На правах рукописи

Кононов Дмитрий Сергеевич

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЫСОКОСКОРОСТНЫХ ТЕЧЕНИЙ С УДАРНЫМИ И ДЕТОНАЦИОННЫМИ ВОЛНАМИ В КАНАЛАХ

Специальность 01.02.05 – Механика жидкости газа и плазмы

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Москва, 2022 г.

Работа выполнена на кафедре «Вычислительная математика и программирование» Московского авиационного института (национального исследовательского университета).

Научный руководитель:	**Гидаспов Владимир Юрьевич**, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, ведущий научный сотрудник кафедры «Вычислительная математика и программирование» Московского авиационного института (национального исследовательского университета).
Официальные оппоненты:	**Мануйлович Иван Сергеевич**, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Лаборатории газодинамики взрыва и реагирующих систем Научно-исследовательского института механики Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова.
	Котов Михаил Алтаевич, кандидат физико-математических наук, Ученый секретарь Института проблем механики им. А. Ю. Ишлинского Российской академии наук, старший научный сотрудник Лаборатории лазерных разрядов.
Ведущая организация:	Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт автоматизации проектирования Российской академии наук

Защита состоится «22» апреля 2022 г. в 12 часов 00 минут на заседании диссертационного совета Д 212.125.14 Московского авиационного института по адресу:
125993, Москва, А-80, ГСП-3, Волоколамское шоссе, дом 4.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Московского авиационного института по адресу: 125993, Москва, А-80, ГСП-3, Волоколамское шоссе, дом 4 или на сайте МАИ по ссылке: https://mai.ru/events/defence/index.php?ELEMENT_ID=162631

Автореферат разослан «___» _____ 2022 г.

Отзывы на автореферат в двух экземплярах, заверенные печатью учреждения, просьба направлять по адресу: 125993, Москва, А-80, ГСП-3, Волоколамское шоссе, дом 4, отдел ученого и диссертационных советов.

Ученый секретарь диссертационного совета Д 212.125.14, д.ф.-м.н., доцент В.Ю. Гидаспов

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования. Исследование процессов детонации представляет большой практический интерес для отечественных и зарубежных исследователей. Он обусловлен как желанием использования данного физического явления в перспективных энергетических установках, так и необходимостью обеспечения безопасности труда путем подавления процессов горения.

Продолжающийся бурный рост возможностей вычислительной техники дает возможность использовать численное моделирование как важное дополнение к натурным экспериментам. Об этом свидетельствуют многочисленные работы научных коллективов, представленные на многих тематических международных конференциях и в ряде научных изданий. При этом, хорошо апробированные математические модели и алгоритмы позволяют получать результаты, не уступающие по надежности экспериментальным данным. Учитывая сложность и многофакторность физико-химических явлений, протекающих в течениях с реагирующими смесями при наличии ударных и детонационных волн, задача их моделирования до сих пор не может быть решена в полном объеме. Поэтому задачи по разработке оригинальных вычислительных программных комплексов и по модификации уже существующих решений до настоящего времени не теряют своей актуальности.

Цель диссертационной работы состоит в построении уточненных физико-математических и вычислительных моделей, а также проведении расчетно-теоретических исследований высокоскоростных течений многокомпонентного газа при наличии ударных и детонационных волн с учетом протекания равновесных и неравновесных химических превращений.

Задачами исследования являются:

- разработка уточненных вычислительных алгоритмы и программных кодов для моделирования химически равновесных и неравновесных течений;
- численное моделирование равновесного и неравновесного стационарного течения горючей смеси с детонационной волной в канале переменного сечения со сверхзвуковым потоком на входе и выходе;
- численные исследования по определению в одномерной постановке устойчивых стационарных режимов течения горючих смесей с детонационной волной в канале переменного сечения со сверхзвуковым потоком на входе и выходе;
- расчетно-теоретическое исследование процесса инициирования и распространения детонации за отраженной ударной волной.

Методы исследования. Основным методом исследования является математическое моделирование.

Научная новизна и практическая значимость работы. В диссертационной работе получены следующие новые результаты:

- проведен термодинамический анализ квазиодномерного стационарного течения горючей смеси, продукты сгорания которой представляют собой многокомпонентную смесь совершенных газов, в канале переменного сечения со сверхзвуковым потоком на входе и выходе, в квазиодномерной нестационарной постановке для течения водородо-воздушной горючей смеси численно получены устойчивые режимы течения с пересжатой детонационной волной в докритической области;
- в квазиодномерной стационарной постановке решена задача прохождения особой точки *(M=1)* в канале переменного сечения со сверхзвуковым потоком на входе и выходе для многокомпонентного совершенного газа с химическими превращениями, описываемыми многостадийными кинетическими механизмами, при соблюдении условия неубывания энтропии смеси, при наличии детонационной волны в докритической области;
- в рамках модели многокомпонентной смеси совершенных газов с химическими превращениями, описываемыми многостадийными кинетическими механизмами, численно решена задача о распространении детонационной волны в канале после отражения от закрытого торца. Показано, что доминирующие параметры, получаемые при решении данной задачи, могут быть получены из решения задачи об отраженной детонационной волне в предположении, что за ней достигается термодинамическое равновесие. Определены числа Маха падающей ударной волны, при которых при отражении реализуется режим Чепмена-Жуге.

Основные положения, выносимые на защиту.

1. Математические модели и уточненные алгоритмы расчета равновесных и неравновесных течений горючих смесей со стационарной детонационной волной в канале переменного сечения со сверхзвуковым потоком на входе и выходе;
2. Результаты моделирования равновесного течения метано-воздушной горючей смеси в канале переменного сечения, аппроксимационные формулы, позволяющие определить положение стационарной детонационной волны в канале, допускаемые одномерной теорией;
3. Вычислительный алгоритм решения стационарной задачи в канале переменного сечения, обеспечивающий непрерывный переход от дозвукового режима течения к сверхзвуковому с учетом наличия стационарной

детонационной волны в докритической области в канале со сверхзвуковым потоком на входе и выходе;

4. Результаты численного исследования устойчивости положения детонационной волны в канале переменного сечения, выполненные в квазиодномерной нестационарной постановке;

5. Результаты решения задачи об отраженной ударной волне в детонирующем газе.

Достоверность полученных результатов обусловлена строгостью математических постановок задач, отсутствием противоречия с известными законами сохранения, устойчивостью и сходимостью применяемых численных методов, сравнением полученных в ходе расчетов данных с экспериментами и результатами других авторов.

Апробация результатов исследования осуществлена в публикациях, докладах и выступлениях на следующих конференциях: VI Международная молодежная научная конференция «Актуальные проблемы современной механики сплошных сред и небесной механики (Томск, 2016), XI Международная конференция по неравновесным процессам в соплах и струях (Алушта, 2016 г.); XVI-XVII Международные конференции «Авиация и космонавтика» (Москва, 2016, 2018); XX - XXII Международные конференции по Вычислительной механике и современным прикладным программным системам (Алушта, 2017-2021 гг.); XLIII Международная молодежная научная конференция «Гагаринские чтения» (Москва,2017); Гидродинамика больших скоростей и кораблестроение (Чебоксары, 2018 г.); XII-XIII Международная конференция по прикладной математике и механике в аэрокосмической отрасли (Алушта, 2018, 2020 гг.); XII Всероссийский съезд по теоретической и прикладной механике (Уфа, 2019 г).

Публикации. По результатам научных исследований в рамках диссертационной работы опубликовано 16 работ, в том числе 4 статьи в периодических изданиях, включенных в перечень ВАК или в международные реферативные базы данных Scopus и Web of Science.

Вклад автора заключается в разработке вычислительных алгоритмов, написании программных кодов, проведении широкомасштабных вычислительных экспериментов и анализе полученных результатов.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения; четырех глав, заключения, списка литературы. Общий объем диссертации 163 страницы, включая 20 таблиц, 67 рисунков и схем. Список использованной литературы содержит 127 наименования.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность темы, сформулированы концепция и основные положения диссертационной работы, показана научная новизна и практическая значимость результатов. Изложены основные положения, выносимые на защиту, приводится список публикаций и сведения об апробации работы. Приводятся обзор литературы и история развития исследования процессов, протекающих в сверхзвуковых реагирующих течениях с ударными и детонационными волнами.

В **первой главе** представлена физико-математическая модель течений в каналах при наличии химических реакций, описаны использованные в работе численные методы и вычислительные алгоритмы [1-4].

Нестационарные химически неравновесные течения газа в канале описываются системой уравнений Эйлера, дополненной термическим и калорическим уравнениями состояния и уравнениями химической кинетики:

$$\frac{\partial \rho F}{\partial t} + \frac{\partial \rho u F}{\partial x} + \frac{\partial \rho v F}{\partial y} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho u F}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u^2 + P) F}{\partial x} + \frac{\partial \rho u v F}{\partial y} = 0\,, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho v F}{\partial t} + \frac{\partial \rho u v F}{\partial x} + \frac{\partial (\rho v^2 + P) F}{\partial y} = 0\,, \quad (3)$$

$$\frac{\partial \rho \left(U + \frac{u^2+v^2}{2}\right) F}{\partial t} + \frac{\partial \rho u F \left(U + \frac{P}{\rho} + \frac{u^2+v^2}{2}\right)}{\partial x} + \frac{\partial \rho v F \left(U + \frac{P}{\rho} + \frac{u^2+v^2}{2}\right)}{\partial y} = 0, \quad (4)$$

$$\frac{\partial \rho F \gamma_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u F \gamma_i}{\partial x} + \frac{\partial \rho v F \gamma_i}{\partial y} = F W_i, i = 1..N, \quad (5)$$

$$P = \rho R T \sum_{i=1}^{N} \gamma_i\,, \quad (6)$$

$$U = \sum_{i=1}^{N} \gamma_i U_i(T). \quad (7)$$

Здесь x, y – декартовы координаты, t – время, ρ – плотность, u, v – компоненты вектора скорости, P – давление, T – температура, $U_i(T)$ – заданная функция – внутренняя энергия и γ_i – мольно-массовая концентрация i-ого компонента в смеси, $F = F(x, y)$ – зависимость площади поперечного сечения канала от координат, W_i – число молей i -того компонета, образующегося в единице объема в единицу времени в результате химических реакций, R – универсальная газовая постоянная.

При постановке ударной волны на ней разрешались интегральные законы сохранения (в форме соотношений Ренкина-Гюгонио):

$$\rho_1 (D - u_1) = \rho_2 (D - u_2), \quad (8)$$

$$P_1 + \rho_1 (D - u_1)^2 = P_2 + \rho_2 (D - u_2)^2, \quad (9)$$

$$U_1 + \frac{P_1}{\rho_1} + \frac{(D-u_1)^2}{2} = U_2 + \frac{P_2}{\rho_2} + \frac{(D-u_2)^2}{2}, \quad (10)$$

$$\bar{\gamma}_1 = \bar{\gamma}_2, \qquad (11)$$

где D – скорость распространения ударной волны, $\bar{\gamma}$– вектор концентраций. Индексами «1» и «2» обозначены параметры слева и справа от разрыва.

В работе рассматривается многокомпонентная система переменного состава из N веществ, в которой протекает N_R реакций вида:

$$\sum_{i=1}^{N} \overleftarrow{\nu}_i^{(r)} M_i \underset{\overrightarrow{W}^{(r)}}{\overset{\overleftarrow{W}^{(r)}}{\Leftrightarrow}} \sum_{i=1}^{N} \vec{\nu}_i^{(r)} M_i, \quad , r = 1..N_r, \qquad (12)$$

где $\overleftrightarrow{\nu}_i^{(r)}$– стехиометрические коэффициенты, M_i – символ молекулы, $\overleftrightarrow{W}^{(r)}$ – скорость (r)-ой химической реакции в прямом и обратном направлениях.

Для замыкания системы уравнений использовались термические и калорические уравнения состояния для смеси совершенных газов (6)-(7) с соответствующим им выражением для потенциала Гиббса:

$$G(P,T,\gamma) = \sum_{i=1}^{N} \gamma_i [RT \ln(P\gamma_i / P_0 \sum_{j=1}^{N} \gamma_j) + G_i^0(T)], \qquad (13)$$

где $P_0 = 101325$ Па - стандартное давление, $G_i^0(T)$ - стандартные молярные потенциалы Гиббса компонентов, известные из справочников функции.

С целью согласования кинетики типа (12) с термодинамикой, описываемой потенциалом Гиббса вида (13), использовалась связь между константами скоростей каждой пары взаимообратных реакций через константу равновесия.

В случае, когда рассматриваются химически равновесные течения, состав продуктов сгорания находится из условий химического равновесия (14) и уравнений сохранения элементного состава (15).

$$\mu_i(\rho,T,\vec{\gamma}) = \sum_{K=1}^{N_e} A_i^k z_K \ , \ i = 1,2,...N \ , \qquad \mu_i = \left(\frac{\partial G}{\partial \gamma_i} \right)_{P,T,\gamma_{j,\, j \neq i}} \qquad (14)$$

$$\sum_{i=1}^{N} A_i^k \gamma_i = \sum_{i=1}^{N} A_i^k \gamma_{i0} = \gamma_k^0 \ , \ k = 1,2,...N_e \ . \qquad (15)$$

Здесь N_e - число элементов, μ_i - химический потенциал *i-ого* компонента, γ_k^0 - мольно-массовые концентрации элементов – известные величины, определяемые по начальному составу, z_K - неизвестные параметры.

Для расчета с использованием указанных моделей использовалась схема С.К. Годунова, потоки через боковые грани расчетных ячеек рассчитывались с помощью решения задачи распада произвольного разрыва HLL-методом. В случае рассмотрения задач в квазиоднорменой стационарной постановке применялся конечно-разностный подход. Для интегрирования жесткой системы обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающих химические превращения, использовался метод У.Г. Пирумова.

Для верификации используемых математической модели и численных методов были решены классические тестовые задачи [2]. Для тестирования численного метода интегрирования уравнений химической кинетики была реализована модель адиабатической реакции при постоянной плотности для стехиометрической смеси водорода и кислорода (рис. 1). Была получена характерная для процесса самовоспламенения зависимость изменения температуры от времени и обеспечен переход к равновесному состоянию.

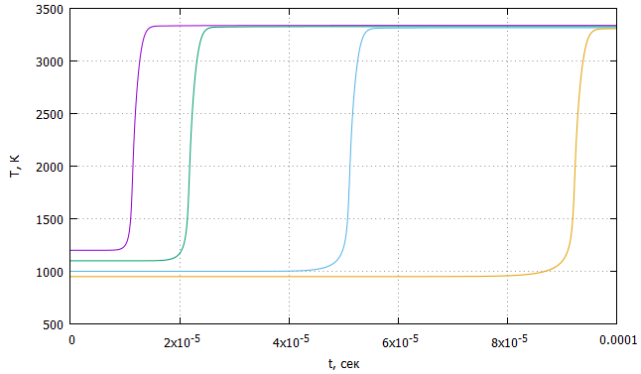


Рис. 1. Зависимость температуры от времени в модели адиабатической реакции при постоянной плотности.

В качестве теста для проверки методики численного моделирования нестационарных течений была взята задача о движении изолированной ударной волны, распространяющейся в канале, заполненным нереагирующим идеальным газом с показателем адиабаты $\varkappa = 1.4$ с синусоидальным распределением плотности перед ударной волной (рис. 2). Область за ударной волной разделилась на подобласти высокочастотных, низкочастотных колебаний и невозмущенных параметров.

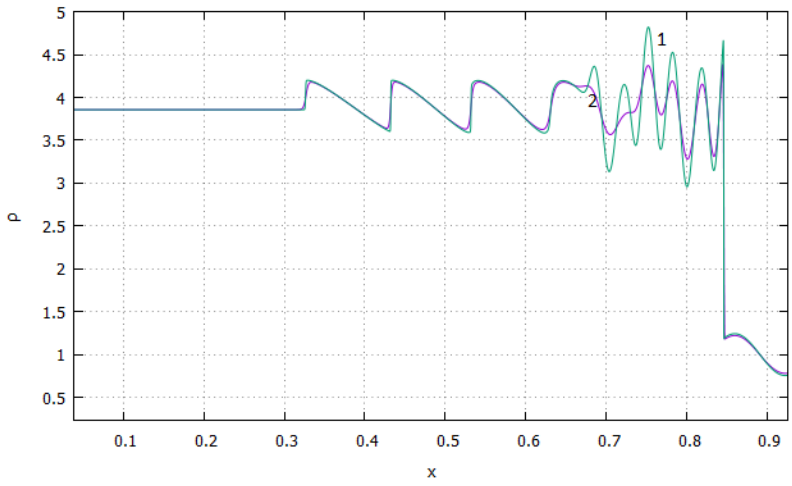


Рис. 2 Распределение плотности в момент времени $t = 0.18$ с. 1 – решение, полученное при разбиении расчетной области на 15000 точек, 2 – решение, полученное при разбиении расчетной области на 3000 точек

Тестирование методики моделирования неравновесного течения осуществлялось путем моделирования стационарного течения стехиометрической смеси водорода с кислородом в канале постоянного сечения с наличием ударной волны во входном сечении канала и без нее. Полученные результаты представлены на *PV*-диаграмме в виде прямых Рэлея-Михельсона (ПРМ) (рис. 3). Каждая из ПРМ ограничена ударной и равновесной детонационной адиабатами (УА и ДА соответственно), что свидетельствует о высокоточном выполнении законов сохранения.

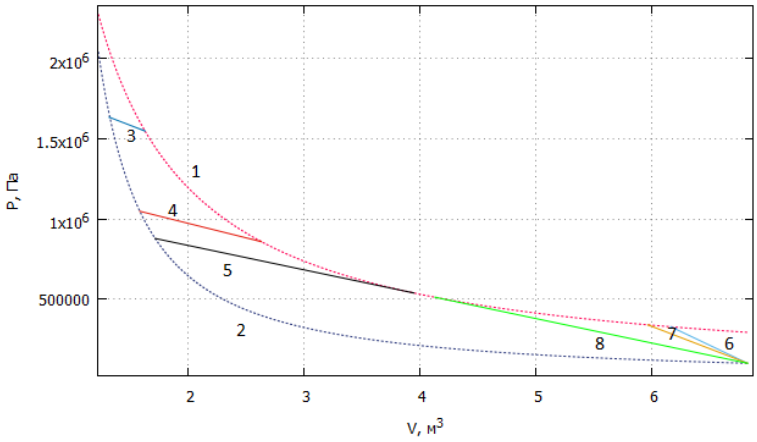


Рис. 3. PV-диаграмма стационарного неравновесного течения в канале постоянной формы. 1- равновесная детонационная адиабата, 2 - ударная адиабата 3-5-ПРМ для течения с УВ, 3 - $u_0 = 3600$м/с, 4- $u_0 = 2900$м/с, 5- $u_0 = 2661{,}3$ м/с; 6-8-ПРМ для течения без УВ, 6 - $u_0 = 4000$ м/с, 7- $u_0 = 3600$ м/с, 8- $u_0 = 2664{,}7$ м/с.

В качестве тестовой задачи также было рассмотрено автомодельное течение, задача «о распаде произвольного разрыва», в литературе именуемая как «тест Сода» (рис. 4).

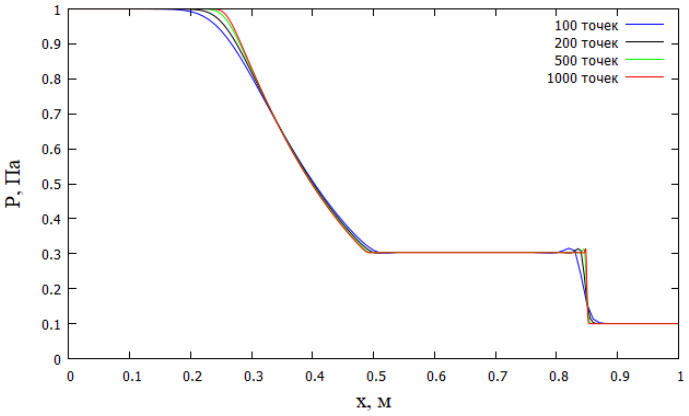


Рис. 4. Тест Сода, распределение давления в момент времени $t = 0.2$ в зависимости от количества узлов в расчетной области

Во **второй главе** рассматривается случай сжигания топлива в канале переменного сечения, который заканчивается соплом Лаваля, в стационарной детонационной волне с последующим разгоном продуктов сгорания до сверхзвуковых скоростей [1-2]. Решаемая система уравнений имеет вид:

$$\frac{d\rho uF}{dx} = 0, \quad (16)$$

$$\frac{d(\rho u^2+P)F}{dx} = 0\,, \quad (17)$$

$$\frac{d\rho uF\left(U+\frac{P}{\rho}+\frac{u^2}{2}\right)}{dx} = 0, \quad (18)$$

$$P = \rho RT\sum_{i=1}^{N}\gamma_i\,, \quad (19)$$

$$U = \sum_{i=1}^{N}\gamma_i U_i(T). \quad (20)$$

На входе в канал считаются заданными:

$$u(x_0) = u_0 > a_0,\ P(x_0) = P_0,\ T(x_0) = T_0 < T_B,\ \gamma_i(x_0) = \gamma_{i0},\ i = 1,2,\ldots N \quad (21)$$

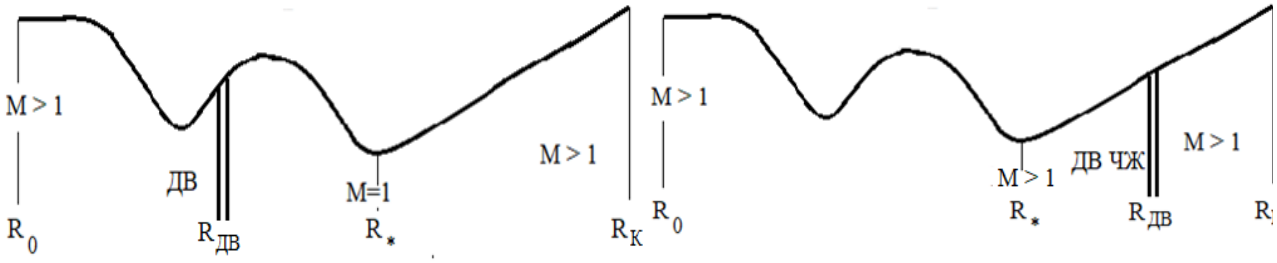
Здесь T_B - температура самовоспламенения горючей смеси.

В случае «замороженного» (химический состав не меняется) течения, система уравнений дополняется условиями:

$$\gamma_i(x) = \gamma_{i0} \quad (22)$$

В «равновесном» случае мольно-массовые концентрации компонентов находятся из условий (14), (15).

Рассматривается одномерное стационарное течение, реализующееся в канале, схематично изображенном на рис. 5. Канал характеризуется начальным радиусом R_0, радиусом минимального сечения R_* и радиусом выходного R_K, как правило, $R_K > R_0$. Форма канала слева от минимального сечения произвольная, причем $R_0 > R > R_*$.



а) б)

Рис. 5. Канал переменного сечения с детонационной волной со сверхзвуковым потоком на входе и выходе (R_0- начальный радиус канала, R_* - радиус критического сечения, R_K-выходного сечения канала, $R_{ДВ}$ - радиус при котором реализуется стационарная детонационная волна.

а) Пересжатая детонационная волна внутри канала; б) Детонационная волна Чепмена-Жуге в сверхзвуковой части сопла.

Течение газа на входе в канал задается сверхзвуковым, до детонационной волны (ДВ) течение считается «замороженным», а за детонационной волной – «равновесным». В том случае, если ДВ реализуется

слева от минимального сечения, она является пересжатой, координата ДВ определяется из условия равенства энтропии за ней энтропии в минимальном сечении, рассчитанной в предположении о термодинамическом равновесии и равенстве скорости продуктов сгорания равновесной скорости звука. В случае, если ДВ реализуется в критическом сечении или в расширяющейся части сопла, то для обеспечения последующего ускорения потока до сверхзвуковых скоростей она должна соответствовать режиму Чепмена-Жуге (ЧЖ). В этом случае, координата ДВ ЧЖ определяется из равенства скорости газа при замороженном течении скорости потока перед ДВ ЧЖ.

Рассматривалось течение смеси метана с воздухом в канале (рис. 5), продукты сгорания включали 16 компонентов: CH_4, O_2, CO, CO_2, H_2O, H_2, N_2, OH, H_2O_2, HO_2, CH_3, C_2H_6, NO, H, O, N, начальные скорость потока u_0 = 2700 м/с, давление P_0=101325 Па, температура T_0=300 К, начальные мольные доли топлива x_{CH4}=0.095, x_{O2}=0.19, x_{N2}=0.715. Необходимо отметить, что параметры, характеризующие стационарные равновесные и замороженные течения в канале переменного сечения, зависят от соотношения площадей (радиусов) на входе в канал и в текущем сечении. На рис. 6 представлены объединенные для данных трех случаев распределения параметров течения. Распределения параметров полностью совпадают слева от ДВ, расположенной в первой секции и справа от ДВ, расположенной в третьей секции. На всех рисунках схематично показан контур канала. Из рис. 6 видно, что в сужающемся канале сверхзвуковой поток тормозится, при этом значения давления, плотности и температуры растут. За детонационной волной поток становится дозвуковым и, соответственно, в сужающемся канале он разгоняется, при этом значения плотности и давления уменьшаются. Такой режим реализуется в случае, когда ДВ находится либо в первой, либо в третьей секции. В расширяющемся канале дозвуковой поток тормозится, значения температуры и плотности растут. Данный режим реализуется в случае, когда ДВ находится во второй секции. В минимальном сечении канала скорость потока равна равновесной скорости звука, далее реализуется сверхзвуковой поток. Отметим, что, как и следует из приведенных выше уравнений, энтропия потока (рис. 6е) является кусочно-постоянной функцией, значение которой скачком возрастает при переходе через ДВ.

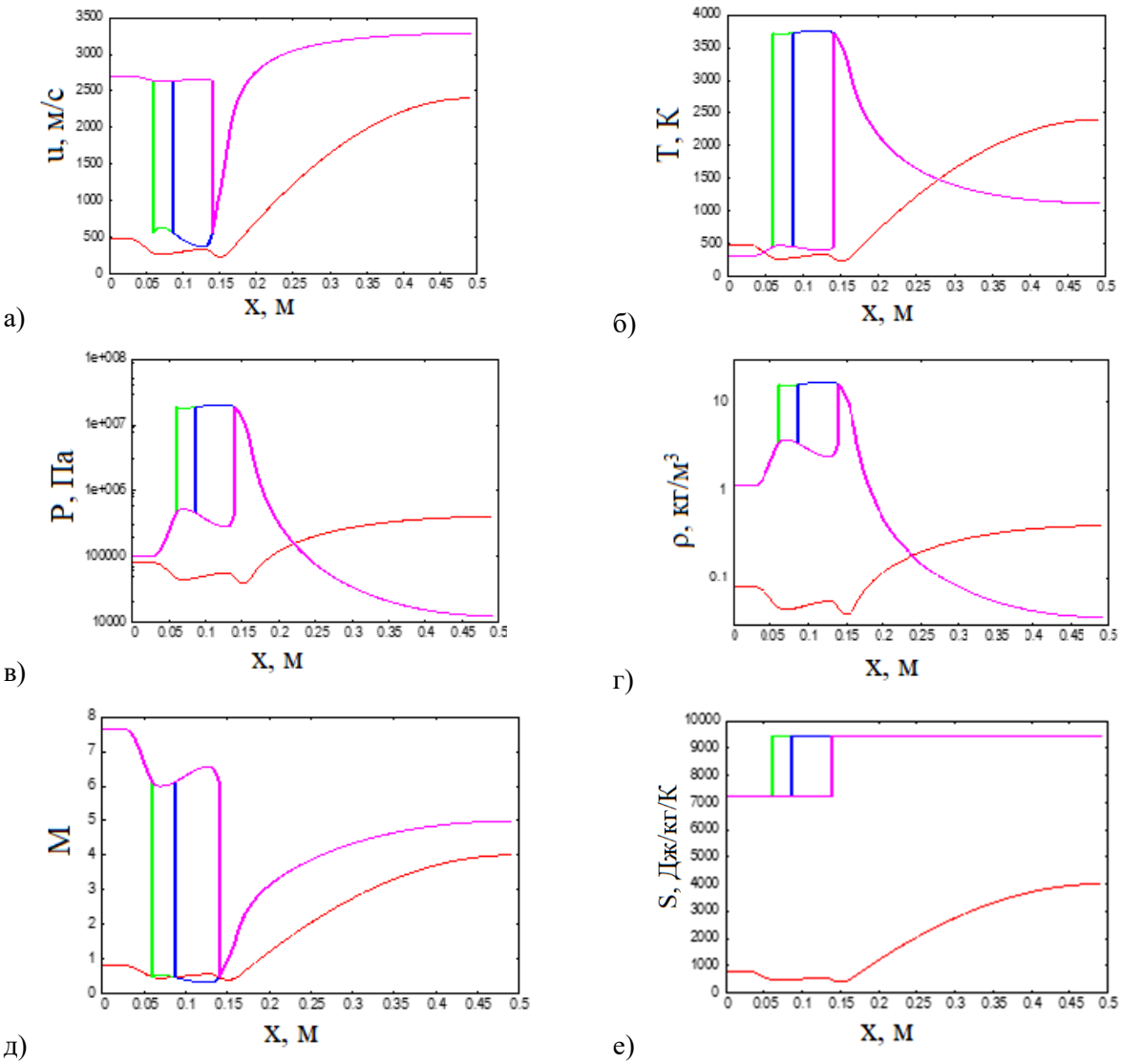


Рис. 6. Распределение параметров в канале (а) – скорость потока, б) температура, в) – давление, г) плотность, д) – число Маха, е) – энтропия. Зеленая кривая – ДВ в первой секции, синяя – во второй, фиолетовая – в третьей, красная – схематичное изображение контура канала.

С использованием разработанных алгоритмов по заданным параметрам входного потока можно провести термодинамический анализ рассматриваемого течения в канале с произвольным радиусом минимального сечения – построить *RR*-диаграмму (рис.7) и получить распределения параметров течения. По осям абсцисс и ординат отложены отнесенные к начальному радиус минимального сечения канала и радиус канала, в котором находится детонационная волна.

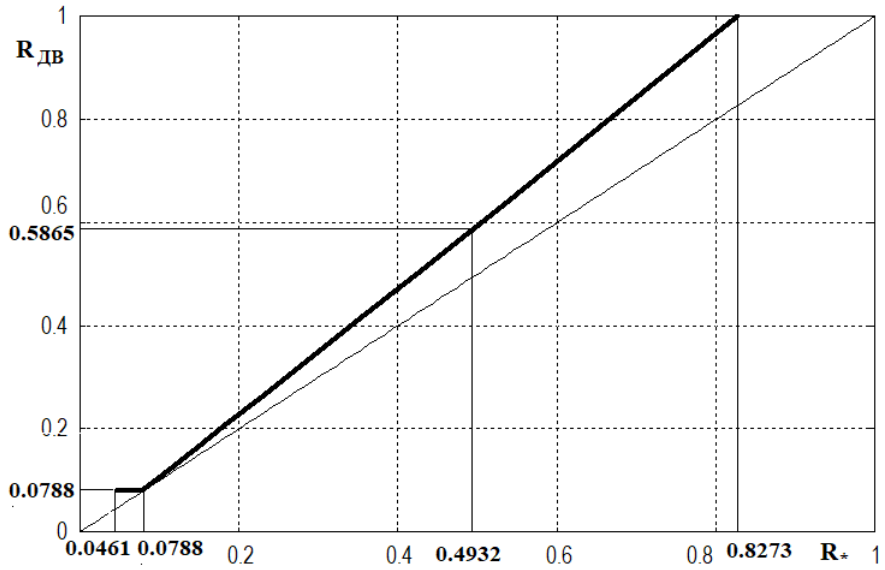


Рис. 7. RR-диаграмма течения метано-воздушной смеси (u_0 = 2700 м/с, P_0=101325 Па, T_0=300 К, x_{CH4}=0.095, x_{O2}=0.19, x_{N2}=0.715)

При минимальном радиусе канала R_*, лежащем в диапазоне $0.8273>R_*>0.0788$, в канале существует стационарное решение с пересжатой ДВ, расположенной слева от минимального сечения. При $R_*=0.0788$ решением рассматриваемой задачи является течение с ДВ Чепмена-Жуге, расположенной в минимальном сечении канала. При $0.0788>R_*>0.0461$ ДВ Чепмена-Жуге находится справа от минимального сечения канала, при этом радиус канала, в котором она находится, составляет 0.0788. При $R_*<0.0461$ слева от минимального сечения канала происходит запирание потока, т.е. решения не существует. График решения на *RR*-диаграмме (рис. 7) может быть представлен в виде (23).

$$R_{ДВ} = \begin{cases} 0.0788 + 1.2307 * (R_* - 0.0788), & 0.8273 \geq R_* \geq 0.0788 \\ 0.0788, & 0.0788 \geq R_* \geq 0.0461 \end{cases} \quad (23)$$

Рассмотренному выше контуру канала (рис. 2) на *RR*-диаграмме соответствует точка с координатами (0.4932, 0.5865). Так как радиус контура в точке минимума, расположенной слева от минимального сечения, составляет 0.56 (меньше, чем 0.5865), то из *RR*-диаграммы течения можно сделать вывод, что в данном контуре возможны три точки положения пересжатой детонационной волны.

На рис. 8 приведены *RR*-диаграмма и зависимость температуры перед детонационной волной от радиуса минимального сечения. Из анализа графиков можно сделать вывод о возможности существования стационарных волн при различных скоростях потока на входе в канал. В частности, если

R_*/R_0=0.4, то в канале стационарная пересжатая ДВ может находится при скоростях потока на входе в канал более чем 2070 м/с, температура перед ДВ при этом не превосходит 600 К.

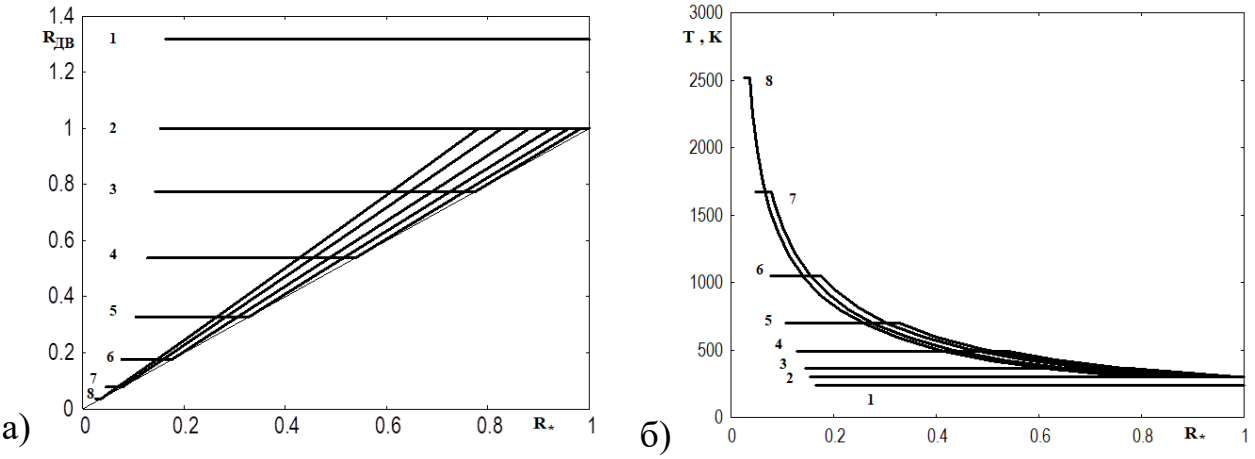


Рис. 8. *RR*-диаграмма (а) и температура перед ДВ (б) для стехиометрической смеси метан-воздух при нормальных условиях (1 – u_0 = 1760 м/с, 2 – 1803.5 (скорость Чепмена-Жуге), 3 – 1850, 4 – 1930, 5 – 2070, 6 – 2300, 7 – 2700, 8 – 3200)

В **третьей главе** численно методом установления исследуется вопрос об устойчивости стационарных течений с детонационной волной в канале. Предложен алгоритм прохождения особой точки в канале переменного сечения при наличии неравновесных химических превращений. Рассматривается случай сжигания топлива в канале переменного сечения, который заканчивается соплом Лаваля (рис. 5), в детонационной волне с последующим разгоном продуктов сгорания в сопле до сверхзвуковых скоростей. Полагается, что в канале находится горючая смесь водорода с воздухом, для описания продуктов сгорания которой используется кинетический механизм, содержащий 8 обратимых стадий и 7 компонентов $H, O, H_2, O_2, N_2, H_2O, OH$.

По методике, приведенной в главе 2, для горючей смеси водород-воздух в рассмотренном контуре (R_1/R_0 = 0.56, R_2/R_0 = 0.493) может быть построена *RR*-диаграмма, согласно которой детонационная волна может находится во второй сужающейся части рассматриваемого канала при входной скорости потока более 2200 м/с, в первой сужающейся и в первой расширяющейся частях рассматриваемого канала при входной скорости потока более 2700 м/с (рис. 9).

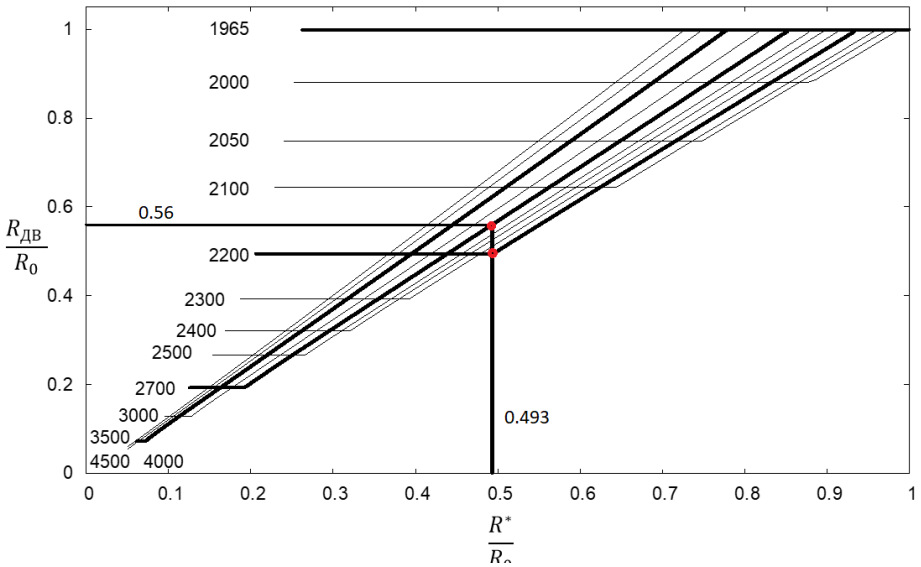


Рис. 9. RR-диаграмма для горючей водородо-воздушной смеси при $T_0 = 400$ К.

Из равновесного стационарного моделирования следует, что для рассматриваемой конфигурации канала, возможно 3 положения стационарной детонационной волны (рис. 10).

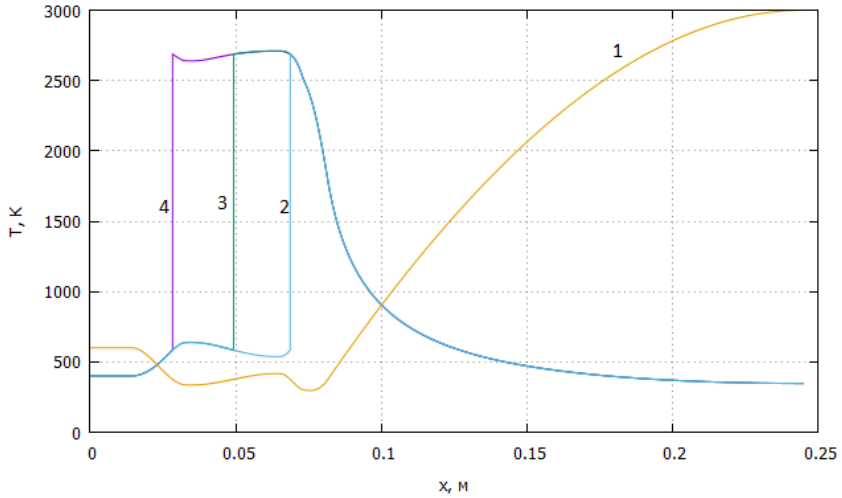


Рис. 10. Решения со стационарной равновесной ДВ для горючей водородо-воздушной смеси с начальной скоростью потока 2750 м/с при R/R_0= 0.57, R – радиус сечения, в котором реализуется ДВ. 1 – форма контура, 2 – решение со стационарной ДВ во 2-ой сужающейся части, 3 – решение со стационарной ДВ в расширяющейся части, 4 – решение со стационарной ДВ в 1-ой сужающейся части.

В случае неравновесного протекания химических реакций их скорости $W_i(P, Y, \bar{\gamma}) \neq 0$ и конечны, из уравнения для скорости потока $\frac{1}{\rho^2 H_T}\sum_{i=1}^{N}\left(H_T\rho_{\gamma_i} - \rho_T H_{\gamma_i}\right)W_i + \frac{u}{F}\frac{dF}{dx} = (M^2-1)\frac{du}{dx}$ (здесь H –энтальпия смеси, $M = \frac{u}{a}$ – число Маха, нижние индексы «T» и «γ_i» обозначают дифференцирование по температуре и концентрации i-ого компонента

соответственно), следует, что координата перехода скорости потока через скорость звука заранее неизвестна. Задача нахождения стационарного решения в сопле с заданным контуром является классической задачей (прямой задачей) теории сопла. Ее решение сводится к нахождению сепаратрисы на множестве интегральных кривых. В работе данная задача рассматривается для случая, когда на входе в канал задается холодный сверхзвуковой поток горючей смеси, который тормозится и нагревается в ударной волне, размещенной слева от минимального сечения канала. В частности, при попытке получить стационарные неравновесные решения с начальной скоростью потока $v_0 = 2650$ м/с и начальной температурой $T_0 = 400$ К наблюдается наличие только одного вида решения с детонационной волной - во второй сужающейся части рассматриваемого канала (рис. 11). В первой сужающейся и расширяющейся частях рассматриваемого канала реализовывались только дозвуковые режимы.

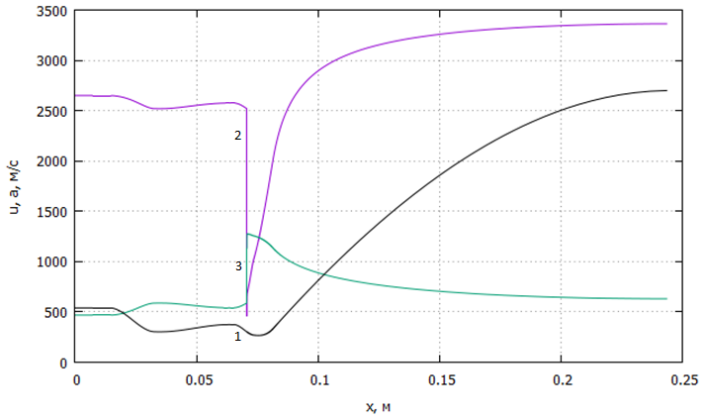


Рис. 11. Распределения скоростей потока и звука при постановке детонационной волны во второй сужающейся части контура для химически неравновесной водородо-воздушной смеси при $T_0 = 400$ К, $v_0 = 2650$ м/с. 1 – форма рассматриваемого канала, 2 – скорость потока, 3 – скорость звука.

Отметим, что факты наличия и отсутствия решений согласуются с результатами расчетов, представленными на *RR*-диаграмме (рис. 9).

Для анализа устойчивости решения в нестационарной постановке задачи применялся метод Годунова второго порядка точности. При задании начального равновесного приближения с ударной волной в первой сужающейся части канала с входной скоростью смеси 2750 м/с, детонационная волна оказывалась неустойчивой и, двигаясь влево, против направления движения потока, покидала расчетную область (рис. 12).

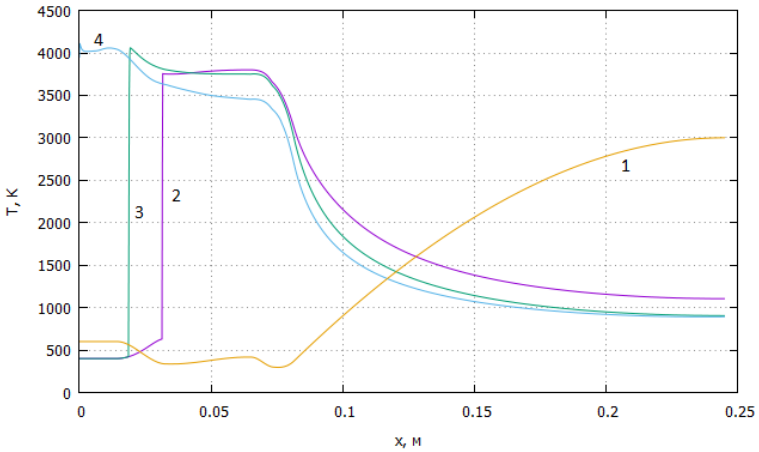
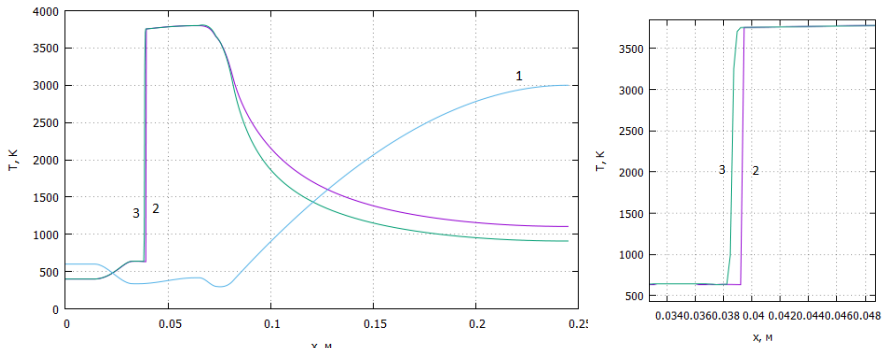


Рис. 12. Неравновесный нестационарный расчет течения водородо-воздушной смеси с детонационной волной в 1ой сужающейся области. 1-форма контура, 2-начальное приближение, 3-распредление температуры в момент времени t = 0.000684с, 4-распределение температуры в момент времени t = 0.000776с.

При задании начального равновесного приближения с ударной волной в первой расширяющейся части канала с входной скоростью смеси 2750 м/с, детонационная волна оказывалась устойчивой и только немного смещалась влево относительно начального приближения (рис. 13).



а) б)

Рис. 13. Неравновесный нестационарный расчет течения водородо-воздушной смеси с детонационной волной в 1-ой расширяющейся области, распределение температуры в канале (а) и в окрестности установления детонационной волны (б). 1– форма контура, 2 – начальное приближение, 3 – установившееся решение.

При задании начального равновесного приближения с ударной волной во второй сужающейся части рассматриваемого канала с входной скоростью смеси 2750 м/с, детонационная волна является неустойчивой в этом положении. Она начинает двигаться влево против направления движения потока и стабилизируется при той же площади поперечного сечения канала, что и в выше рассмотренном случае (рис. 14).

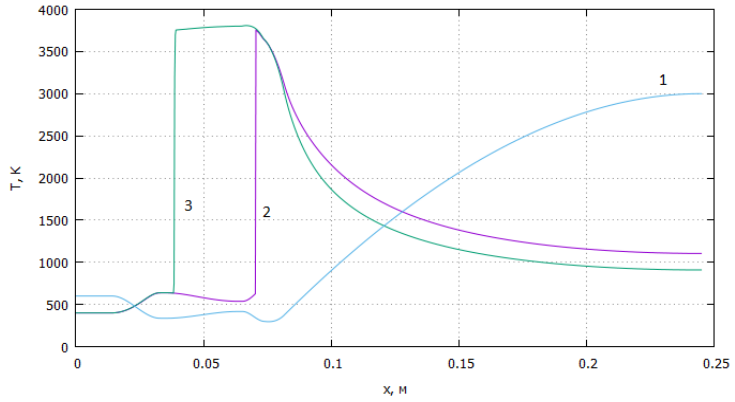


Рис. 14. Неравновесный нестационарный расчет течения водородо-воздушной смеси с детонационной волной во 2-ой сужающейся области. 1-форма контура, 2-начальное приближение, 3 – установившееся распределение температуры.

При задании начального равновесного приближения с ударной волной во второй сужающейся части канала с входной скоростью смеси 2650 м/с, детонационная волна является так же неустойчивой, но при этом, в отличие от предыдущего случая, полностью уходит за пределы расчетной области (рис. 15).

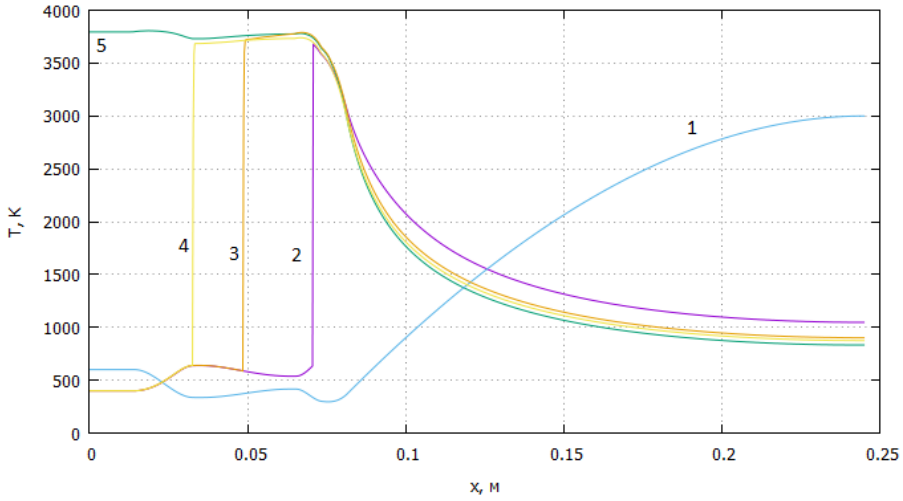


Рис. 15. Неравновесный нестационарный расчет течения водородо-воздушной смеси с детонационной волной во 2-ой расширяющейся области. 1-форма контура, 2-начальное приближение, 3-распредление температуры в момент времени t = 0, 000811с, 4-распределение температуры в момент времени t = 0.004928с, 5-распределение температуры в момент времени t = 0.007188с.

Решения, полученные методом установления, были сравнены с решениями, полученными при решении прямой задачи теории сопла с

прохождением особой точки в окрестности критического сечения (рис. 16) с использованием специально разработанного алгоритма.

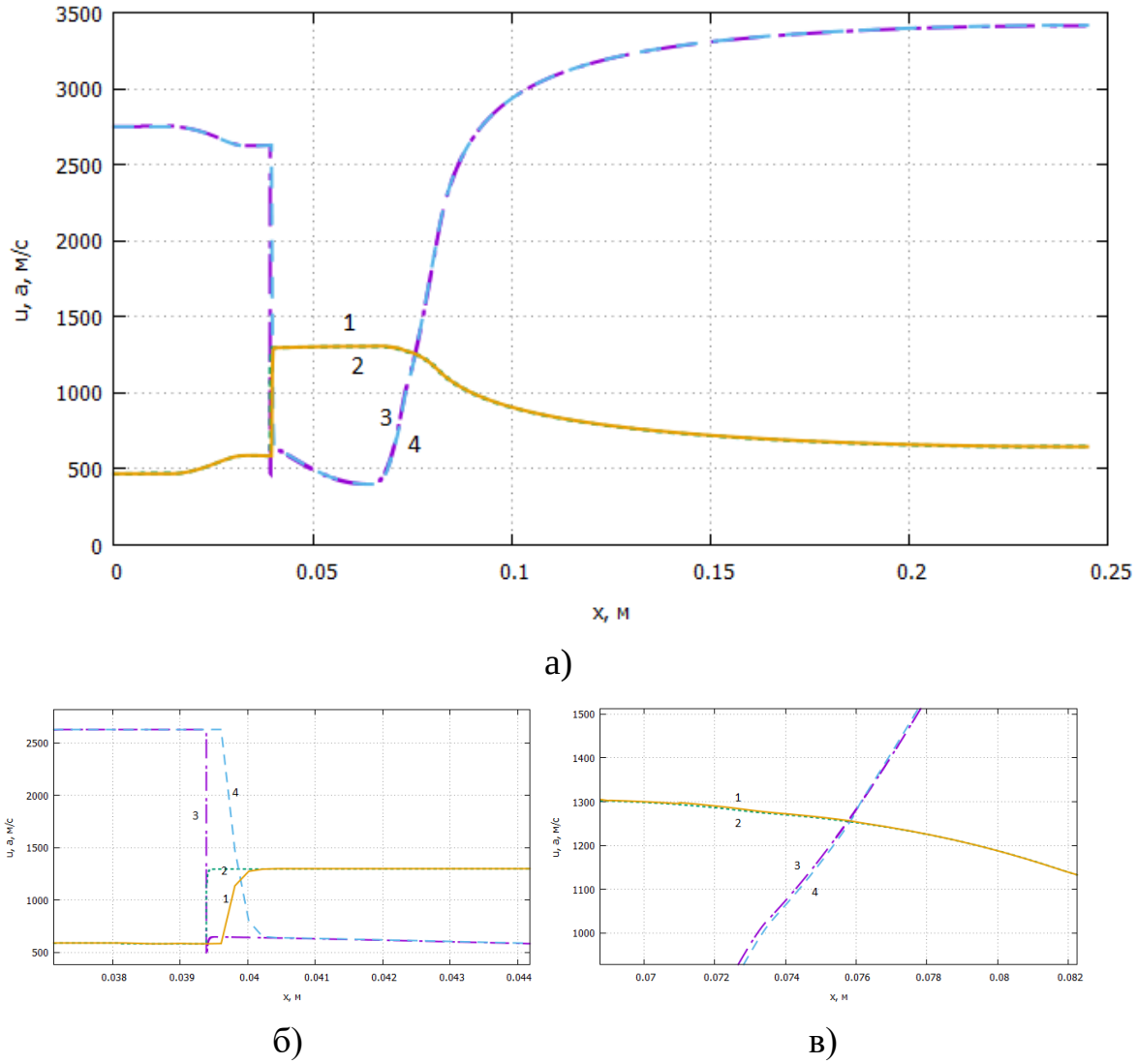


Рис. 16. Химически неравновесная смесь водород-воздух, входная скорость потока 2750 м/с, распределения скорости (3,4) и скорости звука (1,2) в канале (а), в окрестности детонационной волны (б) и в окрестности критического сечения (в). 1, 4 – метод установления, 2,3 –прямая задача теории сопла.

В **четвертой главе** рассматривается одномерное нестационарное течение в ударной трубе, заполненной горючей метано-воздушной смесью, возникающее после отражения ударной волны (УВ) от закрытого торца ударной трубы [3]. Считается, что параметры перед отраженной ударной волной неизменные, химические превращения не протекают. Газодинамическое течение между торцом трубы и ударной волной считается одномерным нестационарным, вязкость, теплопроводность и диффузия не учитывается, продукты сгорания являются смесью совершенных газов. Для

моделирования химических превращений предлагается использовать упрощенный кинетический механизм, состоящий из четырех обратимых реакций: $CH_4+O_2<=>2/3CO+4/3H_2O+1/3CH_4$, $H_2+H_2+O_2<=>H_2O+H_2O$, $CO+CO+O_2<=>CO_2+CO_2$, $CO_2+H_2<=>CO+H_2O$ [3, 4], результаты валидации которого приведены на рис. 17.

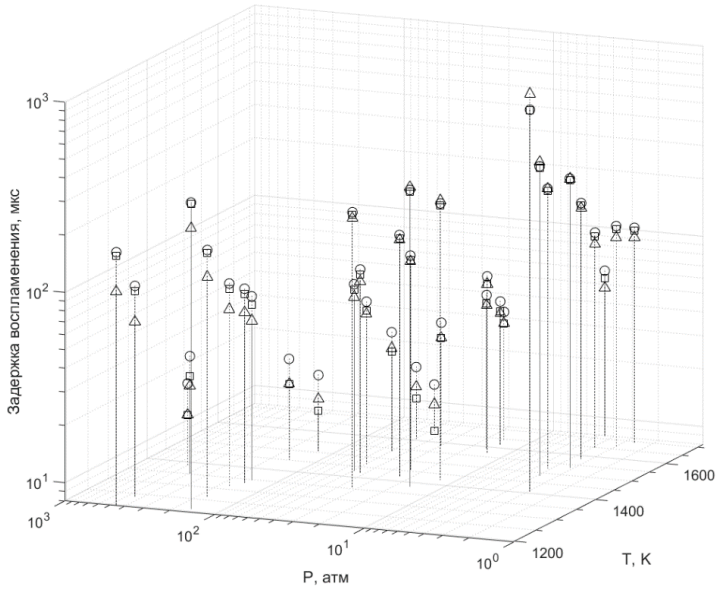
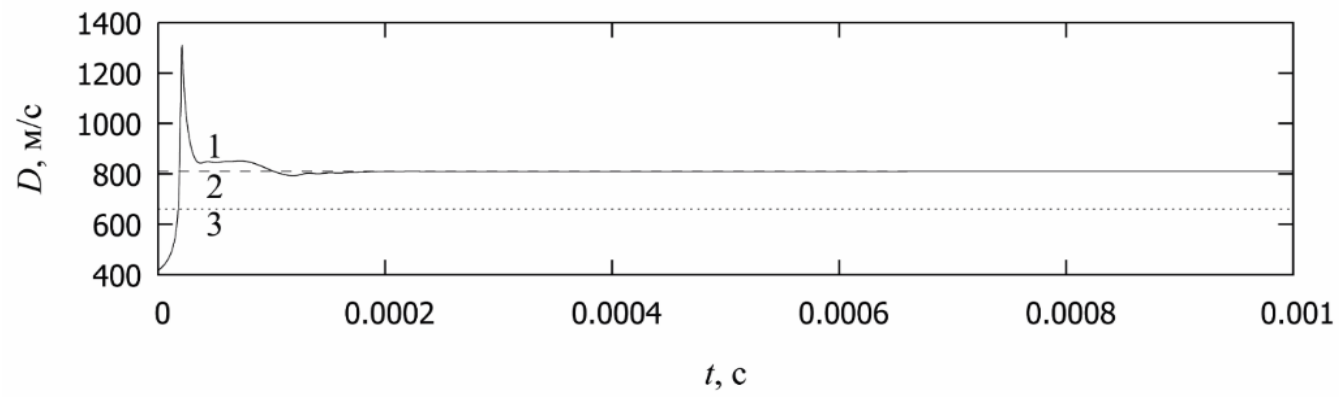


Рис. 17. Зависимость времени самовоспламенения за отраженной УВ от температуры и давления. △ – эксперимент (Жуков В.П. и др., 2003), ○ – расчет GRI-Mech, □ – расчет, данная работа

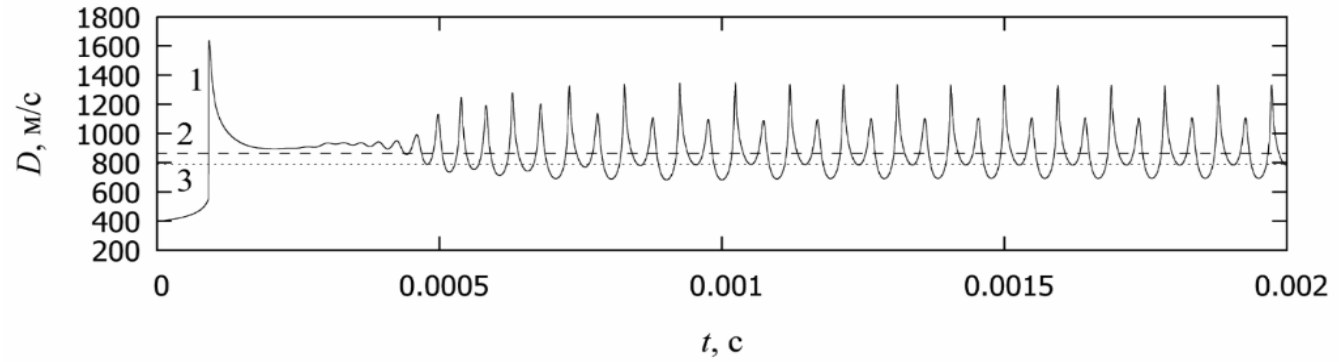
Рассматривалось течение смеси $0.091CH_4+0.182O_2+0.727N_2$ в ударной трубе при различных значениях числа Маха падающей УВ.

Предварительно по разработанным алгоритмам были рассчитаны параметры равновесной отраженной детонационной волны (РОДВ) и детонационной волны Чепмена-Жуге (ДВЧЖ). Для расчета параметров за ДВ численно решалась система нелинейных алгебраических уравнений (8)-(10), (14), (15), дополненная условием равенства нулю скорости потока за РОДВ ($u_2 = 0$) и условием Чепмена-Жуге для ДВЧЖ $D = u_2+a_{2e}$ (a_{2e} – равновесная скорость звука).

Численные исследования проводились сеточно-характеристическим методом с выделением отраженной УВ и методом Годунова. В зависимости от числа Маха падающей ударной волны получены режимы устойчивого и неустойчивого отражения (рис. 20). Расчеты, выполненные методом Годунова, дают менее выраженную колебательную картину течения (рис. 21). Необходимо отметить, что при уменьшении числа Маха падающей ударной волны параметры РОДВ и ДВЧЖ сближаются [3,4].

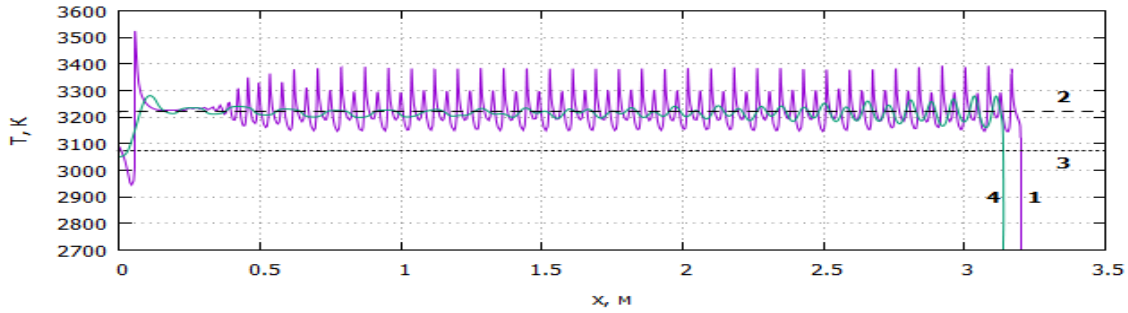


а) M=4.0

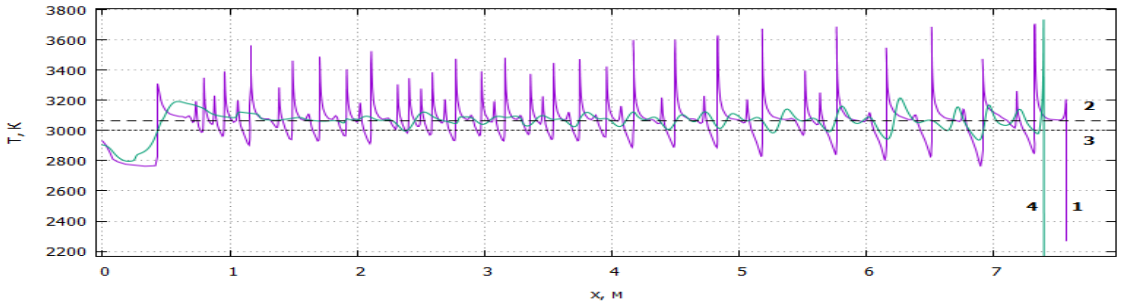


б) M=3.6

Рис. 20. Зависимость скорости отраженной волны (1) от времени; 2 – скорость РОДВ, 3 – скорость ДВ Чепмена-Жуге (сеточно-характеристический метод).



а)



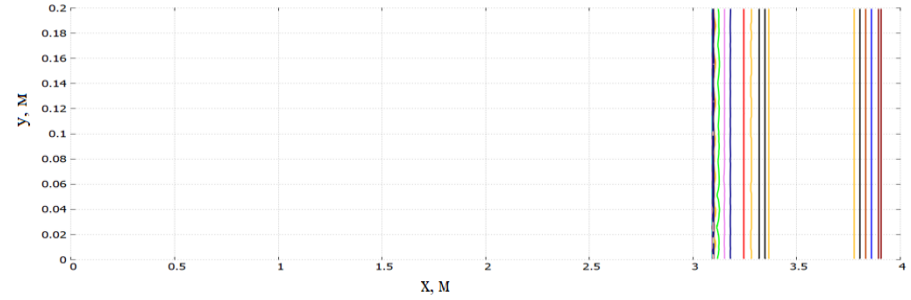
б)

Рис. 21. Распределение температуры за ОУВ (1, 4). а) - $M_{ПУВ}$ = 3.6, t = 4293 мкс. б) - $M_{ПУВ}$ = 3.2, t = 8261 мкс. 2 – температура в равновесной отраженной ДВ, 3 – температура в ДВ Чепмена-Жуге; 1 – сеточно-характеристический метод, 4 – метод Годунова 2-ого порядка.

Течение за отраженной плоской ударной волной также было рассмотрено в двумерной нестационарной постановке (методом Годунова 2-ого порядка решалась система (1)-(7)). На рис. 22 приведены изолинии давления для $M_{ПУВ} = 3.2$. До момента времени $t = 1.4$ мс картина отражения остается одномерной. При $t = 1.4 – 2.0$ мс вблизи фронта отраженной волны начинают развиваться поперечные возмущения, которые приводят к неустойчивости фронта и образованию вблизи него зон с заметно отличающимися температурой и давлением (рис. 22). На момент времени достижения отраженной ударной волной левой границы расчетной области поперек расчетной области имеется шесть локальных зон неоднородности потока, в которых давление и температура продуктов сгорания меняются от 1.5 до 2 МПа и от 3000 до 3600 К соответственно. Доминирующими значениями давления и температуры являются $P \sim 0.85$ *МПа* (рис. 22) и $T \sim 3070$ *K* (рис. 21б), которые с высокой точностью соответствуют решению задачи о равновесной отраженной детонационной волне (РОДВ).

Оценка средней скорости распространения детонационной волны вдали от отражающей стенки проводилась по графикам изменения температуры и давления, соответствующим трем моментам времени (приведены маркерами на рис. 23). Из графиков видно, что при числах Маха ПУВ более 3.2 скорость распространения ДВ соответствует скорости распространения РОДВ, а при $M_{ПУВ} \leq 2.5$ скорости ДВЧЖ (для получения в расчетах ДВЧЖ константа скорости брутто реакции горения метана была увеличена в сто раз). В диапазоне чисел Маха ПУВ 2.7-2.9 скорости равновесной ОДВ и ДВ Чепмена-Жуге близки (кривые 1 и 2 рис. 23), поэтому при проведении многомерных расчетов без выделения ДВ режим распространения четко не определяется, и в ряде работ делается вывод, что ДВ распространяется в режиме Чепмена-Жуге.

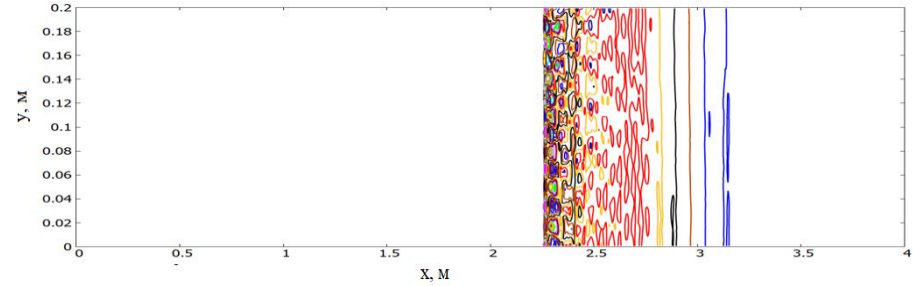
В целом результаты одномерных и двумерных нестационарных расчетов показывают, что доминирующие параметры течения за отраженной ударной волной в детонирующем газе получаемые на больших расстояниях от отражающей стенки соответствуют решению автомодельной задачи о равновесной отраженной детонационной волне (РОДВ).



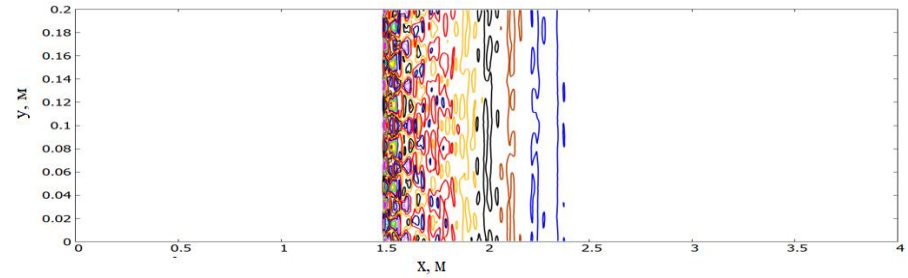
650000 - 1200000 -
700000 - 1250000 -
750000 - 1300000 -
800000 - 1350000 -
850000 - 1400000 -
900000 - 1500000 -
950000 - 1600000 -
1000000 - 1700000 -
1050000 - 1800000 -
1100000 - 1900000 -
1150000 -

Цветовые обозначения значений давления (Па) для графиков изолиний.

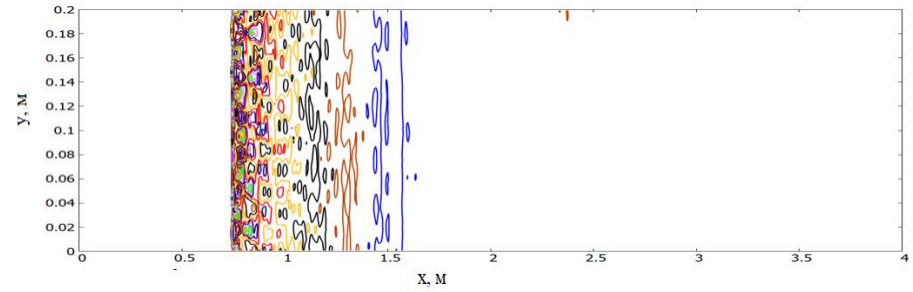
t = 1.402 10^{-3} с



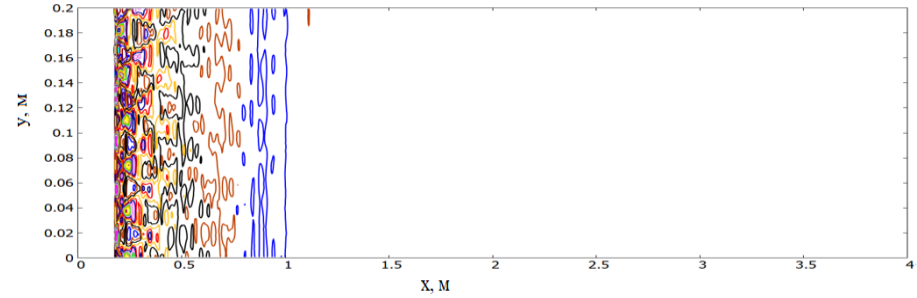
t = 2.213 10^{-3} с



t = 2.992 10^{-3} с



t = 3.753 10^{-3} с



t = 4.317 10^{-3} с

Рис. 22. Изолинии давления в различные моменты времени. $M_{ПУВ}$=3.2.

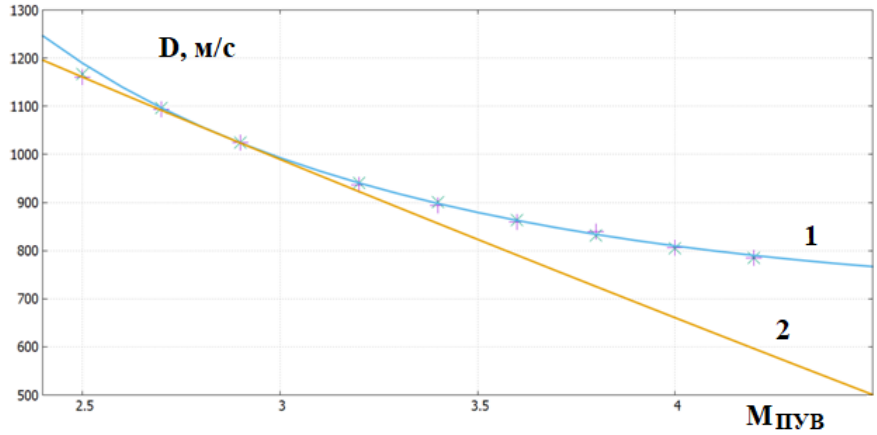


Рис. 23. Зависимости скорости детонационной волны от $M_{ПУВ}$. Маркеры – средние значения рассчитанной скорости ДВ на большом расстоянии от отражающей стенки; 1 – скорость равновесной отраженной ДВ, 2 – скорость ДВ Чепмена-Жуге.

В **заключении** сформулированы основные результаты диссертационной работы.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДИССЕРТАЦИОННОЙ РАБОТЫ

1. Разработаны вычислительные алгоритмы расчета параметров течения с равновесными и неравновесными химическими реакциями, обеспечивающие при неубывании энтропии непрерывный переход к состоянию термодинамического равновесия от начального неравновесного состояния.
2. Произведен термодинамический анализ течения в канале переменного сечения со сверхзвуковым потоком на входе и выходе. В квазиодномерной нестационарной постановке с учетом неравновесного протекания химических реакций численно получены устойчивые режимы течения с пересжатой детонационной волной в докритической области.
3. Решена задача прохождения особой точки в прямой задаче теории сопла в канале переменного сечения со сверхзвуковым потоком на входе и выходе в квазиодномерной постановке для многокомпонентного совершенного газа с неравновесными химическими превращениями, описываемыми многостадийными кинетическими механизмами с наличием детонационной волны в области перед критическим сечением.
4. Численно решена задача об инициировании и распространении детонационной волны в канале постоянного сечения после отражения ударной волны от закрытого торца. Установлено, что доминирующие параметры течения, реализующегося на больших расстояниях от отражающей стенки, с высокой точностью соответствуют решению задачи о равновесной отраженной детонационной волне. Предложен алгоритм определения значений чисел Маха падающей ударной волны, при которых детонационная волна выходит на режим Чепмена-Жуге.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Список опубликованных работ в журналах списка ВАК и из МСЦ

1. Гидаспов В.Ю., Кононов Д.С. Численное моделирование сжигания топлива в стационарной детонационной волне в канале переменного сечения со сверхзвуковым потоком на входе и выходе. Труды МАИ, 2019, № 109, сс. 19 (перечень ВАК);
2. Gidaspov V.Yu., Kononov D.S. On the Stability of a Detonation Wave in a Channel of Variable Cross Section with Supersonic Input and Output Flows. Smart Innovation, Systems and Technologies. Advances in Theory and Practice of Computational Mechanic, 2020 (Scopus);
3. Гидаспов В.Ю., Кононов Д.С., Северина Н.С. Моделирование воспламенения и детонации метано-воздушных смесей за отраженной ударной волной. Теплофизика высоких температур. 2020. Т. 58. № 6. С. 909-914 (Web of Science);
4. Кононов Д.С., Гидаспов В.Ю., Стрижак С.В. Упрощенные кинетические модели горения метана для расширения возможностей пакета OpenFOAM и физико-химических библиотек. Труды Института системного программирования РАН, том 33, вып. 6, 2021, стр. 229-240. DOI: 10.15514/ISPRAS-2021-33(6)-16 (перечень ВАК).

Список опубликованных работ в других изданиях

5. Гидаспов В.Ю., Кононов Д.С., Трошев С.Х. Термодинамический анализ стационарного течения с детонационной волной в канале переменного сечения в сборнике Материалы XXII Международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2021), 4–13 сентября 2021 г., место издания Изд-во МАИ, с. 340-342.
6. Гидаспов В.Ю., Кононов Д.С., Северина Н.С. Численное моделирование воспламенения и детонации метано-воздушной смеси за отраженной ударной волной в сборнике Материалы XIII Международной конференции по прикладной математике и механике в аэрокосмической отрасли (АММАІ’2020), 6–13 сентября 2020 г., Алушта, издательство Изд-во МАИ (М.), с. 75-77.
7. Гидаспов В.Ю., Кононов Д.С., Северина Н.С. Численное моделирование сверхзвукового течения в канале переменного сечения со стационарной детонационной волной в сборнике XII Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики, Уфа, 19-24 августа 2019 г., с. 764-766
8. Гидаспов В.Ю., Кононов Д.С. Об устойчивости детонационной волны в канале переменного сечения при сверхзвуковом входном и выходном потоках

в сборнике Материалы XXI Международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2019), 24-31 мая 2019 Алушта, серия ISBN 978-5-4316-0589-5, место издания Изд-во МАИ, с. 438-440.
9. Гидаспов В.Ю., Кононов Д.С., Морозов А.Ю. Стабилизация детонационной волны в канале переменного сечения в сборнике 17-я Международная конференция «Авиация и космонавтика»,19-23 ноября 2018г., Москва, с. 448-449
10. Кононов Д.С. Численное моделирование одномерного стационарного неравновесного течения в сопле Лаваля в сборнике Труды XII Международной летней научной школы-конференции «Гидродинамика больших скоростей и кораблестроение» 24 – 29 июня 2018 г., Чебоксары, с. 24
11. Кононов Д.С. Математическое моделирование одномерного химически неравновесного стационарного течения в сопле Лаваля в сборнике16-я Международная конференция «Авиация и космонавтика – 2017». 20-24 ноября 2017 г., Москва, стр. 389-390
12. Гидаспов В.Ю., Кононов Д.С. Одномерное неравновесное стационарное течение в двигателе с детонационной волной в сборнике Материалы XX Юбилейной Международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС’2017), 24–31 мая 2017 г. Алушта, место издания М.: Изд-во МАИ Москва, том 1, с. 414-415.
13. Кононов Д.С. Численное моделирование перехода скорости потока через скорость звука в детонационном двигателе в сборнике тезисов докладов Гагаринские чтения – 2017: XLIII Международная молодёжная научная конференция, 5-20 апреля 2017 г., Москва, с.1031
14. Гидаспов В.Ю., Кононов Д.С., Северина Н.С. Моделирование одномерного стационарного неравновесного течения в двигателе с детонационной волной в сборнике VI Международная молодежная научная конференция «Актуальные проблемы современной механики сплошных сред и небесной механики – 2016». 16-18 ноября 2016г, Томск, с.42-43
15. Гидаспов В.Ю., Кононов Д.С., Северина Н.С. Моделирование одномерного неравновесного течения в двигателе с детонационной волной в сборнике XV Международная конференция «Авиация и космонавтика». 14-18 ноября 2016 г., Москва, с. 523-525
16. Гидаспов В.Ю., Кононов Д.С., Северина Н.С. Численное моделирование одномерного стационарного течения в сопле с детонационной волной в сборнике Материалы XI Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях, 25-31 мая 2016г., Алушта, с 129-131