждой итерации которого используется метод прогонки. Сходимость оценивается по концентрации мономеров, которая уточняется на каждой итерации. Необходимо отметить, что при численном решении системы вычисляются и хранятся, ранее введенные величины f_i , а функция распределения кластеров по размерам γ_i рассчитывается после завершения итерационного процесса.

В разделе 5.4 приводятся результаты расчетов функций распределения кластеров по размерам при решении модельных задач. Приведем результаты тестирования разработанных вычислительных алгоритмов на задаче о конденсации паров воды в бомбе постоянного объема. Рассматривается смесь, состоящая из 10% паров воды и 90% азота, которая помещается в адиабатическую камеру постоянного объема с начальным давлением 10^5 Па и температурой 200 К, начальная функция распределения берется с кривой насыщения при повышенной температуре. Вычисляются значения плотности и внутренней энергии, которые в дальнейшем в расчете остаются постоянными. На рисунке 1 приведены зависимости температуры, давления и суммы мольно-массовых концентраций от времени. Температура за счет

конденсации выросла на 60 К, давление увеличилось на 20%. На рисунке 27 представлена перестройка функции распределения во времени. В начальный момент времени (кривая 1) величина пересыщения составляет 9700. Конденсация начинается практически мгновенно, концентрация мономеров падает, и по функции распределения начинает распространяться волна конденсации (кривая 2). Далее волна конденсации достигает максимального размера учитываемых кластеров (кривая 3), при этом количество кластеров в диапазоне от 10 до 100000 монотонно падает (кривая 4) и к окончанию расчета становится меньше чем 10^{-20} моль/кг (кривая 5). При этом концентрации кластеров размером менее 11 молекул ложатся на равновесную зеленую кривую 6 (рассчитана по методике, описанной в разделе 5.2), к которой должна стремиться функция распределения при больших временах. Видно, что в начале на кривую 6 ложатся две точки (кривая 2), затем - 5 (кривая 3), далее - 8 (кривая 4) и окончательно - 11 (кривая 5). Остаточное пересыщение при $t=1000$ мкс составляет менее чем 1.01.

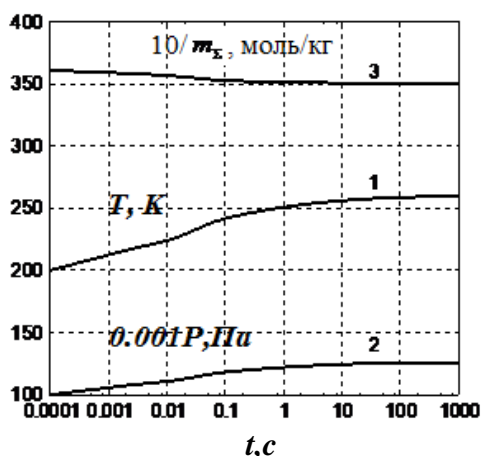


Рис. 26. Зависимость температуры (1), давления (2) и суммы мольно-массовых концентраций (3) от времени

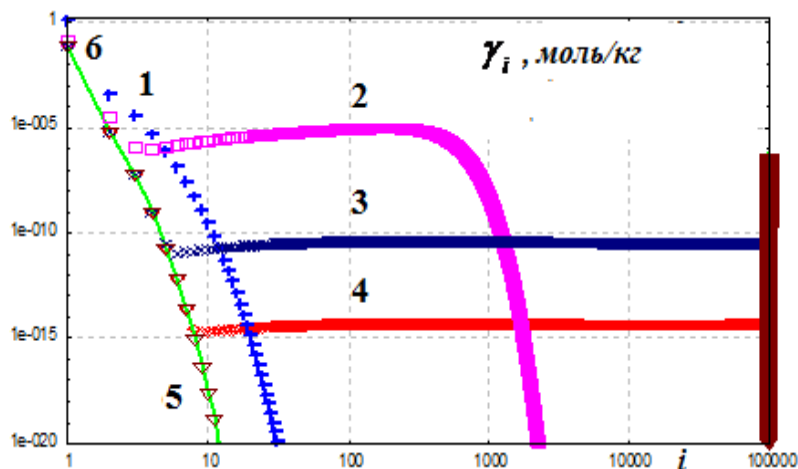


Рис. 27. Функция распределения кластеров по размерам в различные моменты времени (1 – $t=0$, 2 – 3 мкс, 3 – 450, 4 – 570, 5 – 1000), 6 (зеленая кривая) – равновесная функция распределения.

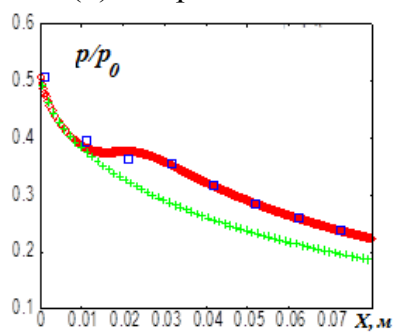


Рис. 28. Распределение давления в сопле. Маркеры – эксперимент.

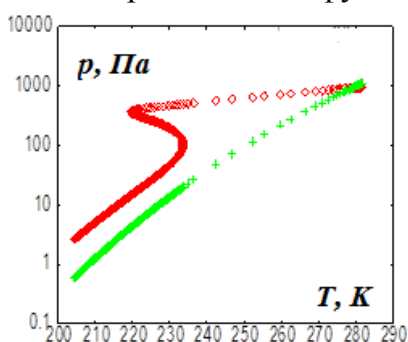


Рис. 29. P-T диаграмма процесса

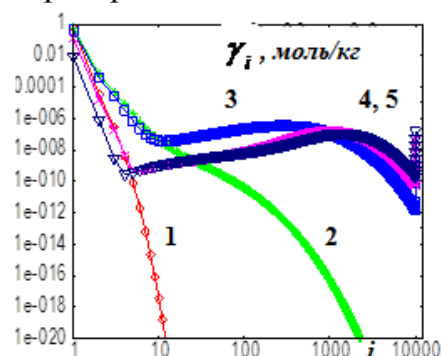


Рис. 30. Функция распределения кластеров воды по размерам 1– $x=0.04$ м, 2–0.0018, 3–0.018, 4–0.032, 5–0.09

В разделе также исследуется конденсация паров воды в соплах с большой геометрической степенью расширения. Моделируются условия эксперимента из работы [Wyslouzil В.Е. и др., 2000]. Рассчитывается конденсация паров воды в азоте при течении в плоском сопле ($L=194$ мм, $R_0=12.5$ мм, $R_*=6.3$ мм, $R_c=10$ мм). Давление в ресивере считается равным 60000 Па, температура 287 К, парциальное давление паров воды в ресивере 1000 Па (массовая доля паров воды равнялась 0.11) (рис. 28-

30). Из графиков следует, что процесс конденсации начал влиять на макропараметры смеси в одном сантиметре от критического сечения сопла. В 1.8 сантиметрах от критики в мономерах содержится более 70 процентов массы, 30 % содержится в кластерах размером от 100 до 1000 молекул. При $X=3.2$ см в мономерах содержится около 20 % массы воды, 80 % в кластерах размером более 800 молекул. Несмотря на то, что на первый взгляд функции распределения при 3.2 см и 9 см от критики отличаются слабо, тем не менее, мономеров воды остается около 2% по массе, остальные молекулы воды содержатся в кластерах размером более 900 молекул. Большие кластеры растут за счет падения концентрации кластеров размером от 1 до 10 молекул, при практически неизменных концентрациях кластеров размером 10 – 800 молекул.

В разделе 5.5 приводятся результаты моделирования конденсации паров свинца в сопле и струе тормозного двигателя. Рассматривается задача об образовании кластеров свинца в струях тормозных ракетных двигателей. Кластеры свинца при взаимодействии с поверхностью способны негативно воздействовать на полезную нагрузку летательного аппарата. Для моделирования процесса образования кластеров свинца в начале методом установления в двумерной нестационарной постановке рассчитывалось вязкое турбулентное течение газа в сопле и струе тормозного ракетного двигателя РДТТ803ДТ (расчеты выполнены Ивановым И.Э. и Крюковым И.А. по разработанной ими программе). Численное моделирование проводилось для случая, когда давление в окружающем пространстве составляет $P_h=1$ Па, что соответствует высоте полета $H=80$ км. Расчетная область соответствовала зоне взаимодействия актуальных элементов конструкции с потоком газа и частиц и составляла 8 м по оси X и 2 м по оси Y . Расчеты производились при следующих начальных параметрах: давление в камере сгорания – 15 МПа; температура в камере - 2800 К; диаметр критического сечения сопла - 0.038 м; средний - молекулярный вес продуктов сгорания -0.0252 кг/моль; удельная теплоемкость смеси при постоянном объеме - 1207.1 Дж/(кг К); коэффициент динамической вязкости - $4.71 \cdot 10^{-5}$ Н/м². Полученные параметры газодинамического поля в сопле и струе тормозного ракетного двигателя служили исходными данными для численного моделирования течения конденсированной фазы, которое было проведено автором. Строились линии тока газа, вдоль которых рассчитывался процесс конденсации свинца. Был рассмотрен случай, когда массовая доля свинца в топливе, а следовательно, и в потоке составляла 0.8 процента. Было проведено математическое моделирование процесса конденсации паров свинца в сопле и струе двигателя. В результате численного моделирования было получено, что на расстоянии более 1 метра от среза сопла функция распределения замораживается, средний размер кластеров остается неизменным и, следовательно, образовавшиеся кластеры достигают поверхности летательного аппарата практически без изменения. Расчеты показывают, что средний размер кластеров является не монотонной функцией угла разлета. На оси струи средний размер кластеров составляет 80 молекул (без учета мономеров 150), в периферийной зоне струи 10 (120) молекул соответственно, в середине струи 100 (580) молекул, соответственно. При этом более 80 процентов массы свинца содержится в кластерах превышающих 50 молекул. Максимальный размер кластеров соответствует углу разворота траектории в 18 градусов от оси сопла. Диаметр кластера свинца, состоящего из 600 молекул, составляет 3.4 нм.

В разделе 5.6 в квазиодномерной нестационарной постановке, допускающей наличие сферической, цилиндрической или плоской симметрии, численно моделировались нестационарные течения, которые, за исключением симметрии, во многом остальном аналогичны реальным течениям, имеющим место в экспериментах,

проводимых в вакуумных камерах. В соответствующих экспериментах облако газа высокого давления образовывалось либо в результате электрического взрыва фольги или тонкой проволоочки. Главной целью исследований, проводимых на таких установках, является создание оптимальных условий для образования в расширяющемся облаке конденсационных кластеров испаренного вещества, а также для их последующего осаждения на специальные подложки или на стенки камеры.

Рассматриваемое течение описывается квазиодномерными нестационарными уравнениями Эйлера, которые в зависимости от решаемой задачи, дополняются моделями термодинамики идеального газа или смеси совершенных газов, а также уравнениями, описывающими кинетику конденсации. Для численного решения системы уравнений используется сеточно-характеристический метод, описанный в главе 3 и позволяющий проводить численное моделирование с явным выделением ударных волн, контактных разрывов и характеристик.

Рассматривалось расширение облака паров серебра с давлением 5270 Па в вакуумную камеру с остаточным давлением 10 Па. Исследовалось влияние типа симметрии течения и начальной величины облака на параметры в пристеночной области. Во всех рассмотренных случаях реализуется головная ударная волна, бегущая по остаточному газу с низким давлением, контактный разрыв и веер волн разрежения. В результате взаимодействия ударной волны со стенками камеры и контактным разрывом образуется сложная волновая структура, содержащая большое количество ударных волн, распространяющихся от пристеночной зоны к левой границе. В результате в пристеночной области температура паров существенно возрастает. Причем скорость падения температуры обратно пропорциональна первоначальной величине облака. Рост температуры в пристеночной области может привести к испарению ранее образованных кластеров. Из-за сильного пересыщения разлетающихся паров в рассмотренном выше течении может начаться процесс неравновесной гомогенной конденсации. Данное течение изучалось с использованием квазихимической модели неравновесной гомогенной конденсации. Рассматривалось расширение чистых паров серебра, которые в начальный момент времени находились в равновесном состоянии ($p_0=5270$ Па, $T_0=1792.43$ К). Путем численного моделирования получена следующая картина течения. В начальной стадии расширения идет интенсивная перестройка функции распределения кластеров по размерам. Но из-за малых концентраций кластеров параметры смеси меняются по адиабатическому закону. После образования достаточного количества зародышей (достижения точки Вильсона) начинается стадия их активного роста, приводящая к уменьшению пересыщения в системе. Максимальное переохлаждение с удалением траектории от контактного разрыва уменьшается, что объясняется уменьшением скорости охлаждения пара. Полученная картина хорошо согласуется с имеющимися данными о протекании процесса неравновесной гомогенной конденсации при расширении газовых смесей. В целом, из проведенных расчетов можно сделать вывод о том, что использование разработанного сеточно-характеристического алгоритма в сочетании с методом численного моделирования неравновесной конденсации позволяет корректно рассчитывать области локализации различных режимов ее протекания. В частности, он позволяет проследить эволюцию кластеров, образовавшихся в веере волн разрежения после пересечения ими системы отраженных ударных волн, что очень важно для разнообразных технологических приложений.

Далее в разделе изучается влияние проницаемости перфорированного экрана (стенки вакуумной камеры) на общую картину и параметры нестационарного

течения, возникающего в результате взаимодействия с экраном головной ударной волны и последующего натекания на него сначала слоя сжатого фонового газа, а затем и расширяющегося облака испаренного вещества. Граничные условия на перфорированном экране были получены в рамках допущений, относящихся к течению газа в каналах перфорации и перечисленных ниже:

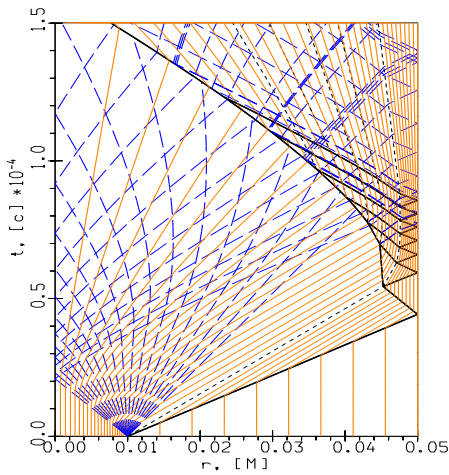
- 1) В любой текущий момент времени течение в каналах перфорации и в некоторой их окрестности является установившимся, влиянием вязкости и теплопроводности газа можно пренебречь.
- 2) Течение газа до входа в каналы перфорации является безотрывным и дозвуковым.
- 3) В целом, в каждом канале перфорации и некоторой его окрестности реализуется запертое течение с переходом через скорость звука.

При перечисленных допущениях поле течения перед экраном не зависит от характера течения за экраном. На перфорированном экране, т.е. при $r = r_w$, вид граничного условия, корректно описывающего влияние экрана на течение перед ним, зависит от времени. До момента времени t_A , который соответствует приходу на экран головной ударной волны, задавалось условие $u_w = 0$. После отражения от экрана головной ударной волны, граничное условие на нем находилось из условий 1-3 и в случае идеального газа и заданной проницаемости экрана (η) сводилось к поиску дозвукового корня известного газодинамического соотношения для изоэнтропических течений

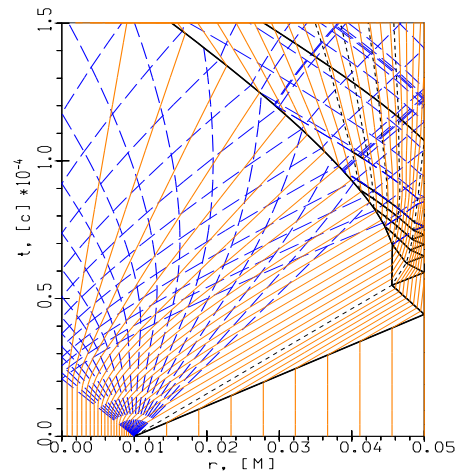
$$M_w \left(\frac{k+1}{2+(k-1)M_w^2} \right)^{(k+1)/2(k-1)} = \eta. \quad \text{В рассматриваемом случае с пористым}$$

экраном могут взаимодействовать ударные волны и контактные разрывы. В этом случае возникает задача о распаде произвольного разрыва на границе пористого экрана. В разделе приводится ее решение для случая идеального газа, которое может содержать в зависимости от числа Маха набегающего потока, либо веер волн разрежения, либо одну или две ударные волны, распространяющиеся внутрь камеры. В представленной серии расчетов варьировалась проницаемость экрана, прочие исходные данные задавались одинаковыми и соответствовали типичным условиям проведения экспериментов с парами серебра. В частности, были выбраны следующие конкретные значения: $r_0 = 1 \text{ см}$, $r_w = 5 \text{ см}$, $p_0 = 5,27 \text{ КПа}$, $T_0 = 1792 \text{ К}$. В качестве фонового газа рассматривались также пары серебра при $p_H = 10 \text{ Па}$ и $T_H = 300 \text{ К}$. На рис. 31 приводятся временные развертки течений видно, что во всех трех случаях реализуются качественно похожие картины течения. С другой стороны видны также и значительные количественные отличия, которые связаны с истечением сжатого фонового газа через перфорированный экран. В частности, в последнем случае толщина слоя сжатого фонового газа монотонно уменьшается, и в итоге он полностью исчезает. Начиная с этого момента времени, на экран натекает уже непосредственно расширяющийся пар. Поэтому образовавшиеся в нем кластеры могут теперь уже беспрепятственно выпадать на экран.

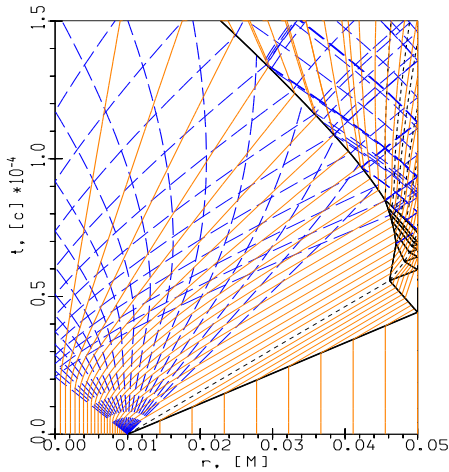
По результатам численного моделирования можно сделать вывод о том, что проницаемый экран или мишень пропускают через себя весь сжатый и соответственно нагретый фоновый газ, после чего условия выпадения на их поверхность кластеров, образовавшихся в расширяющемся облаке пара, становятся более благоприятными, чем в случае непроницаемых стенки или мишени.



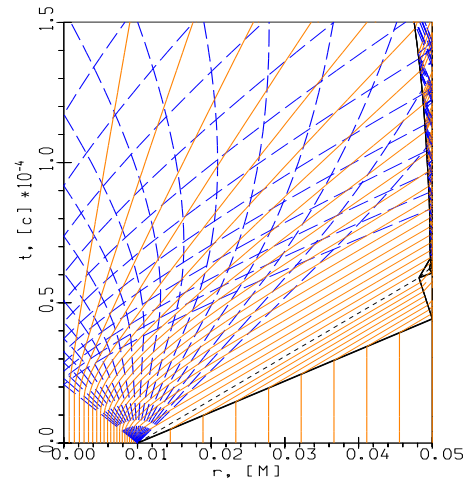
а) $\eta = 0$



б) $\eta = 0.1$



в) $\eta = 0.3$



г) $\eta = 0.8$

Рис. 31. Временные развертки процессов при различных проницаемостях экрана

В шестой главе приводятся задачи, в решении которых автор работы участвовал как разработчик алгоритмов и программ численного моделирования равновесных и неравновесных химических превращений, численного моделирования межфазного обмена импульсом и тепломассообмена, разработчиком алгоритмов и программ подготовки и задания начальных данных. Постановка задач, анализ результатов, а также решение проблем, связанных с обеспечением алгоритмического и программного сопровождения блоков связи ”газ” – ”химия”-”частицы”, проводились коллективом авторов совместно.

В разделе 6.1 приводятся результаты исследований автора, выполненных совместно с И.Э.Ивановым и И.А.Крюковым, которые являются разработчиками методики решения двумерных нестационарных задач физической газовой динамики, авторами соответствующих вычислительных алгоритмов и программных кодов. Целью проводимых исследований было моделирование в двумерной нестационарной постановке самовоспламенения горючей смеси за счет фокусировки ударных волн в канале, возникновения и распространения детонации. Использовалась смесь совершенных газов, в которой протекали химические превращения, описываемые многостадийными кинетическими механизмами. Для решения двумерных нестационарных

уравнений Эйлера, дополненных уравнениями химической кинетики и моделью термодинамики, приведенной в главе 1, использовался оригинальный метод, который являлся комбинацией метода Годунова и метода характеристик. Система уравнений Эйлера решалась вариантом метода Годунова. В результате решения находились ρ , ρu , ρv , E , при этом задача о распаде разрыва решалась с постоянными показателями адиабаты (κ), различными в разных расчетных точках. Концентрации химических компонент находились из интегрирования системы уравнений химической кинетики, записанными вдоль траектории газа, вариантом метода У.Г.Пирумова, при фиксированных на каждой итерации метода ρ , ρu , ρv , E . Значения газодинамических величин и концентрации химических компонент в точке пересечения траекторией газа рассчитанного слоя находились с помощью интерполяции, обеспечивающей сохранение элементного состава. Температура газа находилась из нелинейного уравнения как функция внутренней энергии и мольно-массовых концентраций, давление из уравнения Менделеева-Клайперона как функция плотности, температуры и концентраций. Скорость звука (a) рассчитывалась, как функция плотности, внутренней энергии и их частных производных по давлению и температуре. Показатель адиабаты, используемый при решении задачи о распаде разрыва, рассчитывался в каждой точке как $\kappa = \rho a^2 / p$. Число итераций в методе У.Г.Пирумова использовалось как дополнительный ограничитель на шаг интегрирования уравнений газовой динамики. Сконструированный таким образом метод позволил решить ряд интересных для практики задач, а именно расчет детонации в канале со сферической заглушкой и расчет течения в газодинамическом воспламенителе. В обеих задачах использовалась горючая смесь водорода с кислородом, состоявшая из 6 компонентов, которые участвовали в 8 или 19 обратимых реакциях.

Также в разделе 6.1 рассматривается задача моделирования экспериментов, проводимых Набоко И.М. с коллегами на установке “СФЕРА” в ИТЭС ОИВТ РАН (рис. 32), заполненной гремучим газом. Процесс инициировался взрывом небольших порций твердого взрывчатого вещества. Варьировались энергия взрыва и концентрация водорода в смеси. Прохождение ударных волн регистрировалось датчиками статического давления в шести точках на внутренней поверхности конической полости, фронты воспламенения и горения отслеживались по регистрации интенсивности свечения. Расчеты проводились в два этапа. На первом этапе рассчитывалась задача о сферическом взрыве в однородной реагирующей среде. Применялась программа для расчета квазиодномерных нестационарных химически реагирующих течений сеточно-характеристическим методом, описанным в главе 3. Для лучшего разрешения областей, в которых протекают релаксационные процессы, используется достаточно подробная расчетная сетка, имеющая до 5000 ячеек по пространственной координате. При этом на область, занимаемую продуктами сгорания твердого взрывчатого вещества, приходилось фиксированное количество расчетных точек, а при расчете остальной части расчетной области применялась процедура добавления с течением времени новых расчетных узлов. Одномерный нестационарный расчет проводится до момента достижения ударной волной входного сечения конической полости (рис. 32). После этого параметры сферически симметричного течения переносились с помощью одномерной интерполяции вдоль лучей, выходящих из начала координат, на регулярную двумерную расчетную сетку, построенную в прямоугольной области от центра взрыва до вершины конуса и охватывающую всю коническую поверхность.

Расчетным путем была получена следующая картина течения. После взрыва заряда по горючей смеси распространялась ударная волна. Горючая смесь вблизи контактного разрыва воспламенялась, образовывалась волна горения, переходящая в де-

тонационную волну, которая догоняла ударную волну и образовывала пересжатую детонационную волну, распространяющуюся по исходной горючей смеси. Далее в результате расширения происходил срыв детонации. Ударная волна “убегала” от фронта горения. Таким образом, на момент начала двумерного нестационарного расчета в поле течения находились две зоны с разрывом свойств среды: контактный разрыв между продуктами взрыва твердого вещества и продуктами сгорания горючей смеси водорода с кислородом; фронт горения горючей смеси. Для описания данных образований в двумерном нестационарном расчете использовались *level-set* функции. В результате дифракции ударной волны на внутренней поверхности конуса вблизи вершины конуса происходила фокусировка отраженных ударных волн, сильное повышение давления и температуры, приводящее к воспламенению горючей смеси и формированию фронта горения (рис. 33). Расчеты показывают, что за короткий промежуток времени с момента фокусировки вся горючая смесь в верхней части конуса за отраженной ударной волной сгорает, образовавшийся фронт горения догоняет отраженную волну и формируется структура детонационной волны, которая движется с высокой скоростью навстречу потоку газа, втекающему в полость. При численном моделировании в вершине конуса было получено давление, равное 350 атм, которое коррелирует с экспериментальным давлением, зафиксированным датчиком № 6 (рис. 32).

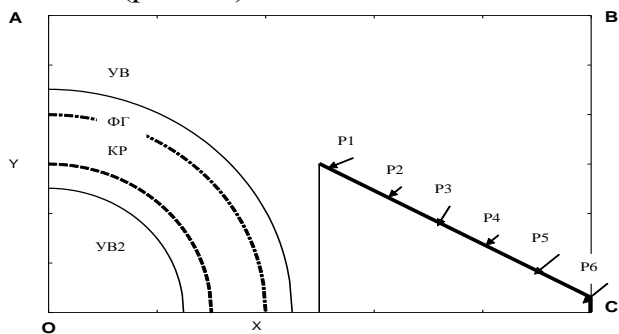


Рис. 32. Качественная картина течения. ФГ – фронт горения. P1-P6 – датчики давления

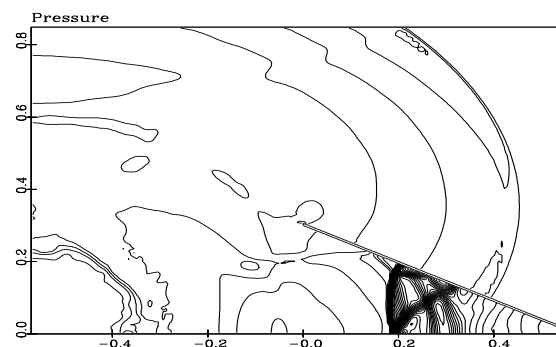


Рис. 33. Изолинии давления после фокусировки.

В разделе 6.2 приводятся результаты исследований по определению параметров конденсированных частиц в зоне космического аппарата с целью оценки параметров возможного загрязнения его элементов, выполненных совместно с В.А. Волковым, И.Э. Ивановым, И.А. Крюковым, А.В. Муслаевым, В.Ю. Стрельцовым под руководством У.Г.Пирумова. Отделение космических аппаратов от третьей ступени ракеты-носителя производится путем запуска твердотопливных тормозных двигателей РДТТ 15Д4, струи которых могут достигать полезной нагрузки космического аппарата, в составе продуктов сгорания содержатся частицы конденсата. Частицы конденсата представляют собой как несгоревшие частицы, входящие в состав топлива, так и частицы металлов, которые образуются при истечении струй в разреженную среду в результате конденсации. Важной задачей является определение величин потоков конденсированных частиц в окрестности космического аппарата с целью оценки параметров возможного загрязнения его элементов. Были получены распределения частиц оксида титана и свинца диаметрами (1-10 мкм) на срезе сопла, а также рассчитана функция распределения кластеров свинца по размерам, образованных за счет гомогенной конденсации паров свинца в сопле и струе тормозного двигателя. Для моделирования процесса конденсации в струе использовались данные вдоль струйки тока, полученные в результате расчета струи чистого газа. Получены функции распределения паров свинца в различные моменты времени. Необходимо отметить, что активная перестройка функции

распределения происходит на первых 30 сантиметрах от среза сопла, далее функция распределения замораживается и практически не меняется. При этом, если на момент вылета из сопла в мономерах свинца содержалось около 60% процентов массы, то после заморозки функции распределения в мономерах осталось менее 2% массы свинца. Среднемассовый размер кластеров свинца составил 2500 молекул, 80% массы свинца заключено в кластерах размером от 1000 до 4500 молекул. На основе проведенных расчетов был сделан вывод, что 98 % пара свинца в струйках тока проходящих вблизи исследуемой поверхности, перейдет в кластеры, при этом число кластеров, состоящих более чем из 1000 молекул составит около 90%. Среднемассовый размер, по которому следует оценивать скорость диффузии кластеров вблизи поверхности составляет 2500 молекул (диаметр кластера равен $5.3 \cdot 10^{-9}$ м).

В разделе 6.3 приводятся результаты исследований автора, выполненных совместно с В.А.Волковым и А.В.Хохловым. Расчет камеры сгорания ВРД проводился с целью определения тепловой нагрузки на стенки камеры и оценки величины вредных выбросов при работе. По результатам расчетов были выработаны рекомендации по оптимизации рабочего процесса и архитектуры камеры сгорания.

Геометрия расчетной области (рис. 34) соответствовала геометрии реальной камеры сгорания. Построена физико-математическая модель таких течений, которая учитывает особенности подачи топлив в камеры сгорания, включая фазовые превращения компонент и взаимодействие фаз, а также сопряженный теплообмен со стенками камеры. Решаются осредненные по Фавру трехмерные нестационарные уравнения Навье-Стокса, уравнение переноса энергии, соответствующие уравнения для капель жидкого горючего, дополненные подмоделями термодинамических и теплофизических свойств, газофазных химических превращений, межфазного обмена импульсом и тепломассообмена. При проведении оценочных расчетов вредных выбросов считается, что все химические реакции, в которых NO_x и CO не участвуют, протекают равновесно, а те в которых участвуют – неравновесно. Серия рисунков 34÷39 иллюстрирует полученные результаты. На рис. 35 показан набор опорных траекторий испаряющихся капель керосина для 20 фракций, выпущенных с одной из скоростей. Конец траектории показывает место, где капля полностью испарилась. Соответствующее распределение концентрации газообразного керосина показано на рис. 37. Рассчитанное в кольцевой камере поле температуры показано на рис. 36 где, в частности, можно наблюдать проникновение струй чистого воздуха на стадии разбавления. На рис. 38-39 приведено распределение концентраций NO_x , CO в центральном сечении. Расчет вредных выбросов на выходе из камеры позволяет оптимизировать подачу топлива и воздуха с точки зрения улучшения эмиссионных характеристик при условии сохранения высокой полноты сгорания. Результаты, полученные в исследовании, согласуются с эмиссионными характеристиками аналогичных устройств. В частности, рассчитанный индекс эмиссии окислов азота I_{NO_x} для разных режимов работы находится в диапазоне от 14 до 30 г/кг_{топл.}

Далее в разделе приводятся результаты расчета тепловых потоков на стенки камеры сгорания двигателя, работающего на смеси водорода с кислородом, с учетом неравновесного протекания химических реакций. Приводится сравнение с экспериментальными данными.

Также представлены результаты численного моделирования обтекания летательного аппарата при движении с большой скоростью в атмосфере Земли, при различных углах атаки (рис. 40). Считается, что химические превращения протекают равновесно. Приводятся результаты сравнения тепловых потоков, распределений давления и температуры с экспериментальными данными.

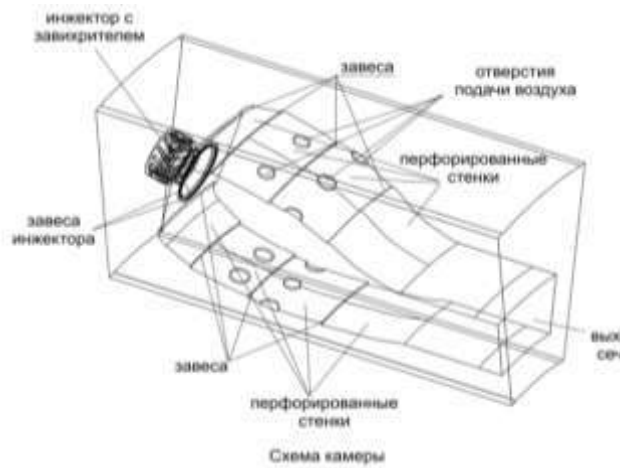


Рис. 34. Схема сектора камеры сгорания ВРД.

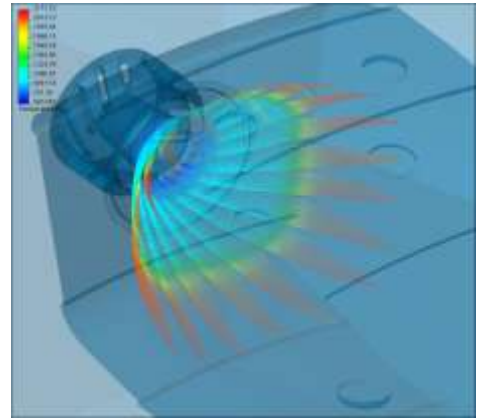


Рис. 35 След одного из наборов опорных траекторий капель.

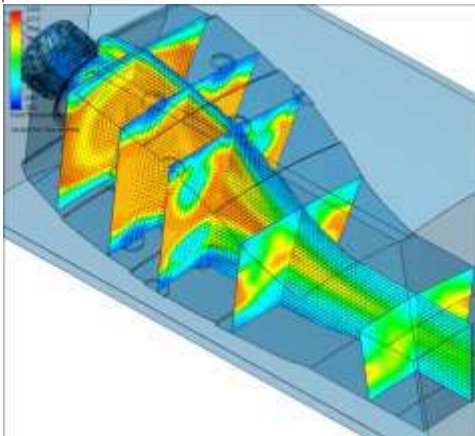


Рис. 36. Распределение температуры потока в некоторых сечениях.

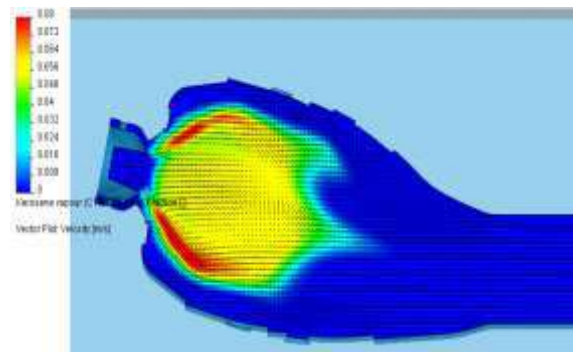


Рис. 37. Распределение газообразного керосина в центральном сечении.

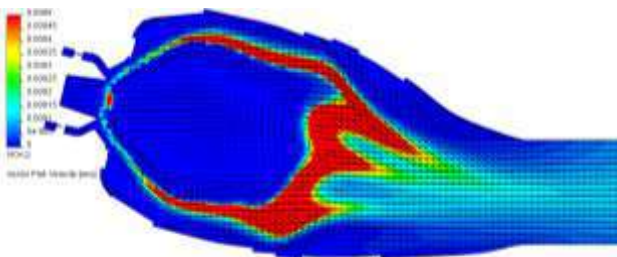


Рис. 38. Распределение концентраций NO_x в центральном сечении.

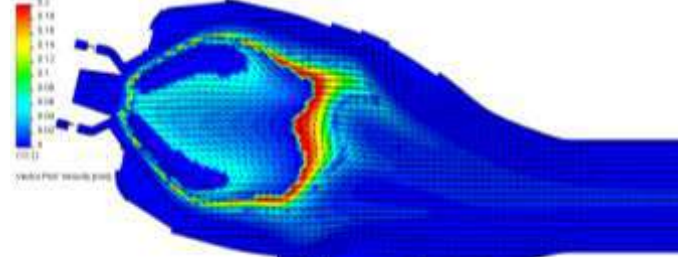
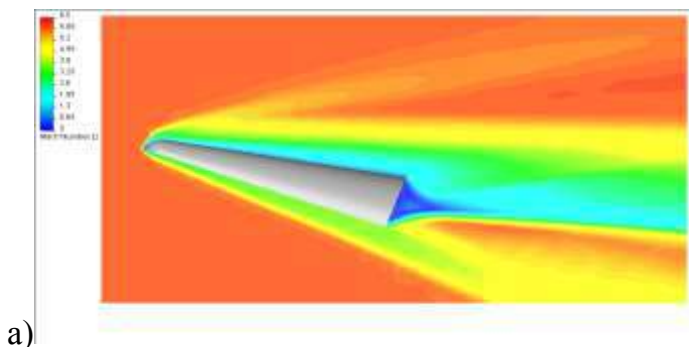
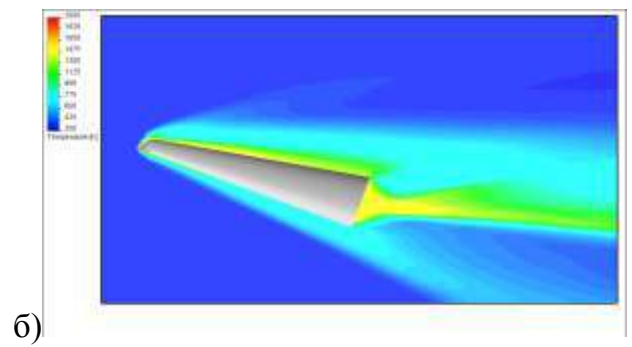


Рис. 39. Распределение концентраций CO в центральном сечении.



а)



б)

Рис. 40. Поля чисел Маха (а) и давления (б), при угле атаки 20°

В **заклучении** сформулированы основные результаты диссертационной работы, выносимые на защиту.

ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ, ВЫНОСИМЫЕ НА ЗАЩИТУ

1. Уточненная универсальная физико-математическая модель высокоскоростных течений многокомпонентного газа и частиц при наличии равновесных и неравновесных, описываемых многостадийными кинетическими механизмами, химических превращений в газовой фазе и на поверхности частиц, обеспечивающая переход системы в состояние термодинамического равновесия при условии неубывания энтропии. Физико-математическая модель включает законы сохранения механики многофазных реагирующих сред, согласованные модели термодинамических свойств веществ и химических превращений, модель межфазного обмена импульсом, тепломассообмена и молекулярного переноса.

2. Сеточно-характеристический метод с явным выделением произвольного числа взаимодействующих разрывов для моделирования квазиодномерных нестационарных многофазных течений с физико-химическими превращениями в каналах. Метод позволяет на нерегулярных сетках рассчитывать течения смеси газов и частиц с явным выделением присутствующих в них сильных и слабых разрывов параметров, таких как ударные волны; контактные разрывы; звуковые характеристики, являющиеся границами вееров разрежения; граничные траектории распространения частиц и всех взаимодействий между ними. В рамках модели многолистной газовой динамики реализован алгоритм расчета бесстолкновительного пересечения траекторий частиц, в результате применения которого в одной точке пространства могут находиться частицы одной начальной фракции, характеризуемые разными значениями массы, скорости, температуры и др. Сеточно-характеристический метод апробирован на решении тестовых задач, а также на задачах моделирования: высокоскоростных двухфазных течений, неравновесной гомогенной конденсации, детонации газовых и газочапельных смесей.

3. Вычислительные алгоритмы расчета состояния термодинамического равновесия многофазных многокомпонентных смесей, на базе которых была решена задача о распаде произвольного разрыва в многокомпонентной смеси газов с произвольными, термодинамически допустимыми уравнениями состояния. Для модели многокомпонентных смесей совершенных газов построено решение задачи о распаде произвольного разрыва в случаях неизменности составов слева и справа от разрыва, в случаях, когда составы удовлетворяют условиям термодинамического равновесия и в случае, когда по разные стороны от ударной волны (если она реализуется в результате распада разрыва) состав может либо сохраняться, либо находиться в состоянии термодинамического равновесия.

4. Модификация вычислительного алгоритма метода У.Г.Пирумова для численного интегрирования жестких систем уравнений химической кинетики и межфазного обмена импульсом и тепломассообмена, обеспечивающая автоматическое выполнение законов сохранения элементного состава многофазной смеси. Данный метод вошел в качестве элемента в сеточно-характеристический метод, разработанный автором. Использовался при моделировании стационарных и нестационарных волн горения и детонации в горючих газовых, газочапельных и металлогазовых смесях. В качестве элемента программных комплексов моделирования многомерных газочапельных и многофазных течений, используемых при расчете течений в камерах сгорания, соплах и струях двигателей, для моделирования задач горения, детонации, образования токсичных компонент и др.

5. Вычислительный алгоритм решения прямой задачи теории сопла в квазиодномерной стационарной постановке, в случае течения смеси совершенных газов с

химическими превращениями, описываемыми многостадийными кинетическими механизмами, который обеспечивает прохождение особой точки ($M=1$) при выполнении условия неубывания энтропии.

6. Результаты численного решения в автомодельной и неавтомодельной постановках задачи о распаде произвольного разрыва в детонирующем газе, в случае, когда продукты сгорания представляют собой смесь совершенных газов при учете равновесного и неравновесного протекания обратимых химических реакций. На примере численного моделирования детонации горючих смесей водорода с кислородом, разбавленных аргонном, показано, что в случае устойчивой детонации скорость детонационной волны и температура в зоне, примыкающей к головной ударной волне, полученные из решения уравнений нестационарной реагирующей газовой динамики, не зависят от механизма химических реакций, и стремятся к соответствующим значениям, полученным в результате решения автомодельной задачи о распаде разрыва в детонирующем газе.

7. Решение задачи о стационарной детонационной волне в канале переменного сечения со сверхзвуковым потоком на входе и выходе, для случая, когда горючая смесь и продукты сгорания представляют собой смесь совершенных газов и, когда течение до детонационной волны считается “замороженным”, а за детонационной волной “равновесным”. Предложен способ представления результатов численного моделирования в виде $R-R$ диаграммы, которая позволяет ответить на вопрос: при каких соотношениях радиусов входного, критического и выходного сечений сопла при заданных параметрах потока на входе в сопло в нем существует решение со стационарной детонационной волной; и в каком сечении она расположена.

8. Результаты решения в одномерной нестационарной постановке с использованием оригинального сеточно-характеристического метода задачи распада произвольного разрыва в многокомпонентных газокapельных смесях на границе “инертный газ – горючая смесь” (“водород-воздух + капли воды”, “воздух + капли керосина”, “воздух+капли бензина”). Получена детальная картина течения, включающая образование, распространение и взаимодействие волн горения, ударных и детонационных волн, образование зон чистого газа, переход детонационных волн к режиму распространения со слабо меняющейся скоростью, а также ослабление и затухание детонации при впрыске капель воды.

9. Результаты исследования тонкой структуры стационарных детонационных волн в газовых, газокapельных и металлогазовых горючих смесях. В предположении, что продукты испарения участвуют в равновесных и неравновесных газофазных химических реакциях, а в случае металлогазовых смесей химические превращения протекают и на поверхности капель металлов и приводят к образованию окислов. В составе газовой фазы допускается наличие конденсированных компонент. Получена тонкая структура волн детонации и дефлаграции в горючих смесях (“водород-воздух”, “капли метанола-воздух”, “капли воды – водород-воздух”, “частицы алюминия, магния, бора – воздух”), включающая диапазон скоростей потока, при которых существует детонация и дефлаграция; расстояния, на которых происходит воспламенение горючей смеси, и устанавливается состояние, близкое к термодинамическому равновесию. Рассмотрены случаи установления двухфазного равновесия. При исследовании воздействия капель воды на детонацию установлено наличие режима течения, при котором детонация Чепмена-Жуге отсутствует, зависящего от массового содержания и начального диаметра капель воды. Для смесей “частицы алюминия – воздух” и “частицы бора – воздух” установлено, что переход от

неравновесного состояние к равновесному протекает через достаточно продолжительное состояние частичного равновесия.

10. Уточненная квазихимическая модель гомогенной конденсации, включающая подмодели термодинамических свойств кластеров, алгоритмы расчета равновесных функций распределения кластеров по размерам как в стабильной, так и в метастабильной областях, элементарные реакции присоединения (отрыва) мономера к n -меру, в том числе и в присутствии инертного газа; уточненный метод и вычислительный алгоритм решения уравнений кинетики конденсации – численного расчета функции распределения кластеров по размерам, обеспечивающий корректный расчет кластеров со сверхмалыми концентрациями. Результаты исследований влияния усечения бесконечной системы кинетики конденсации до конечной. Результаты расчетов динамики изменения неравновесных функций распределения кластеров по размерам для аргона, меди, свинца, воды, серебра в условиях, характерных для технологических установок, в том числе, и в присутствии инертных газовых смесей.

11. Вычислительные алгоритмы и программные коды для расчета равновесного состава и решения уравнений химической кинетики и кинетики конденсации, межфазного обмена импульсом и тепломассообмена, которые были интегрированы в программные комплексы многомерного моделирования и применены при решении задач физической динамики многофазных сред (методики многомерных расчетов и программы разработаны соавторами при участии автора). С их использованием были проведены численные исследования детонации в модельных камерах сгорания и воспламенителях; численное моделирование загрязняющего воздействия кластеров свинца, образованных в результате гомогенной конденсации паров, в струях твердотопливных ракетных двигателей; численные исследования сгорания и эмиссионных характеристик керосино-воздушной газочапельной смеси, на основе которого уточнена конфигурация проектируемой камеры сгорания; расчет тепловых потоков на стенки камеры сгорания двигателя, работающего на смеси водорода с кислородом; численное моделирование обтекания летательного аппарата при движении с большой скоростью в атмосфере Земли.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Статьи в журналах из перечня ВАК

1. Гидаспов В.Ю., Иванов И.Э., Крюков И.А. Численное моделирование инициирования детонации в фокусирующем канале. Математическое моделирование. 1992. Т. 4. № 12. С. 85-88.
2. Виноградов А.В., Волков В.А., Гидаспов В.Ю., Розовский П.В. О влиянии остаточного газа на расширение плотного газового облака в вакуумной камере и его взаимодействие с мишенью или со стенкой. ЖТФ. 1993. Т. 63. № 11. С. 20-24.
3. Виноградов А.В., Волков В.А., Гидаспов В.Ю., Муслиев А.В., Розовский П.В. Метод расчета нестационарных реагирующих течений с явным выделением поверхностей сильных и слабых разрывов. Математическое моделирование. Т. 8. № 3. 1996. С. 79-90.
4. Виноградов А.В., Волков В.А., Гидаспов В.Ю., Розовский П.В. Взаимодействие расширяющегося газового облака с перфорированным экраном. Журнал технической физики. 1997. Т. 67. № 5. С. 19-22.
5. Пирумов У.Г., Гидаспов В.Ю., Даниелян А.А., Иванов И.Э., Крюков И.А., Муслиев А.В. Численный анализ двухфазного течения в газодинамическом фильтре. Математическое моделирование. 1998. Т. 10. № 11. С. 19-28.

6. В.А. Волков, В.Ю. Гидаспов, У.Г. Пирумов, В.Ю. Стрельцов. Численное моделирование течений реагирующих газочапельных и газовых смесей в экспериментах по воспламенению метанола. ТВТ. 1998. № 3. С. 424-434.
7. В.Ю. Гидаспов, А.А. Карпов. Численное исследование динамики аэрозоля в задаче о загрязнении верхней атмосферы. Математическое моделирование. Т. 11. № 2. 1999 С. 65-73.
8. В.А. Волков, В.Ю. Гидаспов, В.Ю. Стрельцов. Численное моделирование течений реагирующих газовых смесей за отраженными ударными волнами. Математическое моделирование. Т. 11. № 2. 1999. С. 74-80.
9. В.Ю. Гидаспов, Н.В. Безменова, С.А. Шустов, И.Э. Иванов. Моделирование течения продуктов сгорания в соплах ЖРДМТ. Математическое моделирование. Т. 11. № 6. 1999. С. 45-51.
10. Гидаспов В.Ю., Иванов И.Э., Крюков И.А., Стрельцов В.Ю. Исследование нестационарных неравновесных процессов в акустическом резонаторе Гартмана. Математическое моделирование, 2003. Т. 15. № 6. С. 41-47.
11. В.Ю. Гидаспов, И.Э. Иванов, И.А. Крюков, И.М. Набоко, В.А. Петухов, В.Ю. Стрельцов. Исследование распространения волн горения и детонации в кумулирующем объеме. Математическое моделирование. 2004. Т. 16. № 6. С. 118-122.
12. В.Ю. Гидаспов, В.Ю. Стрельцов. Исследование влияния капель распыленной воды на воспламенение и детонацию водородо-воздушной смеси. Математическое моделирование. 2004. Т. 16. № 6. С. 123-126.
13. В.А. Волков, В.Ю. Гидаспов, В.Н. Гаврилюк, В.Ю. Стрельцов, А.В. Хохлов Численное моделирование газочапельных реагирующих потоков в камерах сгорания двигательных установок. Математическое моделирование. 2005. Т. 17. № 8. С. 46-60.
14. Е.В. Астраханцева, В.Ю. Гидаспов, Д.Л. Ревизников. Математическое моделирование гемодинамики крупных кровеносных сосудов. Математическое моделирование. 2005. Т. 17. № 8. С. 61-80.
15. Е.В. Астраханцева, В.Ю. Гидаспов, Д.Л. Ревизников. Применение TVD-схем для решения уравнений гемодинамики. Труды МАИ. 2005. № 20. 29 с.
16. Е.В. Астраханцева, В.Ю. Гидаспов, У.Г. Пирумов, Д.Л. Ревизников. Численное моделирование гемодинамических процессов в артериальном дереве. Исследование влияния пережатия сосуда на параметры течения. Математическое моделирование. 2006. Т. 18. № 8. С. 25-36.
17. В.Ю. Гидаспов. Вычислительный алгоритм решения задачи о распаде произвольного разрыва в равновесно-реагирующем газе. Математическое моделирование. 2006. т. 18. № 8. С. 64-76.
18. В.А. Волков, В.Н. Гаврилюк, В.Ю. Гидаспов, А.В. Хохлов. Численное моделирование гиперзвукового обтекания тел воздухом с учетом равновесной диссоциации. Математическое моделирование. 2007. Т. 19. № 12. С. 70-80.
19. В.Ю. Гидаспов, У.Г. Пирумов, Н.С. Северина. Математическое моделирование квазиодномерных нестационарных течений реагирующего газа с произвольным числом взаимодействующих разрывов. Вестник МАИ. Т. 15. № 5. 2008. С. 83-94.
20. В.Ю. Гидаспов, О.А. Москаленко, У.Г. Пирумов. Численное моделирование стационарных детонационных волн в газовых и газочапельных реагирующих смесях. Вестник МАИ. Т. 16. № 2. 2009. С. 51-61.
21. В.Ю. Гидаспов, С.А. Лосев, Н.С. Северина, В.Н. Ярыгина. Влияние электронного возбуждения на структуру ударной волны в кислороде. Вестник МАИ. Т. 16. № 2. 2009. С. 93-100.
22. Гидаспов В.Ю., Лосев С.А., Северина Н.С. Роль термической неравновесности в моделировании химической кинетики на примере диссоциации молекулярного кислорода за фронтом ударной волны. Математическое моделирование. 2009. Т. 21. № 9. С. 3-15.

23. В.Ю. Гидаспов, Н.С. Северина. Численное моделирование экспериментов по определению времени задержки воспламенения в ударных трубах. Вестник МАИ. Т. 16. № 6. 2009. С. 182-192.
24. С.А. Шустов, В.Ю. Гидаспов, И.Э. Иванов, У.Г. Пирумов. Основы физической газовой динамики сопел и струй ракетных двигателей малой тяги. Вестник МАИ. Т. 16. № 7. 2009. С. 31-42.
25. В.Ю. Гидаспов. Распад разрыва в детонирующем газе. Вестник МАИ. Т. 17. № 6. 2010. С. 72-79.
26. В.Ю. Гидаспов, Н.С. Северина. Численное исследование газовой детонации в ударной трубе. Вестник Нижегородского университета им. Н.И.Лобачевского. №4. Часть 3. 2011. С. 714-716.
27. В.Ю. Гидаспов. Численное моделирование стационарных волн горения и детонации в смеси частиц алюминия с воздухом. Труды МАИ. 2011. № 49. 18 с.
28. В.Ю.Гидаспов, У.Г.Пирумов, Н.С.Северина. Тестирование методики моделирования нестационарных течений газа с ударными и детонационными волнами. Вестник МАИ. Т. 18. № 6. 2011. С. 119-124.
29. В.Ю. Гидаспов. Численное моделирование стационарных волн горения и детонации в смеси частиц магния с воздухом. Труды МАИ. 2013. № 66. 14 с.
30. В.Ю. Гидаспов. Численное моделирование химически неравновесного течения в сопле жидкостного ракетного двигателя. Вестник МАИ. Т. 20. № 2. 2013. С. 90-97.
31. В.Ю. Гидаспов, Н.С. Северина. Численное моделирование экспериментов по определению времени задержки воспламенения за падающими ударными волнами. Физика горения и взрыва, 2013. Т. 49. № 4. С. 31-40.
32. В.Ю. Гидаспов, О.А. Москаленко, У.Г. Пирумов. Численное моделирование стационарных волн горения и детонации в керосино-воздушной горючей смеси. Вестник МАИ. Т. 21. № 1. 2014. С. 169-177.
33. В.Ю. Гидаспов, Н.С. Северина. Численное моделирование тонкой структуры цилиндрической детонационной волны в водородно-воздушной горючей смеси. ТВТ, 53:4 (2015), 556–560.
34. В.Ю. Гидаспов. Численное моделирование одномерного стационарного равновесного течения в детонационном двигателе. Труды МАИ. 2015. № 83. 20 с.
35. Gidasпов V.Yu., Golubev V.K, Severina N.S. A Software Package For Simulation Of Unsteady Flows Of The Reacting Gas In The Channel. Вестник южно-уральского государственного университета. Серия: математическое моделирование и программирование. 2016. Т. 9. № 3. С. 94-104.
36. В.Ю. Гидаспов, О.А. Москаленко. Численное моделирование инициирования детонации в керосино-воздушной газокapельной смеси падающей ударной волной. Труды МАИ. 2016. № 90.
37. В.Ю. Гидаспов. Численное моделирование стационарных волн горения и детонации в смеси частиц бора с воздухом. Труды МАИ. 2016. № 91.
38. В.Ю.Гидаспов, Н.С. Северина. Численное моделирование детонации пропано-воздушной горючей смеси с учетом необратимых химических реакций. ТВТ, 55:5 (2017), 795-799.
39. Гидаспов В. Ю., Иванов И. Э., Назаров В. С., Малашин Ф. А., Крюков И. А. Исследование процесса конденсации в соплах с большой степенью расширения. Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2018. Т.19. Вып. 2.
40. В.Ю. Гидаспов, О.А. Москаленко, Н.С. Северина. Численное исследование влияния капelь воды на структуру детонационной волны в водородо-воздушной горючей смеси. ТВТ, 56:5 (2018), 829-835.

41. Морозов А.Ю., Ревизников Д.Л., Гидаспов В.Ю. Алгоритм адаптивной интерполяции на основе kd-дерева для решения задач химической кинетики с интервальными параметрами. Математическое моделирование. 2018. № 12. С. 129-144.
42. В.Ю. Гидаспов, Н.С. Северина. Моделирование детонации металлогазовых горючих смесей в высокоскоростном потоке за ударной волной. ТВТ, 57:4 (2019), 560-571.

Монографии

43. В.А. Котельников, В.А. Волков, В.Ю. Гидаспов, М.В. Котельников, А.В. Хохлов. Математическое моделирование обтекания тел слабоионизированной столкновительной плазмой. М.: Изд-во МАИ, 2007.-144 с.: ил.
44. В.А. Котельников, М.В. Котельников, В.Ю. Гидаспов. Математическое моделирование обтекания тел потоками столкновительной и бесстолкновительной плазмы. М.: Изд-во Физматлит, 2010. - 272 с.: ил.
45. А.Б. Алатырцев, В.Ю. Гидаспов, И.Э. Иванов, С.А. Лосев, Ю.Н. Панов, Д.Л. Ревизников, А.В. Ципенко. Физико-математические модели в экологии. М.: Изд-во МАИ, 2011.-212 с.
46. В.Ю. Гидаспов, Н.С. Северина. Некоторые задачи физической газовой динамики. М.: Изд-во МАИ, 2016.-196 с.

Зарегистрированные объекты интеллектуальной собственности. Программы для ЭВМ

47. Гидаспов В.Ю. № 2010617711 от 20.09.2010 г. Расчёт равновесного состава смеси совершенных газов при заданных плотности и внутренней энергии.
48. Гидаспов В.Ю. № 2011610174 от 08.10.2010 г. Расчёт воспламенения горючей газовой смеси в камере постоянного объема.
49. Гидаспов В.Ю. № 2011619241 от 05.10.2011 г. Расчет равновесной детонационной адиабаты горючих газовых смесей.
50. Гидаспов В.Ю. № 2011619242 от 05.10.2011 г. Моделирование движения и теплообмена частиц в двумерном газовом поле.
51. Гидаспов В.Ю. № 2012618917 от 02.08.2012 г. Равновесный расчет камеры сгорания жидкостного ракетного двигателя.
52. Гидаспов В.Ю. № 2012618882 от 02.08.2012г. Моделирование нестационарного течения, возникающего после распада разрыва в равновесно реагирующем многокомпонентном газе.
53. Гидаспов В.Ю. № 2013617749 от 25.06.2013 г. Программный комплекс для моделирования химически неравновесного течения в сопле ЖРД
54. Гидаспов В.Ю., Северина Н.С. № 2013617251 от 25.06.2013 г. Программный комплекс для моделирования квазиодномерных нестационарных течений нераагирующего газа с явным выделением сильных разрывов.
55. Гидаспов В.Ю. № 2016662644 от 26.09.2016 г. Программа моделирования квазиодномерного стационарного равновесного течения в сопле детонационного двигателя.
56. Гидаспов В.Ю. № 2018610909 от 20.11.2017 г. Программа расчета равновесных функций распределения по размерам конденсирующейся компоненты в смеси совершенных газов.
57. Гидаспов В.Ю., Северина Н.С. № 2018664616 от 23.10.2018 г. Программа для моделирования инициирования и распространения детонации за отраженной ударной волной в канале.