

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«МОСКОВСКИЙ АВИАЦИОННЫЙ ИНСТИТУТ
(национальный исследовательский университет)» (МАИ)

На правах рукописи



Гидаспов Владимир Юрьевич

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

Специальность 01.02.05.
«Механика жидкости, газа и плазмы»

Диссертация на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Научный консультант: д.ф.-м.н., профессор Д.Л.Ревизников

Москва – 2019

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	6
ГЛАВА 1. ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ МНОГОФАЗНОГО ТЕЧЕНИЯ В КАНАЛАХ С ФИЗИКО- ХИМИЧЕСКИМИ ПРЕВРАЩЕНИЯМИ	20
Введение	20
1.1. Законы сохранения вещества, импульса и энергии многофазных реагирующих сред	20
1.2. Модель термодинамики и химической кинетики	27
1.3. Модель межфазного обмена импульсом, тепломассообмена и коэффициентов молекулярного переноса	32
1.4. Одномерные и автомодельные течения	37
Выводы	40
ГЛАВА 2. ЗАДАЧИ РАСЧЕТА РАВНОВЕСНОГО И НЕРАВНОВЕСНОГО СОСТАВА МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СРЕД	41
Введение	41
2.1. Расчет термодинамического равновесия	42
2.1.1. Расчет равновесного состава при заданных паре термодинамических величин.	44
2.1.2. Расчет равновесной ударной адиабаты	52
2.1.3. Расчет равновесного течения в сопле заданной формы с переходом через скорость звука	55
2.1.4. Задача о распаде произвольного разрыва	56
2.1.5. Задача расчета частичного равновесия при заданных давлении, энтальпии и концентрациях некоторых компонент	67
2.2. Расчет химически неравновесных реакторов	69
2.2.1. Численный метод и вычислительный алгоритм решения релаксационных уравнений	69
2.2.2. Элементарные химически неравновесные реакторы	74
2.2.3. Расчет химически неравновесного течения в сопле заданной формы с переходом через скорость звука	80
Выводы	88

Глава 3. СЕТОЧНО-ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИЙ МЕТОД ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ КВАЗИОДНОМЕРНЫХ НЕСТАЦИОНАРНЫХ МНОГОФАЗНЫХ ТЕЧЕНИЙ С ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИМИ ПРЕВРАЩЕНИЯМИ С ЯВНЫМ ВЫДЕЛЕНИЕМ ПРОИЗВОЛЬНОГО ЧИСЛА ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ РАЗРЫВОВ	89
Введение	89
3.1. Общий алгоритм расчета многофазного реагирующего течения	90
3.2. Алгоритмы расчета внутренних узлов расчетной сетки	92
3.3. Алгоритмы расчета граничных узлов расчетной сетки	101
3.4. Интерполяция параметров	103
3.5. Алгоритмы расчета взаимодействий между сеточными линиями	105
3.6. Примеры численного моделирования нереагирующих течений	111
3.7. Примеры численного моделирования химически реагирующих течений	123
3.8. Примеры численного моделирования многофазных течений	126
Выводы	137
Глава 4. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕТОНАЦИИ	138
Введение	138
4.1. Газофазная детонация	138
4.1.1. Классическая теория детонации. Детонационная адиабата.	138
4.1.2. Численное моделирование одномерного стационарного равновесного течения в сопле с детонационной волной	152
4.1.3. Распад разрыва в детонирующем газе	167
4.1.4. Численное моделирование экспериментов по определению времени задержки воспламенения за падающими ударными волнами	188
4.1.5. Об использовании глобальных кинетических механизмов при численном моделировании детонации пропано-воздушной горючей смеси	195
4.1.6. Численное моделирование тонкой структуры цилиндрической детонационной волны в водородо-воздушной горючей смеси	201
4.2. Детонация газокапельных смесей	206
4.2.1. Моделирование детонации смеси метанола с воздухом	210
4.2.2 Моделирование детонации тяжелого углеводородного горючего с воздухом	218

4.2.3. Моделирование влияния капель воды на структуру детонационной волны в горючих смесях	235
4.3. Моделирование горения и детонации металлогазовых горючих смесей	245
Выводы	266
Глава 5. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЙ С ГОМОГЕННОЙ КОНДЕНСАЦИЕЙ	267
Введение. Классическая теория конденсации	267
5.1. Термодинамические свойства кластеров. Расчет равновесных функций распределения кластеров по размерам	271
5.2. Квазихимическая модель гомогенной конденсации	282
5.3. Численный метод для моделирования неравновесной функции распределения кластеров по размерам	286
5.4. Одномерные постановки задач расчета неравновесной функции распределения кластеров по размерам	289
5.5. Моделирование конденсации паров свинца в сопле и струе тормозного двигателя	299
5.6. Особенности моделирования расширения конденсирующихся паров в вакуумную камеру	305
Выводы	322
Глава 6. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МНОГОМЕРНЫХ РЕАГИРУЮЩИХ ТЕЧЕНИЙ	323
Введение	323
6.1. Численное моделирование детонации в двумерной нестационарной постановке	324
6.1.1. Численное моделирование инициирования детонации в фокусирующем канале	325
6.1.2. Моделирование течения горючей газовой смеси в газодинамическом воспламенителе	328
6.3.3. Моделирование процессов распространения и дифракции ударно-волновых структур в водородо-воздушной газовой среде	334
6.2. Определение параметров конденсированных частиц в зоне космического аппарата с целью оценки параметров возможного	

загрязнения его элементов	345
6.3. Численное моделирование трехмерных течений реагирующих сред	358
6.3.1. Численное моделирование газокапельных реагирующих потоков в камерах сгорания двигательных установок	359
6.3.2. Оценка теплового воздействия на стенки камеры кислородно-водородного жидкостного ракетного двигателя	374
6.3.3. Численное моделирование гиперзвукового обтекания тел воздухом с учетом равновесной диссоциации	378
Выводы	383
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	384
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	388

ВВЕДЕНИЕ

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, Г.Г.Черного, Х.А.Рахматуллина, Р.И.Нигматуллина, Р.И.Солоухина, К.П.Станюковича, Л.Е.Стернина, А.Л.Стасенко, У.Г.Пирумова, В.А.Левина, А.Н.Крайко, В.М.Фомина. Для моделирования высокоскоростных 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 универсальные методики моделирования, охватывающие все аспекты моделирования многофазных реагирующих течений.

В большом числе современных технологических и энергетических установок и устройств, так или иначе, используются топлива, состоящие из смеси газов и дисперсных частиц [12, 58, 60, 105, 120, 129, 141, 167, 177, 188, 191, 192, 198, 199, 205-209, 218, 219, 223, 225, 228, 233, 243-247, 251-254, 256, 258, 266, 268, 275]. Среди них различные двигатели (реактивные, внутреннего сгорания, дизельные), установки для напыления защитных покрытий и получения мелкодисперсных порошков, системы охлаждения и пожаротушения и многие другие. Разработка новых установок и технологий тесно связана с изучением физико-химических процессов, на которых они основаны. Средством для этого может служить как экспериментальное исследование [19, 21, 31, 36, 108, 120, 184, 203, 231, 247, 251, 260, 272, 274], так и численное моделирование.

В энергетических установках, основу рабочего процесса которых составляют многофазные течения, протекают разнообразные физико-химические превращения.

Химические компоненты газовой фазы и вещества, входящие в состав частиц, участвуют в химических реакциях, происходят обмен массой, тепловое и механическое взаимодействие частиц с газовой фазой, вещество частиц, при этом, может испаряться, плавиться, кристаллизоваться и конденсироваться. Могут иметь место и некоторые другие виды физических взаимодействий. Математические модели, пригодные для описания всех перечисленных явлений, в общем случае двухфазных сред указанного типа в настоящее время отсутствуют [12, 202]. Исключением является случай умеренно крупных частиц, т. е. таких, размеры которых велики по сравнению со средней длиной свободного пробега молекул в газовой фазе, при условии, что суммарный объем соответствующих частиц мал по сравнению с объемом, занимаемым газом. Именно такие условия чаще всего реализуются в используемых в промышленности технологических и энергетических установках, таких как установки для нанесения износостойких покрытий, установки для получения ультрадисперсных порошков, газожидкостные двигатели и др. [198, 228, 233]. В указанном случае распределение энергии по внутренним степеням свободы молекул и атомов является равновесным, поэтому процессы, происходящие в газовой фазе, можно рассматривать с использованием замыкания на гидродинамическом уровне. При этом, в первом приближении, 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 могут, тем не менее, существенно влиять на процессы, происходящие в непосредственной окрестности поверхности частиц и стенок, ограничивающих поток, поэтому их необходимо учитывать в слагаемых, описывающих взаимодействие несущей и дисперсной фаз друг с другом и со стенками [105, 202].

Указанные двухфазные течения описываются квазилинейной системой дифференциальных уравнений в частных производных [206-209]. Ее можно условно расщепить на три взаимозависимые части [225]. Во-первых, "газодинамическая" часть, включающая уравнения неразрывности, сохранения импульса и энергии, записанные относительно некоторых средних величин, характеризующих газовую смесь как единое целое (например - давление, компоненты скорости и температура). Во-вторых, "химическая" часть, которая состоит из уравнений неразрывности для химических

компонент. В-третьих, уравнения сохранения, характеризующие дисперсные частицы [206-209]. Одиночная частица рассматривается как единое целое, характеризуемое некоторыми интегральными параметрами, такими как масса, химический состав, скорость, температура [233, 245, 257].

Решение полной системы уравнений, описывающих многомерное двухфазное течение с физико-химическими превращениями с реальными граничными условиями, в настоящее время не представляется возможным. Это связано с тем, что указанная система относится к классу жестких [149, 202, 206-210, 229, 289, 290]. Интегрирование ее с приемлемой точностью возможно только с очень мелким шагом по времени - порядка 0.1 мкс, а в областях активного протекания химических реакций - менее наносекунды. Для расчета реального процесса необходимо сделать несколько миллионов (иногда и несколько миллиардов) шагов по времени. Кроме этого, в поле течения, как правило, содержатся зоны резкого изменения параметров, точный расчет которых требует очень подробной разностной сетки. Поэтому в настоящее время при численном моделировании двухфазных течений в реальных энергетических установках обычно используется несколько уровней математического моделирования. Во-первых, рассчитывается реальное многомерное течение с простыми моделями физико-химических процессов (алгебраические или несколько обыкновенных дифференциальных уравнений) [13, 118-120, 128, 132, 161-164, 200, 201, 245]. Во-вторых, наоборот, используется максимально упрощенная модель течения (например, считается, что параметры течения зависят только от одной пространственной координаты), а релаксационные процессы описываются реальными многостадийными кинетическими механизмами [18, 25, 127]. Такой подход позволяет оценить интегральные параметры течения, влияние на них физико-химических процессов, определить характеристики физико-химических процессов (например, в случае расчета течений с химическими превращениями количество токсичных выбросов или временные и концентрационные пределы возникновения детонации). Определенные таким образом характеристики физико-химических процессов также могут быть использованы в упрощенных моделях, используемых на первом уровне моделирования. Часто с приемлемой для практики степенью точности при проведении численного моделирования можно ограничиться проведением одномерных расчетов.

Процессы, протекающие во многих реальных установках, могут быть описаны в рамках квазиодномерного нестационарного приближения [12, 15-17, 36, 60, 128, 133, 191, 197, 253, 258]. Для расчета двухфазных реагирующих течений даже в одномерном приближении используются многопроцессорные вычислительные комплексы, поэтому особое внимание при разработке методик численного расчета необходимо уделять экономичности используемых методов и алгоритмов. Построение экономичных схем расчета невозможно без серьезного анализа свойств и особенностей численно решаемых уравнений. Квазиодномерные нестационарные дифференциальные уравнения динамики многофазных реагирующих сред по типу относятся к гиперболическим и имеют четыре семейства характеристик [107, 118-120, 170, 183, 185, 206-209, 225, 226]. Звуковые характеристики, траектории газа и частиц. Вдоль них выполняются соотношения, которые записываются в полных дифференциалах. Соотношения, выполняемые вдоль звуковых характеристик, связывают дифференциалы скорости, давления газа и времени, коэффициенты при дифференциалах зависят от параметров, характеризующих газ и частицы. Вдоль траектории газа выполняются соотношения, число которых на единицу больше, чем количество компонент газовой фазы. Первое из соотношений устанавливает связь между дифференциалами внутренней энергии, плотности газа и времени, причем коэффициенты при дифференциалах также зависят от параметров, характеризующих газ и частицы. Остальные отвечают за изменение соответствующей концентрации вдоль траектории, которое может происходить за счет химических реакций и испарения материала частиц. В общем случае в используемой модели двухфазных сред число траекторий частиц, проходящих через данную точку пространства, равно числу рассматриваемых начальных размеров частиц (случай пересечения траекторий частиц одного начального размера особо рассматривается в третьей главе). Пока будем рассматривать случай, когда все частицы в начальный момент времени были одного размера. Вдоль траектории частицы выполняются три соотношения, связывающие дифференциалы: первое - массы, второе - скорости, третье - внутренней энергии одиночной частицы с дифференциалом времени; также остается неизменным число частиц, заключенных между траекториями. Таким образом, в каждой точке пространства приходится решать три уравнения газовой динамики, три уравнения для частиц и систему уравнений химической кинетики, число которых равно числу компонент газовой смеси. Реальные кинетические механизмы могут содержать

несколько десятков компонент и несколько сотен реакций. Причем правые части уравнений химической кинетики содержат большое число экспонент, пропорциональное количеству элементарных стадий. Поэтому при решении уравнений реагирующей газовой динамики обычно девяносто процентов времени тратится на интегрирование уравнений химической кинетики [206-209]. Исходя из вышесказанного, можно сделать вывод, что при расчете параметров газа в качестве сеточных линий в областях, занятых реагирующим газом, целесообразно использовать линии, совпадающие с траекториями газа. Такой выбор расчетной сетки позволяет существенно сократить количество интерполируемых величин, а также использовать высокоточные и высокоскоростные численные методы для решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений химической кинетики [173, 206-209, 229].

Как уже отмечалось выше, в двухфазном течении могут возникать сравнительно узкие зоны быстрого изменения параметров. При использовании методов сквозного счета [51, 58, 107, 202, 206-209, 236, 263] интегрирования уравнений газовой динамики для получения точных результатов в окрестности этих зон приходится сильно сгущать сетку. Это приводит к увеличению числа расчетных точек и уменьшению шага интегрирования, а как следствие - к значительному увеличению объема вычислений. В ряде работ по численному решению квазиодномерных нестационарных уравнений газовой динамики приводятся процедуры "явного выделения" линий разрыва (ударных волн и контактных разрывов) [2-6, 68,91,92]. Имеются попытки разработки численных схем для расчета течений идеального газа с выделением произвольного числа взаимодействующих разрывов [2-6, 33, 40-43, 45, 59, 60, 74,78-82, 95-98, 102-104, 114-116, 150-151, 194, 209, 234, 267, 286, 290]. Использование процедур выделения разрывов усложняет логику и размер программ, однако позволяет на сравнительно грубых сетках получать высокоточные результаты [2-6, 27, 59, 60]. Построение аналогичных процедур в случае двухфазных реагирующих течений осложнено тем, что на ударных волнах и контактных разрывах кроме газовых параметров необходимо определять и концентрации химических компонент, и параметры частиц [60].

Необходимо отметить, что задача моделирования высокоскоростных многофазных течений с физико-химическими превращениями в полном объеме до сих пор не может быть решена с помощью широко используемых импортных и отечественных универсальных пакетов прикладных программ. Поэтому, крайне важно

создание отечественного научного задела, включающего многомасштабные физико-математические модели, оригинальные вычислительные алгоритмы и комплексы программ для моделирования многофазных реагирующих течений.

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, излучения, коагуляции и дробления частиц дисперсной фазы на протекание рассматриваемых физико-химических процессов. Вязкость, теплопроводность и диффузия газовых смесей используются только в моделях межфазного сопротивления и тепломассообмена. Тем не менее, данные процессы учитываются в главе 6 в комплексах программ многомерного численного моделирования, в разработке которых принимал участие автор.

В последние годы появляются работы в которых решаются трехмерные нестационарные уравнения, описывающие многофазное течение с физико-химическими превращениями с реальными граничными условиями. Но решение такой задачи требует колоссальных затрат машинного времени, что не позволяет провести полномасштабные параметрические исследования. Также возникают проблемы при моделировании течений, в которых участвуют смеси с существенно различными теплофизическими свойствами, и протекают процессы с существенно различными временными масштабами. В предлагаемой работе для моделирования многофазных реагирующих течений предлагается использовать термодинамический подход. Фундаментальным принципом механики многофазных сред является стремление протекающих в них неравновесных процессов к состоянию термодинамического равновесия, при выполнении условия неубывания энтропии. Этот факт необходимо учитывать при построении физико-математических моделей и вычислительных алгоритмов. В последнее время в России и мире наблюдается рост интереса к моделированию одномерных нестационарных течений, которые рассматриваются в настоящей работе. Созданная в работе методика моделирования с одной стороны является сильно 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 с зонами 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 автором на одномерных моделях методики расчета химических и фазовых превращений, межфазного сопротивления и теплообмена успешно используются при многомерном моделировании (в том числе, вязких турбулентных течений, которые автором не рассматриваются). Все построенные в работе модели и алгоритмы, обеспечивают переход в термодинамически равновесное состояние к которому стремятся рассматриваемые неравновесные процессы, при соблюдении законов сохранения и принципа неубывания энтропии. В целом, при решении практически важных задач, методики одномерного и многомерного моделирования должны использоваться совместно и дополнять друг друга.

Большинство работ, опубликованных автором, выполнено в соавторстве, поэтому в соответствии с требованиями, предъявляемыми к диссертационным работам, необходимо выделить роль автора и соавторов, что зачастую связано со значительными трудностями. Все результаты, выносимые на защиту, получены автором во время работы на кафедре "Вычислительная математика и программирования МАИ" в период с 1985 по 2019 годы. До 2014 года заведующим кафедрой был У.Г.Пирумов, который уже к 1985 году создал научную школу, уникальную атмосферу для научных дискуссий и дружеских отношений, в которой автору посчастливилось работать. Представителями научной школы были в 1985 году как уже известные своими достижениями ученые, так и молодые ученые. Непосредственно моей учебной и научной работой руководил В.А.Волков, он наряду с У.Г.Пирумовым был постановщиком решаемых в то время задач и идеологом их решения. Участниками научной школы У.Г.Пирумова с которыми у автора имеются совместные публикации, были Виноградов А.В., Волков В.А., Иванов И.Э., Крюков И.А., Марасанов А.М., Москаленко О.А., Муслиев А.В., Ревизников Д.Л., Розовский П.В., Северина Н.С., Стрельцов В.Ю. Хочется поблагодарить своих соавторов за плодотворную совместную работу. Условно публикации можно разделить по циклам: химические превращения и детонация, двухфазные течения, гомогенная конденсация,

многомерное моделирование. Наиболее простое разделение авторства в работах, связанных с многомерным моделированием [65, 62, 64, 67, 52, 51, 101], в которых мной разработаны алгоритмы моделирования равновесных и неравновесных химических превращений, межфазного обмена импульсом и тепломассообменом. Данные алгоритмы интегрированы в методики многомерных расчетов, разработанные соавторами. Подготовка исходных данных, тестирование моделей и анализ результатов проводился авторами работ совместно. В работах [40, 41, 42] алгоритмы моделирования квазиодномерных нестационарных течений конденсирующегося газа сеточно-характеристическим методом разработаны автором при участии А.В.Виноградова; квазихимическая модель гомогенной конденсации была предложена В.А.Волковым и А.В.Муслаевым; постановка задачи - П.В.Розовским; подготовка данных и анализ результатов расчетов проводился соавторами совместно. В работах [15-17] постановка задачи и анализ результатов выполнены Д.Л.Ревизниковым и Е.В.Астраханцевой, автором произведен характеристический анализ и предложено решение задачи о распаде разрыва для уравнений гемодинамики. В работах [49, 50, 71] автором рассчитаны одномерные нестационарные течения, произведена постановка задачи. Анализ результатов и тестирование моделей межфазного обмена импульсом и тепломассообмена выполнены совместно. Цикл работ [74 -78, 80-82, 85-87, 89, 92-97, 102-103] выполнены автором совместно с руководимыми им аспирантами, защитившими кандидатские диссертации, Севериной Н.С. (2009 г.), Москаленко О.А. (2016 г.). В этих работах под руководством автора осуществлена постановка задачи и анализ полученных результатов, разработаны алгоритмы и программы численного моделирования, которые составлены как лично автором, так и совместно с соавторами.

В диссертационной работе численно решен ряд задач механики многофазных реагирующих сред и получены следующие новые результаты:

1. Предложена комплексная физико-математическая модель высокоскоростных течений многокомпонентного газа, газочапельных и металлогазовых смесей для случая равновесных и неравновесных, описываемых многостадийными кинетическими механизмами, химических превращений в газовой фазе, а также химическими и фазовыми превращениями 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 в алгоритме реализован случай бесстолкновительного пересечения траекторий частиц.
3. Разработаны вычислительные алгоритмы расчета состояния термодинамического равновесия многофазных многокомпонентных смесей. Численно решена задача о распаде произвольного разрыва в многокомпонентной смеси газов с произвольными, термодинамически допустимыми уравнениями состояния, а для смеси совершенных газов - в случаях “замороженного”, “равновесного” и “равновесно-замороженного” составов.
4. Разработана модификация метода У.Г. Пирумова для численного интегрирования жестких систем уравнений химической кинетики и межфазного сопротивления и теплообмена, обеспечивающая автоматическое выполнение законов сохранения элементного состава. С ее использованием решены задачи моделирования детонации и многофазных течений в камерах сгорания, соплах и струях ракетных двигателей.
5. Разработан вычислительный алгоритм прохождения особой точки при решении прямой задачи теории сопла в одномерной постановке для смеси совершенных газов с химическими превращениями, описываемыми многостадийными кинетическими механизмами.
6. В автомодельной и неавтомодельной постановках численно решена задача о распаде произвольного разрыва в детонирующем газе в случае, когда продукты сгорания представляют собой смесь совершенных газов при учете равновесного и неравновесного протекания химических реакций.
6. Решена задача о стационарной детонационной волне в канале переменного сечения со сверхзвуковым потоком на входе и выходе в случае, когда горючая смесь и продукты сгорания представляют собой смесь совершенных газов. В предположении о “замороженности” течения до детонационной волны и “равновесности” за ней, получены соотношения между радиусами входного, критического и выходного сечений каналов при которых реализуется стационарная детонационная волна.

7. В одномерной нестационарной постановке с использованием оригинального сеточно-характеристического метода численно исследована задача распада произвольного разрыва в многокомпонентных многофазных горючих смесях. Получена детальная картина течения, включающая процесс образования и распространения ударных и детонационных волн.

8. Исследована структура стационарных детонационных волн в газовых, газокapельных 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. В составе газовой фазы допускается наличие конденсированных компонент. Получена тонкая структура волн детонации и дефлаграции. Используемая модель обеспечивает непрерывный переход параметров течения от неравновесного состояния к равновесному, т. е. точке на равновесной адиабате горючей смеси.

9. 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 сверх малыми 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.

10. Разработанные автором численные методы, вычислительные алгоритмы и программные коды для расчета равновесного состава и решения уравнений химической кинетики и кинетики конденсации, межфазного сопротивления и теплообмена были интегрированы в программные комплексы многомерного моделирования и использованы при решении многомерных задач физической динамики многофазных сред (методики многомерных расчетов и программы разработаны соавторами при участии автора).

11. При непосредственном участии автора проведено численное моделирование детонации в модельных камерах сгорания и воспламенителях. Проведено численное моделирование загрязняющего воздействия кластеров свинца, образованных в результате гомогенной конденсации паров в струях твердотопливных ракетных

двигателей, на полезную нагрузку. Проведено численное моделирование воспламенения и горения керосино-воздушной газокапельной смеси, а также и эмиссионных характеристик, на основе которого уточнена конфигурация проектируемой камеры сгорания. Рассчитаны тепловые потоки на стенки камеры сгорания двигателя, работающего на смеси водорода с кислородом. Решены задачи обтекания летательного аппарата при движении с большой скоростью в атмосфере Земли.

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

Достоверность и обоснованность результатов, представленных в диссертационной работе, обеспечивается строгостью математических постановок, разработкой адекватных физико-математических моделей, устойчивостью и сходимостью используемых численных методов, тестированием вычислительных алгоритмов, а также сравнением 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 численные 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. Автор принимал непосредственное участие в постановке задач, разработке численных методов, вычислительных алгоритмов и программных кодов, проведении численного моделирования, в обработке и анализе результатов, а также в подготовке статей и докладов на конференциях. Автором реализованы используемые численные методы решения задач, проведены вычислительные эксперименты и выполнен анализ полученных расчетных данных. Все положения диссертации, выносимые на защиту, получены соискателем самостоятельно. Для иллюстрации полученных результатов в работе приводятся материалы кандидатских диссертаций, выполненных под руководством соискателя.

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 включает 315 наименований.

Во введении обосновывается актуальность работы, излагается общее описание и цели работы.

В первой главе диссертации описана комплексная физико-математическая модель высокоскоростных течений многокомпонентного газа и частиц для случая равновесных и неравновесных химических и фазовых превращений. Приводятся одномерные и автомодельные варианты модели, используемые в диссертации.

Во второй главе приводятся вычислительные алгоритмы расчета состояния термодинамического равновесия многофазных многокомпонентных смесей. Вычислительный алгоритм решения задачи о распаде произвольного разрыва в многокомпонентной смеси газов с произвольными термодинамически допустимыми, уравнениями состояния. Для модели смеси совершенных газов рассмотрены случаи “замороженного”, “равновесного” и “равновесно-замороженного составов”. Приводится модификация метода Пирумова для численного интегрирования жестких систем уравнений химической кинетики и межфазного сопротивления и тепломассообмена, обеспечивающая автоматическое выполнение законов сохранения элементного состава. С использованием которой в последующих главах работы решены задачи моделирования детонации и многофазных течений в камерах сгорания, соплах и струях энергетических установок. Описан предложенный и реализованный автором алгоритм прохождения особой точки при решении прямой задачи теории сопла в одномерной постановке для многокомпонентного газа с химическими превращениями, описываемыми многостадийными кинетическими механизмами.

В третьей главе диссертации приводится разработанный автором 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, в том числе рассматривается случай бесстолкновительного пересечения траекторий частиц; а также всех физически допустимых взаимодействий между ними.

В четвертой главе приводятся результаты исследования детонации горючих газовых, газочапельных и металлогазовых смесей. Приводятся 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 химических реакций. Описано решение задачи о стационарной детонационной волне в канале переменного сечения со сверхзвуковым потоком на входе и выходе, в случае, когда горючая смесь и продукты сгорания представляют собой смесь совершенных газов. При этом течение до детонационной волны считается “замороженным”, а за детонационной волной - “равновесным”. Приводятся результаты численных исследований в квазиодномерной нестационарной постановке с использованием оригинального сеточно-характеристического метода задачи о распаде произвольного разрыва в многокомпонентных многофазных горючих смесях. Представлены результаты математического моделирования структуры стационарных детонационных волн в газовых, газокапельных и металлогазовых горючих смесях.

В пятой главе представлена квазихимическая модель гомогенной конденсации. Приведены численные методы для расчета равновесных функций распределения как в стабильной, так и в метастабильной областях, численный метод и вычислительный алгоритм решения уравнений кинетики конденсации. Представлены результаты численных расчетов неравновесных функций распределения по размерам кластеров аргона, меди, свинца, воды, серебра в условиях, характерных для технологических установок, в том числе и в присутствии инертных газовых смесей. Описаны особенности истечения конденсирующегося пара в вакуумную камеру.

В шестой главе приведены примеры применения разработанных автором численных методов, вычислительных алгоритмов и программных кодов: для расчета равновесного состава; решения уравнений химической кинетики и кинетики конденсации; межфазного сопротивления и тепломассообмена; интегрированных в программные комплексы многомерного моделирования решения задач физической динамики многофазных сред. Приведены результаты численного решения ряда задач исследования: горения и детонации газопазных и газокапельных сред в разноцелевых камерах сгорания; конденсации паров свинца в струях твердотопливных ракетных двигателей; обтекания летательного аппарата при движении с большой скоростью в атмосфере Земли.

В заключении приведены результаты диссертационной работы, выносимые на защиту.

ГЛАВА 1. ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ МНОГОФАЗНОГО ТЕЧЕНИЯ В КАНАЛАХ С ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИМИ ПРЕВРАЩЕНИЯМИ

Введение

В энергетических установках, основу рабочего процесса которых составляют многофазные течения, протекают разнообразные физико-химические превращения. Химические компоненты газовой фазы и вещества, входящие в состав частиц, участвуют в химических реакциях и фазовых превращениях, происходят обмен массой и импульсом, тепловое и механическое взаимодействие частиц с газовой фазой. В работе рассматривается случай умеренно крупных частиц, т.е. таких, размеры которых велики по сравнению со средней длиной свободного пробега молекул в газовой фазе, при условии, что суммарный объем, занимаемый частицами, мал по сравнению с объемом, занимаемым газом. Именно такие условия чаще всего реализуются в используемых в промышленности технологических и энергетических установках. В указанном случае процессы, происходящие в газовой фазе, можно рассматривать с использованием замыкания на гидродинамическом уровне. При этом, в первом приближении, 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, тем не менее, существенно влияют на процессы, происходящие в непосредственной окрестности поверхности частиц, поэтому их необходимо учитывать в слагаемых, описывающих взаимодействие несущей и дисперсной фаз друг с другом.

1.1. Законы сохранения вещества, импульса и энергии многофазных реагирующих сред

Рассмотрим случай квазиодномерных нестационарных течений. Будем считать, что: объемная доля частиц в газе мала; эффекты вязкости теплопроводности и диффузии существенны только при взаимодействии частиц с газом; химические реакции протекают в газовой фазе и на поверхности частиц. При сделанных выше предположениях уравнения, описывающие совместное течение газа и частиц, могут быть записаны в следующем виде [105, 167, 198, 206-209, 223, 257]:

$$\frac{\partial(\rho + n_s m_s)F}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u + n_s m_s u_s)F}{\partial x} = 0, \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial(\rho u + n_s m_s u_s)F}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p + n_s m_s u_s^2)F}{\partial x} = p \frac{dF}{dx}, \quad (1.2)$$

$$\frac{\partial \rho F(e + \frac{u^2}{2}) + n_s m_s F(e_s + \frac{u_s^2}{2})}{\partial t} + \frac{\partial \rho u F(e + \frac{p}{\rho} + \frac{u^2}{2}) + n_s m_s u_s F(e_s + \frac{u_s^2}{2})}{\partial x} = 0, \quad (1.3)$$

$$\frac{\partial(\rho \gamma_i + n_s m_s \gamma_{is})F}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u \gamma_i + n_s m_s u_s \gamma_{is})F}{\partial x} = F W_i, \quad i = 1, \dots, N \quad (1.4)$$

$$\frac{\partial n_s F}{\partial t} + \frac{\partial n_s u_s F}{\partial x} = 0, \quad (1.5)$$

$$\frac{\partial n_s F m_{si}}{\partial t} + \frac{\partial n_s u_s F m_{si}}{\partial x} = F n_s \dot{m}_{si} = F W_i \mu_i, \quad i = N+1, \dots, N+N_s, \quad (1.6)$$

$$\frac{\partial n_s u_s m_s F}{\partial t} + \frac{\partial n_s u_s^2 m_s F}{\partial x} = n_s F (u_s \dot{m}_s + m_s \dot{u}_s), \quad (1.7)$$

$$\frac{\partial n_s m_s e_s F}{\partial t} + \frac{\partial n_s m_s u_s e_s F}{\partial x} = n_s F (e_s \dot{m}_s + e_s \dot{m}_s), \quad (1.8)$$

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

Здесь ρ, u, p, e, γ_i - плотность, скорость, давление, внутренняя энергия и мольно-массовые концентрации газа соответственно; $F=F(x)$ - площадь канала; $n_s, u_s, m_s, e_s, \gamma_{is}, m_{si}, e_{is}$ - число частиц в единице объема, скорость, масса, внутренняя энергия, число молей i -ого вещества в килограмме массы частицы, масса i -ого вещества в частице, внутренняя энергия i -ого вещества в килограмме массы частицы; $\dot{m}_s, \dot{u}_s, \dot{e}_s, \dot{m}_{si}$ - выражения, описывающие скорость изменения массы, скорости, внутренней энергии, массы i -ого вещества в частице; W_i - число молей i -ого вещества, образующегося в единице объема в единицу времени за счет протекания химических реакций и фазовых превращений. В системе уравнений (1.1)-(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 (1.4), (1.6) описывают кинетику химических и фазовых превращений, выражения для W_i получаются по обычным правилам химической кинетики [58, 121, 206-209]. Наряду с указанным выше, рассматриваются еще два предельных случая протекания газофазных химических реакций: случай "замороженных" реакций, когда приближенно полагают: $W_i = 0, \quad i = 1, \dots, N$, а γ_i находят из уравнений (1.4) 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: $W_i(p, T, \gamma) = 0, i = 1, \dots, N$

Система уравнений в частных производных (1.1)-(1.8) условно может быть разделена на две подсистемы описывающую поле газа и описывающую поле частиц. Уравнения, для определения параметров многокомпонентного реагирующего газа в областях непрерывности течения, можно записать в следующем виде:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho F + \frac{\partial}{\partial x} \rho u F = M F ; \quad (1.9)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho u F + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2 + p) F = I F + p \frac{dF}{dx} ; \quad (1.10)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \left(e + \frac{u^2}{2} \right) F + \frac{\partial}{\partial x} \rho u \left(e + \frac{p}{\rho} + \frac{u^2}{2} \right) F = E F ; \quad (1.11)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho F \gamma_i + \frac{\partial}{\partial x} \rho u F \gamma_i = W_i F, \quad i = 1, \dots, N \quad (1.12)$$

Здесь M, I, E - слагаемые, учитывающее массообмен, тепловое и механическое взаимодействия газа с частицами.

Соответственно подсистема, описывающая течение диспергированной фазы, имеет следующий вид:

$$\frac{\partial}{\partial t} n_s F + \frac{\partial}{\partial x} n_s u_s F = 0 ; \quad (1.13)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} n_s m_s F + \frac{\partial}{\partial x} n_s u_s m_s F = -M F ; \quad (1.14)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} n_s m_s u_s F + \frac{\partial}{\partial x} n_s m_s u_s^2 F = -I F ; \quad (1.15)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} n_s m_s F \left(e_s + \frac{u_s^2}{2} \right) + \frac{\partial}{\partial x} n_s u_s m_s F \left(e_s + \frac{u_s^2}{2} \right) = -E F \quad (1.16)$$

Подсистемы уравнений, описывающие совместное течение газа и частиц, связаны через правые части, учитывающие взаимное влияние фаз.

$$\begin{aligned} M &= -n_s \dot{m}_s ; \\ I &= -n_s (\dot{m}_s u_s + m_s \dot{u}) ; \\ E &= -n_s \left(\dot{m}_s \left(e_s + \frac{u_s^2}{2} \right) + m_s \left(\dot{e}_s + u_s \dot{u}_s \right) \right) \end{aligned} \quad (1.17)$$

Наряду с областями плавного изменения параметров многофазного потока в поле течения могут существовать сравнительно тонкие зоны резкого изменения параметров газа, которые обычно аппроксимируют поверхностями разрыва [183, 206-209, 253]. Примерами таких зон могут служить слой смешения газов, состоящих из различных молекул (контактный разрыв) и ударные волны. В условиях моделирования технологических процессов толщина указанных ударно - волновых и диссипативных образований мала по сравнению с характерным размером задачи - длиной канала. Поэтому, в первом приближении, можно пренебречь их тонкой структурой, т.е. отслеживать только полные перепады параметров и их эволюцию во времени. При этом соответствующие перепады должны удовлетворять соотношениям, получаемым в предположении бесконечной малости толщин указанных зон из условий равенства нулю перепадов потоков вещества, импульса и энергии, т.е. их непрерывности. В случае, когда характерное расстояние изменения параметров частиц λ_s велико по сравнению с толщиной ударной волны $\lambda_{yв}$:

$$\lambda_{yв} \ll \lambda_s = |D - u_s| \tau_s, \tau_s = \max\left(\frac{\dot{e}_s}{e_s}, \frac{\dot{u}_s}{u_s}, \frac{\dot{m}_s}{m_s}\right)^{-1},$$

(τ_s - характерное время существенного изменения параметров дисперсной, D - скорость УВ) соотношения на разрыве имеют вид:

$$[\rho(D-u)] = 0, [P + \rho(D-u)^2] = 0, [(D-u)\left(e + \frac{p}{\rho} + \frac{(D-u)^2}{2}\right)] = 0; \quad (1.18)$$

$$[u_s] = 0, [e_s] = 0, [m_s] = 0. \quad (1.19)$$

Квадратные скобки означают разность между значениями, заключенных в них комплексов, перед и за разрывом, т. е. они являются непрерывными на разрывах.

Слой смешения (контактный разрыв) характеризуется дополнительным соотношением: $[D-u] = 0$. Из (1.18) следует, что на контактном разрыве: $[u] = 0, [p] = 0$.

В случае ударной волны соотношения (1.18) - (1.19) дополняются условиями непрерывности концентраций химических компонентов:

$$[\gamma_i] = 0, i = 1, \dots, N. \quad (1.20)$$

На граничных траекториях частиц, отделяющих зону, занятую чистым газом, от газокапельной или металлогазовой 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 вышеприведенной системы уравнений используются термические и калорические уравнения состояния, вид которых определяется используемой моделью термодинамических свойств веществ [20, 121, 195, 221, 224, 248]:

$$e = e(P, T, \gamma); \quad (1.21)$$

$$\rho = \rho(P, T, \gamma); \quad (1.22)$$

$$e_s = e_s(P, T, \gamma); \quad (1.23)$$

$$\rho_s = \rho_s(P, T, \gamma). \quad (1.24)$$

Исследование характеристических свойств системы квазилинейных дифференциальных уравнений с частными производными первого порядка (1.9)-(1.24), аналогичное, описанному в [107, 185, 206-209, 253], приводит к следующим характеристическим направлениям и соотношениям, выполняемым вдоль них:

$$\frac{dx}{dt} = u \pm a : \quad du \pm \frac{1}{\rho a} dp \pm (L \pm \tilde{N}) dt = 0 \quad (1.25)$$

$$\frac{dx}{dt} = u : \quad dh - \frac{1}{\rho} dp + L^0 dt = 0 \quad (1.26)$$

$$d\gamma_i - \frac{1}{\rho} (W_i + G_{is}) dt = 0, \quad i = 1, \dots, N_\gamma$$

Для области, занятой частицами:

$$\frac{dx}{dt} = u_s : \quad \begin{aligned} du_s - \dot{u}_s dt &= 0 \\ de_s - \dot{e}_s dt &= 0 \end{aligned} \quad (1.27)$$

$$dR_s = 0$$

$$dm_{si} - \dot{m}_{si} dt = 0$$

$$R_s(x, t_0) = \int_{X_{IT}}^x n_s(x, t_0) F dx$$

Здесь $R_s(x, t_0)$ - число частиц между граничной траекторией (X_{IT}) и текущей координатой в начальный момент времени. Необходимо отметить, что в рассматриваемых задачах $R_s(x, t_0)$ является монотонной функцией пространственной

координаты, соответственно выполняется равенство $n_s(x, t_0) F = \left| \frac{dR_s(x, t_0)}{dx} \right|$. Так как

частицы являются дискретными объектами (давление внутри ансамбля частиц

отсутствует), то в процессе движения траектории частиц

$x(t, t_0, x_0) = x(t_0, x_0) + \int_{t_0}^t u_s(t, t_0, x_0) dt$ могут пересекаться между собой, т.е. в некоторый

момент времени t функция $x(t, t_0, x_0)$ становится немонотонной функцией x_0 . В этом случае в одной точке физического пространства находятся частицы с различными значениями $R_s(x, t_0)$, которые имеют различные скорости температуры и т. д. Соответственно увеличивается число характеристик – траекторий частиц (1.27), проходящих через рассчитываемую точку и соотношений, выполняющихся вдоль них. В этом случае, для корректного расчета полей газа и частиц комплексы, учитывающие их взаимное влияние, вычисляются путем суммирования вкладов частиц со всех участков монотонности $R_s(x, t_0)$ [60]. Выражения для правых частей (1.25)-(1.26) имеют вид:

$$L = ua \frac{d \ln F}{dx} + \frac{\rho_T (E - uI) - M(\rho_T (e - \frac{u^2}{2}) + \rho e_T)}{\rho^2 a (e_T \rho_p - e_p \rho_T)} + \sum_{i=1}^{N_\gamma} \frac{\rho_i e_T - e_i \rho_T}{\rho^2 a (e_T \rho_p - e_p \rho_T)} (W_i + G_{is}). \quad (1.28)$$

$$\tilde{N} = \frac{1}{\rho F} (uM - I), \quad L^0 = M(e - \frac{u^2}{2} + p) / \rho - (E - uI) / \rho, \quad a^2 = \frac{1}{\rho^2} \frac{e_T \rho^2 - \rho_T p}{e_T \rho_p - e_p \rho_T}$$

Выше использованы следующие обозначения

$$\rho_T = \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{p, \vec{\gamma}}, \quad \rho_p = \left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_{T, \vec{\gamma}}, \quad \rho_i = \left(\frac{\partial \rho}{\partial \gamma_i} \right)_{p, T, \gamma_j, j \neq i},$$

$$e_T = \left(\frac{\partial e}{\partial T} \right)_{p, \vec{\gamma}}, \quad e_p = \left(\frac{\partial e}{\partial p} \right)_{T, \vec{\gamma}}, \quad e_i = \left(\frac{\partial e}{\partial \gamma_i} \right)_{p, T, \gamma_j, j \neq i},$$

в случае неравновесного протекания газофазных реакций, и

$$\rho_T = \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{p, \vec{\gamma}} + \sum_{i=1}^{N_\gamma} \left(\frac{\partial \rho}{\partial \gamma_i} \right)_{p, T, \gamma_j, j \neq i} \left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial T} \right)_p, \quad \rho_p = \left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_{T, \vec{\gamma}} + \sum_{i=1}^{N_\gamma} \left(\frac{\partial \rho}{\partial \gamma_i} \right)_{p, T, \gamma_j, j \neq i} \left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial p} \right)_T$$

$$e_T = \left(\frac{\partial e}{\partial T} \right)_{p, \vec{\gamma}} + \sum_{i=1}^{N_\gamma} \left(\frac{\partial e}{\partial \gamma_i} \right)_{p, T, \gamma_j, j \neq i} \left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial T} \right)_p, \quad e_p = \left(\frac{\partial e}{\partial p} \right)_{T, \vec{\gamma}} + \sum_{i=1}^{N_\gamma} \left(\frac{\partial e}{\partial \gamma_i} \right)_{p, T, \gamma_j, j \neq i} \left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial p} \right)_T$$

в случае равновесного протекания газофазных реакций, т. е. $\vec{\gamma} = \vec{\gamma}(p, T)$ причем

производные $\left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial p} \right)_T, \left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial T} \right)_p$ должны находиться одновременно с решением уравнений

химического равновесия [20, 28-30, 41, 195, 196, 240].

Для того, чтобы математическая постановка задачи была замкнутой, необходимо сформулировать начальные и граничные условия. В начальный момент времени считаются заданными во всей рассматриваемой области течения распределения трех газодинамических параметров, обычно это скорость, давление и температура, химический состав газа, область, занимаемая частицами, их скорость, температура, число частиц в единице объема, а также размер и состав частиц.

Число граничных условий равно числу соотношений, выполняющихся вдоль характеристик, покидающих расчетную область [170, 206-209, 253]. В настоящей работе в зависимости от решаемой задачи используются следующие типы границ расчетной области и соответствующие им граничные условия [60].

1. Условие равенства нулю скорости на неподвижном закрытом конце канала (условие "непротекания"). Для частиц в данном случае используется условие "прилипания" т.е., если траектория частицы направлена из расчетной области на стенку (частица выпадает на стенку), то на стенке рассчитываются параметры частицы, при этом величина R_s на стенке показывает, сколько частиц на нее "выпало". Анализируется случай образования граничной траектории частиц.

2. Условия на входной границе. Случай сверхзвукового втекания – задаются все параметры газа и частиц. Дозвуковое втекание соответствует камере сгорания, в качестве дополнительного условия используется соотношение, выполняемое вдоль характеристики, приходящей на граничную точку из расчетной области. Задаются полная энтальпия, расход (или энтропия, при равенстве скорости нулю используется условие непротекания) и состав газа, а также параметры частиц.

3. Условия на выходной границе. Сверхзвуковое истечение – граничные условия не ставятся. Анализируется случай входа УВ из атмосферы в канал. Дозвуковое истечение – в качестве граничного условия, как правило, используется равенство давления атмосферному, если давление в граничной точке существенно больше атмосферного, то до выравнивания давления используется условие равенства скорости истечения скорости звука. Обратное втекание – задаются параметры внешней атмосферы, скорость потока находится из соотношения вдоль характеристики приходящей из расчетной области, в случае достижения скорости втекания звуковой скорости, скорость в граничной точке считается равной скорости звука, при этом анализируется случай возможного уменьшения скорости втекания. В случае прихода на выходную границу

ударной волны или контактного разрыва параметры в граничной точке считаются равными соответствующим параметрам за линией разрыва.

4. Условия в сечении подачи частиц. Используется для случая подачи частиц в канал в заданном сечении с ненулевой скоростью. В этом случае задаются параметры частиц и число подаваемых частиц в единицу времени.

5. Границей расчетной области может являться ударная волна, при этом параметры перед ударной волной считаются известными. Параметры за ударной волной определяются из соотношений Ренкина-Гюгонио [253] и соотношения вдоль характеристики догоняющей ударную волну.

6. Граница расчетной области – пористая стенка. В качестве дополнительного условия используется условие достижения в пористой стенке скорости, равной скорости звука, которая зависит от коэффициента пористости.

1.2. Модель термодинамики и химической кинетики

При численном моделировании многофазных смесей с физико-химическими превращениями не достаточно с высокой точностью решать уравнения, выражающие законы сохранения, необходимо, чтобы рассчитанные величины удовлетворяли началам термодинамики [206-209, 232, 253]. Для этого в работе используется подход, согласно которому для всех веществ (газообразных, жидких и твердых) восстанавливается зависимость термодинамического потенциала Гиббса от давления и температуры. Такой подход совместно с термодинамически согласованной кинетикой химических и фазовых превращений позволяет автоматически удовлетворять условию неубывания энтропии [121] и корректно определять теплоту, выделяемую при химических и фазовых превращениях.

В качестве величин, имеющих свойство «потенциальности», в литературе [20, 121, 195, 248] в основном используются e — внутренняя энергия, $h = e + pV$ — энтальпия (или теплосодержание), $F = e - TS$ — свободная энергия (или потенциал Гельмгольца), $G = F + pV = h - TS$ — термодинамический потенциал Гиббса.

Первое начало термодинамики с использованием в качестве потенциалов указанных термодинамических функций может быть записано в одной из эквивалентных форм:

$$\begin{aligned}
de &= TdS - pdV + \sum_{i=1}^N \mu_i d\gamma_i, \\
dh &= de + pdV + Vdp = TdS + Vdp + \sum_{i=1}^N \mu_i d\gamma_i, \\
dF &= de - TdS - SdT = -SdT - pdV + \sum_{i=1}^N \mu_i d\gamma_i, \\
dG &= dh - TdS - SdT = -SdT + Vdp + \sum_{i=1}^N \mu_i d\gamma_i.
\end{aligned}
\tag{1.29}$$

Функции e, h, F, G в термодинамике носят название *характеристических функций* в переменных $(S, V), (S, p), (T, V), (T, p)$ соответственно. В настоящей работе в основном используется потенциал Гиббса, т. к. он представляет характеристическую функцию в наиболее легко измеряемых термодинамических переменных, таких как давление и температура.

Все характеристические функции являются функциями состояния системы, а, следовательно, выражения (1.29) — полные дифференциалы. Если известен, например, потенциал Гиббса как функция термодинамического состояния, определенного набором параметров состояния $(T, p, \bar{\gamma})$, т. е. задана характеристическая функция $G = G(T, p, \bar{\gamma})$, то термодинамически сопряженные к ним параметры системы автоматически выражаются как функции этих переменных с помощью первых производных этой функции:

$$V = \left(\frac{\partial G}{\partial p} \right)_{T, \bar{\gamma}}, \quad S = - \left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_{p, \bar{\gamma}}, \quad \mu_i = \left(\frac{\partial G}{\partial \gamma_i} \right)_{p, T, \gamma_j, j \neq i}.$$

Термодинамические потенциалы связаны между собой простыми соотношениями, например, выражение для внутренней энергии через потенциал Гиббса имеет вид:

$$e = F + TS = G - pV + TS = G - T \left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_{p, \bar{\gamma}} - p \left(\frac{\partial G}{\partial p} \right)_{T, \bar{\gamma}}.$$

Кроме этого, очевидно, что:

$$\frac{\partial^2 G}{\partial p \partial T} = \frac{\partial^2 G}{\partial T \partial p} \Rightarrow \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_{p, \bar{\gamma}} = - \left(\frac{\partial S}{\partial p} \right)_{T, \bar{\gamma}}.$$

В случае, когда газовая смесь представляет из себя смесь совершенных газов, ей соответствует потенциал Гиббса [121, 224] вида :

$$G(p, T, \gamma) = \sum_{i=1}^{N_\gamma} \gamma_i [RT \ln(p\gamma_i / p_0 \sum_{j=1}^{N_\gamma} \gamma_j) + G_i^0(T)]
\tag{1.30}$$

Здесь $R = 8.3144 \text{ Дж}/(\text{моль}\cdot\text{К})$ - универсальная газовая постоянная, $p_0 = 101325 \text{ Па}$ - стандартное давление. Соответственно, термическое и калорическое уравнения состояния имеют:

$$h = \sum_{i=1}^{N_g} \gamma_i H_i^0(T) \quad v = \frac{RT}{P} \sum_{i=1}^{N_g} \gamma_i$$

$$H_i^0(T) = G_i^0(T) - T \frac{dG_i^0(T)}{dT}$$

В рассматриваемом случае потенциал Гиббса веществ, входящих в состав частиц, считается зависящим от температуры и в ряде случаев от давления:

$$G_{is}(p, T) = \gamma_{is} \left(G_{is}^0(T) + \frac{1}{\rho_s(T)} (p - p_0) \right) \quad i = N + 1, \dots, N + N_s \quad (1.31)$$

Здесь $p_0 = 101325 \text{ Па}$ - стандартное давление, $G_i^0(T)$ - известные функции, температурная часть стандартных молярных потенциалов Гиббса отдельных компонент [121, 224], ρ_s - плотность материала частицы.

Соответственно, для смеси совершенных газов другие термодинамические величины, используемые при математическом моделировании, выражаются через потенциал Гиббса и его частные производные, в частности,:

$$S(p, T) = \sum_{i=1}^N \gamma_i (S_i^0(T) - R \ln \frac{px_i}{p_0}), \quad C_p(T) = \frac{\partial h}{\partial T} = \sum_{i=1}^N \gamma_i \frac{dH_i^0(T)}{dT}$$

$$e(T) = \sum_{i=1}^N \gamma_i (H_i^0(T) - RT) \quad S_i^0(T) = - \frac{dG_i^0(T)}{dT}$$

, Здесь

Знание выражения для потенциала Гиббса при известных давлении и температуре позволяет рассчитать все термодинамические свойства вещества. В справочной литературе [121, 224] приводятся полиномиальные аппроксимационные формулы для приведенного стандартного потенциала $\Phi^0(T)$, который связан с $G^0(T)$ по формуле

$$G^0(T) = \Delta_f H^0(T_0) - [H^0(T_0) - H^0(0)] - T\Phi^0(T), \quad (1.32)$$

где $H^0(0)$ - стандартная энтальпия $H(T)$ при абсолютном нуле, $H^0(T_0)$ - стандартная энтальпия $H(T)$ при $T = T_0 = 298,15 \text{ К}$. Для задания $\Phi^0(x)$ ($x = 10^{-4} T$), в работе используются полиномы из справочников [121, 122, 224]:

$$\Phi^0(x) = \varphi_0 + \varphi_{\ln} \ln(x) + \varphi_{-2}x^{-2} + \varphi_{-1}x^{-1} + \varphi_1x + \varphi_2x^2 + \varphi_3x^3 \quad (1.33)$$

Здесь $\varphi_i, i = \ln, -2, \dots, 3$ – числовые коэффициенты, индивидуальные для каждого вещества, которые могут быть вычислены, если известны зависимость теплоемкости от температуры, энтальпия образования и стандартная энтропия. Выражения для $H(T), S^0(T), C_p(T)$ получаются дифференцированием (1.32).

$$\frac{dG^0(T)}{dT} = \frac{dH(T)}{dT} - T \frac{dS^0(T)}{dT} - S^0(T) = -S^0(T).$$

Из (1.32), (1.33) получим выражения для энтальпии, энтропии и теплоемкости.

$$H(T) = \Delta_f H^0(T_0) - [H^0(T_0) - H^0(0)] + \varphi_{\ln} 10^4 x - 2\varphi_{-2} (10^4)x^{-1} - \varphi_{-1} 10^4 + \varphi_1 10^4 x^2 + 2\varphi_2 10^4 x^3 + 3\varphi_3 10^4 x^4.$$

$$S^0(T) = \varphi_{\ln} (1 + \ln(x)) - \varphi_{-2} x^{-2} + \varphi_0 + 2\varphi_1 x^1 + 3\varphi_2 x^2 + 4\varphi_3 x^3.$$

$$C_p(T) = \varphi_{\ln} + 2\varphi_{-2} x^{-2} + 2\varphi_1 x + 6\varphi_2 x^2 + 12\varphi_3 x^3.$$

В справочнике [121] для 1-го моля индивидуального вещества в стандартном состоянии в зависимости от температуры приводятся таблицы величин в интервале от 100К до 20000К, а значения для $\varphi_i, i = \ln, -2, \dots, 3$ – в интервале от 500К до 6000К (в случае моделирования течений электронейтральной плазмы (главы 2, 6) используются аппроксимации в диапазоне температур от 1000 до 20000 К). В работе значения коэффициентов $\varphi_i, i = \ln, -2, \dots, 3$ в интервале температур от 100К до 500К восстанавливаются по табличным данным методом наименьших квадратов, причем, восстанавливаются только коэффициенты входящие в полином для теплоёмкости $\varphi_{\ln}, \varphi_{-2}, \varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$. Недостающие коэффициенты φ_0, φ_{-1} могут быть получены, если воспользоваться значениями энтропии и энтальпии при $T = T_0$. Важно отметить, что полученные полиномы для температур в интервале от 100К до 500К обязательно должны стыковаться (т. е. иметь равные значения при $T=500$ К) с полиномами для температур в интервале от 500К до 6000К.

Для обеспечения работоспособности используемых алгоритмов, при выходе за диапазон температур <100 К и >6000 К предполагается, что теплоёмкость остается постоянной и равна значению при температуре на ближайшей границе диапазона:

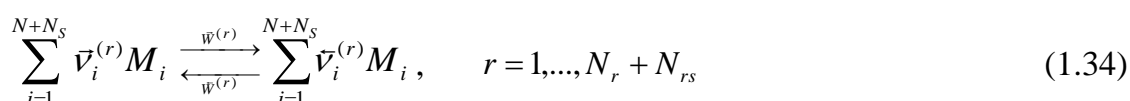
$$C_p(T) = C_p(T_{\Gamma}) = \varphi_{\ln}, T > T_{\Gamma 1}, T < T_{\Gamma 2}.$$

Здесь T_{r1}, T_{r2} – верхнее и нижнее значение температуры, соответственно. T_r – обозначение температуры на границе диапазона (верхней или нижней). Тогда выражения для энтальпии и энтропии при $T > T_{r1}, T < T_{r2}$ примут вид:

$$H(T) = H(T_r) + \int_{T_r}^T C_p dT = H(T_r) + C_p(T_r)[T - T_r],$$

$$S^0(T) = S^0(T_r) + \int_{T_r}^T \frac{C_p}{T} dT = S^0(T_r) + C_p(T_r) \ln \frac{T}{T_r}.$$

Произвольный механизм химических реакций и фазовых переходов при участии, в том числе, и жидких компонент может быть записан в следующем виде [12, 36, 58, 206-209]:



Здесь $\bar{\nu}_i^{(r)}$ – 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:

$$W_i = \sum_{r=1}^{N_r+N_{rs}} (\bar{\nu}_i^{(r)} - \bar{\nu}_i^{(r)}) (\bar{W}^{(r)} - \bar{W}^{(r)}). \quad (1.35)$$

В случае газофазных реакций ($r = 1, 2, \dots, N_r$) число элементарных реакций в единицу времени зависит от температуры газа и объемных концентраций реагентов:

$$\bar{W}^{(r)} = \bar{K}^{(r)}(T) \prod_{(i)} (\rho \gamma_i)^{\bar{\nu}_i^{(r)}}.$$

Для аппроксимации температурной зависимости констант скоростей прямых реакций используется обобщенная формула Аррениуса [127, 248]:

$$\bar{K}(T) = AT^n \exp\left(-\frac{E}{RT}\right). \quad (1.36)$$

Для обеспечения неубывания энтропии в неравновесных процессах и корректного расчета тепловыделения используется связь между константами скоростей прямых и обратных реакций [121, 206-209, 238]:

$$\frac{\bar{K}^{(r)}(T)}{\bar{K}^{(r)}(T)} = \exp \left[\sum_{i=1}^N (\bar{\nu}_i^{(r)} - \bar{\nu}_i^{(r)}) \left(\frac{G_i^0(T)}{RT} + \ln \frac{RT}{P_0} \right) \right]. \quad (1.37)$$

Здесь A, n, E – заданные константы. В случае реакций на поверхности частиц и фазовых переходов ($r = N_r + 1, \dots, N_r + N_{rs}$) выполняется соотношение:

$$W_i = \dot{m}_i^r n_s \frac{1}{\mu_i} = (\vec{v}_i^{(r)} - \vec{v}_i^{(r)}) (\vec{W}^{(r)} - \vec{W}^{(r)}), \quad \dot{m}_i = \sum_{r=N_r}^{N_r+N_{rs}} \dot{m}_i^r \quad (1.38)$$

Выражения для \dot{m}_i^r определяются соответствующими моделями тепломассообмена и кинетики поверхностных реакций.

При высоких температурах в ряде решаемых задач химические превращения, протекающие в газовой фазе, рассматриваются в равновесном приближении. В этом случае концентрации химических компонент удовлетворяют системе нелинейных уравнений:

$$W_i(\rho, T, \gamma_1, \dots, \gamma_{N_\gamma}) = 0, \quad i = 1, \dots, N_\gamma, \quad (1.39)$$

или эквивалентной ей системе уравнений химического равновесия [28, 94].

1.3. Модель межфазного обмена импульсом, тепломассообмена и коэффициентов молекулярного переноса

Модели сопротивления и тепломассообмена испаряющейся частицы характеризуют зависимости $\dot{u}_s, \dot{m}_s, \dot{H}_s$ от текущих значений параметров капле и обтекающего их газа. Используются полуэмпирические критериальные зависимости для квазистационарных, континуальных режимов тепломассообмена и сопротивления одиночных испаряющихся капле, обтекаемых многокомпонентным газом [198, 206-209, 225, 233, 249, 257, 272, 278].

$$\dot{u}_s = \frac{3}{4} \frac{\rho}{\rho_s d_s} C_D |u - u_s| (u - u_s) \quad (1.40)$$

Для расчета коэффициента лобового сопротивления капле C_D используется система соотношений Хендерсона [278], которая позволяет описать изменение коэффициента сопротивления в широком диапазоне чисел Маха и Рейнольдса.

Рассмотрим сферическую многокомпонентную каплю диаметром d_s и массой m_s , состоящую из N_s веществ [249], в жидком или твердом состоянии, равномерно распределенных по объему частицы.

$m_s = \sum_i m_{si}$, $V_s = \sum_i V_{si}$, площадь поверхности, соответствующая каждому веществу,

может быть вычислена как: $S_{si} = \pi d_s^2 \frac{V_{si}}{V_s}$. Обозначим плотность материала частицы через

ρ_{Si} , тогда $V_{Si} = \frac{m_{Si}}{\rho_{Si}}$ и $S_{Si} = \pi d_s^2 \frac{m_{Si} / \rho_{Si}}{\sum_j m_{Sj} / \rho_{Sj}}$. Соответственно, выражение для средней

плотности частицы может быть записано в виде: $\rho_s = \frac{m_s}{V_s} = \frac{\sum_i m_{Si}}{\sum_i m_{Si} / \rho_{Si}}$. Если γ_{Si} - число

молей i -ого вещества в килограмме материала частицы, тогда $m_{Si} = \gamma_{Si} \mu_i m_s$, $\gamma_{Si} = \frac{m_{Si}}{m_s \mu_i}$.

Пусть газовая смесь, окружающая частицу, многокомпонентная и состоит из N компонентов с концентрациями $\gamma_i, i=1, \dots, N$. В соответствии с гипотезой о том, что процесс испарения происходит в “тонком слое” вокруг частицы, в котором плотность постоянна [249, 272] и равна плотности газа ρ , будем считать, что мольно-массовые концентрации газовых компонент у поверхности частиц γ_i^s вычисляются из условия равенства потенциалов Гиббса компонент, участвующих в реакциях испарения (конденсации) и поверхностных реакциях окисления, вычисленных при температуре частицы T_s и плотности газа,

$$\sum_{i=1}^{N+N_s} (\bar{v}_i^{(r)} - \bar{v}_i^{(s)}) G_i = 0, \quad r = N_r + 1, \dots, N_{rs}.$$

Средние концентрации и температуру в “тонком” слое будем рассчитывать по формулам [249, 272]: $\gamma_i^b = \beta \gamma_i^s + (1 - \beta) \gamma_i$; $T_b = \beta T_s + (1 - \beta) T$,

β - некоторый параметр из интервала $[0, 1]$ подбирается из условия согласования расчетных и экспериментальных данных.

Выражение для потока i -ого компонента в реакции испарения (конденсации) в соответствии с диффузионной моделью [83, 84, 87, 249] в первом приближении может быть записано в виде:

$$\dot{m}_i^r = -2\pi d \frac{m_{Si} \rho_s}{\rho_{Si} m_s} \bar{D}_i \rho \delta_{mi}^0 \ln \left(\frac{1 - \alpha_i \rho_i / \rho}{1 - \alpha_i \rho_i^H / \rho} \right) = -2\pi d \frac{m_{Si} \rho_s}{\rho_{Si} m_s} \bar{D}_i \rho \delta_{mi}^0 \ln \left(\frac{1 - \alpha_i \gamma_i \mu_i}{1 - \alpha_i \gamma_i^s \mu_i} \right).$$

Здесь $\rho_i^H = p_i^H / \rho R T_s$, $p_i^H = p_i^H(T_s)$ - давление насыщенных паров i -ого вещества при температуре частицы, α_i - параметр, вообще говоря, зависящий от кинетики межфазного массообмена.

Необходимо отметить, что в ряде работ для задания скорости процесса массообмена используется кинетическая модель, константа скорости (K) и энергия

активации (E), которые определяются из условия согласия скорости массообмена с экспериментальными данными.[18, 83, 188, 252]

$$\dot{m}_i = -\pi d^2 \frac{m_{Si} \rho_s}{\rho_{Si} m_s} K \rho \delta_{mi}^0 \exp(-E/R/T_s) (\tilde{\gamma}_i - \gamma_i^s) \quad (1.41)$$

В качестве $\tilde{\gamma}_i$ берется сумма концентраций компонент в газообразном и конденсированном состояниях в газовой фазе, входящего в состав частицы вещества. Концентрация газообразного компонента у поверхности частицы (γ_i^s) вычисляется из условия термодинамического равновесия соответствующей поверхностной реакции. Выражение для потока тепла Q от газа к частице может быть записано [83, 86, 249, 272]:

$$Q = \frac{\bar{C}_p \delta_T^0 (T - T_s) \sum_i \dot{m}_{si} / \delta_{mi}^0}{\frac{\bar{C}_p \sum_i \dot{m}_{si}}{e^{\frac{2\pi d_s \bar{\lambda}}{2\pi d_s \bar{\lambda}}} - 1}}$$

Здесь $\delta_{mi}^0 = 1 + 0.287 \text{ReSc}_i (\text{ReSc}_i^{4/3} + 1,232)^{-1/2}$ и $\delta_T^0 = 1 + 0.287 \text{RePr} (\text{RePr}^{4/3} + 1,232)^{-1/2}$,

поправки на ненулевую скорость обтекания каплей потоком газа, $\text{Re} = \frac{|v - v_s| d_s}{\eta}$,

$\text{Pr} = \frac{\bar{\eta} \bar{C}_p \bar{\rho}}{\bar{\lambda}}$, $\text{Sc}_i = \frac{\bar{\eta}}{\bar{D}_i}$, коэффициенты диффузии - \bar{D}_i , теплопроводности - $\bar{\lambda}$,

теплоемкость - \bar{C}_p , плотность - $\bar{\rho}$, вычислялись по средним значениям в “тонком слое” вокруг капли (при γ_i^b ; T_b). Эффективные коэффициенты диффузии паров вещества каплей в многокомпонентном газе и вязкости рассчитывались по приближенной формуле Уилки, а коэффициент теплопроводности по формуле Массона и Саксена с использованием уточненной корреляции Эйкена [221].

При наличии химических реакций уравнение для нахождения температуры частицы имеет вид [83]:

$$\frac{dm_s H_s}{dt} = Q + \sum_{r=N_r}^{N_r+N_{rs}} \sum_{i=1}^N (\vec{v}_i^{(r)} - \vec{v}_i^{(r)}) (\vec{W}^{(r)} - \bar{W}^{(r)}) \frac{\mu_i}{n_s} H_i(T_s) \quad (1.42)$$

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:

$$H_s(T) = \sum_{i=1}^{N_s} (\gamma_i^s H_i^s(T) + \gamma_i^l H_i^l(T)) \quad (1.43)$$

Здесь верхние индексы относятся “s” к твердой и “l” к жидкой фазам, при этом содержание i -ого компонента в частице равно сумме соответствующих концентраций:

$$\gamma_{Si} = \gamma_i^s + \gamma_i^l = \frac{m_{Si}}{m_s \mu_i}. \text{ Значение энтальпии } H_s \text{ может быть найдено из (1.42), а температура}$$

частицы T_s и концентрации γ_i^s, γ_i^l из (1.43). При фиксированных концентрациях γ_{Si} энтальпия частицы (1.43) является монотонно-возрастающей функцией температуры и для вычисления температуры и концентраций γ_i^s, γ_i^l может использоваться приведенный ниже алгоритм. Вещества, входящие в состав частицы, нумеруются при этом в порядке возрастания температуры плавления (T_m^i). В нижеприведенных формулах, если индекс начала суммирования больше индекса конца суммирования, суммирование не производится.

$$\text{Если } H_s < \sum_{i=1}^{N_s} \gamma_{Si} H_i^s(T_m^1), \text{ то } T_s : H_s = \sum_{i=1}^{N_s} \gamma_{Si} H_i^s(T_s), \gamma_i^s = \gamma_{Si}, \gamma_i^l = 0;$$

$$\text{Если } \sum_{i=1}^{j-1} \gamma_{Si} H_i^l(T_m^j) + \sum_{i=j}^{N_s} \gamma_{Si} H_i^s(T_m^j) < H_s < \sum_{i=1}^j \gamma_{Si} H_i^l(T_m^j) + \sum_{i=j+1}^{N_s} \gamma_{Si} H_i^s(T_m^j), \quad j=1, \dots, N_s, \text{ то}$$

$$T_s = T_m^j; \quad \gamma_j^s = \frac{H_s - \sum_{i=1}^{j-1} \gamma_{Si} H_i^l(T_m^j) - \sum_{i=j}^{N_s} \gamma_{Si} H_i^s(T_m^j)}{H_i^s(T_m^j) - H_i^l(T_m^j)}, \quad \gamma_j^l = \gamma_{Sj} - \gamma_j^s;$$

$$\gamma_i^l = \gamma_{Si}, \gamma_i^s = 0, \quad i=1, \dots, j-1; \quad \gamma_i^l = 0, \gamma_i^s = \gamma_{Si}, \quad i=j+1, \dots, N_s.$$

$$\text{Если } \sum_{i=1}^j \gamma_{Si} H_i^l(T_m^j) + \sum_{i=j+1}^{N_s} \gamma_{Si} H_i^s(T_m^j) < H_s < \sum_{i=1}^j \gamma_{Si} H_i^l(T_m^{j+1}) + \sum_{i=j+1}^{N_s} \gamma_{Si} H_i^s(T_m^{j+1}), \quad j=1, \dots, N_s - 1, \text{ то}$$

$$T_s : H_s = \sum_{i=1}^j \gamma_{Si} H_i^l(T_s) + \sum_{i=j+1}^{N_s} \gamma_{Si} H_i^s(T_s),$$

$$\gamma_i^l = \gamma_{Si}, \gamma_i^s = 0, \quad i=1, \dots, j; \quad \gamma_i^l = 0, \gamma_i^s = \gamma_{Si}, \quad i=j+1, \dots, N_s$$

$$\text{Если } H_s > \sum_{i=1}^{N_s} \gamma_{Si} H_i^l(T_m^{N_s}), \text{ то } T_s : H_s = \sum_{i=1}^{N_s} \gamma_{Si} H_i^l(T_s), \gamma_i^s = 0, \gamma_i^l = \gamma_{Si}.$$

В выражения для комплексов, описывающих межфазное сопротивление и тепломассообмен, входят коэффициенты диффузии, вязкости и теплопроводности компонентов газовой смеси. Для нахождения эффективного коэффициента диффузии паров вещества частиц в многокомпонентном газе D_k используется формула Уилки [221]:

$$D_k = \sum_{(i \neq k)} \gamma_i \left[\sum_{(i \neq k)} \gamma_i / D_{ik} \right]^{-1}, \quad D_{ik} = \frac{3}{16} \left[\frac{2}{\pi} (RT)^3 \frac{\mu_i + \mu_k}{\mu_i \mu_k} \right]^{1/2} [N_A p \sigma_{ik}^2 \Omega_{ik}^{(1,1)*}]^{-1},$$

где $\Omega_{ik}^{(1,1)*}$, σ_{ik} - интеграл столкновений и эффективный диаметр столкновений, соответственно, μ_i, μ_k - молекулярные массы.

Для расчета вязкости смеси (η) использовалась приближенная формула Уилки, а для расчета теплопроводности (λ) формула Массона и Саксена с использованием уточненной корреляции Эйкена [221]:

$$\eta = \sum_{(i)} \eta_i (\gamma_i / B_i) \quad , \quad B_i = \sum_{(j)} A_{ij} \gamma_j \quad ; \quad A_{ij} = [1 + (\eta_i / \eta_j)^{1/2} (\mu_j / \mu_i)^{1/4}]^2 [8(1 + \mu_i / \mu_j)]^{-1/2} ;$$

$$\eta_i = \frac{5}{16} \left[\frac{\mu_i RT}{\pi} \right]^{1/2} [N_A \sigma_i^2 \Omega_i^{(2,2)*}]^{-1} ;$$

$$\lambda = \sum_{(i)} \frac{\eta_i}{\mu_i} (1,32 C_{pi} + 0,45 R) (\gamma_i / B_i) ,$$

где η_i , C_{pi} - вязкость и теплоемкость чистых компонентов.

Для вычисления интегралов столкновений Штокмайера использовалась аппроксимация, предложенная Брокау .

$$\Omega_{ik}^{(1,1)*} = \Omega_D(T_{ik}^*) + 0,19 \delta_{ik} / T_{ik}^* \quad , \quad T_{ik}^* = RT / N_A \varepsilon_{ik} \quad ,$$

$$\Omega_i^{(2,2)*} = \Omega_V(T_i^*) + 0,2 \delta_i / T_i^* \quad , \quad T_i^* = RT / N_A \varepsilon_i .$$

Здесь $\Omega_D(T_{ik}^*)$, $\Omega_V(T_i^*)$ - аналогичные интегралы для потенциала Леннарда-Джонса, значения которых вычислялись по их аргументам с использованием аналитических аппроксимаций [221]. Параметры потенциалов взаимодействия: одинаковых молекул $\sigma_i, \varepsilon_i, \delta_i$ заимствовались из справочной литературы; различных молекул - σ_{ik} (диаметр сечения соударений), ε_{ik} (потенциал взаимодействия для молекул вида i и k), δ_{ik} рассчитывались с использованием правил суперпозиции. В случае взаимодействия двух неполярных молекул: $\sigma_{ik} = \frac{\sigma_i + \sigma_k}{2}$, $\varepsilon_{ik} = \sqrt{\varepsilon_i \varepsilon_k}$. Если хотя бы одна из двух взаимодействующих молекул является полярной, то применялось правило суперпозиции Брокау - $\sigma_{ik} = \sqrt{\sigma_i \sigma_k}$, $\varepsilon_{ik} = \sqrt{\varepsilon_i \varepsilon_k}$, $\delta_{ik} = \sqrt{\delta_i \delta_k}$.

1.4. Одномерные и автомодельные течения

В главах 2-5 настоящей работы при численном моделировании используются системы уравнений, которые являются следствием системы (1.1) – (1.8). В частности рассматривается квазиодномерное стационарное течение смеси многокомпонентного газа в канале переменного сечения. В этом случае система решаемых уравнений имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \rho u F &= 0, \\ \frac{d}{dx} (\rho u^2 + p) F &= p \frac{dF}{dx}, \\ \frac{d}{dx} \rho u \left(h + \frac{u^2}{2} \right) F &= 0, \\ \frac{d}{dx} \rho u F \gamma_i &= F W_i, \quad i=1,2,\dots,N, \end{aligned} \tag{1.44}$$

Данная система путем алгебраических преобразований приводится к виду:

$$\rho u F = Q, \quad h + \frac{u^2}{2} = H_0 \tag{1.45}$$

$$\rho u \frac{du}{dx} + \frac{dp}{dx} = 0, \tag{1.46}$$

$$\frac{d\gamma_i}{dx} = \frac{1}{\rho u} W_i, \quad i=1,2,\dots,N, \tag{1.47}$$

Система (1.45)-(1.47) в главах 2, 4, 6 рассматривается в “замороженной”, “равновесной” и “неравновесной” постановках. Замороженная постановка соответствует случаю отсутствия химических превращений:

$$\gamma_i(x) = \text{const}, \quad W_i = 0, \quad i=1,2,\dots,N.$$

В равновесном течении $\gamma_i(x)$ при каждом значении пространственной координаты находятся из условий термодинамического равновесия, которые подробно описаны в главе 2. В случае, если $W_i(p, T, \vec{\gamma})$, записаны в соответствии с правилами термодинамики, то $\gamma_i(x)$ удовлетворяют системе уравнений:

$$W_i(p, T, \gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_N) = 0, \quad i=1,2,\dots,N.$$

В неравновесном случае $W_i(p, T, \vec{\gamma})$ записываются по правилам термодинамики и химической кинетики, а $\gamma_i(x)$ находятся путем интегрирования системы обыкновенных дифференциальных уравнений (1.47). При этом равновесное решение является стационарной точкой этой системы.

При расчете течения в соплах, а также при изучении гомогенной конденсации (см. главу 5) в качестве начальных условий предполагается состояние термодинамического равновесия в камере сгорания или в тигле. При этом, равновесные значения концентраций ищутся при заданных давлении и полной энтальпии, давлении и температуры, а также элементного состава. Как известно [206-209], система уравнений (1.45)-(1.47) имеет особенность при равенстве числа Маха потока единице, которая проходит путем подбора расхода (Q) в начальном сечении канала. Следует отметить,

что подбор расхода необходимо осуществлять одновременно с расчетом равновесного состава в начальном сечении. В случае расчета неравновесного течения данная задача даже в одномерной постановке является достаточно трудоемкой.

Часто система (1.45)-(1.47) в неравновесном случае решается в упрощенной постановке, дополнительно задается распределение давления или плотности от продольной координаты (которое находится из более простой замороженной или равновесной задачи или берется из многомерного газодинамического расчета) – так называемая обратная задача, которая не содержит особенности.

При моделировании течения за стационарной ударной волной (рассматривается в главе 4) используется система уравнений, полученная из (1.1)-(1.8), в предположении об автомодельности течения с переменной, имеющей смысл расстояния от ударной волны до точки наблюдения: $\xi = Dt - x$. В этом случае система (1.1)-(1.8) записывается в виде:

$$\begin{aligned}
\frac{d(\rho(D-u) + n_s m_s (D-u_s))}{d\xi} &= 0, \\
\frac{d(\rho(D-u)^2 + p + n_s m_s (D-u_s)^2)}{d\xi} &= 0, \\
\frac{d(\rho(D-u)(e + \frac{p}{\rho} + \frac{(D-u)^2}{2}) + n_s m_s (D-u_s)(e_s + \frac{(D-u_s)^2}{2}))}{d\xi} &= 0, \\
\frac{d(\rho(D-u)\gamma_i + n_s m_s (D-u_s)\gamma_{is})}{d\xi} &= W_i, \quad i = 1, \dots, N, \\
\frac{dn_s (D-u_s)}{d\xi} &= 0, \\
\frac{dn_s (D-u_s) m_{si}}{d\xi} &= F n_s \dot{m}_{si} = W_i \mu_i, \quad i = N+1, \dots, N+N_s, \\
\frac{dn_s m_s (D-u_s)^2}{d\xi} &= n_s ((D-u_s) \dot{m}_s + m_s (D-\dot{u}_s)), \\
\frac{dn_s m_s (D-u_s) e_s}{d\xi} &= n_s (\dot{e}_s m_s + e_s \dot{m}_s),
\end{aligned} \tag{1.48}$$

Данная система путем алгебраических преобразований приводится к виду:

$$\begin{aligned}
\rho v + n_s m_s v_s &= \rho_0 v_0 + n_{s0} m_{s0} v_{s0}, \\
\rho v^2 + p + n_s m_s v_s^2 &= \rho_0 v_0^2 + p_0 + n_{s0} m_{s0} v_{s0}^2, \\
\rho v (e + \frac{p}{\rho} + \frac{v^2}{2}) + n_s m_s v_s (e_s + \frac{v_s^2}{2}) &= \rho_0 v_0 (e_0 + \frac{p_0}{\rho_0} + \frac{v_0^2}{2}) + n_{s0} m_{s0} v_{s0} (e_{s0} + \frac{v_{s0}^2}{2}), \\
n_s v_s &= n_{s0} v_{s0},
\end{aligned} \tag{1.49}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d\rho v \gamma_i + n_s m_s v_s \gamma_{is}}{d\xi} &= W_i, \quad i = 1, \dots, N, \\
v_s \frac{dm_{si}}{d\xi} &= \dot{m}_{si} = W_i \mu_i / n_s, \quad i = N_s + 1, \dots, N + N_s, \\
v_s \frac{du_s}{d\xi} &= \dot{u}_s, \\
v_s \frac{dm_s H_s}{d\xi} &= \dot{H}_s,
\end{aligned} \tag{1.50}$$

Здесь $v = D - u$, $v_s = D - u_s$, индексом “0” обозначены параметры перед ударной волной (считаются известными), непосредственно при переходе через ударную волну концентрации химических компонент и параметры, характеризующие частицы, не меняются. Данная система уравнений содержит особенность при равенстве числа Маха газа единице. Из системы (1.49)-(1.50) может быть получено дифференциальное уравнение для скорости потока:

$$\begin{aligned}
\rho a^2 \left(\frac{\rho h_T}{p_T} - 1 \right) (M^2 - 1) dv &= \rho v \sum_{i=1}^N \left(h_{\gamma_i} - \frac{h_T}{p_T} p_{\gamma_i} \right) d\gamma_i + \\
n_s v_s \left[h_s + \frac{v_s^2}{2} - h - \frac{v^2}{2} + a^2 \left(\frac{\rho h_T}{p_T} - 1 \right) + \frac{\rho v h_T}{p_T} (v - v_s) \right] dm_s &- , \\
n_s v_s m_s \left[v \left(\frac{\rho h_T}{p_T} - 1 \right) + (v - v_s) \right] du_s &+ n_s v_s m_s dh_s
\end{aligned} \tag{1.51}$$

Здесь $a^2 = \frac{\rho h_T p_\rho - \rho h_\rho p_T}{\rho h_T - p_T}$, $M = \frac{v}{a}$, a – скорость звука, нижние индексы “ T ”, “ ρ ”, “ γ_i ” –

означают частное дифференцирование по соответствующему параметру. Из термодинамики [20, 195] следует, что $\frac{\rho h_T}{p_T} - 1 > 0$. Дифференциалы $d\gamma_i$, du_s , dh_s , dm_s (в

чисто газофазном случае дифференциалы с нижним индексом “ s ” равны нулю) определяются моделями химической кинетики, межфазных сопротивлений и тепломассообмена соответственно, которые описаны ниже. Данное дифференциальное уравнение для относительной скорости содержит особенность в случае, когда в процессе решения $M^2 - 1 = 0$, а правая часть уравнения не равна нулю, в этом случае рассматриваемая система решения не имеет. Точка Чепмена-Жуге, соответствует одновременному выполнению равенства $M^2 - 1 = 0$ и достижения состояния равновесия, т.е. равенству нулю правой части данного уравнения.

Система (1.49)-(1.50) используется в работе для моделирование впрыска частиц и описания волны дефлаграции в газовых, газокапельных и металлогазовых смесях. В этом случае. $\xi \equiv x$, $v = u$, $v_s = u_s$.

Необходимо отметить, что в работе система (1.49)-(1.50) рассматривается в “неравновесной”, и, “частично равновесной” постановках. При моделирования течений в “частично-равновесной” постановке считается, что неравновесно протекают процессы межфазного сопротивления и тепломассообмена, а газофазные химические превращения протекают равновесно.

Выводы

В первой главе приведена комплексная физико-математическая модель высокоскоростных течений многокомпонентного газа и частиц для случая 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. Данная физико-математическая модель многофазных реагирующих течений в полном виде используется в главах 2 – 4. В пятой главе данная модель уточняется описанием термодинамических свойств кластеров и кинетики гомогенной конденсации. В шестой главе описанные в первой главе модели адаптированы автором для использования при численном решении многомерных уравнений Эйлера и Рейнольдса. При интегрировании вычислительных моделей в многомерные алгоритмы основное внимание уделялось точности выполнения законов сохранения массы, импульса, энергии и элементного состава, а также обеспечению перехода системы от неравновесного к равновесному состоянию, с неубыванием энтропии, как в расчетной области, в целом, так и вдоль отдельно взятых траекторий газа и частиц.

ГЛАВА 2. ЗАДАЧИ РАСЧЕТА РАВНОВЕСНОГО И НЕРАВНОВЕСНОГО СОСТАВА МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ МНОГОФАЗНЫХ СРЕД

Введение

Законы термодинамики являются важнейшей составляющей при разработке физико-математических моделей и вычислительных алгоритмов для исследования высокоскоростных многофазных течений с физико-химическими превращениями. Течения многофазных смесей описывается набором параметров, изменяющихся во времени и пространстве, которые характеризуют, как само течение, так и участвующие в нем газы, твердые и жидкие частицы. Изменение параметров течения не может быть произвольным. Его ограничивают законы сохранения массы, импульса, энергии, записанные как для смеси в целом, так и для отдельных, входящих в ее состав компонентов. Связи между параметрами, а соответственно сужение диапазонов их изменения устанавливает модель термодинамики и следующие из нее уравнения состояния. Еще одним условием, накладываемым на изменения параметров многофазной системы, а соответственно и физико-математические модели, которыми они описываются, является закон стремления изолированной системы к состоянию термодинамического равновесия, сопровождаемый неубыванием энтропии всей системы энтропии ее элементов в отдельности. Невыполнение законов термодинамики при условии выполнения всех законов сохранения при математическом моделировании может приводить к неправильной трактовке поведения системы на качественном уровне и значительным количественным ошибкам в рассчитываемых параметрах. Поэтому при решении практических задач очень важно уметь эффективно решать задачи расчета термодинамического равновесия, причем как для однофазных, так и для многофазных систем [28-30, 38, 196, 240]. При этом используемые численные методы и алгоритмы должны обладать рядом свойств. Среди них, такие как сходимость для произвольных, допустимых с физической точки зрения, начальных данных, а также высокой скоростью вычислений. При моделировании химически неравновесных течений крайне важно обеспечить, чтобы при отсутствии внешних воздействий на больших временах получаемое неравновесное решение стремилось к равновесию [238]. Это обеспечивается термодинамическим согласованием используемых моделей термодинамики и химической кинетики. В настоящем разделе представлены оригинальные вычислительные алгоритмы [46, 72, 75, 79, 83, 84, 88, 91, 94, 96, 97, 222, 305-309, 311],

которые могут быть использованы и используются в программных комплексах, позволяющих решать многомерные задачи физической газовой динамики. Все используемые в главе алгоритмы и программные коды прошли процедуру самотестирования, которая заключается в последовательном использовании решателей равновесных задач при заданных разных парах термодинамических величин и сравнения получаемых параметров. Также перед решением конкретных задач, рассчитанные результаты сравнивались с данными справочников [238] и результатами вычислений по известным программам [29,38].

2.1. Расчет термодинамического равновесия

Задачи расчета термодинамически равновесного состояния среды могут быть сформулированы следующим образом. Пусть заданы пара термодинамических параметров, например: V,T ; V,E ; P,T ; P,H ; S,H и др. и содержание элементов в системе: $\gamma_k^0, k = 1, \dots, N_e$ [моль/кг] (N_e - число элементов, в случае равновесной плазмы в качестве элемента используется электрон “ e ” и условие электронейтральности $\gamma_{N_e}^0 = 0$). Необходимо найти состав $\gamma_i, i = 1, \dots, N_\gamma$ к которому стремится система при неизменности пары термодинамических параметров при стремлении времени к бесконечности. Этот состав называется равновесным. Запишем систему уравнений для расчета термодинамически равновесного состава [195]. Законы сохранения элементного состава:

$$\sum_{i=1}^{N_\gamma} A_K^i \gamma_i = \gamma_K^0, k = 1, \dots, N_e \quad (2.1)$$

Условия химического равновесия

$$\mu_i = \sum_{K=1}^{N_e} A_K^i \mu_K, \quad (2.2)$$

A_K^i - матрица состава. Будем рассматривать многокомпонентную смесь совершенных газов, с известными термодинамическими свойствами [121]. Подставим соответствующее выражение для химического потенциала μ_i .

$$RT \ln(p\gamma_i / p_0 \sum_{(j)} \gamma_j) + G_i^0(T) = \sum_{K=1}^{N_e} A_K^i \mu_K.$$

Выразим γ_i , с использованием уравнения состояния

$$\gamma_i = \frac{p_0 V}{RT} \exp\left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i Z_K - \mu_i^0\right), \quad (2.3)$$

здесь $Z_K = \mu_K / RT$, $\mu_i^0 = G_i^0(T) / RT$. Если подставить (2.3) в (2.1), то получим законы сохранения элементарного состава в форме:

$$\frac{p_0 V}{RT} \sum_{i=1}^N A_K^i \exp\left(\sum_{K=1}^{N_A} A_K^i Z_K - \mu_i^0\right) = \gamma_K^0, \quad k = 1, \dots, N_e \quad (2.4)$$

Необходимо отметить, что приводимые ниже методики расчета равновесного состава могут быть также использованы для приближенного расчета равновесного состава при наличие жидких и твердых компонент. Для этого необходимо воспользоваться так называемым “методом крупных молекул” [129, 238], согласно которому жидкая и твердая фаза трактуются как совершенный газ, состоящий из кластеров данного вещества, включающих K молекул. При этом, выражения для молекулярного веса и молярного потенциала Гиббса такого газа имеют вид:

$$m_i^* = K * m_l, \quad G_i^*(p, T, \gamma) = RT \ln(p \gamma_i^* / p_0 \sum_{(j)} \gamma_j) + K * G_i^0(T) \quad (2.5)$$

Здесь m_l -молекулярный вес жидкости, $G_i^0(T)$ -стандартный молярный потенциал жидкой фазы. Если записать условие химического равновесия вида (2.2) для кластера, то при больших K оно автоматически переходит в условие равновесия между газовой и жидкой фазами. В реальных расчетах при $K = 1000$ ошибка при определении массовой доли жидкой фазы не превышает 1%. При этом концентрации газофазных компонент $\tilde{\gamma}_i$ имеют размерность моль i -ого вещества в килограмме двухфазной смеси, используемую выше концентрацию γ_i (моль i -ого вещества в килограмме газа) можно рассчитать по формуле:

$$\gamma_i = \tilde{\gamma}_i * (1 - K * \sum_{(l)} \gamma_l^* * m_l) \quad (2.6)$$

В состоянии термодинамического равновесия могут быть вычислены производные равновесного состава и термодинамических параметров по температуре и удельному объему. В соответствии с (2.3) концентрации γ_i являются функциями двух термодинамических параметров T и V , а также параметров Z_K

$$\gamma_i = \frac{p_0 V}{RT} \exp\left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i Z_K - \mu_i^0\right), \quad \text{следовательно,} \quad \left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial V}\right)_T = \gamma_i \left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i \frac{\partial Z_K}{\partial V} + \frac{1}{V}\right),$$

$$\left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial T}\right)_V = \gamma_i \left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i \frac{\partial Z_K}{\partial T} + \frac{E_i^0}{RT^2}\right). \quad \text{Для нахождения} \quad \frac{\partial Z_K}{\partial V} \quad \text{и} \quad \frac{\partial Z_K}{\partial T}$$

запишем полный дифференциал от законов сохранения элементарного состава (2.1).

$$d\left[\sum_{i=1}^{N_y} A_k^i \gamma_i(V, T, Z_1, \dots, Z_k)\right] = \sum_{i=1}^N A_k^i \gamma_i \frac{dV}{V} + \sum_{i=1}^N A_k^i \gamma_i E_i^0 \frac{dT}{RT^2} + \sum_{i=1}^N A_k^i \gamma_i \sum_{L=1}^{N_a} A_L^i dZ_L = 0, k = 1, \dots, N_A$$

или в матричной форме: $b_V dV + b_T dT + AdZ = 0$, образует систему линейных

алгебраических уравнений из которой могут быть найдены : $\left(\frac{\partial Z}{\partial V}\right)_T = -A^{-1}b_V$,

$\left(\frac{\partial Z}{\partial T}\right)_V = -A^{-1}b_T$. Необходимо отметить, что с использованием уравнения состояния могут

быть рассчитаны производные от равновесного состава при заданных, например

давлении и температуре: $\left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial p}\right)_T = \left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial V}\right)_T \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T$ и $\left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial T}\right)_P = \left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial T}\right)_V + \left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial V}\right)_T \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P$. В

совершенном газе $pV = RT \sum_{i=1}^{N_y} \gamma_i$, следовательно,

$$pdV + Vdp = R \sum_{i=1}^{N_y} \gamma_i dT + RT \sum_{i=1}^{N_y} d\gamma_i = R \sum_{i=1}^{N_y} \gamma_i dT + RT \sum_{i=1}^{N_y} \left[\left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial V}\right)_T dV + \left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial T}\right)_V dT \right]$$

$$\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T = -\frac{V}{p - RT \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial V}\right)_T}, \quad \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P = -\frac{R \sum_{i=1}^{N_y} (\gamma_i + T \left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial T}\right)_V)}{p - RT \sum_{i=1}^{N_y} \left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial V}\right)_T}.$$

Равновесная теплоемкость:

$$C_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_P = \left(\frac{\partial \sum_{i=1}^N \gamma_i(P, T) H_i(T)}{\partial T}\right)_P = \sum_{i=1}^N (\gamma_i \frac{\partial H_i}{\partial T} + H_i \left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial T}\right)_P);$$

Равновесная скорость звука:

$$a^2 = V^2 \frac{\left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_P}{\left(\left(\frac{\partial h}{\partial p}\right)_T - V\right) \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P - \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_P \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T}, \text{ где } \left(\frac{\partial h}{\partial p}\right)_T = \sum_{i=1}^N H_i^0 \left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial p}\right)_T.$$

2.1.1. Задача расчета равновесного состава при заданной паре термодинамических величин

Термодинамическое равновесия при заданных удельном объеме и температуре

Данная задача соответствует состоянию термодинамического равновесия реализуемого в камере постоянного объема с теплопроводящими стенками после впрыска в нее компонент топлива [97, 248].

Дано: $V, T, \gamma_k^0, k = 1, \dots, N_e$. Найти: $\gamma_i, i = 1, \dots, N_e$. Необходимо решить систему N_e нелинейных уравнений [69, 94, 97] относительно переменных Z_k :

$$\frac{p_0 V}{RT} \sum_{i=1}^{N_e} A_k^i \exp\left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i Z_K - \mu_i^0\right) = \gamma_k^0, k = 1, \dots, N_e;$$

если Z_k найдены, то при известных V и T , определим концентрации компонент из:

$$\gamma_i = \frac{p_0 V}{RT} \exp\left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i Z_K - \mu_i^0\right).$$

Задачу решения системы можно свести к поиску безусловного минимума выпуклой функции (Волков В.А., 1983) [7, 46, 158, 159]:

$$f(Z) = \frac{p_0 V}{RT} \sum_{i=1}^{N_e} \exp\left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i Z_K - \mu_i^0\right) - \sum_{K=1}^{N_e} \gamma_K^0 Z_K$$

Доказательство:

$$\frac{\partial f}{\partial Z_K} = \frac{p_0 V}{RT} \sum_{i=1}^{N_e} A_K^i \exp\left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i Z_K - \mu_i^0\right) - \gamma_K^0 = 0, k = 1, \dots, N_e$$

Докажем, что $f(Z)$ всюду выпукла, для этого рассмотрим произвольную прямую в пространстве переменных: $Z_K = Z_K^{(n)} + \dot{Z}_K t, k = 1, \dots, N_e$, тогда

$$\dot{f} = \frac{df}{dt} = \sum_{i=1}^{N_e} \gamma_i \left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i \dot{Z}_K\right) - \sum_{K=1}^{N_e} \gamma_K^0 \dot{Z}_K, \quad \text{а} \quad \ddot{f} = \frac{d^2 f}{dt^2} = \sum_{i=1}^{N_e} \gamma_i \left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i \dot{Z}_K\right)^2 > 0 \quad - \text{ по любому}$$

направлению строго положительна, а следовательно, f выпукла и имеет единственную точку минимума.

На рис. 2.1—2.2 представлены результаты расчета равновесного состава продуктов сгорания водорода в воздухе. Массовый состав воздуха $C_{1.271 \cdot 10^{-4}} O_{0.23484} N_{0.76503}$. Это условная массовая формула, обозначающая то, что в одном килограмме воздуха содержится $1.271 \cdot 10^{-4}$ кг атомов углерода C , 0.23484 кг атомов кислорода и 0.76503 кг атомов азота. Продукты сгорания включали 12 компонент $H_2O, H_2, N_2, CO_2, CO, OH, O_2, NO, C, H, O, N$, термодинамические свойства которых заимствовались из [121].

Считается, что валентности элементов [12]: $C - 4, H - 1, O - (-2), N - 0$, тогда стехиометрическое соотношение горючее—окислитель: $CH_3NHNH_2 + 1.25 N_2O_4$. Молекулярные веса элементов в [г/моль]: $C - 12.011, H - 1.0079, O - 15.9994, N -$

14.0067, соответственно, стехиометрическая формула горения водорода в воздухе может быть записана в виде: $H_2 + \frac{0.5}{0.209}(0.209 O_2 + 0.788 N_2 + 0.003 CO_2)$.

Из рисунка 2.1 видно, что с ростом коэффициента избытка окислителя давление, энтропия, скорость звука уменьшаются, молекулярный вес растет. В составе продуктов сгорания в окрестности стехиометрии присутствуют азот, вода и углекислый газ. При недостатке окислителя добавляются углеродосодержащие соединения, при избытке – кислородосодержащие.

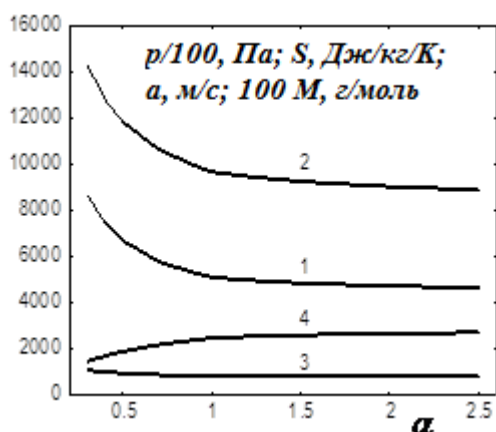


Рис. 2.1. Зависимость параметров от коэффициента избытка окислителя α (H_2 +воздух, $\rho = 1 \text{ кг/м}^3, T = 1500 \text{ К}$).

1 – давление, 2 – энтропия, 3 – скорость звука, 4 – молекулярный вес.

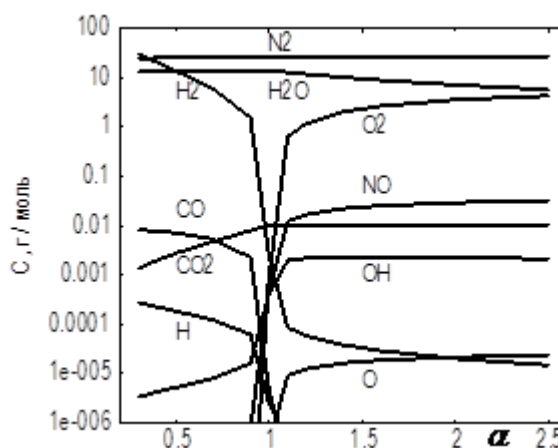


Рис. 2.2. Зависимость мольно-массовых концентраций от коэффициента избытка окислителя α (H_2 +воздух, $\rho = 1 \text{ кг/м}^3, T = 1500 \text{ К}$).

Расчет равновесного состава при заданных удельном объеме и внутренней энергии

Данная задача соответствует состоянию термодинамического равновесия реализуемого в адиабатической камере постоянного объема после впрыска в нее компонент топлива [97, 248, 305].

Дано: $V, e, \gamma_k^0, k = 1, \dots, N_A$. Найти: $\gamma_i, i = 1, \dots, N$. Необходимо решить систему $N_e + 1$ нелинейных уравнений относительно переменных Z_k и T :

$$\frac{p_0 V}{RT} \sum_{i=1}^{N_\gamma} A_k^i \exp\left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i Z_K - \mu_i^0\right) = \gamma_k^0, k = 1, \dots, N_e;$$

$$\frac{p_0 V}{RT} \sum_{i=1}^{N_\gamma} E_i(T) \exp\left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i Z_K - \mu_i^0\right) = e$$

если Z_k найдены, то при известных V и T концентрации компонент рассчитываются из

$$\gamma_i = \frac{p_0 V}{RT} \exp\left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i Z_K - \mu_i^0\right).$$

Задачу решения системы можно свести к задаче нахождения точки безусловного минимума выпуклой функции [7, 46]:

$$f\left(Z, \frac{1}{T}\right) = \frac{p_0 V}{RT} \sum_{i=1}^{N_\gamma} \exp\left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i Z_K - \mu_i^0\right) - \sum_{K=1}^{N_e} \gamma_K^0 Z_K + \frac{e}{RT}$$

Доказательство:

$$\frac{\partial f}{\partial Z_K} = \frac{p_0 V}{RT} \sum_{i=1}^{N_\gamma} A_K^i \exp\left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i Z_K - \mu_i^0\right) - \gamma_K^0 = 0, \quad k = 1, \dots, N_e$$

$$\frac{\partial f}{\partial 1/T} = -\frac{p_0 V}{R^2 T} \sum_{i=1}^{N_\gamma} E_i(T) \exp\left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i Z_K - \mu_i^0\right) + \frac{e}{R} = 0,$$

Докажем, что $f(Z, y)$, где $y = \frac{1}{T}$ всюду выпукла, для этого рассмотрим произвольную прямую в пространстве переменных:

$$Z_K = Z_K^{(n)} + \dot{Z}_K t, \quad k = 1, \dots, N_e, \quad y = y^{(n)} + \dot{y} t, \quad \text{тогда}$$

$$\dot{f} = \frac{df}{dt} = \sum_{i=1}^{N_\gamma} \gamma_i \left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i \dot{Z}_K - \frac{E_i}{R} \dot{y} \right) - \sum_{K=1}^{N_e} \gamma_K^0 \dot{Z}_K + \frac{e}{R} \dot{y}, \quad \text{так как } C_{Vi} = \left(\frac{\partial E_i}{\partial T} \right)_V > 0, \text{ то}$$

$$\ddot{f} = \frac{d^2 f}{dt^2} = \sum_{i=1}^{N_\gamma} \gamma_i \left[\left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i \dot{Z}_K - \frac{E_i}{R} \dot{y} \right)^2 + \frac{C_{Vi}}{R} \left(\frac{\dot{y}}{y} \right)^2 \right] > 0 \quad - \text{ по любому направлению строго}$$

положительна, а, следовательно, f выпукла и имеет единственную точку минимума.

Рассматривалась горючая смесь водорода с воздухом. Внутренняя энергия соответствует газообразной смеси водорода с воздухом при температуре 298.15 К. График температуры (рис. 2.3) имеет максимум при коэффициенте избытка окислителя, равном 0.9, молекулярный вес смеси с увеличением коэффициента избытка окислителя растет, а плотность и скорость звука уменьшаются. Так как уровень температур в рассматриваемом диапазоне коэффициента избытка окислителя от 0.3 до 2.5 превышает 1500 К, то в составе продуктов сгорания (рис. 2.4) в заметных концентрациях присутствуют все рассматриваемые вещества (кроме атомарного углерода и азота).

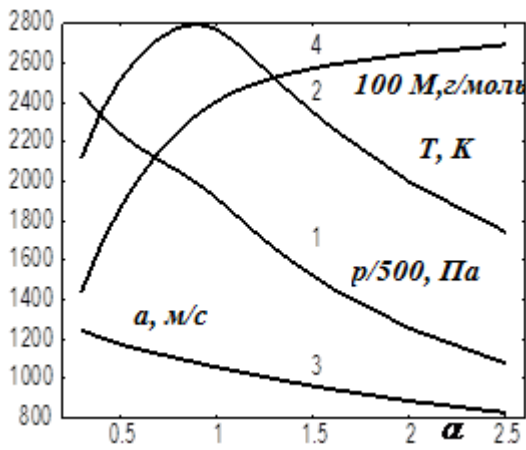


Рис. 2.3. Зависимость параметров от коэффициента избытка окислителя (H_2 +воздух, $\rho = 1 \text{ кг/м}^3$). 1 – давление, 2 – температура, 3 – скорость звука, 4 – молекулярный вес.

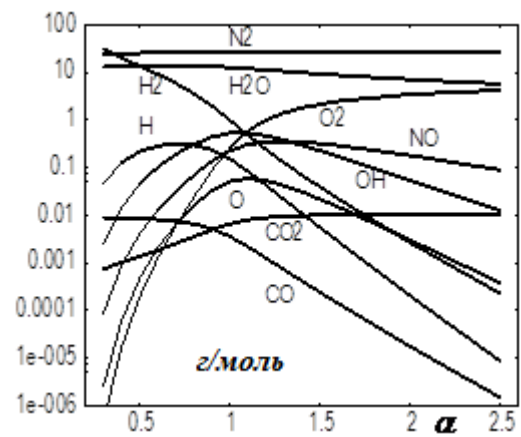


Рис. 2.4. Зависимость мольно-массовых концентраций от коэффициента избытка окислителя (H_2 +воздух, $\rho = 1 \text{ кг/м}^3$).

Расчет равновесного состава при заданных давлении и температуре

Данная задача соответствует состоянию термодинамического равновесия реализуемого в камере постоянного давления с теплопроводящими стенками после впрыска в нее компонент топлива [97, 248].

Дано: p , T , γ_k^0 , $k=1, \dots, N_e$. Найти: γ_i , $i=1, \dots, N_\gamma$. Необходимо решить систему $N_e + 1$ нелинейных уравнений относительно переменных Z_k и $\frac{1}{m_\Sigma}$:

$$\frac{p_0}{p m_\Sigma} \sum_{i=1}^{N_\gamma} A_K^i \exp\left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i Z_K - \mu_i^0\right) = \gamma_k^0, \quad k=1, \dots, N_e;$$

$$\frac{p_0}{p} \sum_{i=1}^{N_\gamma} \exp\left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i Z_K - \mu_i^0\right) = 1.$$

Если Z_k и m_Σ найдены, то при известных p и T мольно-массовые концентрации

компонент рассчитываются из
$$\gamma_i = \frac{p_0}{p m_\Sigma} \exp\left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i Z_K - \mu_i^0\right).$$

Данная нелинейная система уравнений может быть решена методом Ньютона. Также задача поиска решения может быть сведена к нахождению точки глобального минимума функции:

$$f\left(Z, \frac{1}{m_\Sigma}\right) = \frac{p_0}{p m_\Sigma} \sum_{i=1}^{N_\gamma} \exp\left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i Z_K - \mu_i^0\right) - \sum_{K=1}^{N_e} \gamma_K^0 Z_K - \frac{1}{m_\Sigma}$$

Если решение системы - Z_K^* , найдено, то молекулярный вес смеси m_Σ :

$$m_{\Sigma} = \frac{P_0}{P} \sum_{i=1}^{N_{\gamma}} m_i \exp\left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i Z_K^* - \mu_i^0\right), m_i - \text{молекулярный вес } i\text{-ого компонента.}$$

Данное условие позволяет находить точку глобального минимума функции.

Рассматривалась горючая смесь водорода с воздухом. Из рисунка 2.5 видно, что с ростом коэффициента избытка окислителя плотность и молекулярный вес растут, а энтропия и скорость звука уменьшаются. В составе продуктов сгорания в окрестности стехиометрии присутствуют азот, вода и углекислый газ. При недостатке окислителя добавляются углеродосодержащие соединения, при избытке – кислородосодержащие.

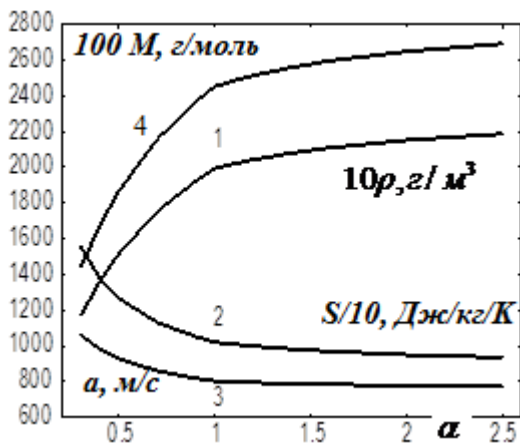


Рис. 2.5. Зависимость параметров от коэффициента избытка окислителя (H_2 +воздух, $P=1013250$ Па, $T=1500$ К). 1 – плотность, 2 – энтропия, 3 – скорость звука, 4 – молекулярный вес.

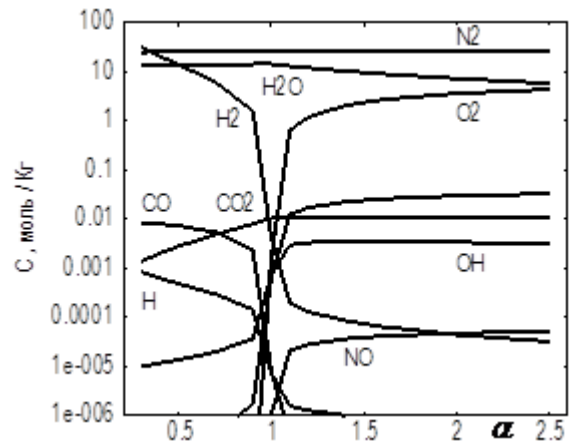


Рис. 2.6. Зависимость мольно-массовых концентраций от коэффициента избытка окислителя (H_2 +воздух, $P=1013250$ Па, $T=1500$ К).

Расчет равновесного состава при заданных удельном объеме и энтропии

Данная задача используется при расчетах изоэнтропического равновесного течения в каналах и соплах [97, 206-209].

Дано: V , S , γ_K^0 , $k=1, \dots, N_e$. Найти: γ_i , $i=1, \dots, N_{\gamma}$. Необходимо решить систему $N_e + 1$ нелинейных уравнений относительно переменных Z_K и T :

$$\frac{P_0 V}{RT} \sum_{i=1}^{N_{\gamma}} A_K^i \exp\left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i Z_K - \mu_i^0\right) = \gamma_K^0, k=1, \dots, N_e;$$

$$\sum_{i=1}^{N_{\gamma}} \gamma_i \left(S_i^0(T) - R \ln \frac{\gamma_i RT}{V P_0}\right) = S.$$

Задача нахождения равновесного состава при заданных удельном объеме и энтропии может быть сведена к последовательности задач нахождения равновесного состава γ_i^n

при заданном удельном объеме V и температуре T^n . При этом температура уточняется по формуле:

$$T^{n+1} = T^n - \beta \frac{T^n}{C_V^n} \left[\sum_{i=1}^{N_g} \gamma_i^n (S_i^0(T^n) - R \ln \frac{\gamma_i^n RT^n}{V p_0}) - S \right], \quad 0 < \beta \leq 1,$$

где $\frac{C_V^n}{T^n} = \sum_{i=1}^{N_g} \gamma_i^n \left[\left(\frac{\partial S_i^0(T)}{\partial T} \right)_{T=T^n} - \frac{R}{T^n} \right]$, итерации прекращаются, когда выполняется условие:

$$\left| \sum_{i=1}^{N_g} \gamma_i^n (S_i^0(T^n) - R \ln \frac{\gamma_i^n RT^n}{V p_0}) - S \right| < \varepsilon C_V^n, \quad \text{где } \varepsilon \approx 10^{-8}.$$

Рассматривалась горючая смесь водорода с воздухом. Энтропия и плотность соответствуют газообразной смеси водорода с воздухом при температуре 1000 K и давлении 101325 Па . График температуры (рис. 2.7) имеет максимум при коэффициенте избытка окислителя, равном 0.9 , молекулярный вес смеси с увеличением коэффициента избытка окислителя растет, а давление, энтропия и скорость звука уменьшаются. Так как уровень температур в рассматриваемом диапазоне коэффициента избытка окислителя от 0.3 до 2.5 превышает 2000 K , то в составе продуктов сгорания (рис. 2.8) в заметных концентрациях присутствуют все рассматриваемые вещества (кроме атомарного углерода и азота).

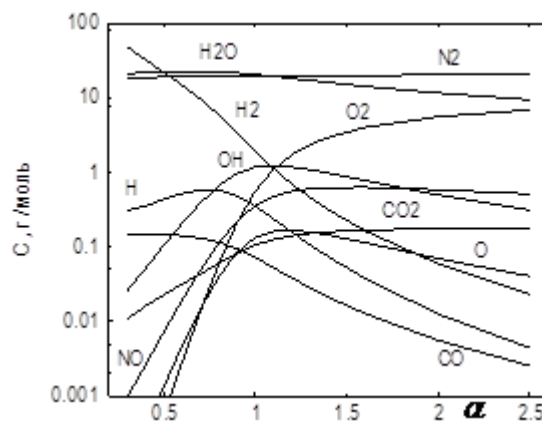
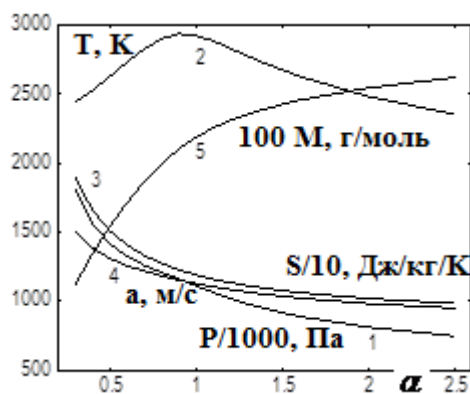


Рис. 2.7. Зависимость параметров от коэффициента избытка окислителя (H_2 +воздух, $R_0 = 1 \text{ кг/м}^3$, $T = 1000 \text{ K}$). 1 – давление, 2 – температура, 3 – энтропия, 4 – скорость звука, 5 – молекулярный вес.

Рис. 2.8. Зависимость мольно-массовых концентраций от коэффициента избытка окислителя (H_2 +воздух, $R_0 = 1 \text{ кг/м}^3$, $T = 1000 \text{ K}$).

Расчет равновесного состава при заданных давлении и энтальпии

Данная задача соответствует состоянию термодинамического равновесия реализуемого в адиабатической камере постоянного давления после впрыска в нее компонент топлива [97, 248, 305].

Дано: $p, h, \gamma_k^0, k=1, \dots, N_e$. Найти: $\gamma_i, i=1, \dots, N_\gamma$. Необходимо решить систему $N_e + 2$ нелинейных уравнений относительно переменных $Z_K, \frac{1}{m_\Sigma}$ и T :

$$\begin{aligned} \frac{p_0}{pm_\Sigma} \sum_{i=1}^{N_\gamma} A_K^i \exp\left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i Z_K - \mu_i^0\right) &= \gamma_K^0, k=1, \dots, N_e; \\ \frac{p_0}{p} \sum_{i=1}^{N_\gamma} \exp\left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i Z_K - \mu_i^0\right) &= 1, \\ \sum_{i=1}^{N_\gamma} \gamma_i H_i^0(T) &= h, \quad H_i^0 = G_i^0 - T \left(\frac{\partial G_i^0}{\partial T} \right)_P. \end{aligned}$$

Задача нахождения равновесного состава при заданных давлении и энтальпии может быть сведена к последовательности задач нахождения равновесного состава γ_i^n при заданном давлении P и температуре T^n . При этом температура уточняется по формуле:

$$T^{n+1} = T^n - \beta \frac{1}{C_P^n} \left[\sum_{i=1}^{N_\gamma} (\gamma_i^n H_i^0(T^n) - h) \right], \quad 0 < \beta \leq 1, \quad C_P^n = \sum_{i=1}^{N_\gamma} \gamma_i^n \left(\frac{\partial H_i^0(T)}{\partial T} \right)_{T=T^n}$$

итерации прекращаются, когда выполняется условие:

$$\left| \sum_{i=1}^{N_\gamma} (\gamma_i^n H_i^0(T^n) - h) \right| < \varepsilon C_P^n, \quad \text{где } \varepsilon \approx 10^{-8}.$$

Также задача поиска решения может быть сведена к нахождению точки глобального минимума функции:

$$f\left(Z, \frac{1}{m_\Sigma}, \frac{1}{T}\right) = \frac{p_0}{pm_\Sigma} \sum_{i=1}^{N_\gamma} \exp\left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i Z_K - \mu_i^0\right) - \sum_{K=1}^{N_e} \gamma_K^0 Z_K + \frac{h}{RT} - \frac{1}{m_\Sigma}$$

Если решение системы - Z_K^* найдено, то молекулярный вес смеси m_Σ :

$m_\Sigma = \frac{p_0}{p} \sum_{i=1}^{N_\gamma} m_i \exp\left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i Z_K^* - \mu_i^0\right)$. Данное условие позволяет находить точку глобального минимума функции.

Рассматривалась горючая смесь водорода с воздухом со значениями энтальпий образования, взятыми из справочника [238], $\Delta_f H_{H_2}(298.15) = -435.39 \text{ КДж/кг}$, $\Delta_f H_{Air}(298.15) = 0.44 \text{ КДж/кг}$. Задача расчета равновесного состава при заданных давлении и энтальпии используется на практике для расчета параметров в камере сгорания ракетных двигателей. График температуры (рис. 2.9) имеет максимум при коэффициенте избытка окислителя около единицы, молекулярный вес смеси и плотность с увеличением коэффициента избытка окислителя растут, а скорость звука

уменьшаются. В составе продуктов сгорания в окрестности стехиометрии присутствуют H_2O , N_2 , CO_2 . При недостатке окислителя добавляются CO , при избытке – OH , NO , O_2 .

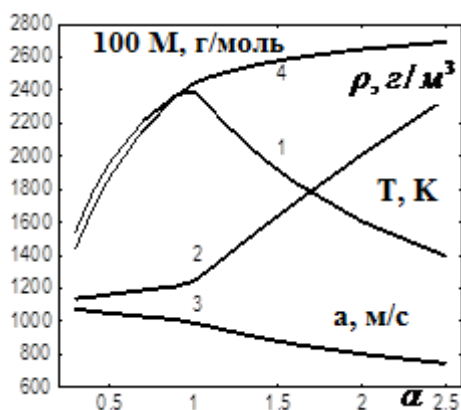


Рис. 2.9. Зависимость параметров от коэффициента избытка окислителя (H_2 +воздух, $P=1013250$ Па). 1 – температура, 2 – плотность, 3 – скорость звука, 4 – молекулярный вес.

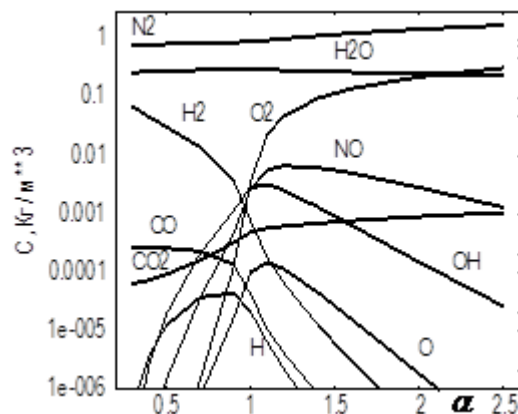


Рис. 2.10. Зависимость объемных концентраций от коэффициента избытка окислителя (H_2 +воздух, $P=1013250$ Па).

2.1.2. Расчет равновесной ударной адиабаты

Ударная адиабата определяет множество возможных решений соотношений Ренкина-Гюгонио на плоскости P - V в зависимости от скорости ударной волны D . Если дополнительно делается предположение о том, что газовая смесь находится в состоянии термодинамического равновесия, то ударная адиабата называется равновесной. Случай горючих газовых смесей, когда равновесная ударная адиабата состоит из детонационной и дефлаграционной ветвей, будет рассмотрен в главе 4.

Для расчета равновесной ударной адиабаты необходимо решить следующую систему уравнений [183, 214, 215, 232, 253]:

$$\sum_{i=1}^{N_\gamma} \gamma_i (V_3, T_3) H_i^0(T_3) - \sum_{i=1}^{N_\gamma} \gamma_i (V_D, T_D) H_i^0(T_D) - \frac{1}{2} (V_3 + V_D) (P_3 - P_D) = 0. \quad (2.7)$$

Мольно-массовые концентрации γ_i можно рассматривать как неявно-заданные функции удельного объема и температуры, которые рассчитываются по методике, описанной в разделе 2.1.2. Давление P удовлетворяет уравнению состояния:

$$P_M = \frac{RT_M \sum_{i=1}^{N_\gamma} \gamma_i (V_M, T_M)}{V_M}, \quad M = D, 3. \quad (2.8)$$

Таким образом, при заданных V_d, T_d и известном T_3 из (2.7) численно может быть найдено V_3 , и из (2.8) - P_3 . На каждой итерации при нахождении V_3 по методике, описанной в настоящей главе, вычисляются равновесные мольно-массовые концентрации $\gamma_{3,i} = \gamma_i(V_3, T_3)$ и производные от них по удельному объему.

Приведем результаты расчета равновесной ударной адиабаты для однократно ионизированного воздуха [159, 307]. Давление воздуха перед ударной волной P_d варьировалось от 10^{-4} до 1 атм (101325 Па), температура T_d - принималась равной 298,15 К, начальные массовые концентрации компонент - $O_2 - 0,2315$; $N_2 - 0,7556$; $Ar - 0,0129$. На рис. 2.11 в логарифмическом масштабе приведены равновесные ударные адиабаты воздуха. Кривая 1 соответствует начальному давлению $P_d = 10^{-4}$ атм, 2 - 10^{-3} атм, 3 - 0.01 атм, 4 - 0.1 атм, 5 - 1 атм, 6 - соответствует замороженной ударной адиабате воздуха, ее вид не зависит от начального давления. Кривые 7, 8 и 9 соответствуют прямой Релея при различных значениях скорости ударной волны в покоящемся газе (или, что тоже самое, относительной скорости набегающего потока $D - u_d$), 1000, 5000 и 10000 м/с, соответственно. Уравнение для прямой Релея может быть получено из (1.17)-(1.19):

$$\frac{P_3}{P_d} = 1 - \frac{(D - u_d)^2}{P_d V_d} \left(1 - \frac{V}{V_d}\right). \quad (2.9)$$

Расчет адиабат проводился до достижения скорости ударной волны 12000 м/с, предполагалось наличие равновесия между поступательными, вращательными и колебательными степенями свободы компонент. Из рис. 2.11 следует, что до скорости ударной волны 2100 м/с равновесные ударные адиабаты совпадают с замороженной. Если рассмотреть случай плоской ударной волны, распространяющейся в воздухе с постоянной скоростью [159], то качественная картина течения имеет следующий вид: состояние перед ударной волной соответствует точке с координатами (1, 1) рис. 2.11; состояние непосредственно за ударной волной соответствует точке пересечения прямой Релея и замороженной ударной адиабаты; далее, независимо от кинетики протекающих процессов фазовая траектория совпадает с прямой Релея; фазовая траектория заканчивается в точке пересечения прямой Релея и равновесной адиабаты. Из рис. 2.11 и 2.12 видно, что при движении по фазовой траектории давление возрастает, а удельный объем и температура уменьшается, при этом, чем меньше давление перед ударной

волной, тем больше перепад давлений и меньше температура в точке окончания фазовой траектории – точке пересечения прямой Релея с равновесной ударной адиабатой.

На рис. 2.13 представлены зависимости массовых концентраций компонент на равновесной адиабате от скорости ударной волны. Жирные линии соответствуют давлению перед ударной волной 10,1325 Па, тонкие – 101325 Па. Концентрация N₂ – кривые 1, O₂ – 2, NO – 3, N – 4, O – 5, N⁺ – 6, O⁺ – 7. Из графиков видно, что не смотря на то, что температура на равновесной адиабате понижается с уменьшением давления перед ударной волной рис. 2.11, процесс диссоциации и образования положительных ионов протекает быстрее. Это связано с сильным влиянием давления на значения равновесных концентраций. Немонотонности на графиках равновесных ударных адиабат и зависимостях температуры, от скорости ударной волны связаны с протеканием процессов диссоциации ($D \sim 4000$ м/с) и ионизации ($D \sim 9000$ м/с). Рассчитанные величины хорошо коррелируют с данными [168, 214].

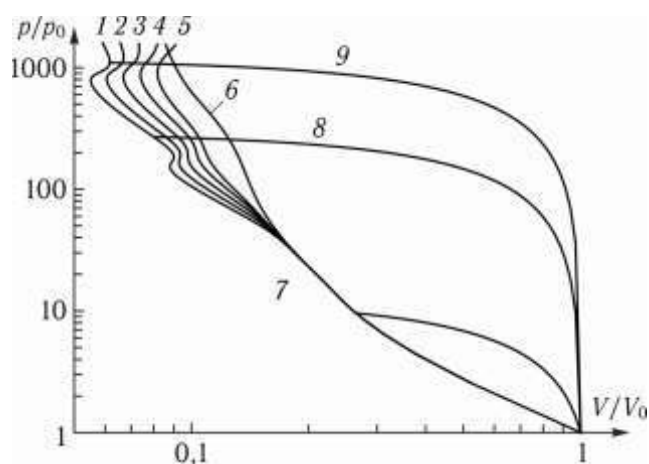


Рис. 2.11. Равновесные ударные адиабаты и прямые Релея.

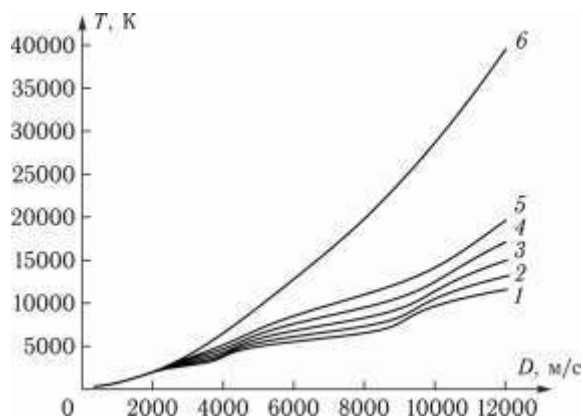


Рис. 2.12. Зависимости температуры от скорости ударной волны

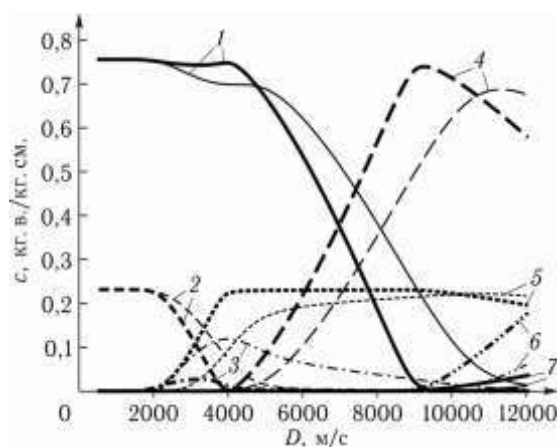


Рис. 2.13. Зависимости равновесных массовых концентраций компонент от скорости ударной волны.

2.1.3. Расчет равновесного течения в сопле заданной формы с переходом через скорость звука

Система уравнений, описывающая квазиодномерные стационарные течения равновесно реагирующего газа, включающая законы сохранения массы, импульса, энергии (2.10) и элементного состава, а также условия химического равновесия и уравнение состояния, имеет вид [12, 94, 129, 238, 255]:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \rho u F &= 0 \\ \frac{d}{dx} (\rho u^2 + p) F &= p \frac{\partial F}{\partial x} \end{aligned} \quad (2.10)$$

$$\frac{d}{dx} \rho u \left(\sum_{i=1}^{N_\gamma} \gamma_i H_i(T) + \frac{u^2}{2} \right) F = 0$$

$$\sum_{i=1}^{N_\gamma} A_k^i \gamma_i = \gamma_k^0, \quad k = 1, \dots, N_e,$$

$$\gamma_i = \frac{p_0 V}{RT} \exp \left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i Z_K - \mu_i^0 \right), \quad V = 1/\rho \quad (2.11)$$

$$P = \rho R \sum_{i=1}^{N_\gamma} \gamma_i T \quad (2.12)$$

Здесь $F = F(x)$ - зависимость площади канала от продольной координаты.

Система (2.10) может быть преобразована к виду:

$$\begin{aligned} \rho u F &= Q_0, \quad Q_0 = const \\ S &= \sum_{i=1}^{N_\gamma} \gamma_i \left(S_i^0(T) - R \ln \frac{p \gamma_i}{p_0 \sum_{j=1}^{N_\gamma} \gamma_j} \right) = S_0, \quad S_0 = const \end{aligned} \quad (2.13)$$

$$h + \frac{u^2}{2} = \sum_{i=1}^{N_\gamma} \gamma_i H_i^0(T) + \frac{u^2}{2} = H_0, \quad H_0 = const$$

В случае течения с переходом через скорость звука в начальном сечении считаются известными энтропия и полная энтальпия:

$$\begin{aligned} S|_{x=x_0} &= S_0 \\ h + \frac{u^2}{2} \Big|_{x=x_0} &= H_0 \end{aligned} \quad (2.14)$$

Параметры S_0 , H_0 - равны соответствующим параметрам в камере сгорания и определяются из решения задачи расчета равновесного состава при заданных давлении и энтальпии, описанной в разделе 2.1.1. Расход Q_0 считается неизвестным и

определяется из условия равенства скорости течения газа равновесной скорости звука в минимальном сечении сопла X_* .

$$u|_{X=X_*} = a|_{X=X_*} \quad (2.15)$$

Для решения задачи расчета равновесного течения реагирующего газа в сопле с переходом через скорость звука используется следующий алгоритм.

1. Рассчитываются параметры в камере сгорания. Считается, что в камере газ покоится, а давление известно для данной марки двигателя. Для заданных горючего и окислителя по данным теплофизических справочников рассчитывается энтальпия топлива H_0 , по условной формуле топлива определяется атомарный состав γ_k^0 , вектор равновесных концентраций γ_i определяется из решения задачи о расчете термодинамического равновесия при заданных давлении, энтальпии и элементного состава. Затем находится энтропия полученной смеси S_0 , плотность ρ_0 и др.

2. Задается убывающая таблица плотности ρ_m , $m = 0, 1, \dots, M$, ρ_M - малая величина. Для каждого значения плотности решается задача расчета равновесного состава при заданных $V_m = \frac{1}{\rho_m}$, S_0 и γ_k^0 , $k = 1, \dots, N_e$, описанная в разделе 2.1.1. В результате решения которой находятся вектор равновесных концентраций, давление, температура, равновесная скорость звука и др. Скорость газа находится из (2.13).

3. Находятся две соседние точки в таблице, в которых разность $u - a$ меняет знак с минуса на плюс, и методом деления отрезка пополам путем решения на каждой итерации задачи расчета термодинамического равновесия, подбирается значение плотности ρ^* , для которого $u = a$. По найденным значениям определяется расход Q_0 .

$$Q_0 = \rho^* a^* F^*, \quad (2.16)$$

Здесь F^* - минимальное сечение сопла.

4. Далее, из уравнения $F(x) = \frac{Q_0}{\rho_m u_m}$ находим сечения X_m , соответствующие табличным значениям плотности.

2.1.4. Задача о распаде произвольного разрыва

В настоящем разделе приводится алгоритм решения задачи о распаде произвольного разрыва [22, 107, 232] в смесях, удовлетворяющих произвольным,

термодинамически допустимым уравнениям состояния. Рассмотрены случаи смеси совершенных газов с реальными зависимостями теплоемкостей от температуры в замороженной, равновесной и равновесно-замороженной постановках [72, 79, 310]. А именно, состав переходит через ударные волны и веера волн разрежения не меняется; состав смеси подчиняется условиям термодинамического равновесия; перед ударной волной состав считается заданным (замороженным), а за ударной волной удовлетворяет условиям термодинамического равновесия [72, 79]. Кроме этого, приводится решение задачи о распаде произвольного разрыва на границе раздела многокомпонентный газ – вода (вода рассматривается как сжимаемая жидкость).

Распад разрыва в многокомпонентном газе

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 - $X > 0$, $u_R, P_R, T_R, \gamma_{R,i}, i=1, N$ (Рис.2.14).

Здесь u, P, T, γ_i - скорость, давление, температура и мольно-массовые концентрации химических компонент.

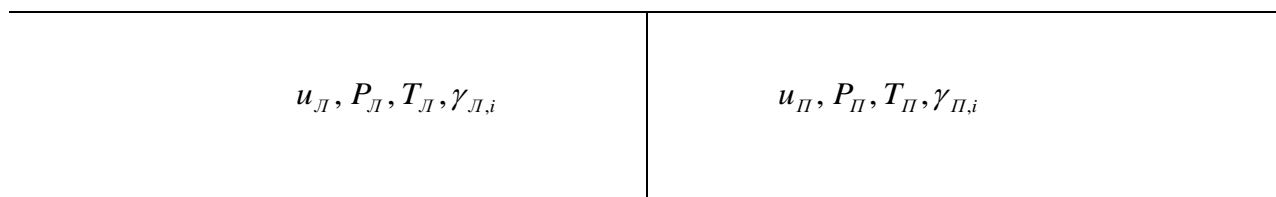


Рис.2.14. Начальные данные.

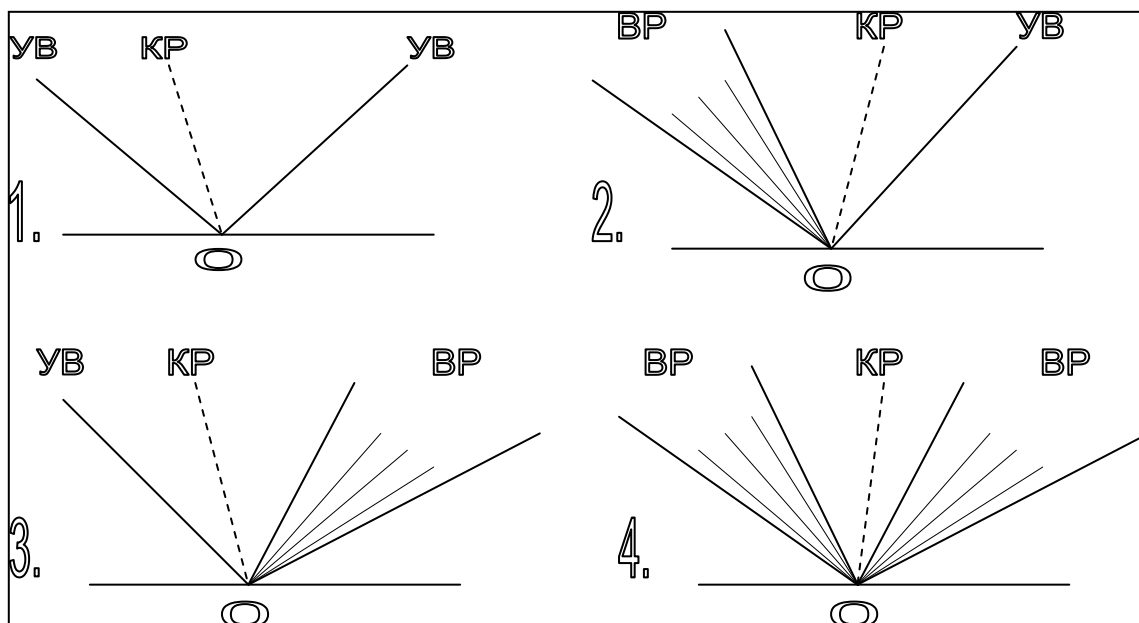


Рис. 2.15. Реализующиеся конфигурации

При этом, если параметры слева и справа в начальный момент времени произвольные, то исходный разрыв при $t > 0$ распадается на несколько разрывов,

возможные конфигурации которых описаны, например, в [107]. Схематически автомодельная картина течения на плоскости $X-t$ при $t > 0$ изображается одной из пяти возможных конфигураций, четыре из которых представлены на рис. 2.15. Здесь УВ – ударная волна, КР – контактный разрыв, ВР – центрированный веер волн разрежения. Слева и справа от разрывов находятся зоны постоянных параметров. Пятая конфигурация представляет из себя вырожденную четвертую, а именно, давление между веерами волн разрежения равно нулю и контактный разрыв отсутствует.

При переходе через ударную волну выполняются соотношения Ренкина-Гюгонио [253], которые можно записать в виде:

$$\begin{aligned} \rho_D(D-u_D) &= \rho_3(D-u_3) \\ p_D + \rho_D(D-u_D)^2 &= p_3 + \rho_3(D-u_3)^2 \\ (D-u_D)\left(e_D + \frac{p_D}{\rho_D} + \frac{(D-u_D)^2}{2}\right) &= (D-u_3)\left(e_3 + \frac{p_3}{\rho_3} + \frac{(D-u_3)^2}{2}\right) \end{aligned} \quad (2.17)$$

Здесь D - скорость ударной волны, ρ - плотность, e – внутренняя энергия, индексом “Д” помечены параметры до волны, индексом “З” - параметры за волной.

В веере волн разрежения течение непрерывно, и выполняются дифференциальные уравнения газовой динамики, например в своей характеристической форме:

$$\begin{aligned} \frac{dX}{dt} = u \pm a \quad du \pm \frac{1}{\rho a} dp &= 0 \\ \frac{dX}{dt} = u \quad dS &= 0 \end{aligned} \quad (2.18)$$

Здесь a - скорость звука, S - энтропия.

В общем случае плотность, внутренняя энергия, скорость звука и энтропия, являются заданными функциями давления, температуры и концентраций. Если известно выражение для потенциала Гиббса смеси

$$\begin{aligned} G = G(P, T, \bar{\gamma}), \text{ то } 1/\rho &= \left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_T, \quad S = -\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_P, \quad e = G + TS - p/\rho, \\ a^2 &= \frac{1}{\rho^2} \frac{\rho^2 \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_P - p \left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P}{\left(\frac{\partial \rho}{\partial p}\right)_T \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_P - \left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P \left(\frac{\partial e}{\partial p}\right)_T} \end{aligned} \quad (2.19)$$

В случае, если считается, что химический состав при переходе через ударную волну и в веере волн разрежения не меняется, то к соотношениям (2.17) добавляются условия:

$$\gamma_{Д,i} = \gamma_{З,i}, \quad i = 1, \dots, N_\gamma, \quad (2.20)$$

а к соотношениям, выполняемым вдоль траектории газа (2.18) условия:

$$d\gamma_i = 0, \quad i = 1, \dots, N_\gamma. \quad (2.21)$$

Если считается, что смесь газов находится в состоянии термодинамического равновесия, то концентрации химических компонент являются неявно заданными функциями двух термодинамических параметров, например давления и температуры, и атомарного состава слева и справа от исходного разрыва, соответственно.

$$\gamma_i = \gamma_i(p, T, \gamma_{K,M}^0), \quad i = 1, \dots, N_\gamma, \quad K = 1, \dots, N_e, \quad M = Л, П, \quad (2.22)$$

$\gamma_{K,Л}^0$ и $\gamma_{K,П}^0$ - число молей к-ого атома в килограмме смеси слева и справа от разрыва, соответственно, данные величины остаются неизменными и на ударной волне и в веере волн разрежения.

Решить задачу о распаде разрыва - это значит определить реализуемую при конкретных параметрах конфигурацию, найти параметры течения слева и справа от контактного разрыва (на контактном разрыве, как известно, скорость и давление газа непрерывны, а плотность, температура и концентрации могут претерпевать разрыв) и, если это необходимо, рассчитать параметры внутри веера волн разрежения. Из соотношений (2.17) можно получить уравнение для ударной адиабаты:

$$e - e_m - \frac{1}{2}(p + p_m)\left(\frac{1}{\rho_m} - \frac{1}{\rho}\right) = 0, \quad m = Л, П \quad (2.23)$$

И соотношение, связывающие перепады скорости, давления и плотности на ударной волне:

$$\text{Для левой ударной волны: } u - u_{Л} + \sqrt{\left(\frac{1}{\rho_{Л}} - \frac{1}{\rho}\right)(p - p_{Л})} = 0 \quad (2.24)$$

$$\text{Для правой ударной волны: } u - u_{П} - \sqrt{\left(\frac{1}{\rho_{П}} - \frac{1}{\rho}\right)(p - p_{П})} = 0 \quad (2.25)$$

Из (2.18) можно получить соотношения, связывающие параметры до и после веера волн разрежения.

Для левого веера:
$$u - u_L + \int_{p_L}^p \frac{dp}{\rho a} = 0 \quad (2.26)$$

Для правого веера:
$$u - u_{II} - \int_{p_{II}}^p \frac{dp}{\rho a} = 0 \quad (2.27)$$

В веере волн разрежения сохраняется энтропия:

$$S = S_M, M = L, II, \quad (2.28)$$

соответственно, поэтому подынтегральные выражения можно рассматривать как функции только одной термодинамической переменной: давления или температуры.

Соотношения (2.23) и (2.28) совместно с выражениями (2.22) неявно задают температуру и плотность, как функции давления: $T = T(p)$ и $\rho = \rho(p)$ и, следовательно, решение задачи о распаде произвольного разрыва сводится к решению одного нелинейного уравнения относительно давления. Например, для случая, когда слева от контактного разрыва находится веер волн разрежения, а справа - ударная волна, уравнение для определения давления имеет вид:

$$u_{II} - u_L + \int_{p_L}^p \frac{dp}{\rho a} + \sqrt{\left(\frac{1}{\rho_{II}} - \frac{1}{\rho}\right)}(p - p_{II}) = 0, \quad (2.29)$$

причем плотность: $\rho = \rho(p)$ и скорость звука: $a = a(p)$, входящие в подынтегральное выражение, находятся из уравнения состояния и условия сохранения энтропии в веере волн разрежения, а плотность, стоящая под радикалом – из уравнения состояния и ударной адиабаты. В случае равновесно-реагирующего газа дополнительно используются зависимости (2.22).

В общем случае, если ввести аналогично [107], функцию $f(P, P_M)$:

$$f(P, P_M) = \begin{cases} \int_{P_M}^P \frac{dp}{\rho a}, & P < P_M \\ \sqrt{\left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_M}\right)}(P - P_M), & P > P_M \end{cases}, \quad M = L, II, \quad (2.30)$$

то задача о распаде разрыва сводится к решению одного нелинейного уравнения относительно давления:

$$F(P) = u_{II} - u_L + f(p, p_L) + f(p, p_{II}) = 0 \quad (2.31)$$

Можно показать, что функция $F(p)$ - возрастающая. Доказательство, для случая смеси идеальных газов будет приведено ниже. Тогда конфигурация в задаче о распаде разрыва может быть определена заранее.

$F(p_L) < 0 \Rightarrow p > p_L \Rightarrow$ влево распространяется ударная волна;

$F(p_L) > 0 \Rightarrow p < p_L \Rightarrow$ влево распространяется веер волн разрежения;

$F(p_{II}) < 0 \Rightarrow p > p_{II} \Rightarrow$ вправо распространяется ударная волна;

$F(p_{II}) > 0 \Rightarrow p < p_{II} \Rightarrow$ вправо распространяется веер волн разрежения.

Давление P находится из (2.39) итерационным методом, например методом Ньютона, при этом интеграл, входящий в (2.38), в общем случае, вычисляется численно. Скорость газа на контактном разрыве с использованием (2.24)-(2.29) и (2.31).

$$u = \frac{1}{2}(u_{II} + u_L - f(p, p_L) + f(p, p_{II})) \quad (2.32)$$

В случае веера волн разрежения температура находится из условия изоэнтропичности (2.28), в случае ударной волны - из адиабаты Гюгонио (2.23).

Параметры внутри веера могут быть вычислены при заданной автомодельной

переменной $\xi = \frac{dX}{dt} = u \pm a$, из $\xi \mp a \mp \int_{p_M}^p \frac{1}{\rho a} dp = 0$ (верхний знак берется, если веер

образован характеристиками семейства C^+ , $m = L$, нижний - C^- , $m = II$, и условия изоэнтропичности $S = S_M$, $m = L, II$). При этом, для крайних характеристик

центрированного веера разрежения $\xi_M = u_M \mp a_M$.

Скорость ударной волны при рассчитанных параметрах на контактном разрыве u и ρ (со стороны ударной волны), находится из (2.17): $D = (\rho u - \rho_M u_M) / (\rho - \rho_M)$.

Будем рассматривать смесь совершенных газов, в этом случае термодинамические свойства описываются заданием потенциала Гиббса [121, 224] вида (1.30). Если рассматривается равновесно-реагирующая смесь, то концентрации γ_i , могут быть найдены из законов сохранения атомарного состава (2.1) и условий термодинамического равновесия (2.2).

Система (2.1)-(2.2) содержит $N_\gamma + N_e$ неизвестных, $\gamma_i, i = 1, \dots, N_\gamma, \mu_k, k = 1, \dots, N_e$. В веере волн разрежения сохраняется энтропия:

$$S = \sum_{i=1}^{N_\gamma} \gamma_i (S_i^0(T) - R \ln(p \gamma_i / p_0 \sum_{(j)} \gamma_j)) = S_M, \quad m = L, II \quad (2.33)$$

Плотность $\rho = \rho(p)$, входящая в подинтегральное выражение, находится из уравнения (2.33) с использованием уравнения состояния:

$$\rho = \frac{p}{RT \sum_{i=1}^{N_y} \gamma_i}. \quad (2.34)$$

Плотность под корнем - из уравнений состояния (2.34) и ударной адиабаты:

$$\sum_{i=1}^{N_y} \gamma_i E_i^0(T) - e_{\Pi} - \frac{1}{2}(p + p_{\Pi}) \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_{\Pi}} \right) = 0. \quad (2.35)$$

Можно показать, что функция $F(p)$ (2.31) - возрастающая.

$$\frac{df(p, p_M)}{dP} = \begin{cases} \frac{1}{\rho a}, & p < p_M \\ \frac{1}{2} \frac{\frac{1}{\rho_M} - \frac{1}{\rho} + \frac{1}{\rho^2}(p - p_M) \left(\left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_T + \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_P \frac{dT}{dp} \right)}{\sqrt{\left(\frac{1}{\rho_M} - \frac{1}{\rho} \right) (p - p_M)}}, & p > p_M \end{cases}, \quad M = \text{Л, П} \quad (2.36)$$

Входящие в (2.36) производные плотности и температуры находятся из (2.35), при этом, если считается, что концентрации при переходе через ударную волну не меняются, то

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_T = \frac{\rho}{p}, \quad \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_P = -\frac{\rho}{T}, \quad \frac{dT}{dp} = \frac{1}{2} \frac{\frac{p_M + 1}{\rho p} + \frac{1}{\rho_M}}{E_T + \frac{P}{2\rho T} \left(1 + \frac{P_M}{p} \right)} \quad (2.37)$$

Здесь: $E_T = \sum_{i=1}^N \gamma_i \frac{dE_i^0(T)}{dT}$. Подставим (2.37) в (2.36) и получим:

$$\frac{df(p, p_M)}{dp} = \begin{cases} \frac{1}{\rho a}, & p < p_M \\ \frac{\left(\frac{1}{\rho_M} - \frac{1}{\rho} \right) (\rho T E_T + p_M) + \frac{(p - p_M)}{P} T E_T}{\left(\rho T E_T + \frac{p + p_M}{2} \right) \sqrt{\left(\frac{1}{\rho_M} - \frac{1}{\rho} \right) (p - p_M)}}, & p > p_M \end{cases}, \quad M = \text{Л, П} \quad (2.38)$$

Производная $\frac{df(p, p_M)}{dp} > 0$ при любых значениях p , следовательно, $F(p)$ -возрастающая функция.

В случае равновесно реагирующего газа, концентрации γ_i , равновесные теплоемкости, скорости звука и других термодинамические характеристики являются функциями давления, температуры и атомарного состава и могут быть найдены по методике, описанной в разделе 2.1.

В качестве примеров рассмотрим решение задачи о распаде разрыва в высокотемпературном воздухе [72]. В первом примере концентрации при переходе через веер волн разрежения и ударную волну остаются неизменными.

Таблица 2.1.

	U , м/с	p , Па	T , К	C_p / C_v	a , м/с	m , г/моль	Начальные концентрации компонент кг.в/кг.см
Л	0	10000	300	1.395	347	28.96	$O_2 - 0.2315, N_2 - 0.7556,$ $Ar - 0.0129$
П	0	10000000	10000	1.219	1871	28.96	$O_2 - 0.2315, N_2 - 0.7556,$ $Ar - 0.0129$

В результате расчета реализовалась конфигурация: влево – ударная волна, вправо – веер волн разрежения, со следующими параметрами.

Таблица 2.2.

U , м/с	P , Па	T , К	C_p / C_v	a , м/с	Скорость УВ, ВР, м/с
-2943	117895	4951	1.278	1347	-3422
	0	6592	1.263	1546	-1396, 1871

Состав в первом расчете считался неизменным.

Во втором примере скорость, давление, температура, а также атомарный состав воздуха был тем же, что и в первом. При этом использовалось предположение, что смесь слева и справа находится в состоянии термодинамического равновесия, но концентрации при переходе через веер волн разрежения и ударную волну остаются неизменными.

Соответствующие начальные данные приведены в таблице 2.3.

В результате расчета реализовалась конфигурация: влево – ударная волна, вправо – веер волн разрежения, со следующими параметрами.

Таблица 2.3.

	U , м/с	P , Па	T , К	C_p / C_v	a , м/с	m , г/моль	Начальные концентрации компонент кг.в/кг.см
Л	0	10000	300	1.395	347	28.96	$O_2 - 0.2315, N_2 - 0.7556,$ $Ar - 0.0129$
П	0	10000000	10000	1.359	2568	17.13	$O_2 - 0.0004, N_2 - 0.2776, NO - 0.015,$ $N_2^+ - 0.004, NO^+ - 0.0013, O^+ - 0.0003,$ $N^+ - 0.0011, O - 0.2219, N - 0.4677,$ $Ar - 0.0129$

Таблица 2.4

U, м/с	P, Па	T, К	C_p / C_v	a, м/с	m , г/моль	Скорость УВ, ВР
-3205	1392803	5727	1.272	1446	28.96	-3715
		5669	1.454	2001	17.13	-1205, 2568

Таблица 2.5.

	U, м/с	P, Па	T, К	C_p / C_v	a, м/с	m , г/моль	Начальные концентрации компонент кг.в/кг.см
Л	0	10000	300	1.395	347	28.96	$O_2 - 0.2315, N_2 - 0.7556,$ $Ar - 0.0129$
П	0	10000000	10000	1.301	2405	17.13	$O_2 - 0.0004, N_2 - 0.2776, NO - 0.015,$ $N_2^+ - 0.004, NO^+ - 0.0013, O^+ - 0.0003,$ $N^+ - 0.0011, O - 0.2219, N - 0.4677,$ $Ar - 0.0129$

В третьем расчете скорость, давление, температура, а также атомарный состав воздуха был тем же, что и в первом и во втором. Но при этом использовалось предположение, что смесь находится в состоянии термодинамического равновесия. Соответствующие начальные данные приведены в таблице 2.5. В результате расчета реализовалась конфигурация: влево – ударная волна, вправо – веер волн разрежения, со следующими параметрами.

Таблица 2.6

U, м/с	P, Па	T, К	C_p / C_v	a, м/с	m , г/моль	Скорость УВ, ВР	
-3489	1591173	4590	1.250	1388	25.94	-3903	$O_2 - 0.0599, N_2 - 0.7158,$ $NO - 0.083, O - 0.1274,$ $N - 0.0011, Ar - 0.0129$
		8199	1.270	2245	18.53	-1420, 2405	

Необходимо отметить, что во втором и в третьем расчете начальные скорости, давления, температуры и состав одинаковые (таблицы 2.3 и 2.5). В третьем расчете предполагается, что концентрации компонент при переходе через веер и ударную волну находятся в состоянии термодинамического равновесия, во втором, что остаются неизменными. Результаты второго и третьего расчетов существенно отличаются (Таблицы 2.4, 2.6). Данный факт необходимо учитывать при исследовании высокотемпературных процессов, а также при разработке вычислительных методов многомерного моделирования, в алгоритме которых используются результаты решения задачи о распаде разрыва.

Распад разрыва в воде

Разработанные вышеописанные алгоритмы решения задачи о распаде разрыва в среде с произвольными, термодинамически допустимым уравнениями состояния были апробированы на решении задачи на границе “продукты взрыва–вода”. Вода считалась сжимаемой жидкостью, термодинамические свойства которой описываются потенциалом Гиббса [9]. В соответствии с данными справочника критические параметры воды составляют критическое давление - $P_c = 2.212 \cdot 10^7$ Па, критическая температура - $T_c = 647.3$ К, объем - $V_c = 0.00317$ м³/кг. В справочнике [9] дано выражение для приведенного потенциала Гиббса:

$$F = a_0 \theta (1 - \ln \theta) + \sum_{i=1}^{10} a_i \theta^{i-1} + a_{11} \left(\frac{17}{29} Z - \frac{17}{12} Y \right) Z^{\frac{12}{17}} + \pi (a_{12} + a_{13} \theta + a_{14} \theta^2 + a_{15} (b_6 - \theta) + \frac{a_{16}}{b_7 + \theta^{19}}) -$$

$$\frac{a_{17} \pi + a_{18} \pi^2 + a_{19} \pi^3}{b_8 + \theta^{11}} - a_{20} \theta^{18} (b_9 + \theta^2) ((b_{10} + \pi)^{-3} + b_{11} \pi) + a_{21} (b_{12} - \theta) \pi^3 + \frac{a_{22} \pi^4}{\theta^{20}} - (a_{23} + a_{24} \pi^3) \theta^{19},$$

$$Z = Y + \sqrt{b_3 Y^2 - 2b_4 \theta + 2b_5 \pi}, \quad Y = 1 + b_1 \theta^2 - b_2 \theta^{-6}, \quad \theta = \frac{T}{T_c}, \quad \pi = \frac{P}{P_c}$$

Здесь $a_0, a_1 \dots a_{24}, b_1, b_2 \dots b_{12}$ - константы. Истинный потенциал Гиббса равен: $G(p, T) = F(\pi, \theta) P_c V_c$. Из выражения для потенциала Гиббса могут быть найдены его частные производные по давлению и температуре, а значит и все термодинамические функции, необходимые для решения задачи о распаде произвольного разрыва.

$$G_T = F_\theta \frac{P_c V_c}{T_c}, \quad G_P = F_\pi V_c, \quad G_{TT} = F_{\theta\theta} \frac{P_c V_c}{T_c^2}, \quad G_{PP} = F_{\pi\pi} \frac{V_c}{P_c}, \quad G_{TP} = F_{\theta\pi} \frac{V_c}{T_c}$$

Тогда энтальпия равна: $h = G - T G_T$; энтропия: $S = -G_T$, удельный объем: $V = \frac{1}{\rho} = G_P$;

$$\text{скорость звука: } a = V \sqrt{\frac{h_T}{(h_p - V) V_T - h_T V_P}}.$$

Рассмотрим задачу о взрыве под водой при высоком давлении стехиометрической смеси водорода с кислородом. Требуется рассчитать начальные параметры ударной волны, образовавшейся в воде. В начале решим задачу о равновесном сгорании стехиометрической смеси водорода с кислородом при заданных объеме и внутренней энергии (в соответствии с алгоритмом, приведенном в разделе 2.1.1). Начальную температуру будем считать равной 300 К, начальное давление будем варьировать от 1 до 30 МПа, состав продуктов сгорания состоял из 15 компонент: $H_2, OH, H_2O, O_2, HO_2, H_2O_2, O_2^+, O^+, H_2^+, H^+, OH^+, H_2O^+, H, O, e$ (электрон). Внутренняя энергия такой смеси:

$E = -2.02 * 10^5$ Дж/кг [121]. На рисунке представлены результаты расчета, в частности видно, что давление возрастает около десяти раз по сравнению с начальным.

С полученными данными решим задачу о распаде разрыва, на границе “продукты сгорания – вода”. В воде будем задавать параметры, равными начальным значениям в горючей смеси до воспламенения.

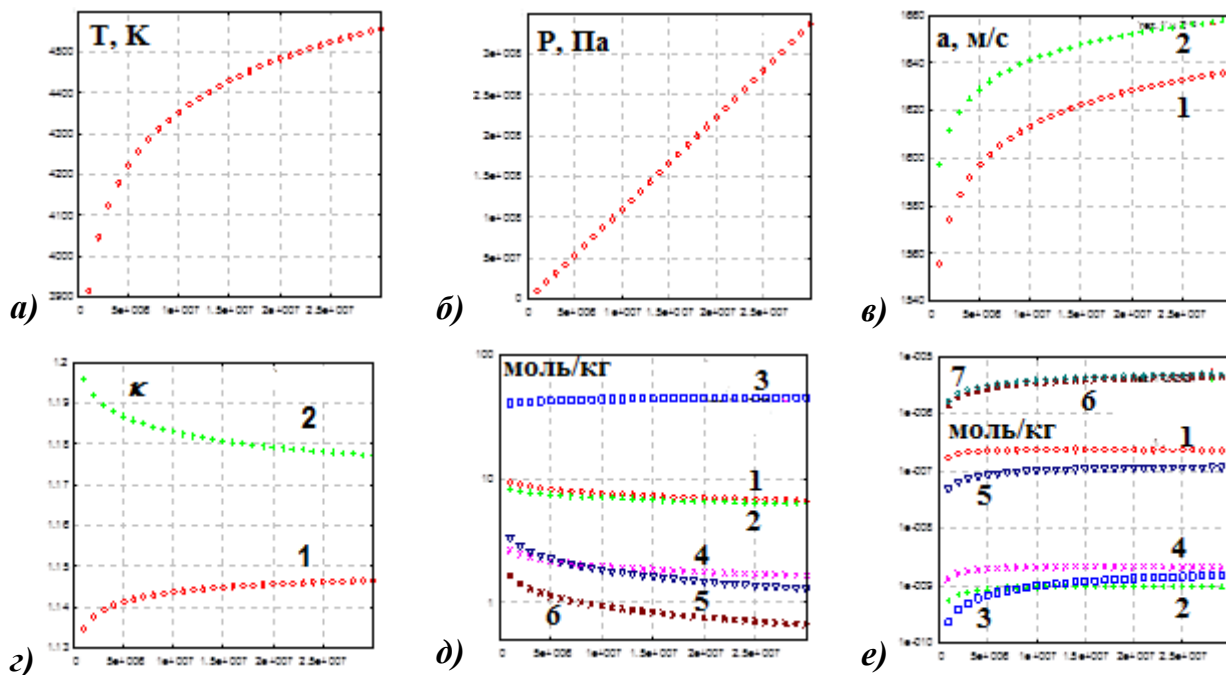
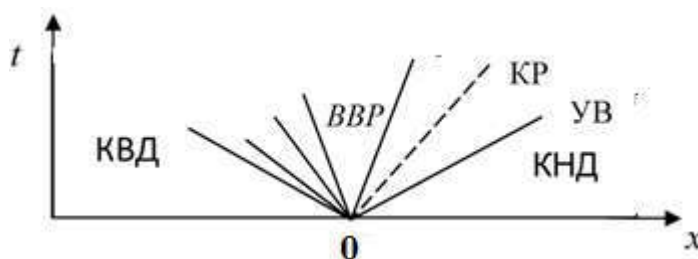


Рис. 2.16. Зависимость температуры (а), давления (б), равновесной и замороженной скоростей звука (в), равновесного и замороженного показателя адиабаты (г), мольно-массовых концентраций компонент (д) : 1- H_2 , 2- OH , 3- H_2O , 4- O_2 , 5- H , 6- O ; е): 1- O_2+ , 2- $O+$, 3- H_2+ , 4- $H+$, 5- $OH+$, 6- H_2O+ , 7- e от давления [Па].

$U=0, P=P_1, T=T_1$
 СМЕСЬ:
 $H_2, OH, H_2O, O_2,$
 $HO_2, H_2O_2, O_2+,$
 $O+, H_2+, H+,$
 $OH+, H_2O+, H, O,$
 e



$U=0, P=10^6-3 \cdot 10^7$
 Па,
 $T=300$ К.
 H_2O

Рис. 2.17. Распад разрыва на границе продукты сгорания - вода

В результате распада разрыва образуется ударная волна (УВ), распространяющаяся по жидкости, контактный разрыв (КР), разделяющий продукты сгорания и воду и веер волн разрежения (ВВР), распространяющийся по продуктам сгорания. Считается, что в продуктах сгорания реализуется термодинамическое

равновесие. Для решения задачи о распаде произвольного разрыва используется алгоритм, приведенный в данном разделе. На рисунках приводятся зависимости параметров течения воды, реализуемые в момент распада разрыва. Давление на контактном разрыве близко к давлению в продуктах сгорания (рис. 2.16) и превосходит начальное давление в воде почти в 10 раз, при этом температура меняется на несколько градусов (температура продуктов сгорания превышает 3000 К, поэтому вблизи контактного разрыва на больших временах будет происходить активное испарение воды, но это, скорее всего, слабо скажется на параметрах УВ, распространяющейся в воде. Концентрации компонент, входящих в продукты сгорания, меняются незначительно по сравнению с приведенными выше и на графиках не приводятся. Скорость звука в воде в рассматриваемых вариантах составляет от 1500 до 1550 м/с. Ударная волна распространяется со скоростью от 1510 до 1800 м/с. Необходимо отметить, что полученные результаты соответствуют значениям параметров течения в момент распада и, соответственно, могут меняться в сторону уменьшения своих значений по мере удаления УВ от места взрыва.

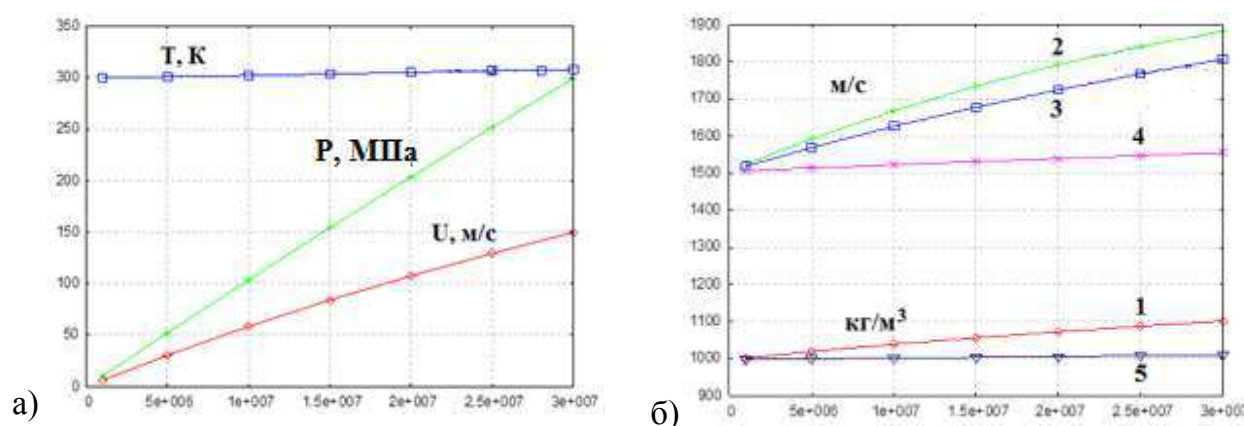


Рис. 2.18. Рассчитанные параметры в воде. а) Скорость контактного разрыва между продуктами сгорания и водой, давление за УВ, температура за УВ. б) 1- плотность воды за УВ; 2 - скорость звука в воде за УВ; 3 - скорость УВ; 4 - скорость звука в воде перед УВ; 5 - плотность воды перед УВ.

2.1.5. Расчет частичного равновесия при заданных давлении, энтальпии и концентрациях некоторых компонент

В ряде практических задач при численном моделировании можно считать, что часть химических компонент находится в равновесном состоянии, а другая часть – в неравновесном и вычисляется из уравнений химической кинетики. Данная модель используется при расчете концентраций токсичных компонент в заданном газовом поле.

Например, когда имеются результаты многомерного моделирования горения углеводородного топлива в камере сгорания воздушно-реактивного двигателя (пример расчета описан в главе 6), с использованием для расчета процесса горения глобальных кинетических механизмов, в которые токсичные компоненты не входят. В этом случае в рассчитанном газовом поле восстанавливаются газовые траектории, вдоль них интерполяцией находятся параметры течения, включая соотношения между элементами (C, H, O, N). Далее для расчета концентраций токсичных компонент используется многостадийный кинетический механизм, вдоль траекторий интегрируются уравнения химической кинетики только для токсичных компонент, а концентрации остальных компонент, входящих в правые части уравнений, вычисляются из решения задачи расчета равновесного состава при заданных параметрах газа и элементном составе. Получаемая при таком расчете температура служит элементом контроля точности используемой модели

Введем дополнительные обозначения: x_i - мольная доля i -ой компоненты, M – множество компонент, концентрации которых, определяются в результате равновесного расчета, N – множество компонент, концентрации которых, считаются известными, P, H_0 - заданные значения давления и энтальпии смеси.

С учетом введенных обозначений уравнения, выражающие законы сохранения элементного состава и энтальпии смеси, имеют вид:

$$\sum_{\langle M \rangle} A_i^k \gamma_i = \gamma_k^0 - \sum_{\langle N \rangle} A_i^k \gamma_i, \quad k = 1 \dots N_e, \quad (2.39)$$

$$\sum_{\langle M \rangle} \gamma_i H_i^0(T) = H_0 - \sum_{\langle N \rangle} \gamma_i H_i^0(T), \quad (2.40)$$

Мольные доли и мольно-массовые концентрации химических компонент связаны соотношениями (2.41).

$$x_i = \frac{\gamma_i}{\sum_{\langle M \rangle} \gamma_i + \sum_{\langle N \rangle} \gamma_i}, \quad \gamma_i = \frac{x_i \sum_{\langle N \rangle} \gamma_j}{1 - \sum_{\langle M \rangle} x_j}, \quad i = 1 \dots N_\gamma \quad (2.41)$$

Воспользовавшись условиями химического равновесия (2.2), выражением для химического потенциала:

$$\mu_i(p, T) = RT \ln \frac{p x_i}{P_0} + G_i^0(T), \quad (2.42)$$

а также, введя новую переменную $Z_k = \frac{\mu_k(p, T)}{RT}$, систему уравнений (2.39)-(2.40) можно

переписать в следующем виде:

$$\frac{\sum_{\langle M \rangle} A_i^k x_i}{1 - \sum_{\langle M \rangle} x_i} = \frac{\gamma_k^0 - \sum_{\langle N \rangle} A_i^k \gamma_i}{\sum_{\langle N \rangle} \gamma_i}, \quad k = 1 \dots N_e, \quad (2.43)$$

$$\frac{\sum_{\langle M \rangle} x_i H_i^0(T)}{1 - \sum_{\langle M \rangle} x_i} = \frac{H_0 - \sum_{\langle N \rangle} \gamma_i H_i^0(T)}{\sum_{\langle N \rangle} \gamma_i}, \quad (2.44)$$

где $x_i = \exp\left(\sum_{k=1}^{N_e} A_i^k Z_k - \left(\ln \frac{P}{P_0} + \frac{G_i^0(T)}{RT}\right)\right)$. (2.45)

Таким образом, (2.43)-(2.44) представляет из себя систему из $N_e + 1$ нелинейных алгебраических уравнений, неизвестными в которой являются T, Z_k .

Решение системы (2.43)-(2.44) эквивалентно нахождению максимума выпуклого функционала

$$F\left(y, \frac{1}{T}\right) = \ln\left(1 - \sum_{\langle M \rangle} x_i\right) + \sum_{k=1}^{N_e} \frac{\gamma_k^0 - \sum_{\langle N \rangle} A_i^k \gamma_i}{\sum_{\langle N \rangle} \gamma_i} Z_k - \frac{H_0}{RT \sum_{\langle N \rangle} \gamma_i} + \frac{\sum_{\langle N \rangle} \gamma_i G_i^0(T)}{RT \sum_{\langle N \rangle} \gamma_i}. \quad (2.46)$$

Необходимо отметить, что система уравнений (2.43)-(2.44) содержит особенность, в том случае, если $\sum_{\langle M \rangle} x_i = 1$ или, что то же самое, $\sum_{\langle N \rangle} \gamma_i = 0$.

2.2. Расчет химически неравновесных реакторов

Элементарные химически неравновесные реакторы используются при расчете концентраций компонентов, если известно (например из многомерного расчета) распределение параметров течения вдоль траектории газа.

2.2.1. Численный метод и вычислительный алгоритм решения релаксационных уравнений

В настоящем разделе приведем описание используемого в работе метода решения уравнений химической кинетики и межфазного теплообмена на примере уравнений химической кинетики. Необходимо отметить, что при моделировании многомерных течений данная система решается не при известных ρ, μ, T , от которых зависит правая часть уравнений, а при заданных плотности и внутренней энергии (если решаются уравнения Эйлера) или заданных давления и энтальпии (если решаются уравнения Рейнольдса). В этом случае плотность и температура считаются функциями

плотности и внутренней энергии ($T = T(\rho, e, \gamma_1, \dots, \gamma_N)$) или давления и энтальпии ($T = T(p, h, \gamma_1, \dots, \gamma_N)$ $\rho = \rho(p, h, \gamma_1, \dots, \gamma_N)$) при текущем векторе концентраций и пересчитываются при каждом вычислении W_i .

Система обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающая изменение мольно-массовых концентраций во времени, имеет вид [206-209]:

$$\rho \frac{d\gamma_i}{dt} = W_i(\rho, T, \gamma_1, \dots, \gamma_N), \quad \gamma_i(t_0) = \gamma_i^0, \quad i = 1, \dots, N_\gamma. \quad (2.47)$$

Необходимо отметить, что система обыкновенных дифференциальных уравнений (2.47) относится к классу «жёстких», и для её успешного решения необходимо использовать специально разработанные методы. В настоящей работе используется модификация [97, 300, 306, 311, 315] метода Пирумова [149], в основу которого положена двухточечная разностная аппроксимация:

$$\gamma_{i,n+1} - \gamma_{i,n} = \tau(\sigma W_{i,n} / \rho_n + (1-\sigma)W_{i,n+1}(\rho_{n+1}, T_{n+1}, \bar{\gamma}_{n+1}) / \rho_{n+1}), \quad i = 1, \dots, N_\gamma, \quad (2.48)$$

здесь $\tau = t_{n+1} - t_n$ — шаг интегрирования; σ — параметр неявности ($0 \leq \sigma \leq 1$, в расчетах $\sigma = 0,4$), известны значения параметров в моменты времени t_0, \dots, t_n , требуется найти параметры в момент времени t_{n+1} .

Полученная система конечно-разностных уравнений на каждом шаге интегрирования решается численно итерационным методом до сходимости, причём на каждой итерации метода с машинной точностью выполняются законы сохранения элементного состава (N_e первых интегралов (2.47)).

$$\gamma_l^0 = \sum_{i=1}^{N_e} A_i^l \gamma_i, \quad l = 1, 2, \dots, N_e, \quad (2.49)$$

здесь $\gamma_l^0 = \sum_{i=1}^{N_\gamma} A_i^l \gamma_i^0$, $l = 1, \dots, N_e$ — число молей l -ого атома в смеси в начальный момент времени, A_i^l — элементы матрицы состава [12, 248].

При построении численного метода также учитывается, что правая часть уравнений газофазной химической кинетики всегда может быть представлена как разность положительных комплексов:

$$W_i = \tilde{\varphi}_i - \tilde{\phi}_i, \quad \text{где} \quad \tilde{\varphi}_i = \sum_{r=1}^{N_r} \left(\vec{v}_i^r \overleftarrow{W}^r + \overleftarrow{v}_i^r \overrightarrow{W}^r \right), \quad \tilde{\phi}_i = \sum_{r=1}^{N_r} \left(\overleftarrow{v}_i^r \overrightarrow{W}^r + \vec{v}_i^r \overleftarrow{W}^r \right). \quad (2.50)$$

В ряде рассматриваемых задач заданными являются не плотность и температура, а например давление и температура; давление и энтальпия; плотность и внутренняя энергия и др. В этих случаях плотность и температура, входящие в правые части (2.47), вычисляются при текущих значениях концентраций из соответствующей системы, как правило, нелинейных уравнений, каждый раз, когда необходимо, в соответствии с алгоритмом пересчитать правую часть (2.47).

Необходимо отметить, что $\tilde{\phi}_i$ всегда прямо пропорционально мольно-массовой концентрации i -ого компонента γ_i . Если ввести

$$\varphi_i = \tilde{\varphi}_i / \rho, \quad \phi_i = \tilde{\phi}_i / \rho, \quad (2.51)$$

то систему (2.48) можно переписать в виде:

$$\gamma_{i,n+1} - \gamma_{i,n} - \tau[\sigma(\varphi_{i,n} - \phi_{i,n}) + (1 - \sigma)(\varphi_{i,n+1} - \phi_{i,n+1})] = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N_\gamma, \quad (2.52)$$

или, выделив неотрицательный комплекс $\gamma_{i,n+1} + \tau(1 - \sigma)\phi_{i,n+1}$:

$$1 - \frac{\gamma_{i,n} + \sigma\tau(\varphi_{i,n} - \phi_{i,n})}{\gamma_{i,n+1} + (1 - \sigma)\tau\phi_{i,n+1}} - \frac{(1 - \sigma)\tau\varphi_{i,n+1}}{\gamma_{i,n+1} + (1 - \sigma)\tau\phi_{i,n+1}} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N_\gamma, \quad (2.53)$$

в случае, если $\gamma_{i,n+1} < 10^{-15}$ моль/кг, то вместо (2.53) можно использовать (2.54):

$$\gamma_{i,n+1} - \frac{\gamma_{i,n} + \sigma\tau(\varphi_{i,n} - \phi_{i,n})}{1 + (1 - \sigma)\tau\phi_{i,n+1} / \gamma_{i,n+1}} - \frac{(1 - \sigma)\tau\varphi_{i,n+1}}{1 + (1 - \sigma)\tau\phi_{i,n+1} / \gamma_{i,n+1}} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N_\gamma. \quad (2.54)$$

Нелинейную систему алгебраических уравнений (2.53) – (2.54) будем решать двухшаговым итерационным методом до достижения сходимости. Для задания начального приближения $\gamma_{i,n+1}$ ($\gamma_{i,n+1}^0$) может быть использована экстраполяционная формула по двум рассчитанным временным слоям:

$$\gamma_{i,n+1}^0 = \gamma_{i,n} + \alpha \frac{t_{n+1} - t_n}{t_n - t_{n-1}} (\gamma_{i,n} - \gamma_{i,n-1}),$$

параметр α выбирается максимальным из диапазона $[0, 1]$, чтобы выполнялось условие $\gamma_{i,n+1} \geq 0$ для всех i : $1 \leq i \leq N_\gamma$.

В качестве критерия точности на k -ой итерации будем использовать сумму квадратов невязок по уравнениям (2.53) – (2.54) δ_i^K (скалярное произведение векторов невязок):

$$(\bar{\delta}^K, \bar{\delta}^K) = \sum_{i=1}^N (\delta_i^K)^2, \quad \delta_i^K = 1 - \frac{\gamma_{i,n} + \sigma\tau(\varphi_{i,n} - \phi_{i,n})}{\gamma_{i,n+1}^k + (1 - \sigma)\tau\phi_{i,n+1}^k} - \frac{(1 - \sigma)\tau\varphi_{i,n+1}^k}{\gamma_{i,n+1}^k + (1 - \sigma)\tau\phi_{i,n+1}^k}, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (2.55)$$

Если выполняется условие $|\bar{\delta}_i^k| < \varepsilon$ для всех $i: 1 \leq i \leq N$, то решение считается найденным (в реальных расчетах $\varepsilon \approx 10^{-5}$).

На промежуточном шаге вычислим $\gamma_{i,n+1}^{k+\frac{1}{2}}$ с использованием модифицированного метода Ньютона в предположении, что $\phi_{i,n+1}^k$ и $\phi_{i,n+1}^k / \gamma_{i,n+1}^k$ не зависят от $\gamma_{i,n+1}^k$:

$$\gamma_{i,n+1}^{k+\frac{1}{2}} = \gamma_{i,n+1}^k - \beta^k D_i^k, \quad (2.56)$$

где $D_i^k = \gamma_{i,n+1}^k - \gamma_{i,n} - \tau[\sigma(\phi_{i,n} - \phi_{i,n}) + (1 - \sigma)(\phi_{i,n+1}^k - \phi_{i,n+1}^k)] = 0$, $i = 1, 2, \dots, N$,

$$\beta^k = \frac{\alpha}{\max_{i=1, \dots, N} (1 + (1 - \sigma)\tau\phi_{i,n+1}^k / \gamma_{i,n+1}^k)},$$

параметр α выбирается максимальным из диапазона $[0, 1]$ так, чтобы выполнялось условие $\gamma_{i,n+1}^{k+\frac{1}{2}} \geq 0$ для всех $i: 1 \leq i \leq N$, и вычисляются $\delta_i^{k+\frac{1}{2}}$ и $(\bar{\delta}^{k+\frac{1}{2}}, \bar{\delta}^{k+\frac{1}{2}})$. На

окончательном шаге находим $\gamma_{i,n+1}^{k+1}$ как линейную функцию $\gamma_{i,n+1}^k$ и $\gamma_{i,n+1}^{k+\frac{1}{2}}$:

$$\gamma_{i,n+1}^{k+1} = \gamma_{i,n+1}^k + \alpha(\xi - 1)(\gamma_{i,n+1}^k - \gamma_{i,n+1}^{k+\frac{1}{2}}) \quad (2.57)$$

или

$$\gamma_{i,n+1}^{k+1} = \gamma_{i,n+1}^{k+\frac{1}{2}} + \alpha\xi(\gamma_{i,n+1}^k - \gamma_{i,n+1}^{k+\frac{1}{2}}). \quad (2.58)$$

Формула (2.57) используется, когда $(\bar{\delta}^k, \bar{\delta}^k) < (\bar{\delta}^{k+\frac{1}{2}}, \bar{\delta}^{k+\frac{1}{2}})$, (2.58) — в противном случае.

Значение параметра ξ (ξ_{MN}), входящего в формулы (2.57) – (2.58), выбирается из условия минимума скалярного произведения невязок на $k+1$ -ой итерации — $(\bar{\delta}^{k+1}, \bar{\delta}^{k+1})$, которое является квадратичной функцией ξ , если применить разложение невязки в ряд Тейлора по концентрациям в точке $\gamma_{i,n}$ и отбросить члены второго порядка и выше:

$$\begin{aligned} \bar{\delta}^{k+1} &= \xi \bar{\delta}^k + (1 - \xi) \bar{\delta}^{k+\frac{1}{2}}, \\ (\bar{\delta}^{k+1}, \bar{\delta}^{k+1}) &= \xi^2 (\bar{\delta}^k, \bar{\delta}^k) + (1 - \xi)^2 (\bar{\delta}^{k+\frac{1}{2}}, \bar{\delta}^{k+\frac{1}{2}}) + 2\xi(1 - \xi) (\bar{\delta}^k, \bar{\delta}^{k+\frac{1}{2}}), \end{aligned}$$

$$\xi_{MIN} = \frac{\left(\bar{\delta}^{k+\frac{1}{2}}, \bar{\delta}^{k+\frac{1}{2}} - \bar{\delta}^k \right)}{\left(\bar{\delta}^k - \bar{\delta}^{k+\frac{1}{2}}, \bar{\delta}^k - \bar{\delta}^{k+\frac{1}{2}} \right)}. \quad (2.59)$$

Параметр α выбирается максимальным из диапазона $[0,1]$, чтобы выполнялось условие $\gamma_{i,n+1}^{k+1} \geq 0$ для всех $i: 1 \leq i \leq N$. После вычисления $\gamma_{i,n+1}^{k+1}$ осуществляется контроль точности, и, если точность не достигнута, то вычисления по формулам (2.55)–(2.59) повторяются.

Число итераций, за которое достигается сходимость, может использоваться для изменения шага интегрирования. Если число итераций например меньше трех, шаг увеличивается. Если число итераций больше шести — шаг уменьшается. Если за десять итераций точность не достигнута, то шаг τ считается завышенным, осуществляется уменьшение шага, и вычисления проводятся заново.

Для объективного контроля точности решения системы (2.49) после получения решения вычисляется невязка (2.55) на двух шагах интегрирования:

$$\delta_i^{n+1,n-1} = 1 - \frac{\gamma_{i,n-1} + \sigma(t_{n+1} - t_{n-1})(\varphi_{i,n-1} - \phi_{i,n-1})}{\gamma_{i,n+1} + (1 - \sigma)(t_{n+1} - t_{n-1})\phi_{i,n+1}} - \frac{(1 - \sigma)(t_{n+1} - t_{n-1})\varphi_{i,n+1}}{\gamma_{i,n+1} + (1 - \sigma)(t_{n+1} - t_{n-1})\phi_{i,n+1}}, i = 1, 2, \dots, N. \quad (2.60)$$

Если $|\delta_i^{n+1,n-1}| < 3\epsilon$ для всех $i = 1, 2, \dots, N$, то шаг интегрирования соответствует решаемой задаче, если нет, то его необходимо уменьшить.

Предлагаемый алгоритм решения релаксационных уравнений показал свою эффективность при решении большого числа разномасштабных задач, в том числе и как элемент при моделировании трехмерных нестационарных течений. Среди них химически неравновесные течения в соплах ракетных двигателей, расчет малых концентраций токсичных компонентов, детонационное горение топлива в перспективных двигательных установках [49, 50, 54, 60, 62, 64-68, 74-76, 78-87, 91-100].

Необходимо отметить, что при моделировании многофазных течений в стационарной волне детонации и дефлаграции в качестве концентрации используется

$$\text{количество } i\text{-ого компонента в многофазной смеси: } \eta_i = \frac{\rho v \gamma_i + n_s m_s v_s \gamma_{is}}{\rho v + n_s m_s v_s}, i = 1, \dots, N.$$

Система (2.49) может быть использована для описания процессов, происходящих в так называемых «модельных химических реакторах». Рассмотрим несколько типов «реакторов», в которых реагенты не добавляются и не выводятся из «реактора»:

– Модель изотермической реакции при постоянной плотности, т. е. камера постоянного объёма с идеально теплопроводящими стенками;

– Модель адиабатической реакции при постоянной плотности, т. е. камера постоянного объёма с идеально теплоизолированными стенками;

– Модель изотермической реакции при постоянном давлении, т. е. камера переменного объёма (с бесконечно легким поршнем и заданным внешним давлением) с идеально теплопроводящими стенками;

– Модель адиабатической реакции при постоянном давлении, т. е. камера переменного объёма с идеально теплоизолированными стенками.

Необходимо отметить, что экспериментов, в которых напрямую могут быть измерены скорости химических реакций, крайне мало. Например, в литературе имеется несколько десятков механизмов горения водорода в кислороде, которые отличаются числом учитываемых реакций и константами, входящими в обобщенную формулу Аррениуса [23, 25, 36, 58, 127, 140, 157]. В настоящей работе, если это специально не оговаривается, при численном моделировании используется обобщенная формула Аррениуса для констант скоростей прямых реакций, а скорости обратных реакции рассчитываются с использованием константы равновесия. Для моделирования газофазных химических превращений в водородо-кислородной горючей смеси в настоящей главе используется кинетический механизм (Таблица 2.7), включающий 19 обратимых стадий [36, 58, 127] в которых участвуют 8 компонент (H_2O , H_2 , OH , O_2 , H_2O_2 , HO_2 , H , O).

2.2.2. Элементарные химические реакторы

Модель изотермической реакции при постоянной плотности

Предполагается, что система замкнута, однородна по пространству, изотермична и имеет постоянную плотность: $T = \text{const}$, $\rho = \text{const}$.

Необходимо определить временные зависимости концентраций химических компонентов и термодинамических параметров. При сделанных предположениях система принимает следующий вид:

$$\rho \frac{d\gamma_i}{dt} = W_i(\rho, T, \gamma_1, \dots, \gamma_{N_\gamma}), \quad \gamma_i(0) = \gamma_i^0, \quad i = 1, \dots, N_\gamma.$$

Таблица 2.7.

Реакция						Коэффициенты ф-лы Аррениуса			
						A, кг-м-с	n	E/R, K	
H	+	O2	<=>	O	+ OH	2.460E+08	0.00	7785	
O	+	H2	<=>	H	+ OH	15.0	2.00	3798	
OH	+	H2	<=>	H	+ H2O	6.30	2.00	1490	
O	+	H2O	<=>	OH	+ OH	3.980E+03	1.32	8430	
H2	+	M	<=>	H	+ H	+ M	2.900E+12	-1.00	52499
O	+	O	+ M	<=>	O2	+ M	6.170E+03	-0.50	0.00
O	+	H	+ M	<=>	OH	+ M	4.200E+04	0.00	-1399
H	+	OH	+ M	<=>	H2O	+ M	2.250E+10	-2.00	0.00
H	+	O2	+ M	<=>	HO2	+ M	6.410E+06	-1.00	0.00
HO2	+	H	<=>	H2	+ O2	6.630E+07	0.00	1070	
HO2	+	H	<=>	OH	+ OH	1.690E+08	0.00	440	
HO2	+	O	<=>	OH	+ O2	6.300E+07	0.00	349	
HO2	+	OH	<=>	H2O	+ O2	1.450E+10	-1.00	0.00	
HO2	+	HO2	<=>	H2O2	+ O2	2.000E+06	0.00	0.00	
H2O2	+	M	<=>	OH	+ OH	+ M	3.190E+11	0.00	23706
H2O2	+	H	<=>	H2O	+ OH	2.200E+09	0.00	5902	
H2O2	+	H	<=>	H2	+ HO2	4.820E+07	0.00	3.325E+04	
H2O2	+	O	<=>	OH	+ HO2	9.54	2.00	1.661E+04	
H2O2	+	OH	<=>	H2O	+ HO2	7.000E+06	0.00	5.983E+0	

Рассматривается стехиометрическая смесь водорода с кислородом находящаяся при температуре $T=1000$ К и плотности $\rho=0.1$ кг/м³. В процессе химических реакций давление уменьшается, молекулярный вес растет, отношение удельных теплоемкостей уменьшается (рис. 2.19). Горючее и окислитель расходуются. В начале образуются промежуточные продукты реакций, которые помимо паров воды включают радикал *ОН*, атомарные водород и кислород и другие (рис. 2.20). Процесс завершается установлением состояния равновесия, в котором в заметных концентрациях присутствуют только пары воды.

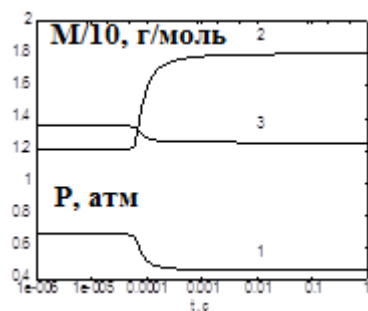


Рис. 2.19. Зависимость параметров от времени 1 – давление, 2 – молекулярный вес, 3 – показатель адиабаты. ($T=1000$ К, $\rho=0.1$ Кг/м³)

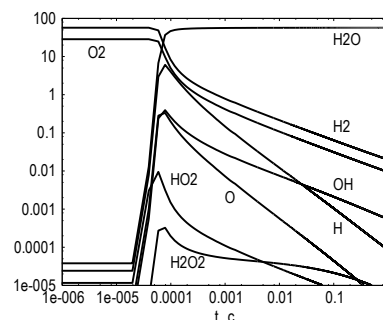


Рис. 2.20. Зависимость мольно-массовых концентраций от времени. ($T=1000$ К, $\rho=0.1$ Кг/м³)

Модель адиабатической реакции при постоянной плотности

Предполагается, что система замкнута, однородна по пространству, неизменного объёма — плотность постоянна, адиабатична, т.е. внутренняя энергия постоянна.

$$\rho = \text{const}, \quad e = \text{const}.$$

Необходимо определить временные зависимости концентраций химических компонентов, давления и температуры.

При сделанных предположениях искомыми параметрами являются концентрации и температура, которые могут быть найдены из системы дифференциально-алгебраических уравнений:

$$\sum_{i=1}^{N_\gamma} \gamma_i E_i^0(T) = e,$$

$$\rho \frac{d\gamma_i}{dt} = W_i(\rho, T, \gamma_1, \dots, \gamma_N), \quad \gamma_i(0) = \gamma_i^0, \quad i = 1, \dots, N_\gamma.$$

Система включает N_γ обыкновенных дифференциальных уравнений для концентраций и одно нелинейное уравнение сохранения внутренней энергии системы. Последнее может быть путём эквивалентных преобразований приведено к обыкновенному дифференциальному уравнению относительно температуры:

$$\frac{de}{dt} = \frac{d \sum_{i=1}^{N_\gamma} E_i^0(T) \gamma_i}{dt} = 0 \Rightarrow \sum_{i=1}^{N_\gamma} \gamma_i \frac{dE_i^0(T)}{dT} \frac{dT}{dt} + \sum_{i=1}^N E_i^0(T) \frac{d\gamma_i}{dt}.$$

$$\text{Отсюда получаем: } \frac{dT}{dt} = - \frac{\sum_{i=1}^{N_\gamma} E_i^0(T) W_i}{\rho C_V}, \quad T(0) = T^0, \quad \text{где } C_V = \sum_{i=1}^{N_\gamma} \gamma_i \frac{dE_i^0(T)}{dT}.$$

При этом начальное значение температуры T^0 удовлетворяет уравнению:

$$e = \sum_{i=1}^{N_\gamma} \gamma_i^0 E_i^0(T^0).$$

В результате решения определяются временные зависимости концентраций химических компонентов, температуры и других термодинамических параметров.

Рассматривается стехиометрическая смесь водорода с кислородом, внутренняя энергия рассчитывается при температуре $T_0=1000$ К, плотность - $\rho=0.1$ кг/м³. Из-за протекания экзотермических химических реакций через 50 мкс происходит воспламенение горючей смеси, температура существенно возрастает и достигает 3300 К, также возрастают давление, энтропия и молекулярный вес (рис. 2.21). Необходимо отметить, что в результирующем равновесном составе (рис. 2.22) в высокотемпературных продуктах сгорания в заметных концентрациях присутствуют не

только пары воды, но и исходные компоненты, радикалы, атомарные водород и кислород.

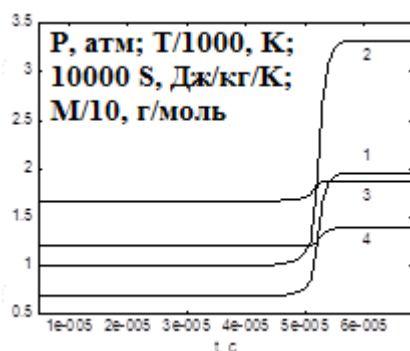


Рис. 2.21. Зависимость параметров от времени 1 – давление, 2 – температура, 3- энтропия, 4 – молекулярный

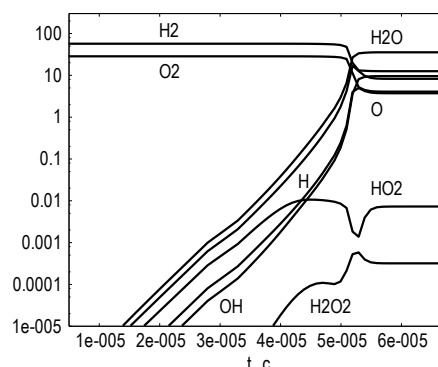


Рис. 2.22. Зависимость мольно-массовых концентраций от времени

Модель изотермической реакции при постоянном давлении

Предполагается, что система замкнута, однородна по пространству, изотермична и расширяется до заданного давления:

$$T = \text{const}, p = \text{const}.$$

Необходимо определить временные зависимости концентраций химических компонентов и термодинамических параметров. При сделанных предположениях система дифференциально-алгебраических уравнений принимает следующий вид:

$$\rho = \frac{p}{RT \sum_{i=1}^{N_\gamma} \gamma_i},$$

$$\rho \frac{d\gamma_i}{dt} = W_i(\rho, T, \gamma_1, \dots, \gamma_{N_\gamma}), \quad \gamma_i(t_0) = \gamma_i^0, \quad i = 1, \dots, N_\gamma.$$

Система включает N обыкновенных дифференциальных уравнений для концентраций и уравнение состояния Менделеева-Клапейрона. Последнее может быть путём эквивалентных преобразований приведено к обыкновенному дифференциальному уравнению относительно температуры.

$$d\left(\frac{p}{RT}\right) = d\left(\rho \sum_{i=1}^{N_\gamma} \gamma_i\right) = 0 \Rightarrow \sum_{i=1}^{N_\gamma} \gamma_i d\rho + \rho \sum_{i=1}^{N_\gamma} d\gamma_i = 0.$$

С использованием (2.52) получим:

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\sum_{i=1}^{N_\gamma} W_i(\rho, T, \gamma_1, \dots, \gamma_{N_\gamma})}{\sum_{i=1}^{N_\gamma} \gamma_i}, \quad \rho(t_0) = \frac{p}{RT \sum_{i=1}^{N_\gamma} \gamma_i^0}.$$

Рассматривается стехиометрическая смесь водорода с кислородом находящаяся при температуре $T=1000$ К и давлении $P=101325$ Па. В процессе химических реакций плотность и молекулярный вес возрастают, отношение удельных теплоемкостей уменьшается (рис. 2.23). Горючее и окислитель расходуются. В начале образуются промежуточные продукты реакций, которые помимо паров воды включают радикал ОН, атомарные водород и кислород, перекись водорода и другие (рис. 2.24). Процесс завершается установлением состояния равновесия, в котором в заметных концентрациях присутствуют только пары воды.

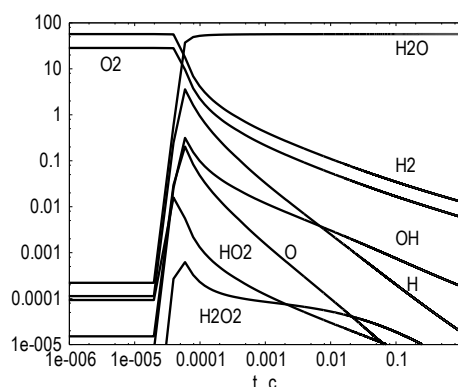
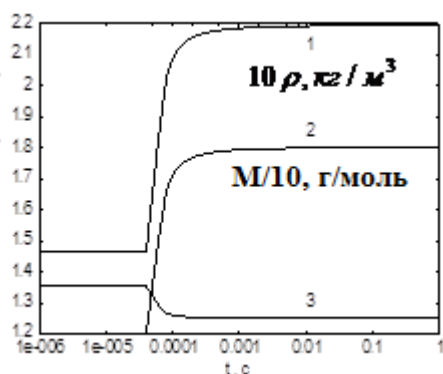


Рис. 2.23. Зависимость параметров от времени 1 – плотность, 2 – молекулярный вес, 3 – показатель адиабаты. ($T=1000$ К, $P=101325$ Па)

Рис. 2.24. Зависимость мольно-массовых концентраций от времени .($T=1000$ К, $P=101325$ Па)

Модель адиабатической реакции при постоянном давлении

Предполагается, что система замкнута, однородна по пространству, изотермична и расширяется до заданного давления:

$$p = \text{const}, H = \text{const}.$$

Необходимо определить временные зависимости концентраций химических компонентов и термодинамических параметров. При сделанных предположениях система дифференциально-алгебраических уравнений принимает следующий вид:

$$h = \sum_{i=1}^{N_\gamma} \gamma_i H_i^0(T), \quad \rho = \frac{P}{RT \sum_{i=1}^{N_\gamma} \gamma_i},$$

$$\rho \frac{d\gamma_i}{dt} = W_i(\rho, T, \gamma_1, \dots, \gamma_{N_\gamma}), \quad \gamma_i(t_0) = \gamma_i^0, \quad i = 1, \dots, N_\gamma.$$

Система включает N обыкновенных дифференциальных уравнений для концентраций, нелинейное уравнение сохранения энтальпии системы и термическое

уравнение состояния Менделеева-Клапейрона. Последние могут быть путём эквивалентных преобразований приведены к обыкновенным дифференциальным уравнениям относительно температуры и плотности.

$$\frac{dh}{dt} = \frac{d \sum_{i=1}^{N_y} H_i^0(T) \gamma_i}{dt} = 0 \Rightarrow, \quad \sum_{i=1}^{N_y} \gamma_i \frac{dH_i^0(T)}{dT} \cdot \frac{dT}{dt} + \sum_{i=1}^{N_y} H_i^0(T) \frac{d\gamma_i}{dt} = 0.$$

Получим дифференциальное уравнение для температуры:

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{1}{\rho C_p} \sum_{i=1}^{N_y} H_i^0(T) W_i, \quad T(t_0) = T^0, \quad \text{где } C_p = \sum_{i=1}^{N_y} \gamma_i \frac{dH_i^0(T)}{dT}.$$

При этом начальное значение температуры T^0 удовлетворяет уравнению:

$$h = \sum_{i=1}^{N_y} \gamma_i^0 H_i(T^0).$$

Преобразуем термическое уравнение состояния:

$$\begin{aligned} d\left(\frac{p}{R}\right) &= d\left(\rho T \sum_{i=1}^{N_y} \gamma_i\right) = 0 \Rightarrow T \sum_{i=1}^{N_y} \gamma_i d\rho + \rho \sum_{i=1}^{N_y} \gamma_i dT + \rho T \sum_{i=1}^{N_y} d\gamma_i = 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow T \sum_{i=1}^{N_y} \gamma_i \frac{d\rho}{dt} - \frac{1}{C_p} \sum_{j=1}^{N_y} \gamma_j \sum_{i=1}^{N_y} H_i^0(T) W_i + T \sum_{i=1}^{N_y} W_i &= 0. \end{aligned}$$

Получим дифференциальное уравнение для плотности:
$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\sum_{i=1}^{N_y} \left(H_i^0(T) - \frac{C_p T}{\sum_{j=1}^{N_y} \gamma_j} \right) W_i}{C_p T},$$

при этом начальное значение плотности $\rho(0)$ находится из уравнения Менделеева –

Клапейрона:
$$\rho(t_0) = \frac{p}{RT_0 \sum_{i=1}^{N_y} \gamma_i^0}.$$

Рассматривается стехиометрическая смесь водорода с кислородом, находящаяся при давлении $P=101325$ Па, начальные значения энтальпии и плотности вычисляются при температуре $T=1000$ К. В процессе химических экзотермических химических реакций через 41 мкс происходит воспламенение горючей смеси, температура существенно возрастает и достигает 3200 К, также возрастают энтропия и молекулярный вес, плотность уменьшается (рис. 2.25). Необходимо отметить, что в результирующем равновесном составе (рис. 2.26) в высокотемпературных продуктах

сгорания в заметных концентрациях присутствуют не только пары воды, но и исходные компоненты, а также атомарные водород и кислород.

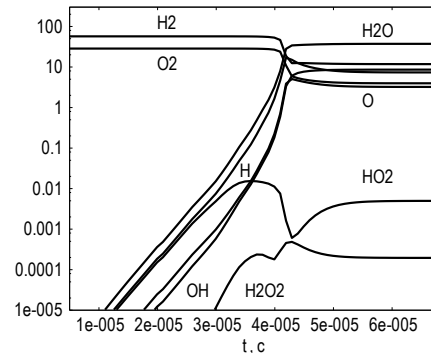
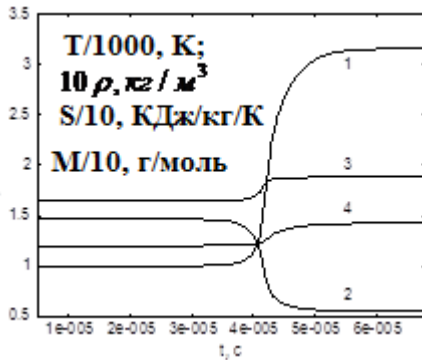


Рис. 2.25. Зависимость параметров от времени 1 – температура (Т/1000, К), 2 – концентраций от времени (Р =101325 Па) плотность (*10, кг/м**3, 3 – энтропия Па) (S/10 КДж/Кг/К, 4 – молекулярный вес (M/10, Кг/моль), (Р =101325 Па)

2.2.3. Одномерное течение реагирующего газа в сопле с переходом через скорость звука

При численном моделировании предполагается, что течение одномерное, эффекты вязкости, теплопроводности и диффузии не учитываются. В камере сгорания (КС) предполагается известным давление и состав топлива, считается, что компоненты топлива полностью перемешаны и продукты сгорания находятся в состоянии термодинамического равновесия, неидеальность КС учитывается введением параметра ”полнота сгорания”, равного отношению измеренной температуры к идеальной (определенной из решения задачи расчета равновесного состава при заданных давлении и энтальпии топлива) [12]. Задача расчета течения в сопле решается в “равновесной” (состав продуктов сгорания удовлетворяет условиям химического равновесия) и “неравновесной” (учитывается конечность скоростей химических реакций) постановках, при этом решается как “обратная” [206, 255], так и ”прямая” задача теории сопла.

Система уравнений, описывающая квазиодномерные стационарные течения реагирующего газа в канале переменного сечения, имеет вид [7, 12]:

$$\frac{d}{dx} \rho u F = 0, \tag{2.61}$$

$$\frac{d}{dx} (\rho u^2 + p) F = p \frac{dF}{dx}, \tag{2.62}$$

$$\frac{d}{dx} \rho u \left(h + \frac{u^2}{2} \right) F = 0, \quad (2.63)$$

$$\frac{d}{dx} \rho u F \gamma_i = F W_i, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (2.64)$$

$$\rho = \rho(p, T, \gamma) \quad (2.65)$$

$$h = h(p, T, \gamma) \quad (2.66)$$

Здесь ρ , u , p , T , h , γ_i - плотность, скорость, давление, температура, энтальпия и мольно-массовые концентрации смеси газов соответственно, $F = F(x)$ – заданная зависимость площади канала от продольной координаты. Уравнения (2.61)-(2.63) выражают законы сохранения массы, импульса и энергии соответственно, (2.64) – описывает изменение концентраций компонентов в химических реакциях, (2.65), (2.66) – термическое и калорическое уравнение состояния соответственно. Различают три вида течения: “замороженное” – скорость химических реакций равна нулю, концентрации химических компонентов не меняются $\gamma_i = \text{const}$, $W_i = 0$; “равновесное” – химические реакции протекают с бесконечно большими скоростями, $\gamma_i: W_i(p, T, \gamma) = 0$; “неравновесное” – скорости химических реакций конечные $W_i(p, T, \gamma) \neq 0$ [4,5].

Из уравнений (2.61)-(2.66) путем эквивалентных преобразований, с использованием первого начала термодинамики (2.67):

$$dG = -SdT + Vdp + \sum_{i=1}^N \mu_i d\gamma_i, \quad (2.67)$$

могут быть получены уравнения для прироста энтропии:

$$\rho u T dS = \sum_{i=1}^N \mu_i W_i dx \quad (2.68)$$

и уравнение изменения скорости потока:

$$(M^2 - 1) du = u \left(\frac{1}{\rho^2 h_T} \sum_{i=1}^N (\rho_{\gamma_i} h_T - h_{\gamma_i} \rho_T) W_i + \frac{F_x}{F} \right) dx, \quad (2.69)$$

Здесь число Маха — $M = \frac{u}{a}$, скорость звука — a :

$$a^2 = \frac{\rho h_T}{\rho h_T \rho_p + \rho_T (1 - \rho h_p)}. \quad (2.70)$$

Из (2.68) и (2.69), в частности, следует, что в “замороженных” и “равновесных” течениях ($W_i \equiv 0$) энтропия не изменяется, $S = \text{const}$, а также, что дозвуковой поток в

сужающемся канале ($F_x < 0$ ускоряется ($du/dx > 0$), в расширяющемся канале ($F_x > 0$) замедляется ($du/dx < 0$). Сверхзвуковой поток в сужающемся канале замедляется, а в расширяющемся канале ускоряется. Для разгона потока от дозвукового до сверхзвукового необходимо одновременное выполнение условий:

$$M^2 = 1 \text{ и } F_x = 0, \quad (2.71)$$

а в случае неравновесного протекания химических реакций:

$$M^2 = 1 \text{ и } \frac{1}{u\rho^2 h_T} \sum_{i=1}^N (\rho_{\gamma_i} h_{T_i} - h_{\gamma_i} \rho_{T_i}) W_i + \frac{F_x}{F} = 0. \quad (2.72)$$

В качестве начальных условий для системы (2.61)-(2.66) при моделировании течения в сопле с переходом через скорость звука задаются значения скорости, давления, температуры и концентраций, соответствующие состоянию термодинамического равновесия при заданных полной энтальпии и энтропии равные их значениям в камере сгорания, и расходу газа, при котором система (2.61)-(2.66) имеет соответствующее решение, т.е. существует $x \geq x_*$ в котором выполняются условия (2.71) в случае “замороженного” и “равновесного” течений, и условия (2.72) в случае “неравновесного” течения. Необходимо отметить, что численное решение “неравновесной” задачи с заданной точностью достаточно трудоемко из-за сильной жесткости рассматриваемой системы уравнений.

Соотношения (2.61)-(2.72) справедливы при произвольных, термодинамически допустимых уравнениях состояния (2.65), (2.66). Рассмотрим случай, когда продукты сгорания являются смесью совершенных газов. В этом случае выражение для потенциала Гиббса смеси [121] имеет вид:

$$G(p, T, \gamma) = \sum_{i=1}^N \gamma_i [RT \ln(p\gamma_i / p_0 \sum_{j=1}^N \gamma_j) + G_i^0(T)]. \quad (2.73)$$

Соответствующие (2.73) термическое и калорическое уравнения состояния имеют вид:

$$p = \rho R \sum_{i=1}^N \gamma_i T \text{ и } h = \sum_{i=1}^N \gamma_i H_i^0(T), \quad (2.74)$$

где $H_i^0(T) = G_i^0(T) - T \frac{dG_i^0(T)}{dT}$. После преобразований система (2.61)-(2.66) и

используемая в расчетах двухточечная разностная аппроксимация примут вид:

$$\rho u F = Q \quad \Leftrightarrow \quad \rho_2 u_2 F_2 = \rho_1 u_1 F_1 = Q, \quad (2.75)$$

$$\rho u \frac{du}{dx} + \frac{dp}{dx} = 0 \quad \Leftrightarrow \frac{1}{2}(\rho_2 u_2 + \rho_1 u_1)(u_2 - u_1) + p_2 - p_1 = 0, \quad (2.76)$$

$$h + \frac{u^2}{2} = H_0 \quad \Leftrightarrow \quad h(T_2) + \frac{u_2^2}{2} = H_0, \quad (2.77)$$

$$\frac{d\gamma_i}{dx} = \frac{1}{\rho u} W_i, i = 1, 2, \dots, N \quad \Leftrightarrow \gamma_{i2} - \gamma_{i1} - s \Delta x \frac{W_{i2}}{\rho_2 u_2} - (1-s) \Delta x \frac{W_{i1}}{\rho_1 u_1} = 0. \quad (2.78)$$

Здесь Q – расход газа, H_0 - энтальпия продуктов сгорания в КС, s – параметр невязности разностной схемы [206-209] (в расчетах $s=0.4$). С использованием (2.74) и (2.75) уравнение (2.76) может быть преобразовано к виду:

$$\frac{(F_1 + F_2)(u_2 - u_1)}{2F_1F_2} + \frac{RS_2T_2}{u_2F_2} - \frac{RS_1T_1}{u_1F_1} = 0, \quad S = \sum_{i=1}^N \gamma_i, \quad (2.79)$$

и получено выражение для T_2 как функции u_2 :

$$T_2 = \frac{RS_1T_1F_2u_2}{RS_2u_1F_1} - \frac{u_2(F_1 + F_2)(u_2 - u_1)}{2F_1RS_2} \text{ и } \frac{dT_2}{du_2} = \frac{RS_1T_1F_2}{RS_2u_1F_1} - \frac{(F_1 + F_2)(2u_2 - u_1)}{2F_1RS_2}. \quad (2.80)$$

Подставим (2.80) в (2.77) и получим нелинейное уравнение, из которого при фиксированных концентрациях может быть найдено u_2 :

$$\Phi(u_2) = \frac{u_2^2}{2} + h(T_2(u_2)) - H_0 = 0, \quad (2.81)$$

$$\frac{d\Phi}{du_2} = u_2 + h_T \frac{dT_2}{du_2} = u_2 + h_T \left(\frac{T_2}{u_2} - \frac{u_2(F_1 + F_2)}{2RF_1S_2} \right). \quad (2.82)$$

Здесь $h_T = \left. \frac{dh}{dT} \right|_{T=T_2}$, с учетом (2.70), (2.74) выражение для скорости звука имеет вид:

$$a_2^2 = \frac{RS_2T_2h_T}{h_T - RS_2}. \quad (2.83)$$

С использованием (2.83) можно получить значение для u_2 , при котором (2.82) обращается в ноль.

$$u_2^2 = \frac{2a_2^2}{\left(1 + \frac{h_T F_2 - RS_2 F_1}{F_1(h_T - RS_2)} \right)}. \quad (2.84)$$

Значение правой части (2.84) при уменьшении шага интегрирования стремится к квадрату скорости звука a_2^2 . Таким образом, при $u_2 < a_2$ $\frac{d\Phi}{du_2} > 0$, при $u_2 > a_2$ $\frac{d\Phi}{du_2} < 0$ и,

следовательно, (2.81) имеет два корня “дозвуковой” и “сверхзвуковой”, если $\Phi(a_2) > 0$ и не имеет корней, если $\Phi(a_2) < 0$.

Для интегрирования (2.78) используется модифицированный метод У. Г. Пирумова, на каждой итерации которого с высокой точностью решается уравнение (2.81). Значения параметров течения в начальном сечении находятся из расчета химически равновесного течения в сопле по методике, приведенной выше.

Решение системы (2.75)-(2.78) зависит от величины расхода Q . Если Q “большой”, то поток разгоняется сильнее, чем успевает релаксировать состав, и, следовательно, выполняется первое условие (2.72) и не выполняется второе, т.е. происходит “запирание” течения. Если Q “маленький”, то решение существует, но поток остается дозвуковым. Для поиска решения с переходом через скорость звука необходимо использовать специальные алгоритмы прохождения особой точки.

Для иллюстрации рассмотрим течение, реализующееся в сопле ЖРД (рис. 2.27, радиус критического сечения $R_* = 0.0196$ м, $R_0 / R_* = 2.5$, $X_* / R_* = 14.93$, $R_K / R_* = 23.65$, $X_K / R_* = 79$), работающем на несимметричном диметилгидразине ($(\text{CH}_3)_2\text{NNH}_2$) и азотном тетраоксиде (N_2O_4), давление в КС 10^7 Па, коэффициент избытка окислителя [12] - $\alpha = 0.9$. Химические процессы в продуктах сгорания моделировались кинетическим механизмом, включающем 14 обратимых реакций [206], в которых участвовали 12 компонентов H_2O , H_2 , N_2 , CO_2 , CO , OH , O_2 , NO , C , H , O , N , термодинамические свойства веществ заимствовались из [121].

На рисунке 2.28 приводятся рассчитанные зависимости изменения скорости от продольной координаты в окрестности особой точки. Значение расхода газа Q при получении кривых 1, 2 отличается на 10^{-10} кг/с. Вдоль кривой 1 по мере приближения к особой точке $\frac{du}{dx} \rightarrow \infty$, на кривой 2 существует точка, в которой $\frac{du}{dx} = 0$. Для

прохождения особой точки использовался следующий алгоритм. На первом этапе с высокой точностью ($\varepsilon \approx 10^{-10}$ кг/с) находился расход соответствующий неравновесному течению в сопле, вдоль кривых 1 и 2, соответствующих режиму запирания и дозвуковому течению (все параметры вдоль них совпадают с высокой точностью вплоть до малой окрестности особой точки) находилась точка x_1 , в которой значение

производной скорости по продольной координате $\frac{du}{dx}$ отличаются на 1%.

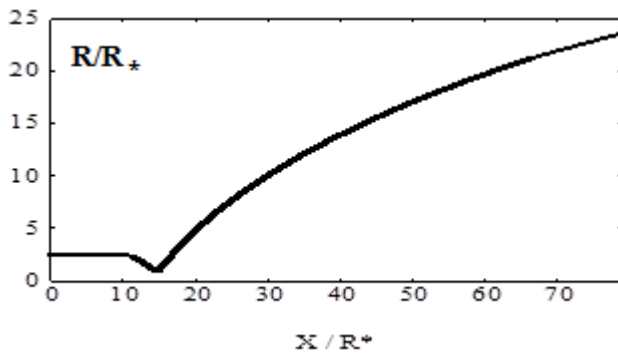


Рис. 2.27. Контур сопла.

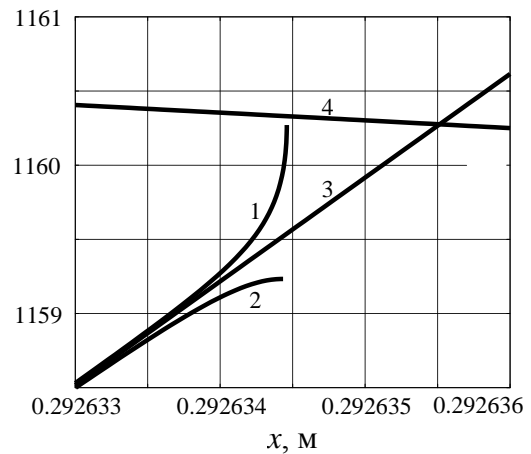


Рис. 2.28. Зависимость скорости (м/с, 1-3) и скорости звука (м/с, 4) от продольной координаты. 1 – режим запираия, 2 – дозвуковой режим течения, 3 – прохождение особой точки.

На втором этапе решалась система уравнений (2.75), (2.77), (2.78), вместо уравнения (2.76) предполагалось, что

$$u \frac{du}{dx} = \text{const} = u_1' \quad (2.85)$$

и равно соответствующему значению на дозвуковой ветви решения (кривая 2). Соответственно $u(x) = \sqrt{u^2(x_1) + 2u_1'(x - x_1)}$, переход через скорость звука происходил при $x = x_2$. Решение велось до одновременного выполнения условий при $x = x_3$.

$$M > 1 \quad \text{и} \quad \frac{1}{u \rho^2 h_T} \sum_{i=1}^N (\rho_{yi} h_{Ti} - h_{yi} \rho_{Ti}) W_i + \frac{F_x}{F} > 0 . \quad (2.86)$$

В процессе решения контролировалось условие неубывания энтропии.

$$\frac{dS}{dx} \geq 0 \quad (2.87)$$

На третьем этапе при $x > x_3$ решалась прямая задача для сверхзвукового течения.

Необходимо отметить, что при больших значениях u_1' условие (2.87) может нарушаться. Выбиралось максимальное значение u_1' (и соответствующая т. x_1) при котором выполнялись условия (2.86), (2.87). В качестве результата расчета неравновесного течения в сопле с переходом через скорость звука принималось: до выполнения условия (2.85) “дозвуковое” решение системы (2.85)-(2.88); далее решение системы (2.75, 2.77, 2.78, 2.85); далее “сверхзвуковое” решение системы (2.75)-(2.78).

Полученное решение “прямой” задачи сравнивалось с решением “обратной” задачи [206], при решении которой зависимость плотности от продольной координаты бралась из решения ”прямой” задачи. Все рассчитанные параметры течения с высокой точностью совпали.

Исследовалось влияние давления в камере сгорания и коэффициента избытка окислителя на параметры течения в сопле.

На рис. 2.29 приводятся изменения параметров течения в зависимости от продольной координаты, полученные при решении прямой задачи в “неравновесной” и “равновесной” (алгоритм расчета равновесного течения приведен выше) постановках. Из рис. 2.29, в частности, видно, что в сверхзвуковой части сопла температура ниже в ”неравновесном” расчете (рис. 2.29а, кривые 5,6), а также, что происходит ”замораживание” состава продуктов сгорания, при этом концентрации токсичных компонентов в равновесном и неравновесном расчетах существенно отличаются (рис. 2.29б, кривые 3,4 и 5,6).

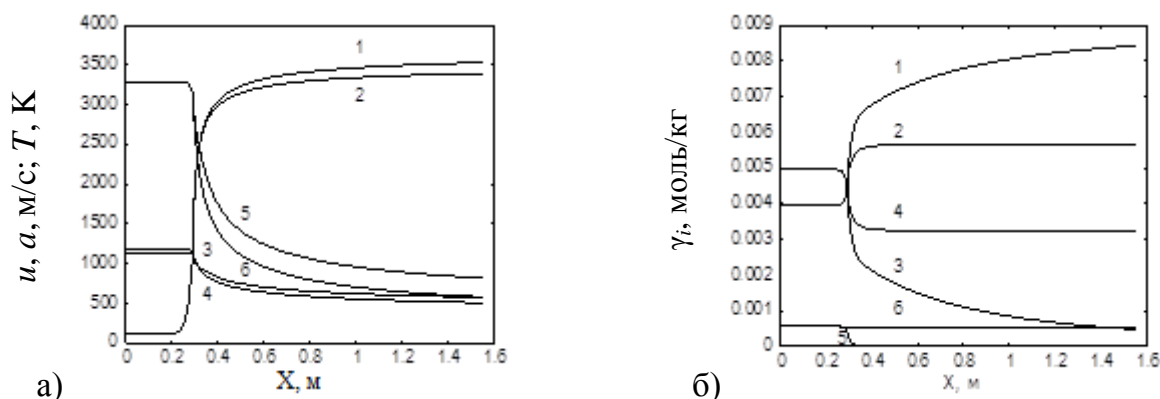


Рис. 2.29. Равновесное и неравновесное распределение параметров в сопле ЖРД $p_K = 5$ МПа, $\alpha_{ок} = 0.9$ (1, 3, 5 – равновесное течение, 2, 4, 6 – неравновесное течение). а) 1, 2 – скорость, 3, 4 – скорость звука, 5, 6 – температура б) мольно-массовые концентрации: 1, 2 - CO_2 ; 3, 4 – CO; 5, 6 – NO

Расход, полученный в результате решения “неравновесной” задачи, превышает соответствующее значение “равновесного” расхода на десятые доли процента (рис. 2.30а), потери удельного импульса могут составлять несколько процентов (рис. 2.30б) (величины потерь на химическую неравновесность хорошо коррелируют с данными [238]). С ростом давления в камере сгорания отличия уменьшаются.

Если проводить математическое моделирование “неравновесного” течения с “равновесным” расходом, то будет реализовываться дозвуковой режим течения. Максимальное достигаемое в этом случае число Маха в сопле с ростом давления в камере сгорания увеличивается (рис. 2.31). Как уже отмечалось, при решении

“неравновесной” прямой задачи переход через скорость звука происходит в расширяющейся части сопла. В рассматриваемых вариантах заметное отличие точки перехода от критического сечения наблюдается при давлении в камере сгорания, превышающем 10 МПа , координата точки перехода увеличивается с ростом давления.

В заключении отметим, что в разделе приведен алгоритм решения прямой задачи теории сопла при наличии неравновесных химических реакций в квазиодномерной стационарной постановке. Произведено численное моделирование течения продуктов сгорания несимметричного диметилгидразина с азотным тетраксидом в диапазоне изменения коэффициента избытка окислителя $0.8 - 1.2$ и давлений в КС: $2 \text{ МПа} - 20 \text{ МПа}$. Получены отличия “неравновесного” расхода от “равновесного”, величины потерь удельного импульса и координаты точек перехода через скорость звука при “неравновесном” течении.

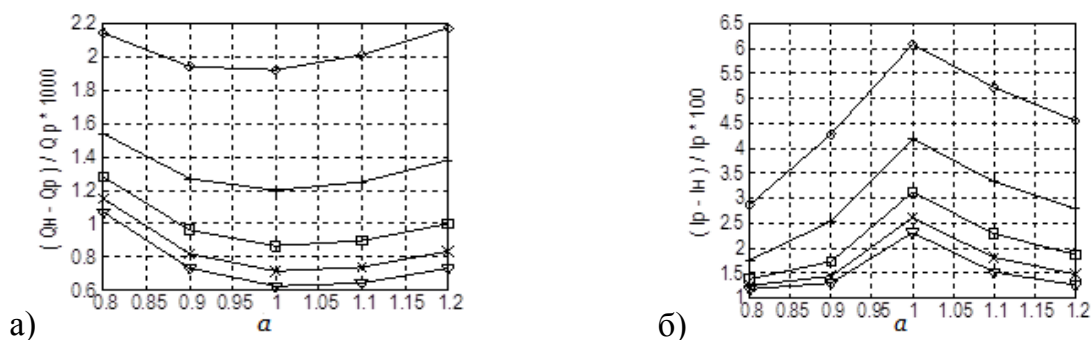


Рис. 2.30. Зависимость отличия “неравновесного” и “равновесного” расходов (а) и потерь удельного импульса (б) на срезе сопла от коэффициента избытка окислителя при различных давлениях в камере сгорания. (p_K : \diamond - 2 МПа , $+$ - 5 МПа , \square - 10 МПа , \times - 15 МПа , ∇ - 20 МПа)

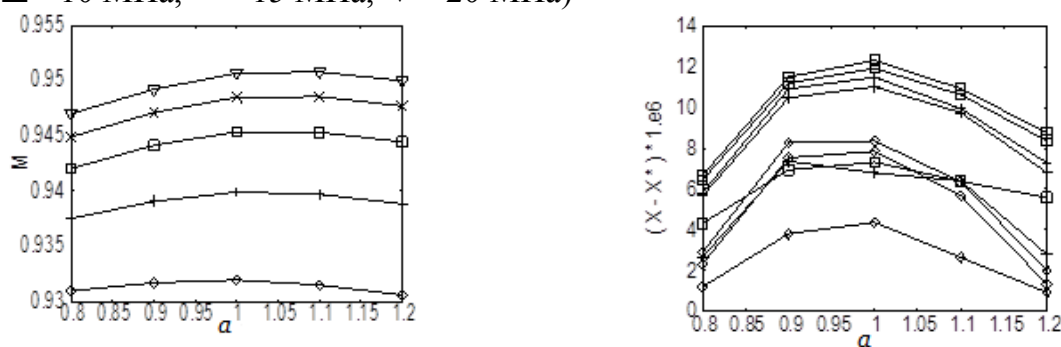


Рис. 2.31. Зависимость максимального числа Маха, достигаемого при “неравновесном” расчете с “равновесным” расходом от коэффициента избытка окислителя при различных давлениях в камере сгорания (p_K : \diamond - 2 МПа , $+$ - 5 МПа , \square - 10 МПа , \times - 15 МПа , ∇ - 20 МПа)

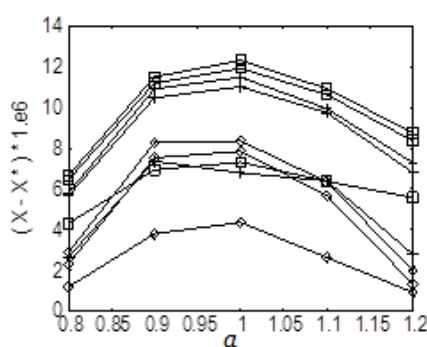


Рис. 2.32. Зависимость расстояния, на котором заканчивался “первый этап” (т. x_1), достигалось значение $M = 1$ (т. x_2) и начинался “третий этап” (т. x_3) от коэффициента избытка окислителя при различных давлениях в камере сгорания (p_K : \diamond - 10 МПа , $+$ - 15 МПа , \square - 20 МПа)

Выводы

В главе 2 приведены используемые в работе методы расчета равновесного и неравновесного состава многокомпонентных смесей, а также решение с их использованием двух задач. Построены алгоритмы решения задачи о распаде произвольного разрыва в многокомпонентном газе для трех случаев: при неизменном (замороженном) составе, равновесном составе и равновесно-замороженном составе. Разработан вычислительный алгоритм прохождения особой точки при решении прямой задачи теории сопла в одномерной постановке для многокомпонентного газа с химическими превращениями, описываемыми многостадийными кинетическими механизмами.

ГЛАВА 3. СЕТОЧНО-ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИЙ МЕТОД ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ КВАЗИОДНОМЕРНЫХ НЕСТАЦИОНАРНЫХ МНОГОФАЗНЫХ ТЕЧЕНИЙ С ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИМИ ПРЕВРАЩЕНИЯМИ С ЯВНЫМ ВЫДЕЛЕНИЕМ ПРОИЗВОЛЬНОГО ЧИСЛА ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ РАЗРЫВОВ

Введение

В многофазных течениях в каналах переменного сечения могут возникать линии разрыва, на которых газодинамические параметры или правые части уравнений газовой динамики меняются скачком. Для обеспечения второго порядка аппроксимации (вообще говоря, даже первого) уравнений газовой динамики положение таких линий должно отслеживаться, а перепад параметров определяться в процессе расчета. Если в многомерном случае создание процедур расчета многофазных течений с явным выделением поверхностей разрывов весьма проблематично, то в одномерном нестационарном случае это возможно без существенных дополнительных затрат [2-6, 33, 40-43, 48-50, 59, 60, 95, 114-116, 155, 185, 194]. Значения перепадов тех или иных параметров на линиях разрыва могут быть найдены из системы уравнений, включающей в себя уравнения характеристик, проходящих через разрыв, и соотношения на них [185]. Иногда, если это необходимо, используются некоторые дополнительные условия на разрывах, зависящие от их конкретной физической природы, полученные из интегральных законов сохранения вещества, импульса и энергии.

Теоретические аспекты создания и использования сеточно-характеристических методов подробно освещены в монографии [185]. Достоинством разработанного автором подхода [40-43, 48-50, 59, 60, 67, 71, 74, 78-80, 89, 94, 95-97, 209, 267, 300, 301] является отсутствие необходимости априорного знания картины реализующегося течения. Зачастую это практически невозможно из-за сложной ударно-волновой структуры. Реализация разработанного алгоритма сводится к последовательности решения элементарных подзадач, расчет ведется автоматически. Необходимо знание распределения параметров течения и границ областей непрерывности течения только в начальный момент времени. В качестве начальных данных, задается ряд параметров, характеризующих сеточно-характеристический метод. Например, число отслеживаемых характеристик ВВР при распаде разрыва, как функция перепада давления в веере, а также соотношения между параметрами течения при которых можно считать сильный

разрыв выродившимся. В процессе расчета сложных течений, число сеточных линий может лавинообразно увеличиваться, чтобы этого не происходило в алгоритме предусмотрена процедура удаления сеточной линии. Критерием возможности их удаления является возникающая при этом погрешность в интерполяционном представлении рассчитанного слоя.

3.1. Общий алгоритм расчета многофазного реагирующего течения

Сеточная линия (расчетная точка) относится 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 S^+ (ТХ+); характеристика семейства S^- (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).

Предлагаемый алгоритм численного расчета двухфазных течений основан на нескольких ключевых положениях [59, 60], а именно:

- 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;
 - границы областей непрерывности рассчитываются по специальным алгоритмам, учитывающим их конкретную физическую природу;
 - 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 (U, P, T), 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 компонентов 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 в зависимости 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.

3.2. Алгоритмы расчета внутренних узлов расчетной сетки.

При расчете давления, температуры и скорости газа на $(i+1)$ -ой итерации будут считаться известными скорость звука, температура, давление, скорость, коэффициенты, входящие в характеристические соотношения в узлах разностной сетки и по обе стороны от разрывов на старом временном слое t и их значения на новом временном слое $t+\Delta t$ на i -ой итерации. Также считается известной координата рассчитываемого узла (см. раздел ниже). Индексами $0, 1, 2, s$ будут обозначены точки пересечения характеристиками семейства C^0, C^+, C^-, C^s предыдущего слоя соответственно, индексом 3 — рассчитываемая точка. Для узлов, лежащих на разрывах, индексом 3 обозначится точка слева от разрыва, $3'$ — справа от него. Введем следующие обозначения (см. 1.25 – 1.28):

$$\begin{aligned}
 K &= \frac{1}{\rho a}, N = \frac{1}{\rho}, K^+ = \frac{K_3 + K_1}{2}, L^+ = \frac{L_3 + L_1}{2}, \\
 K^- &= \frac{K_3 + K_2}{2}, L^- = \frac{L_3 + L_2}{2}, N^0 = \frac{N_3 + N_0}{2}.
 \end{aligned}
 \tag{3.1}$$

Концентрации химических компонентов и параметры частиц во всех узлах расчетной сетки рассчитываются вдоль траекторий газа и частиц соответственно, модифицированным методом Пирумова, описанным в главе 2.

Определение координат подвижных узлов

Координаты i -го узла на рассчитываемом $(n+1)$ -ом слое по времени определяются из уравнения движения этого узла $\frac{dx}{dt} = D$, записанного в разностном виде:

$$x_i^{n+1} = x_i^n + \frac{1}{2}(D_i^{n+1} + D_i^n)\Delta t.$$

Здесь D — скорость движения узла (см. п. 3.1). Необходимо отметить, что число узлов на рассчитываемом и рассчитанном слоях всегда совпадает. В случае, если узел разностной сетки является УВ, то D — скорость УВ; если ТГ, КР или ТС, то D равна скорости газа в узле; если ФТ, то $D=0$; если ТЧ, то D равна скорости частицы и т. д.

Расчет точки в поле течения

В том случае если искомая точка — точка на траектории, находим координаты x_1 , x_2 из уравнений характеристик C^+ и C^- , записанных в разностном виде (рис. 3.1):

$$x_1 = x_3 - \frac{u_3 + a_3 + u_1 + a_1}{2} \Delta t,$$

$$x_2 = x_3 - \frac{u_3 - a_3 + u_2 - a_2}{2} \Delta t.$$

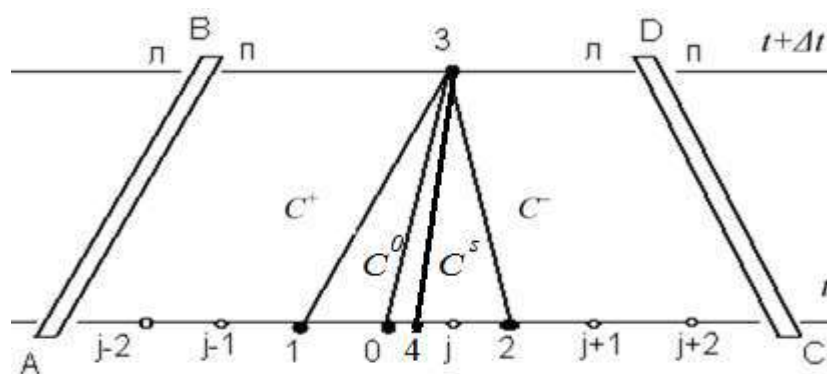


Рис. 3.1. Расчет точки в поле течения

Используя четырехточечную интерполяцию по предыдущему слою, находим u_1 , p_1 , a_1 , K_1 , L_1 и u_2 , p_2 , a_2 , K_2 , L_2 . Записываем соотношения на звуковых характеристиках с учетом обозначений (3.1) в разностном виде:

$$C^+ = u_3 - u_1 + K^+(p_3 - p_1) + L^+ \Delta t,$$

$$C^- = u_3 - u_2 - K^-(p_3 - p_2) - L^- \Delta t$$

и находим значения u, p по формулам:

$$u_3^{i+1} = u_3^i - \alpha \delta u, \quad \delta u = \frac{K^- C^+ + K^+ C^-}{K^+ + K^-},$$

$$p_3^{i+1} = p_3^i - \alpha \delta p, \quad \delta p = \frac{C^+ - C^-}{K^+ + K^-}, \quad \alpha \in [0, 1].$$

Т. к. в качестве расчетной сетки используются ТГ, то все параметры в точке 0 заданы. Из выражения (1.21), записанного в разностном виде, находим h_3 :

$$h_3 = h_0 - N^0 (p_3 - p_0) - L^0 \Delta t.$$

Для нахождения концентраций химических компонент (и параметров частиц) используется модифицированный метод Пирумова.

$$\gamma_{i3} - \gamma_{i0} - \left(s \frac{W_{i0}}{\rho_0} + (1-s) \frac{W_{i3}}{\rho_3} \right) \Delta t = 0.$$

$W_i(\rho, T, \gamma_i)$ является функцией плотности, температуры и концентраций. Плотность $\rho = \rho(p, h, \gamma)$ и температура $T = T(p, h, \gamma)$ считаются функциями давления, энтальпии и концентраций. При рассчитанных значениях давления, энтальпии и концентраций всех компонентов находим T из, в общем случае, нелинейного уравнения для энтальпии методом Ньютона:

$$f(T) = h - h_3, \quad f'(T) = h_T, \quad T = T^{old} - \frac{f(T)}{f'(T)}, \quad \text{с точностью } \delta = \left| \frac{T - T^{old}}{T} \right| \approx 10^{-7}.$$

Затем плотность ρ находим из термического уравнения состояния.

Далее повторно рассчитываются u_3, p_3, h_3 . Для выхода из итераций контролируем точность по неравенствам: $|C^+| < \varepsilon, |C^-| < \varepsilon, |C^0| < \varepsilon, \varepsilon \approx 10^{-5}$ — некоторая наперед заданная константа. Если все три условия выполнены — достигнута требуемая точность расчета точки в поле течения, устанавливается признак выхода.

Расчет ФТ ведется так же, как и расчет точки в поле течения, за исключением того, что мы выпускаем характеристику семейства C^0 и находим координату x_0 из соотношения (1.27), записанного в разностном виде: $x_0 = x_3 - \frac{u_3 + u_0}{2} \Delta t$, и далее интерполяцией находим значения газодинамических параметров в точке x_0 . Скорость движения узла в этом случае равна нулю.

Расчет точки на контактном разрыве

Контактный разрыв (КР) является траекторией для газа слева и справа от него. При переходе через КР плотность, температура и концентрации могут претерпевать разрыв, а скорость и давление газа непрерывны (рис. 3.2).

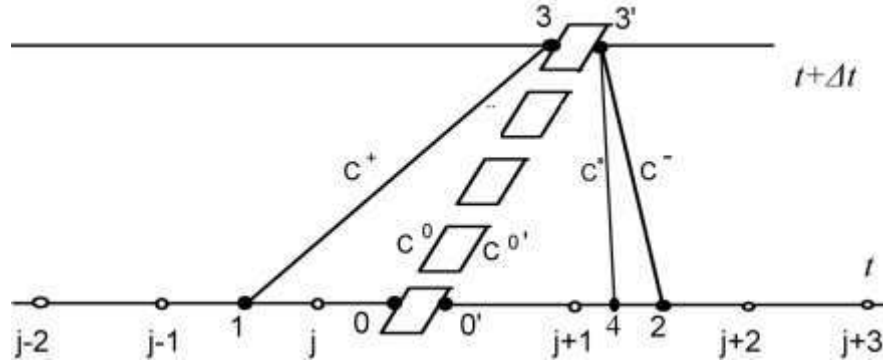


Рис. 3.2. Шаблон для расчета точки на КР

Находим координаты x_1 , x_2 из уравнений характеристик семейства C^+ и C^- , записанных в разностном виде:

$$x_1 = x_3 - \frac{u_3 + a_3 + u_1 + a_1}{2} \Delta t, \quad x_2 = x_{3'} - \frac{u_{3'} - a_{3'} + u_2 - a_2}{2} \Delta t.$$

Используя интерполяцию по предыдущему слою, находим u_1, p_1, a_1, K_1, L_1 и u_2, p_2, a_2, K_2, L_2 . Записываем соотношения на звуковых характеристиках с учетом обозначений (3.1) в разностном виде:

$$C^+ = u_3 - u_1 + K^+(p_3 - p_1) + L^+ \Delta t, \quad C^- = u_{3'} - u_2 - K^-(p_{3'} - p_2) - L^- \Delta t$$

и находим значения u, p по формулам:

$$u_3^{i+1} = u_{3'}^{i+1} = u_3^i - \alpha \delta u, \quad \delta u = \frac{K^- C^+ + K^+ C^-}{K^+ + K^-},$$

$$p_3^{i+1} = p_{3'}^{i+1} = p_3^i - \alpha \delta p, \quad \delta p = \frac{C^+ - C^-}{K^+ + K^-}, \quad \alpha \in [0, 1].$$

Параметры в точках 0 и 0' известны. Из выражения (1.27), записанного в разностном виде, находим h_3 и $h_{3'}$:

$$h_3 = h_0 - N^0(p_3 - p_0) - L^0 \Delta t, \quad h_{3'} = h_{0'} - N^{0'}(p_{3'} - p_{0'}) - L^{0'} \Delta t.$$

Далее, при фиксированном векторе концентраций $\bar{\gamma}$, давлении p и энтальпии h справа и слева от разрыва находим температуру T_3 и $T_{3'}$, используя процедуру нахождения температуры, описанную в предыдущем разделе. Контроль точности выполняется аналогично способу, описанному в предыдущем разделе.

Расчет точки на ударной волне

Рассмотрим УВ движущуюся по газу слева направо, относящуюся к семейству C^+ . Относительно газа перед ней УВ движется со сверхзвуковой скоростью, параметры газа перед волной ("справа") (точка 3' на рис. 3.3) рассчитываются независимо от параметров газа за волной ("слева"), как описано в пункте «Расчет точки в поле течения» выше.

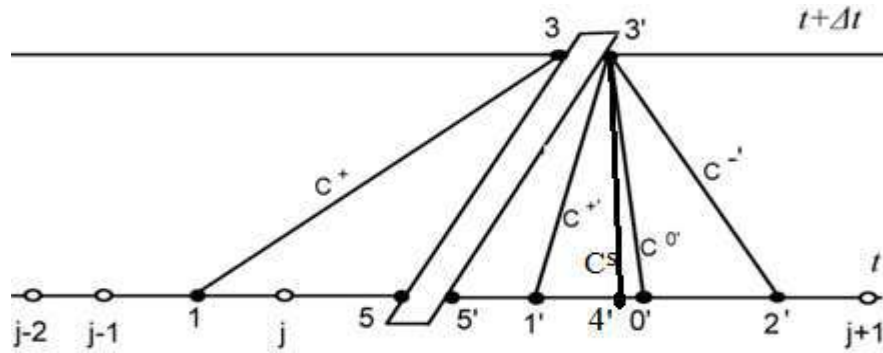


Рис. 3.3. Шаблон для расчета точки на УВ

Если известны значения всех параметров в точке 3' перед УВ и значение p_3 в точке за УВ в первом приближении, то при переходе через УВ выполняются соотношения Ренкина-Гюгонно [253].

$$\begin{aligned} \rho_3(u_3 - D) &= \rho_{3'}(u_{3'} - D), \\ p_3 + \rho_3(u_3 - D)^2 &= p_{3'} + \rho_{3'}(u_{3'} - D)^2, \\ h_3 + \frac{(u_3 - D)^2}{2} &= h_{3'} + \frac{(u_{3'} - D)^2}{2}. \end{aligned}$$

Из этих соотношений путем алгебраических преобразований получаем выражение для ударной адиабаты:

$$g(T) = h_3 - h_{3'} - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\rho_3} + \frac{1}{\rho_{3'}} \right) (p_3 - p_{3'}) = 0.$$

Далее, до достижения заданной точности, применяем следующий алгоритм. По известным p_3 и T_3 находим ρ_3 . Значение T_3 на первой итерации берется с предыдущей.

$$h_3 = e_3 + \frac{p_3}{\rho_3}, \quad (h_T)_3 = (e_T)_3 - \frac{p_3(\rho_T)_3}{\rho_3}, \quad g'(T) = (h_T)_3 + \frac{1}{2}(p_3 - p_{3'}) \frac{(\rho_T)_3}{\rho_3}.$$

$$T_3^{n+1} = T_3^n - \frac{g(T_3^n)}{g'(T_3^n)}.$$

Достигнув заданной точности, находим скорость звука a и координату x_1 из уравнения характеристики семейства C^+ , записанного в разностном виде:

$$x_1 = x_3 - \frac{u_3 + a_3 + u_1 + a_1}{2} \Delta t.$$

Интерполяцией находим значения всех параметров в точке x_1 . Далее решаем совместно уравнение для ударной адиабаты и соотношение, выполняемое вдоль характеристики семейства C^+ , догоняющей волну:

$$\begin{cases} u_3 - u_{3'} - \sqrt{\left(\frac{1}{\rho_{3'}} - \frac{1}{\rho_3}\right)}(p_3 - p_{3'}) = 0, \\ u_3 - u_1 + K^+(p_3 - p_1) + L^+ \Delta t = 0. \end{cases}$$

Исключим из данной системы u_3 и получим нелинейное уравнение:

$$f(p) = u_{3'} - u_1 + K^+(p_3 - p_1) + \sqrt{\left(\frac{1}{\rho_{3'}} - \frac{1}{\rho_3}\right)}(p_3 - p_{3'}) + L^+ \Delta t = 0$$

Методом Ньютона [210] находим из него давление:

$$p_3^{n+1} = p_3^n - \frac{f(p_3^n)}{f'(p_3^n)}, \quad f'(p_3) = K^+ + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\rho_{3'}} - \frac{1}{\rho_3} \right) / \sqrt{\left(\frac{1}{\rho_{3'}} - \frac{1}{\rho_3}\right)}(p_3 - p_{3'})$$

Значения u_3, D_3 находятся после достижения сходимости:

$$u_3 = u_{3'} \pm \sqrt{\left(\frac{1}{\rho_{3'}} - \frac{1}{\rho_3}\right)}(p_3 - p_{3'}), \quad D_3 = \frac{\rho_3 u_3 - \rho_{3'} u_{3'}}{\rho_3 - \rho_{3'}}.$$

В выражении для скорости u_3 берется тот знак, который имеет разность $u_{3'} - D_3$ на предыдущей итерации. Сходимость алгоритма контролируем по значениям относительных невязок параметров:

$$\left| \frac{D_3^{i+1} - D_3^i}{D_3^{i+1}} \right| < \varepsilon, \quad \left| \frac{u_3^{i+1} - u_3^i}{a_3^{i+1}} \right| < \varepsilon, \quad \left| \frac{p_3^{i+1} - p_3^i}{p_3^{i+1}} \right| < \varepsilon, \quad \left| \frac{T_3^{i+1} - T_3^i}{T_3^{i+1}} \right| < \varepsilon.$$

Если УВ относится к семейству C^- , то вместо соотношений для "догоняющей характеристики" семейства C^+ используется соотношения на характеристике семейства C^- .

Расчет точки на характеристике

Пусть рассчитываемая точка лежит на характеристике семейства C^+ . Алгоритм расчета параметров течения в такой точке аналогичен алгоритму расчета ФТ (см. раздел «расчет точки в поле течения»), за тем исключением, что координата x_1 (точка Б рис. 3.4) и значения параметров в ней равны значениям в рассчитываемой точке на предыдущем временном слое. В случае же, когда рассчитываемая точка лежит на характеристике семейства C^- , используется аналогичный алгоритм. Мы не выпускаем характеристику этого семейства, а считаем координату x_2 и значения параметров в ней равными координате и значениям в рассчитываемой точке на предыдущем слое.

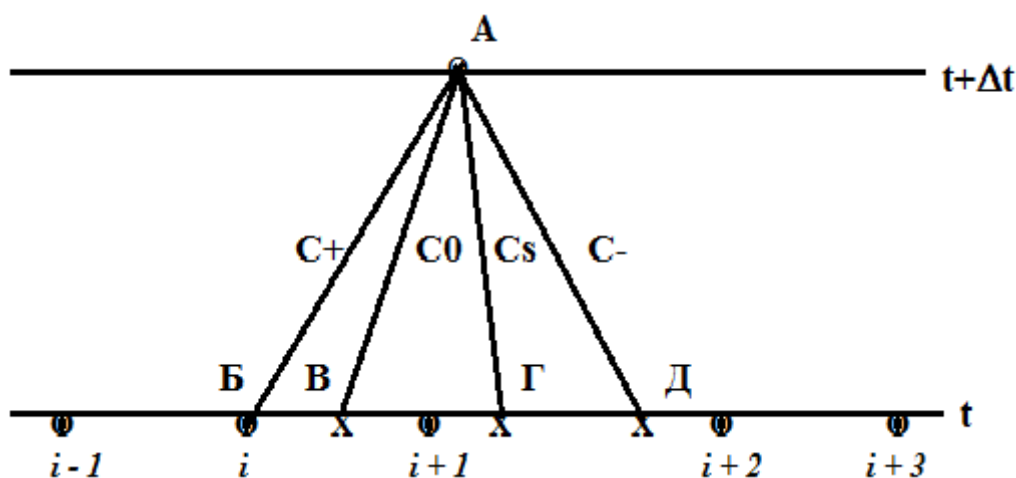


Рис.3.4 Шаблон расчета точки на характеристике C^+ .

Точка на разрывной характеристике рассчитывается так же, как и ТХ. Отличие этих точек состоит в том, что разрывная характеристика является границей области непрерывности, и через нее параметры течения не интерполируются.

Расчет точки на траектории частиц

Траектория частиц является подвижным узлом расчетной сетки. Соответственно вначале находится координата ее пересечения с рассчитываемым слоем t . A рис. 3.5. Далее из точки A выпускаются характеристики и C^+ , C^- , C^0 и рассчитываются параметры в точке, аналогично как это делается в случае расчета параметров в фиксированной точке. Если сходимость не достигнута, то процедура повторяется.

Необходимо отметить, что характеристики в зависимости от параметров течения могут располагаться по обе стороны от траектории частиц.

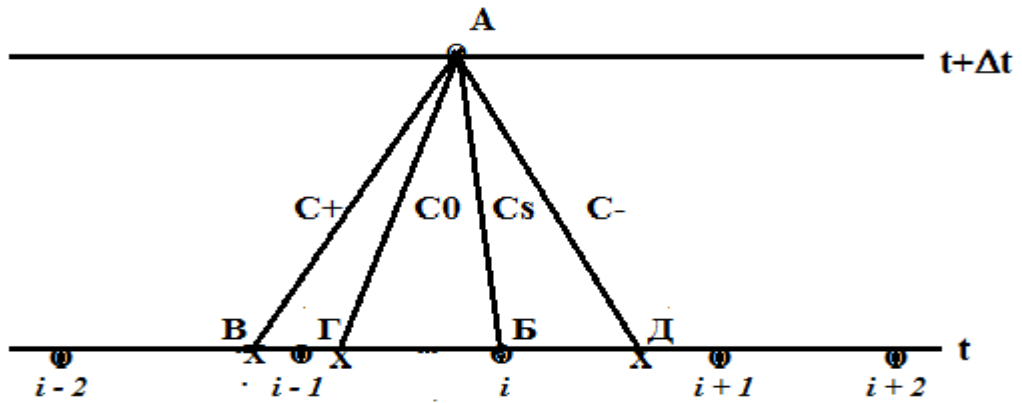


Рис. 3.5 Шаблон расчета точки на траектории частиц

Вдоль траектории частиц записываются характеристические соотношения для параметров частиц, из которых находятся значения u_{SA}, H_{SA}, m_{SiA} модифицированным методом Пирумова, описанным в главе 2, при фиксированных параметрах газа. Правые части в уравнениях вычисляются по формулам, приведенным в главе 1.

$$u_{SA} - u_{SB} - \left(\sigma \dot{u}_{SB} + (1 - \sigma) \dot{u}_{SA} \right) \Delta t = 0, \quad H_{SA} - H_{SB} - \left(\sigma \dot{H}_{SB} + (1 - \sigma) \dot{H}_{SA} \right) \Delta t = 0,$$

$$m_{SiA} - m_{SiB} - \left(\sigma \dot{m}_{SiB} + (1 - \sigma) \dot{m}_{SiA} \right) \Delta t = 0, \quad m_S = \sum_{(i)} m_{Si}$$

Граничная траектория частиц (линия $AA' - BB'$, рис. 3.6) является линией разрыва правых частей уравнений, описывающих многофазные среды. Соответственно, процедура расчета точки AA' совпадает с расчетом обычной траектории частиц, за исключением того, что при определении параметров течения в точках пересечения характеристиками рассчитанного слоя по времени при интерполяции используются только точки, расположенные слева или справа от граничной траектории частиц в зависимости от того, в какой из подобластей расположены точки пересечения.

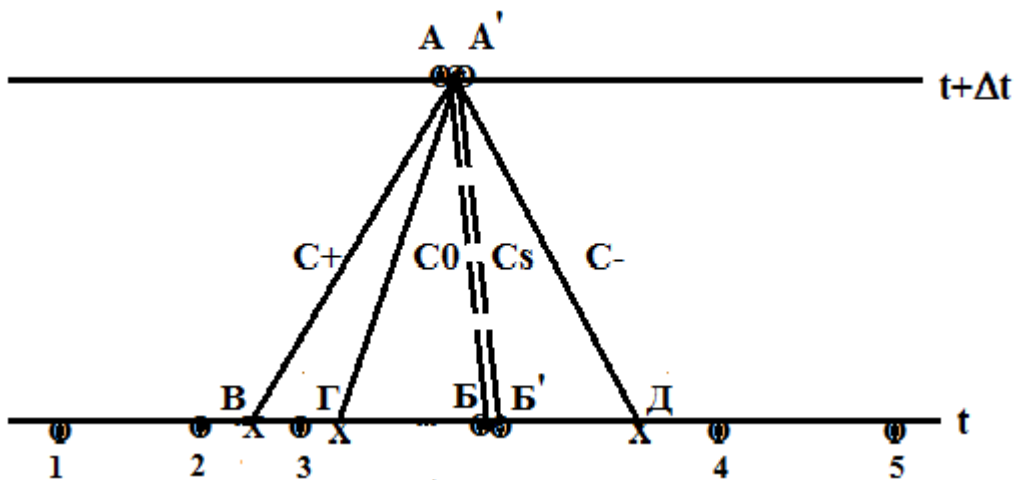


Рис. 3.6 Шаблон расчета точки на граничной траектории частиц

Особенности расчета параметров частиц в фиксированной точке

При расчете параметров частиц в фиксированной точке пространства необходимо учитывать возможность попадания точки в область многозначности параметров частиц (рис. 3.7).

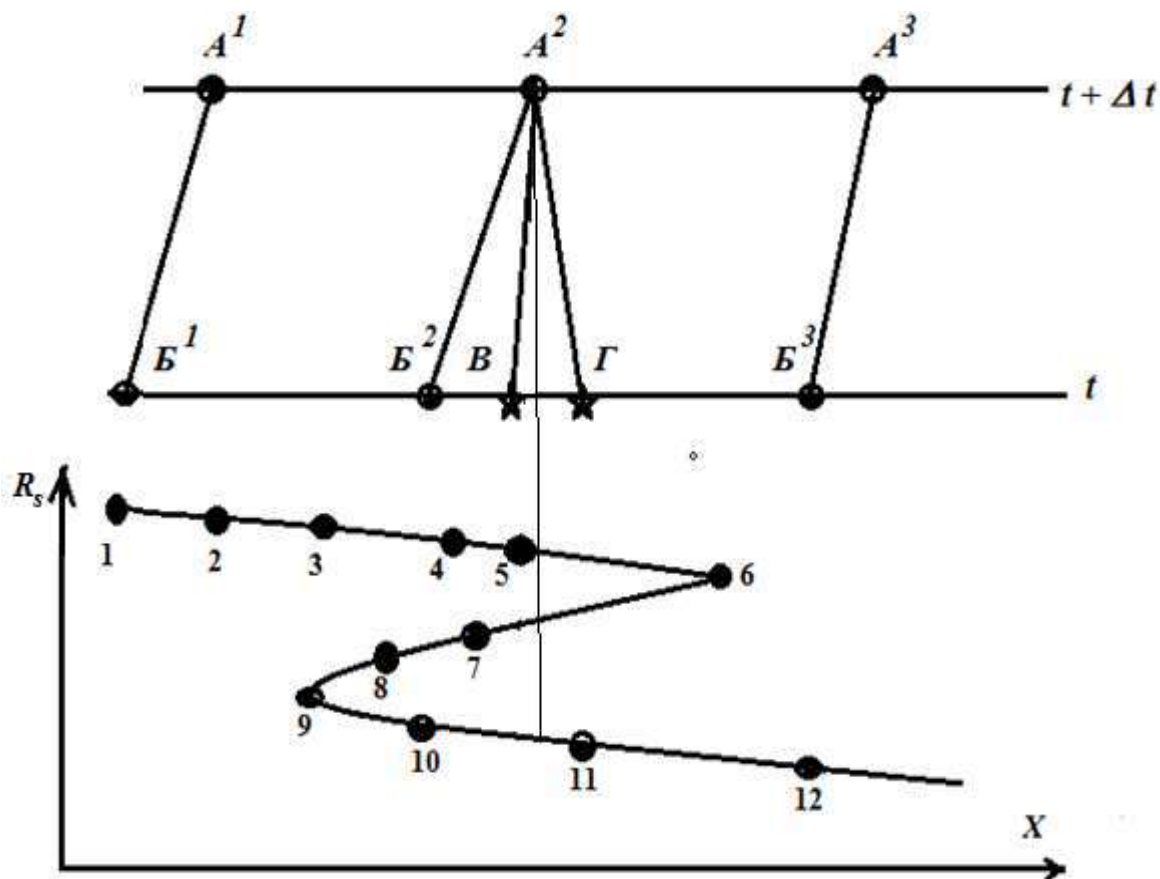


Рис. 3.7 Шаблон расчета параметров частиц в фиксированной точке

То есть одной точке пространства может соответствовать либо одна (A^1B^1 , A^3B^3), либо две, либо три (A^2B^2 , A^2B , $A^2\Gamma$) траектории частиц (вообще говоря, произвольное число траекторий частиц в случае наложения складок). Под складкой в работе понимается ситуация когда частицы (для каждой частицы в начальный момент времени известно, сколько частиц находится слева и справа от нее, при движении соседние траектории частиц сходятся или расходятся, соответственно меняется число частиц в единице объема, заключенного между ними, при этом общее число частиц остается неизменным), упорядоченные в начальный момент времени, в процессе расчета меняют порядок расположения (иначе говоря, траектории частиц пересекаются, при этом столкновений между частицами не происходит). Например (рис. 3.7) частицы в начальный момент времени были упорядочены от 1 до 12 (т.е. частица с большим номером имела большую пространственную координату. На рис. 3.7. 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 должен учитываться при расчете комплексов, учитывающих взаимное влияние фаз. Соответственно при расчете точки с координатой A^2 необходимо рассчитать три траектории частиц A^2B^2 , A^2B , $A^2Г$.

3.3. Алгоритмы расчета граничных узлов расчетной сетки.

Число граничных условий равно числу соотношений вдоль характеристик, покидающих расчетную область. Расчет граничных точек расчетной области непосредственно связан с типом граничной точки.

Точка на стенке

В случае, когда граничная точка является точкой на "жесткой" стенке (стенка справа, рис. 3.8), для определения u , p , T в точке 3 используются следующие соотношения.

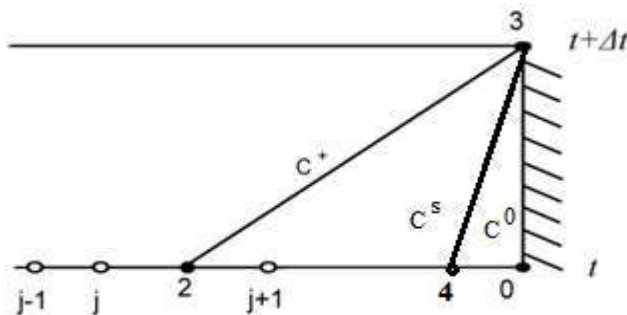


Рис. 3.8. Расчет точки на "стенке"

Соотношение на ТГ C^0 (3-0), направленной вдоль стенки. Соотношение на характеристике семейства C^+ (3-2), направленной внутрь расчетной области. Условие "непротекания" (нет расхода газа через стенку): $u_3 = 0$.

Расчет проводится аналогично тому, как описано в разделе "расчет точки в поле течения". Если граничная точка находится на левой "жесткой" стенке, то внутрь расчетной области выпускается характеристика семейства C^- . В случае подвижной стенки скорость на ней вычисляется по заданному уравнению движения.

Необходимо отметить, что параметры течения могут быть таковы, что частицы дисперсной фазы выпадают на стенку, т. е. траектория частиц направлена из расчетной области в сторону стенки (3-4). В этом случае параметры частиц вычисляются на стенке, соответственно она является границей зоны распространения частиц (при этом считается, что число частиц в расчетной области уменьшается на число частиц, выпавших на стенку). Если поток газа вблизи стенки начинает двигаться от стенки, то возможно образование граничной траектории частиц (траектории, касательной к стенке) и соответственно зоны чистого газа вблизи стенки.

Точка во входном сечении канала

В работе рассматриваются два случая входной границы расчетной области. Первый случай – случай сверхзвукового втекания газа в канал. В этом случае все параметры течения газа считаются заданными и остаются постоянными в процессе расчета. Вторым случаем – дозвуковое втекание газа в канал - для расчета граничной точки используются дополнительные условия. Как правило, считается заданными полная энтальпия, расход и состав газа. Дополнительно к граничным условиям используются уравнение звуковой характеристики, приходящее из расчетной области, и соотношение, выполняемое вдоль нее.

Параметры и расход частиц (если частицы во входном сечении имеются) считаются заданными. В соответствии с описываемым алгоритмом реализуется подвод траекторий частиц в расчетную область через равные интервалы времени.

Точка в выходном сечении канала

В работе рассматриваются следующие режимы течения. Первый – сверхзвуковое истечение. В этом случае граничная точка полностью определяется параметрами течения в расчетной области и рассчитывается как фиксированная точка. Необходимо отметить, что когда перепад давления на срезе канала и атмосферного становится выше критического значения, предусмотрена возможность захода ударной волны (с последующим ее выделением) из атмосферы в канал с параметрами внешней атмосферы, соответственно режим истечения меняется на дозвуковой. Вторым случаем – дозвуковой режим истечения. Тогда в качестве дополнительного условия используется условие равенства давления в выходном сечении канала атмосферному. Третьим случаем – дозвуковое втекание газа в канал. Здесь задается давление, температура и состав, втекающего газа, соответствующие атмосферным параметрам. Начало втекания

моделируется заходом в канал контактного разрыва, слева от которого текущие значения концентраций компонент, справа концентрации компонент соответствуют атмосферному газу. Параметры частиц во всех случаях в выходном сечении рассчитываются как в фиксированной точке. В случае затекания газа в канал в выходном сечении канала возможно образование зоны чистого газа и, соответственно, граничной траектории частиц.

Сечение подвода частиц

В ряде технологических установок подвод частиц осуществляется путем размещения устройства подачи частиц внутри канала. В этом случае параметры газа в сечении подачи частиц рассчитываются как фиксированная точка. Параметры и расход частиц в сечении подачи частиц считаются заданными, при этом согласно предлагаемому алгоритму реализуется подвод траекторий частиц в расчетную область через равные интервалы времени.

3.4. Интерполяция параметров

При построении сеточно-характеристического алгоритма важное значение имеет методика нахождения параметров в точках пересечения характеристиками рассчитанного слоя. Для этих целей используется полиномиальная интерполяция [192-196], для обеспечения второго порядка точности, как правило, квадратичная. Более правильно было бы сказать, что при численном моделировании необходимо применять методику восстановления параметров течения на участках между рассчитанными узлами расчетной сетки. Причем, процедура восстановления должна быть однозначной для каждого отрезка, а также не порождать дополнительных экстремумов, присущих интерполяционным многочленам высокого порядка. Последнее требование связано с тем, что точные решения нестационарных уравнений газовой динамики часто содержат точки разрыва основных параметров течения (ударные волны, контактные разрывы и др.), а также их первых производных (границы вееров волн разрежения). В настоящей работе в качестве базовой процедуры восстановления параметров рассчитанного слоя используется четырехточечная интерполяция.

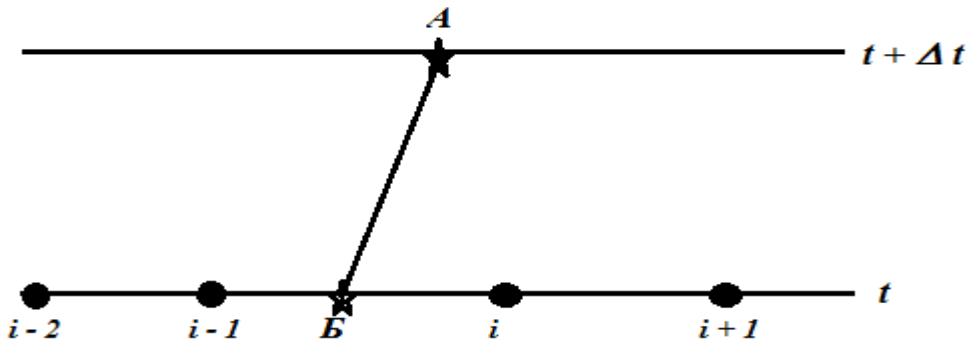


Рис. 3.9 Интерполяционный шаблон

Пусть в момент времени t нам известны все параметры течения в точках $x_0 < x_1 < \dots < x_j < \dots < x_{N-1} < x_N$. Необходимо найти параметры в точке x , находящейся на отрезке между точками с координатами x_{i-1} и x_i , в которых интерполируемый параметр принимает значения y_{i-1} и y_i соответственно. Тогда

$$y(x) = \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} f_{i-2,i-1,i}(x) + \frac{x - x_i}{x_{i-1} - x_i} f_{i-1,i,i+1}(x); \quad (*)$$

здесь

$$f_{i-1,i,i+1}(x) = \begin{cases} y_{i-1} \frac{(x - x_i)(x - x_{i+1})}{(x_{i-1} - x_i)(x_{i-1} - x_{i+1})} + y_i \frac{(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})}{(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})} + y_{i+1} \frac{(x - x_i)(x - x_{i-1})}{(x_{i+1} - x_i)(x_{i+1} - x_{i-1})}; & x^* \notin [x_{i-1}, x_i] \\ \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} y_i + \frac{x - x_i}{x_{i-1} - x_i} y_{i-1}; & x^* \in [x_{i-1}, x_i] \end{cases};$$

$$x^* = \frac{1}{2} \frac{x_{i-1}^2 (y_{i+1} - y_i) + x_i^2 (y_{i-1} - y_{i+1}) + x_{i+1}^2 (y_i - y_{i-1})}{x_{i-1} (y_{i+1} - y_i) + x_i (y_{i-1} - y_{i+1}) + x_{i+1} (y_i - y_{i-1})}.$$

Формула (*) представляет из себя сплайн третьего порядка, при восстановлении параметров течения с его помощью на всех отрезках разностной сетки производные параметров течения равны в точках x_{i-1} и x_i , за исключением случаев, когда экстремум парабол находится на рассматриваемом отрезке. Необходимо отметить, что в описываемой методике моделирования расчетные узлы на участках непрерывности параметров течения могут иметь одинаковые координаты и одинаковый набор параметров течения. В этом случае, одна из таких точек “удаляется”, а в качестве интерполяционной используется ближайшая к ней соседняя точка. В случае, если одна из точек x_{i-1} или x_i является линией разрыва параметров течения (рис. 3.10, т. Б), то используется квадратичная интерполяция (с проверкой наличия экстремума) по точкам x_{i-1}, x_i, x_{i+1} или x_{i-2}, x_{i-1}, x_i соответственно. В случае, если характеристика (линия АБ, рис. 3.10) направленная с рассчитываемого слоя на рассчитанный пересекает линию

разрыва (1-5) параметров течения, то интерполяция параметров осуществляется вдоль линии разрыва, с той стороны, откуда на нее приходит характеристика, при этом шаг по времени, фигурирующий в соответствующих характеристических соотношениях рассчитывается от рассчитываемого слоя (т. А) до точки пересечения между характеристикой и линией разрыва параметров течения (т. Б).

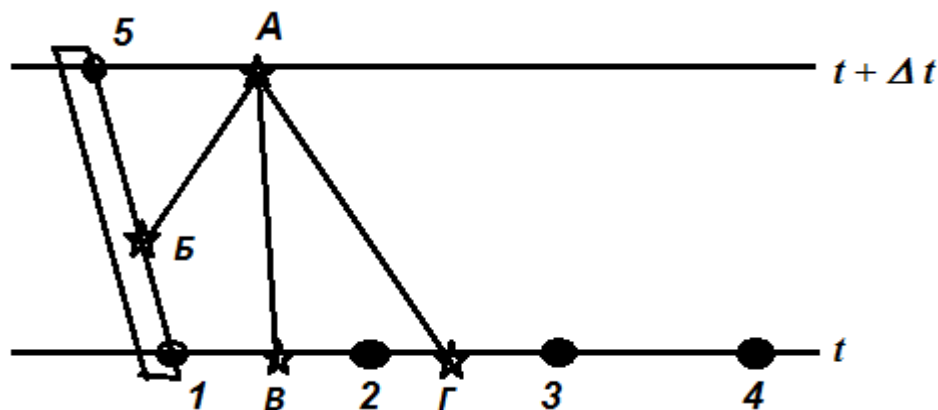


Рис. 3. 10. Интерполяционные шаблоны вблизи линии разрыва.

Необходимо отметить, что такой подход обеспечивает автоматический расчет конфигураций, возникающих при пересечении линий разрыва параметров между собой, а также при расчете образования “висячих” ударных волн, как результат пересечения характеристик одного семейства. При сближении точек А и 5 параметры в интерполируемых точках Б (в ряде случаев и В) стремятся к соответствующим параметрам в точке 5.

3.5. Алгоритмы расчета взаимодействий между сеточными линиями

В случае, когда обнаруживается пересечение траекторий узлов разностной сетки, шаг по времени уменьшается до времени ближайшего пересечения и устанавливается “признак пересечения”. Расчет нового временного слоя при этом проводится с переменным шагом (шаг по времени может меняться в итерационном процессе). После того, как новый слой рассчитан, происходит обработка пересечения в соответствии с физической природой взаимодействующих разностных узлов.

При взаимодействии двух УВ или УВ с КР для определения структуры и параметров реализующегося течения используется решение задачи о распаде произвольного разрыва (РР). Используется обобщение решения задачи Римана (см. Гл. 2) на случай, когда слева и справа от разрыва находятся газы с различными уравнениями состояния. После решения задачи Римана в точке РР становятся известны начальные

параметры образовавшихся новых сеточных линий (ударных волн, контактных разрывов, характеристик, образующих веер волн разрежения), число и тип которых зависит от реализовавшейся конфигурации и перепада параметров. Все вновь образованные подвижные узлы сетки имеют одну и ту же координату, но различные параметры.

При взаимодействиях УВ с твердой стенкой параметры отраженной УВ находятся из соотношений типа Рэнкина-Гюгонио для многокомпонентного газа с использованием условия равенства скорости газа скорости стенки за ней.

Комбинации ТХ+ТХ, ТХ+КР, ТХ+УВ, ТХ+ТС и все пересечения с траекториями частиц являются вырожденными случаями описанных выше взаимодействий. Вопрос о дальнейшем выделении данной характеристики (или замене ее характеристикой другого семейства при пересечении с УВ или КР) решается в соответствии с характером рассматриваемого течения, на этапе задания начальных данных. Необходимо отметить, что в случае пересечения характеристик одного семейства, решается задача Римана, и происходит зарождение ударной волны.

Параметры в точках пересечения траекторий газа, характеристик, траекторий частиц рассчитываются стандартным методом характеристик, а при пересечении ТГ (ТЧ) с УВ параметры на ТГ (ТЧ) после взаимодействия берутся из точки за УВ.

При взаимодействии траектории частицы с граничной траекторией частицы одной фракции происходит смена типа расчетных точек, а именно траектория частиц становится граничной траекторией, а граничная траектория обычной траекторией.

Как уже отмечалось выше, при обнаружении пересечения сеточных линий шаг интегрирования выбирается в итерациях таким образом, чтобы момент пересечения сеточных линий совпадал с временем расчета слоя. После расчета слоя по времени пересечение сеточных линий обрабатывается по специальному алгоритму, учитывающему их физическую природу. Необходимо отметить, что разработанный алгоритм расчета устроен так, что число узлов на рассчитанном и рассчитываемом слое всегда одинаково и узлы пронумерованы так, что координата последующего узла всегда больше и равна координаты предыдущего. Изменение числа расчетных узлов и их нумерации может происходить только в процессе обработки взаимодействия между сеточными линиями, которая выполняется после полного расчета временного шага. В таблице приведены допустимые, системой решаемых уравнений пересечения (отмечены

знаком ”+”) и недопустимые (отмечены знаком ”-“). Недопустимые пересечения делятся на две части, а именно: обрабатываемые (указывается вид обработки) и необрабатываемые. Если пересечение необрабатываемое, то выполнение алгоритма прекращается, и требуется корректировка вычислительной модели, изменение стратегии формирования и (или) типа сеточных линий, задаваемых в качестве начальных данных. Рассмотрим алгоритмы обработки пересечений сеточных линий различных типов.


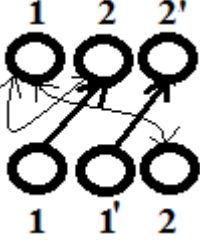

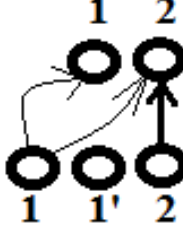
Таблица. 3.1. Взаимодействия между сеточными линиями.

№	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
	ТГ	-	+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.

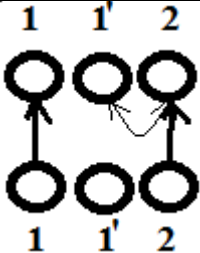
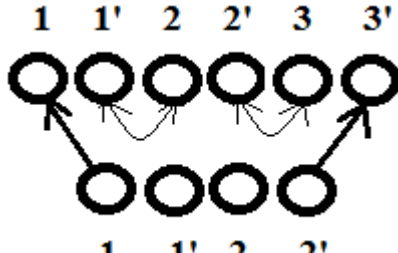
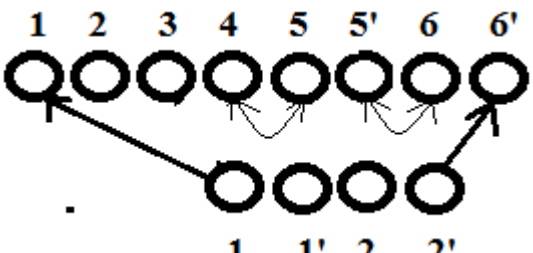
Переброска параметров (”П”) является наиболее часто используемым алгоритмом при взаимодействии сеточных линий и используется в двух вариантах. Первый случай, когда сеточные линии не являются линиями разрыва параметров течения (рис.3.11). Необходимо отметить, что в данном описании и далее, координаты (время и пространственная координата) всех точек до и после взаимодействия равны друг другу,

при этом скорости движения сеточных линий различные. Снизу расположены расчетные точки до обработки взаимодействия, сверху – после обработки взаимодействия. Сеточные линии (1, 2) и (2, 1), обозначенные жирными стрелками, меняются местами, при этом в ряде случаев, чтобы избежать ошибок округления, ряд параметров в точках 1 и 2 сохраняются. Например, если линия (1-2) является траекторией газа, а линия (2-1) характеристикой (С-), то концентрации химических компонентов в точках 1 и 2 после обработки пересечения в точности равны концентрациям химических компонент в точке 1 до обработки пересечения. Второй случай (рис. 3.12), когда одна из сеточных линий является линией разрыва параметров течения. Например линия (1-2, 1'-2') УВ семейства С+, а линия (2-1) траектория газа, тогда параметры течения в точках 1 и 2 после обработки пересечения совпадают между собой, при этом скорость, давление температура и др. вдоль траектории меняются скачком от параметров в точке 2 до параметров в точке 1 (в том числе и комплексы, входящие в правые части характеристических соотношений), а концентрации химических компонент и параметры, характеризующие дисперсную фазу, сохраняются неизменными. Аналогичным образом обрабатывается взаимодействие ударной волны и контактного разрыва с траекторией частиц, контактного разрыва с характеристиками. В случае взаимодействия ударной волны и характеристики, обработка пересечения зависит от семейств, к которым относится ударная волна и характеристика (ПХ). Например конфигурация, изображенная на рис. 3.12 может реализоваться, когда УВ (1-2, 1'-2') и характеристика (1-2) относятся к семейству С+, в этом случае используются два типа алгоритмов обработки. Первый – перенос характеристики в точку 1 слева от ударной волны, при этом характеристика меняет свой тип с С+ на С- (характеристики С+ слева от УВ, направленной вперед по времени не существует) и соответственно меняется скорость ее распространения. Также вместо характеристики С+ может быть зарождена траектория газа (у точки 1 меняется тип линии и скорость ее распространения задается равной скорости газа). Второй – характеристика С+ удаляется. Линия 1-2 на рис. 3.12. Может являться характеристикой С-. В этом случае выполняется стандартная перекидка параметров, описанная выше.

П	П, ОХ	У	У, ОХ
			
Рис.3.11	Рис. 3.12	Рис. 3.13	Рис. 3.14

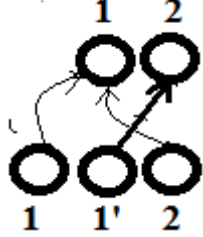
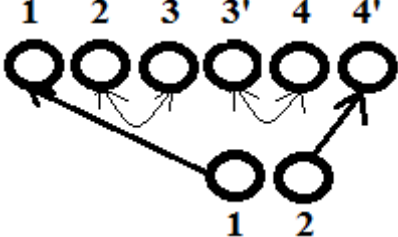
На рис. 3.13 представлен случай пересечения свободной границы и сеточной линии (ТГ, ТЧ, ХС-). При пересечении сеточной линией свободной границы расчетной области происходит удаление сеточной линии, при этом часть параметров удаляемой сеточной линии переходит в граничную точку. Например, если удаляемой сеточной линией является правая граничная траектория частиц (ПГЧ), то все параметры, характеризующие поле частиц переходят в точку на свободной границе и свободная граница, по сути, становится границей области распространения частиц. Если же правую свободную границу пересекает левая граничная траектория частиц, то в точке на свободной границе устанавливается признак отсутствия частиц.

При взаимодействии ударной волны (или контактного разрыва) со свободной границей (рис. 3.14. УВ С+ или КР (1,1') и ПСГ (2-2) линия 1 после обработки – ХС-) УВ (КР) удаляются (У), и на новом временном слое появляется новая расчетная точка - характеристика С- в случае правой свободной границы или характеристика С+ в случае левой свободной границы.

О	РР (ДВЕ УВ)	РР (ВР УВ)
		
Рис.3.15	Рис. 3.16	Рис. 3.17

На рис. 3.15 изображен случай отражения УВ+ от ПС. После отражения УВ становится волной семейства С- (УВ-), при этом параметры течения в точке 1 сохраняются (кроме скорости сеточной линии), а параметры в точках 1' и 2 и скорость УВ находятся из решения задачи об отражении УВ от стенки. В случае отражения

характеристики, характеристика меняет тип (C+ на C- или C- на C+) и скорость движения, остальные параметры остаются неизменными.

ВУВ	ЗУВ
	
Рис. 3.18	Рис. 3.19

В случае взаимодействия ударных волн и контактных разрывов между собой решается задача о распаде произвольного разрыва. При этом в качестве параметров слева от распада разрыва берутся параметры слева от левого из взаимодействующих разрывов, а в качестве параметров справа от распада разрыва берутся параметры справа от правого из взаимодействующих разрывов. Количество расчетных точек после расчета взаимодействия зависит от реализующейся при решении задачи о распаде разрыва конфигурации и начального перепада параметров. На рис. 3.16 представлен случай взаимодействия двух сильных разрывов (двух УВ или УВ и КР), заданных до взаимодействия точками (1, 1') и (2, 2'). В результате взаимодействия реализовалась конфигурация “Две УВ”, которой соответствует 3 сеточные линии (или 6 расчетных точек), отслеживаемых в последующие моменты времени: (1, 1') –УВ-; (2,2') – КР; (3,3') –УВ+, причем значения параметров течения в точках 1' и 2, а также в 2' и 3 совпадают. На рис. 3.17 представлен случай взаимодействия двух УВ или УВ и КР, заданных до взаимодействия точками (1, 1') и (2, 2'). В результате взаимодействия которых реализовалась конфигурация “Влево ВР, вправо УВ”, которой соответствует 6 сеточных линий (или 8 расчетных точек), отслеживаемых в последующие моменты времени: 1, 2, 3, 4 – ХС+, (5,5') – КР; (6,6') –УВ+, причем значения параметров течения в точках 4 и 5, а также в 5' и 6 совпадают. Четыре отслеживаемые характеристики в веере свидетельствуют о том, что веер средней интенсивности. Обычно число отслеживаемых после распада разрыва характеристик пропорционально перепаду давления в веере и колеблется в пределах от двух до двадцати.

Необходимо отметить, что в методике моделирования предусмотрены случаи вырождения ударных волн и контактных разрывов (рис. 3.18) в случае перепада

параметров на них менее 0.001 %. Ударные волны при этом вырождаются в характеристики, а контактный разрыв в траекторию газа.

Недопустимый с точки зрения используемой системы уравнений в частных производных случай пересечения характеристик одного семейства, при численной реализации используется для описания зарождения ударных волн в исходно безударном течении (рис.3.19). Здесь 1 и 2 характеристики семейства C^+ . Полученные в точках 1 и 2 параметры течения в результате решения конечно-разностной системы уравнений отличаются. Для разрешения возникшей кинематически несовместимой ситуации решается задача о распаде произвольного разрыва. В приведенном (рис. 3.19) случае образуется ударная волна, распространяющаяся вправо $УВ^+$ (4,4'), контактный разрыв (3, 3') и слабый веер волн разрежения, описываемый двумя характеристиками 1 и 2. Необходимо отметить, что в реальных задачах, моделируемых на подробных конечно-разностных сетках, перепад параметров в веере волн разрежения и на контактном разрыве часто бывает ниже порога вырождения, и они в расчете не учитываются.

Задача распада произвольного разрыва, в принципе, может быть использована для разрешения любого из отмеченных знаком ”-” взаимодействия между внутренними сеточными линиями из таблицы. Однако во избежании случаев потери массы газа, находящейся между исходно заданными сеточными линиями (траекториями газа), в случае обнаружения пересечения между траекториями и контактными разрывами алгоритм прерывается с соответствующей диагностикой.

3.6. Примеры численного моделирования нереагирующих течений

Рассматриваются тестовые задачи, иллюстрирующие используемую методику моделирования [60, 82, 226, 312]. Подробно приведены результаты численного решения ряда задач нестационарной газовой динамики нереагирующих сред [232, 253], таких как распад произвольного разрыва, задача о поршне, задача о движении снаряда в трубе, моделируется зарождение $УВ$ внутри исходно непрерывного потока. Приводится пример расчета, моделирующего аэродинамику холодного тракта ГПВРД в нестационарных условиях. Полученные результаты сравниваются с экспериментальными данными. Также рассматриваются примеры расчетов задач нестационарной газовой динамики реагирующих сред. Приводится сравнение результатов численного моделирования задачи о распространении стационарной $ДВ$ в водородно-воздушной горючей смеси с точным решением [79]. Представлены

результаты численного моделирования серии экспериментов [78, 80, 85, 204] по измерению задержек воспламенения, разбавленных аргоном водородно-кислородных смесей в УТ за падающими УВ [204]. Приводятся результаты моделирования [87] распространения цилиндрической ДВ в пульсирующем режиме в окрестности точки ЧЖ.

Задача о распаде разрыва

В качестве первой тестовой задачи рассматривается автомодельное течение, называемое задачей "о распаде произвольного разрыва" [107]. Аналитическое решение данной задачи состоит в зависимости от начальных данных из вееров волн разрежения, ударных волн и контактного разрыва, связанных друг с другом участками с постоянными параметрами. На $x-t$ диаграмме (рис. 3.20) приводится качественная картина течения в канале после распада рассматриваемого разрыва.

Были рассмотрены два тестовых примера со следующими параметрами слева и справа от точки распада P (в областях R и Q):

- тест 1, слева: скорость $u_R = 0$, давление $P_R = 1$, плотность $\rho_R = 1$, показатель адиабаты $\alpha_R = 1.4$; справа: скорость $u_Q = 0$, давление $P_Q = 0.1$, плотность $\rho_Q = 0.125$, показатель адиабаты $\alpha_Q = 1.4$;

- тест 2, слева: скорость $u_R = 0.5$, давление $P_Q = 1$, плотность $\rho_R = 1$, показатель адиабаты $\alpha_R = 1.4$; справа - скорость $u_Q = 0.5$, давление $P_Q = 0.1$, плотность $\rho_Q = 0.125$, показатель адиабаты $\alpha_Q = 1.4$.

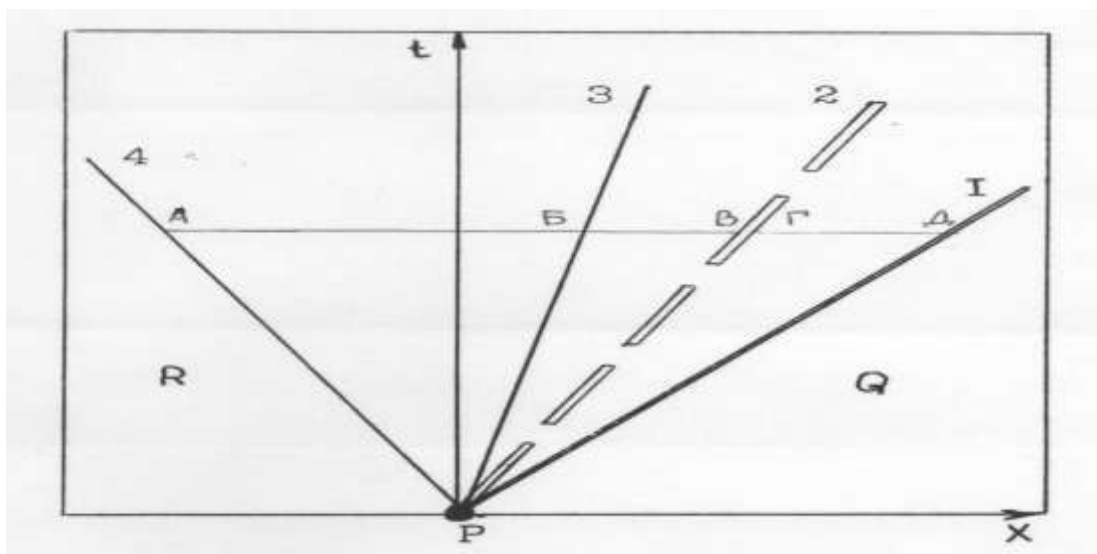


Рис. 3.20. $X-t$ - диаграмма. I - головная ударная волна, 2 - линия тангенциального разрыва, 3 - крайняя правая характеристика веера волн разрежения 4 - крайняя левая характеристика веера волн разрежения, R - левая область невозмущенных параметров, Q - правая область невозмущенных параметров.

Данная система тестов была предложена в работе [296] и получила название теста Сода. Расчеты проводились с помощью программ автора, реализующих сеточно-характеристические методы и программ И.Э Иванова, реализующих различные модификации метода Годунова [107, 170, 276, 277, 293, 294, 296, 304].

1. Послойный сеточно-характеристический метод (СХМ):

а) с использованием трехточечной интерполяции (СХМ1) - результаты расчетов по тесту 1 на рис.3.21а-3.23а и обозначены цифрой 1; -тесту 2 на рис. 3.21б-3.23б и обозначены цифрой 1;

б) с использованием четырехточечной интерполяции (СХМ2) - результаты расчетов по тесту 1 на рис.3.21а-3.23а и обозначены цифрой 2; -тесту 2 на рис. 3.21б-3.23б и обозначены цифрой 2;

в) с явным выделением ударной волны 1 и контактного разрыва 2 (СХМ3) - результаты расчетов по

- тесту 1 на рис. 3.21а-3.23а и обозначены цифрой 3,
- тесту 2 на рис. 3.21б-3.23б и обозначены цифрой 3.

- 2. Метод Годунова и его модификации :

а) схема Янга (СЯ) [126], результаты расчетов по

- тесту 1 на рис. 3.21а-3.23а и обозначены цифрой 4,
- тесту 2 на рис. 3.21б-3.23б и обозначены цифрой 4;

б) метод Годунова 2 порядка точности (МГ2), с модификацией Рое [293], результаты расчетов по

- тесту 1 на рис. 3. 21а-3. 2а3 и обозначены цифрой 5,
- тесту 2 на рис. 3.21б-3.23б и обозначены цифрой 5.

Целесообразно применять следующие критерии для описания согласования численных расчетов с аналитическим решением, которое на рис. 3.21-3.23 обозначено сплошной жирной линией без цифры.

- 1. Поведение численного решения в окрестности головной ударной волны (УВ):
 - а) "размазывание" УВ - количество точек расчетной сетки,
 - б) величина "выбросов" - немонотонности в поведении p , u , ρ в окрестности точки Д (максимальная относительная ошибка).
- 2. Степень точности выхода численного решения для p и u на аналитическое в зоне постоянных значений (БД) (величина средней относительной ошибки).
- 3. Поведение рассчитанного значения p на отрезке [БД]:

- а) отрезок ГД (справа от КР),
- б) отрезок БВ (слева от КР),
- в) размазывание контактного разрыва (количество точек расчетной сетки).
- 4. Поведение рассчитанных значений u , p , ρ на отрезке [АБ] (характер поведения численного решения в веере волн разрежения).
- а) величина выбросов (максимальная относительная ошибка),
- б) "размазывание" границ веера.
- Результаты расчетов по тестам 1 и 2, рассмотренные с точки зрения изложенных выше критериев, сведены в таблицу 3.2.

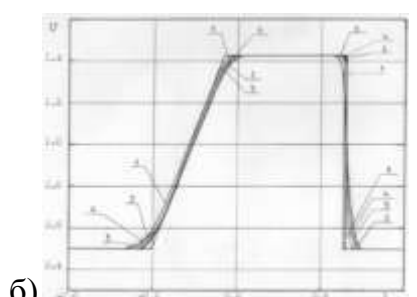
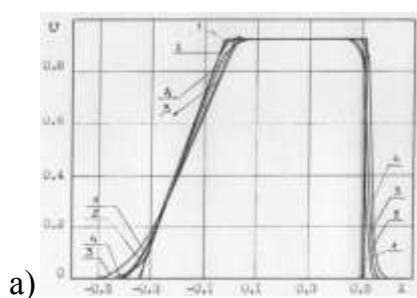


Рис. 3.21. Распределения скорости

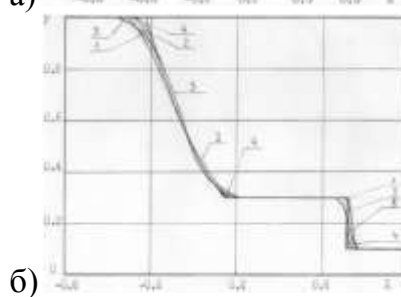
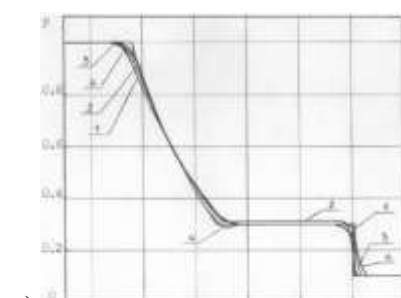


Рис. 3.22. Распределения давления

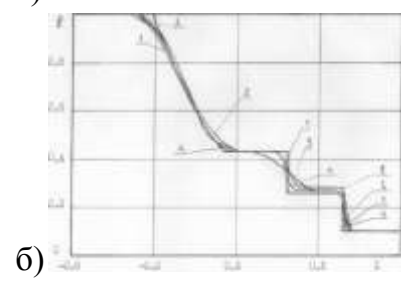
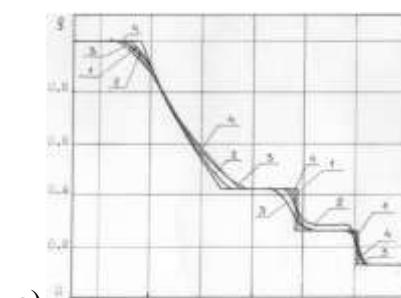


Рис. 3.23. Распределения плотности.

Сравнение методов показало, что на течениях идеального газа с постоянным показателем адиабаты СХМ3 и МГ2 дают очень близкие результаты. Причем с точки зрения точности расчета физических экстремумов рассмотренного течения и точного выделения их местоположения лучшим является СХМ3. СХМ2 дает результаты, сравнимые с СЯ, и, следовательно, также, в принципе, может быть использован для расчета разрывных течений. Использование МГ2 выглядит более предпочтительным при расчете течений идеального газа с постоянным показателем адиабаты, т. к. расчет слоя по МГ2 примерно в 5 раз быстрее чем по СХМ3. Однако, использование СХМ3 выглядит более предпочтительным при расчете течений газа с переменной теплоемкостью или с физико-химическими превращениями.

Таблица 3.2.

Метод	Критерии							
	1а точек	1б точек	2 %	3а %	3б %	3в %	4а %	4б точек
Тест № 1								
СХМ1	3	-	< 0.1	3.5	2.0	10	4.8 4.9.	Л 3 П 3
СХМ2	3	-	< 0.1	3.5	< 0.1	6	4.7 < 0.1	Л 3 П 1
СХМ3	1	-	< 0.1	< 0.1	< 0.1	1	< 0.1	Л 4 П 0
СЯ	3	-	< 0.1	< 0.1	< 0.1	10	< 0.1	Л 5 П 2
СР	3	-	< 0.1	< 0.1	< 0.1	6	< 0.1	Л 4 П 2
Тест № 2								
СХМ1	7	-	< 0.1	7	2.0	10	1.9	Л 4 П 5
СХМ2	4	-	< 0.1	< 0.1	< 0.1	7	< 0.1	Л 3 П 4
СХМ3	1	-	< 0.1	< 0.1	< 0.1	1	< 0.1	Л 5 П 3
СЯ	5	-	< 0.1	< 0.1	< 0.1	14	< 0.1	Л 4 П 6
СР	4	-	< 0.1	< 0.1	< 0.1	7	< 0.1	Л 4 П 4

Рассмотрим задачу о распаде произвольного разрыва в закрытом с обоих концов канале, заполненном не реагирующим газом. В начальный момент времени перегородка, отделяющая КВД и КНД, мгновенно удаляется.

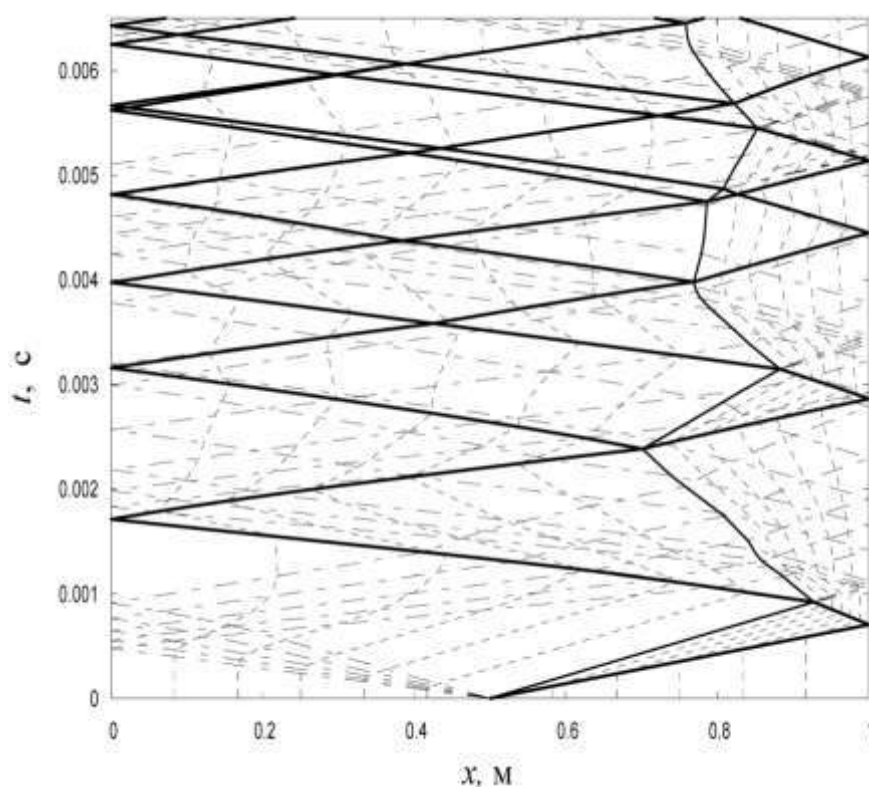


Рис. 3.24. Временная развертка: УВ — жирная сплошная линия; КР — тонкая сплошная линия; характеристики — крупный пунктир-точка; ТГ — мелкий пунктир.

В результате РР вправо распространяются УВ и КР, влево — ВВР. На рис. 3.24 представлена временная развертка процесса. За рассматриваемый промежуток времени УВ (жирные сплошные линии), КР (сплошная линия) и характеристики (крупный пунктир-точка) многократно взаимодействуют между собой и с закрытыми торцами канала. В качестве дополнительных полевых узлов используются ТГ (мелкий пунктир). Из временной развертки видно, что газ ускоряется, меняет направление движения, как УВ отражаются от стенок и взаимодействуют друг с другом, образуя дополнительные УВ и характеристики. На рис. 3.25 представлены графики изменения температуры вдоль КР: линии, помеченные (1), слева, (2), справа от КР. Многочисленные скачки соответствуют взаимодействиям КР с УВ.

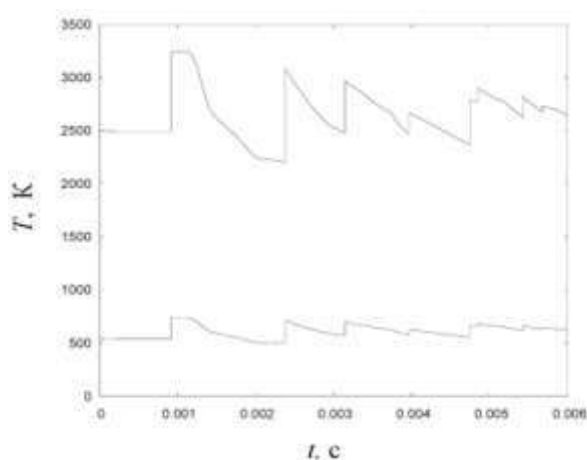


Рис. 3.25. Распределения температуры вдоль КР: верхняя кривая — слева от КР; нижняя кривая — справа от КР

Задача о сильном взрыве

Для выяснения точности используемого метода при расчете гладких течений с большими градиентами параметров, в качестве тестовой была рассмотрена автомоделная задача о сильном взрыве в газе без противодействия [161-163, 227].

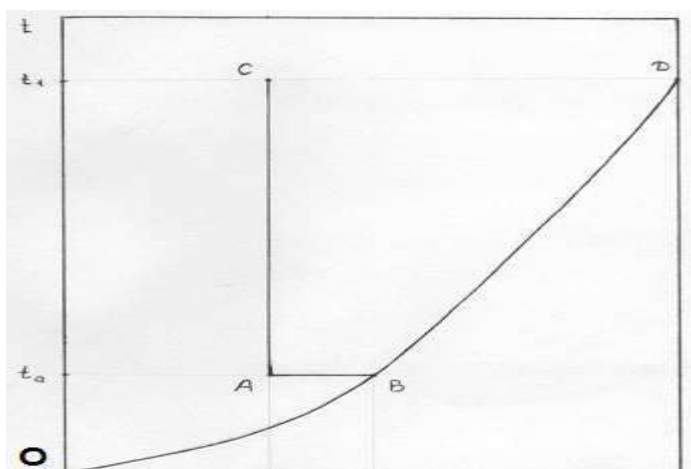


Рис. 3.26. Задача о сильном взрыве.
ОВД – головная ударная волна.
АВДС – расчетная область

Рассматривалось течение, возникающее после сильного взрыва в идеальном газе. Решались уравнения газовой динамики в области $ABCD$ (рис. 3.26). В качестве

начальных данных использовались распределения скорости, давления и температуры и значение скорости головной ударной волны, взятые из точного решения задачи о сильном взрыве в среде с начальной плотностью $\rho_0 = 1$, энергией взрыва $E_0 = 10^5$ Дж, показателем адиабаты $\kappa = 1.4$ [161, 162, 227] в момент времени: $u = u(t_A, X)$, $p = p(t_A, X)$, $T = T(t_A, X)$, $D = D(t_A)$. Граничные условия ставились на линии $X = X_A$, из точного решения задавались значения скорости и температура $u = u(t, X_A)$, $T = T(t, X_A)$ и на головной ударной волне задавались соотношения для сильной ударной волны $u = \frac{2}{\kappa + 1} D$, $\rho = \frac{\kappa + 1}{\kappa - 1} \rho_0$, $p = \frac{2}{\kappa + 1} \rho_0 D$.

Расчет проводился сеточно-характеристическим методом с явным выделением головной ударной волны (СХМЗ). На рис. 3.27 приведены зависимости относительной ошибки по давлению и скорости от продольной координаты, соответствующие 600-ому шагу по времени от начального распределения. Как видно, ошибка ведет себя достаточно монотонно и составляет менее 0.2% для случая со сферической симметрией. В случае течений с плоской и цилиндрической симметрией ошибка в 3-5 раза меньше. Расчеты проводились на 100 точках поперек слоя, в момент времени t_A на отрезке [АД] с равномерным шагом задавались 20 точек, а остальные расчетные точки добавлялись по мере распространения головной ударной волны. Необходимо отметить, что если при проведении расчетов на левой границе области из аналитического решения задавать все три газодинамические функции $u = u(t, X_A)$, $T = T(t, X_A)$, $p = p(t, X_A)$, то ошибки в определении параметров течения существенно возрастают. Начально-краевая задача в этом случае оказывается переопределенной, возмущения от левой границы проникают внутрь расчетной области и искажают картину течения.

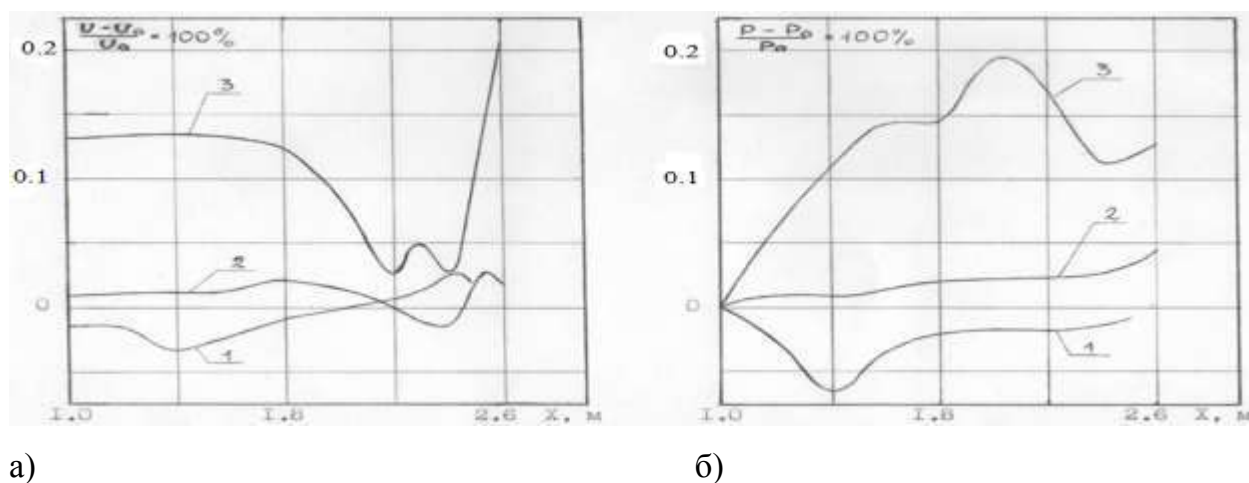


Рис. 3.27. Задача о сильном взрыве. Относительная ошибка по скорости (а) и давлению (б). 1 - $v=1$, $t=0.15$ мс, 2 - $v=2$, $t=0.24$ мс, 3 - $v=3$, $t=0.36$ мс

Задача о поршне

Рассмотрим задачу о равноускоренном движении поршня внутрь области, занятой покоящимся не реагирующим газом: $X(t) = \frac{Ct^2}{2}$, $C = 10000$. Картина течения на плоскости $x - t$ представлена на рис. 3.28. Расчетная сетка строится таким образом, что в момент времени $t = 0$ начальный слой состоит из 2-х узлов: точка на поршне и характеристика семейства C^+ , которая является правой границей расчетной области.

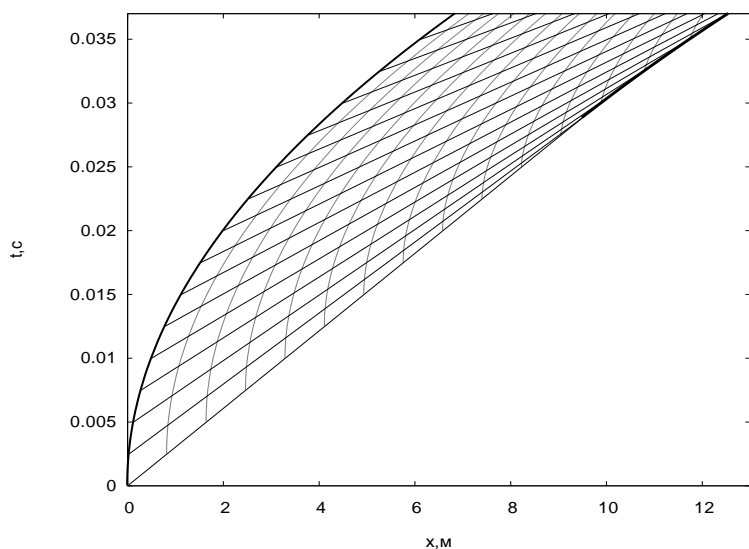


Рис. 3.28. $x - t$ диаграмма течения: правая жирная сплошная линия — УВ, левая жирная сплошная линия — граница поршня, тонкие сплошные линии — характеристики семейства C^+ , пунктирные линии — ТГ

Значения в них — $p = 1$ МПа, $T = 298,15$ К, $u = 0$. В процессе расчета добавляются новые расчетные узлы (каждые 0,0025 с), на границе поршня подводятся характеристики семейства C^+ , а на крайней правой характеристике — ТГ. Из рис. 3.28 видно, что в момент времени $t = 2,883 \cdot 10^{-2}$ с характеристики семейства C^+ сходятся в точке, образуя УВ. Этот момент времени может быть найден аналитически. Ниже представлены координаты (x_*, t_*) точки зарождения УВ [253]: $x_* = \frac{2}{\kappa+1} \frac{a_0^2}{C}$, $t_* = \frac{2}{\kappa+1} \frac{a_0}{C}$. Здесь a_0 — скорость звука, κ — показатель адиабаты.

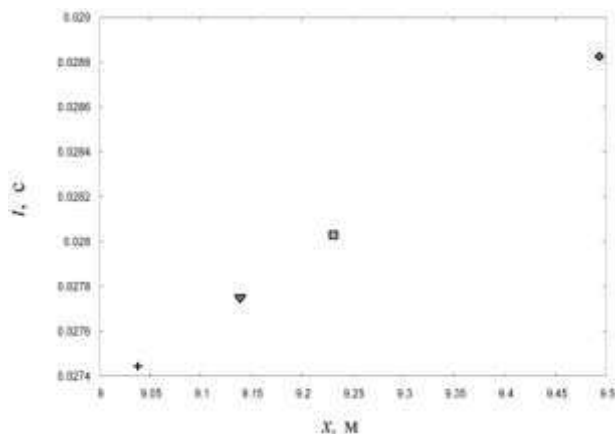


Рис. 3.29. Сравнение аналитических и численных координат точки зарождения УВ: + — координата, полученная аналитически; ◇ — подвод характеристик с периодом 0,0025 с; □ — с периодом 0,001 с; ▼ — с периодом 0,0005 с

Из рис. 3.29 видно, что чем гуще расчетная сетка, тем ближе координата точки зарождения УВ, полученная численно, к вычисленной аналитически.

Задача о снаряде

Следующей рассмотрим задачу внутренней баллистики о движении снаряда под действием газа в трубе постоянного сечения, закрытой с одного конца, с учетом противодействия p_{Π} . В момент времени $t = 0$ покоящийся в камере газ имеет начальное давление $p_0 = 10^8$ Па и температуру $T_0 = 1000$ К. Скорость газа на поршне равна скорости движения поршня, которая подчиняется обыкновенному дифференциальному уравнению: $m \frac{du}{dt} = S(p - p_{\Pi})$, здесь $S = \pi r^2$ - площадь поршня, $r = 0,06$ м - радиус поршня, $m = 1$ кг — масса поршня, p — давление на поршне со стороны газа в камере. Расчетная сетка строится таким образом, что в момент времени $t = 0$ на начальном слое заданы 103 расчетных узла: ЛС, 100 ТГ, характеристика C^- , “Поршень” (ПС, ЛС), характеристика C^+ . В процессе расчета на границе поршня каждые 10^{-4} с зарождаются узлы — характеристики C^- и C^+ (рис. 3.30). Из рис. 3.30 видно, что перед поршнем пересекаются характеристики одного семейства (C^+), автоматически решается задача Римана (см. раздел 3.5), и образуется УВ (жирная сплошная линия), которая движется перед снарядом.

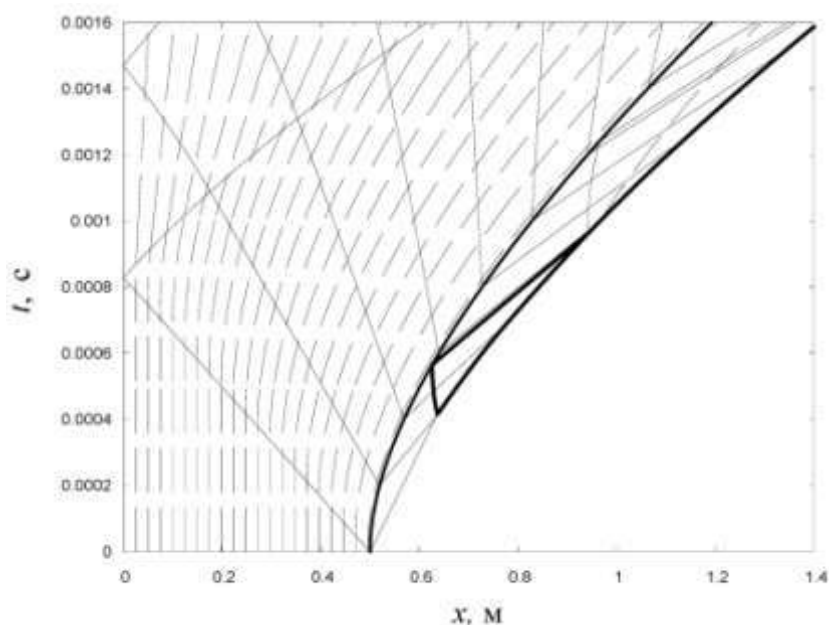


Рис. 3. 30. Временная развертка течения

Моделирование течения с цилиндрической симметрией

Рассматривается течение с цилиндрической симметрией ($F(x) = 2\pi x$), камеры высокого (КВД) и низкого (КНД) давления заполнены воздухом. Начальные данные в

КВД: $T_{\text{КВД}} = 3000 \text{ К}$, $P_{\text{КВД}} = 10000000 \text{ Па}$, $u = 0$; в КНД: $P_{\text{КНД}} = 101325 \text{ Па}$, $T_{\text{КНД}} = 298,15 \text{ К}$, $u = 0$. В начальный момент времени происходит распад разрыва при $x = 0,1 \text{ м}$. Влево распространяется ВВР, вправо — УВ. Временная развертка течения приведена на рис. 3.31. Через некоторое время в КНД образуется висячая УВ (рис. 3.32) вследствие пересечения характеристик одного семейства, которая распространяется в направлении левой границы расчетной области, в качестве которой используется жесткая стенка, отстоящая на 1 см от оси симметрии. Далее происходит серия взаимодействий УВ со стенкой и КР, в результате образуется несколько УВ, которые распространяются вслед за головной УВ (рис. 3.31). Видно, что КР со временем замедляется и располагается практически параллельно оси симметрии. При численном моделировании границами расчетной области является ЛС и головная УВ, используется подвижная разностная сетка, состоящая из ТГ, траекторий УВ, КР и характеристик. Всего в расчете задействовано 10000 ТГ, которые «зарождаются» на головной УВ каждые 10 мкс (на рис. 3.22 – 3.23 чтобы не загромождать графики они не изображены).

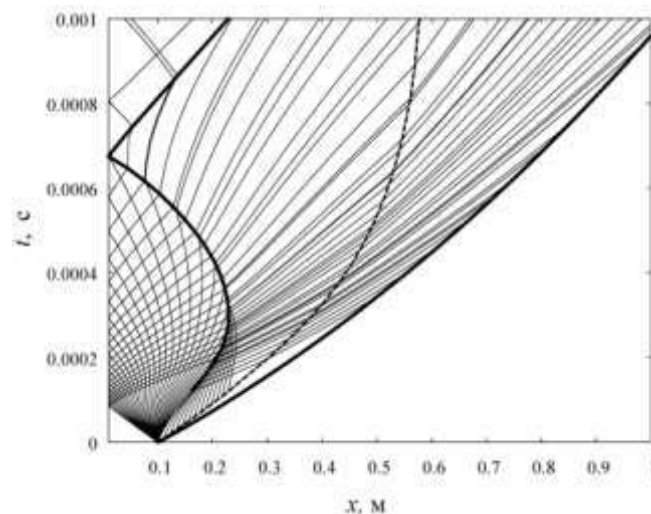
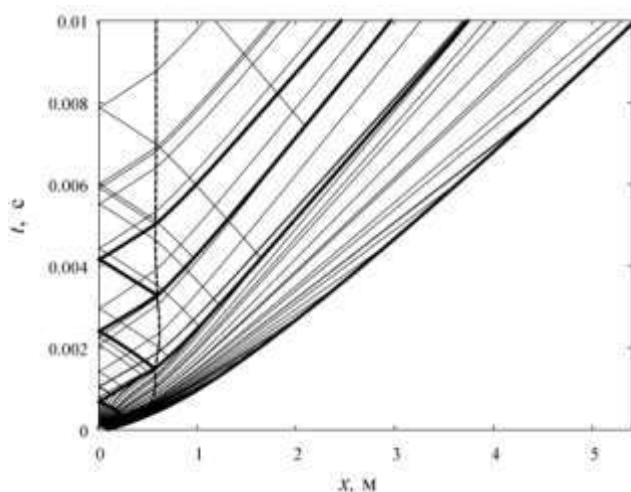


Рис. 3.31. Временная развертка течения

Рис. 3.32. Образование висячей УВ

Необходимо отметить, что рассматриваемая в работе методика моделирования позволяет "включать" и "выключать" из расчета необходимые типы линий. Например, из рис. 3.31 можно видеть, что после образования висячего скачка прекращается подвод характеристик семейства C^- с КР.

На рис. 3.33 представлены распределения температуры и давления соответственно в момент времени $t \approx 0,0013 \text{ с}$. В данном случае из временной развертки можно видеть, что скачок температуры на графике (рис. 3.33а) при $x \approx 0,43$ соответствует перепаду параметров на УВ, а при $x \approx 0,58$ — перепаду температуры на

КР. Скачок при $x \approx 1,22$ соответствует перепаду параметров на головной УВ. На рис. 3.34 приводятся распределения температуры и давления в различные моменты времени. Из рис. 3.34 видно, что с течением времени происходит постепенное вырождение УВ в звуковую волну.

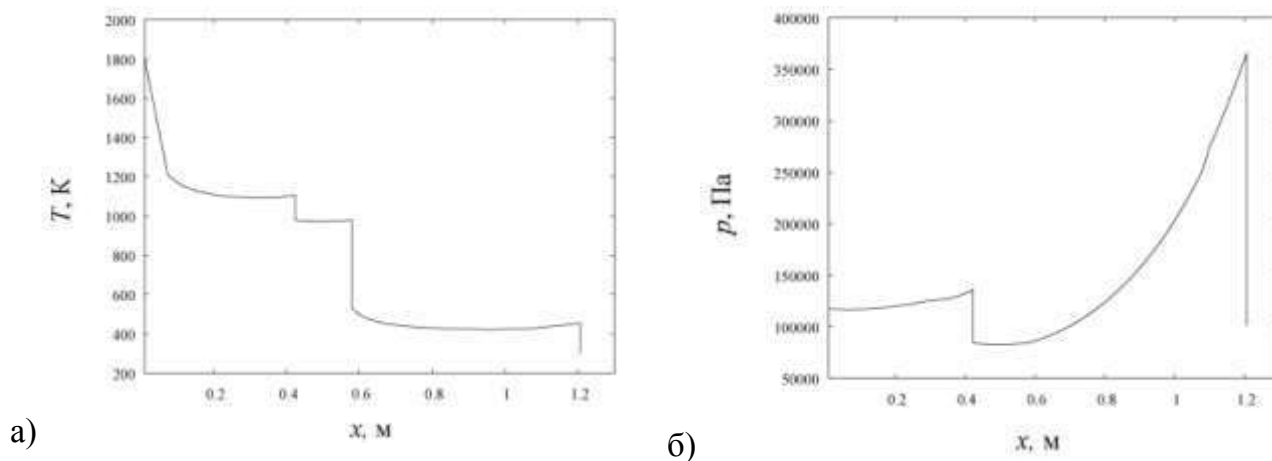


Рис. 3.33. Распределение температуры (а) и давления (б) в момент времени $t \approx 0,0013$

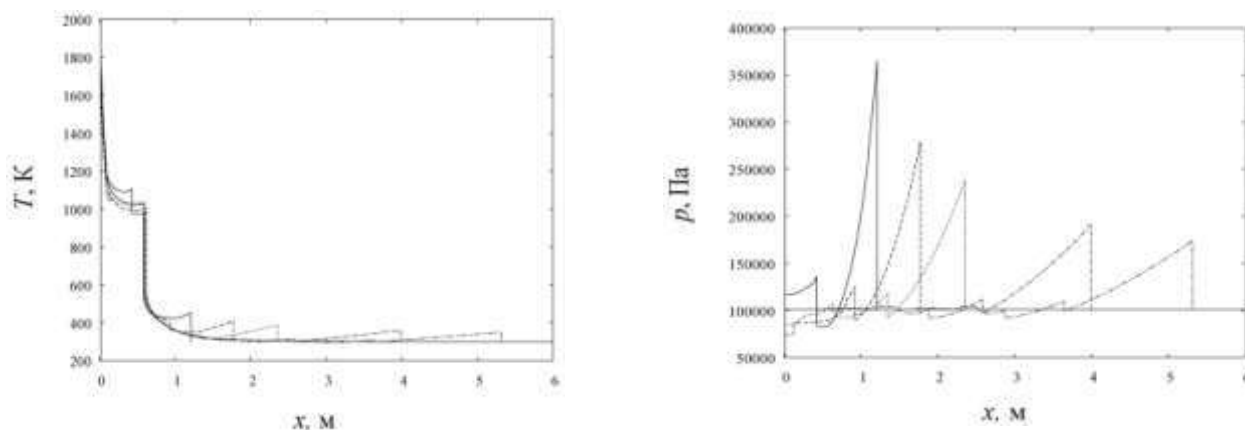


Рис. 3.34. Распределения температуры(а) и давления(б) в различные моменты времени

Моделирование течения в холодном тракте ГПВРД

В данном разделе описанная выше методика используется для исследования структуры сверхзвукового течения в плоском канале [97]. Исследовались процессы формирования набегающего потока на модели элементов гиперзвуковых летательных аппаратов [165, 166]. Схематическое изображение установки ГУАТ ИПМех РАН представлено на рис. 3.35. Применительно к рассматриваемой методике интерес представляют экспериментальные данные по ударно – волновому взаимодействию в протяженных внутренних каналах, моделирующих аэродинамику холодных трактов ГПВРД в нестационарных условиях. В частности, для оценки влияния входного отверстия соплового блока на ударно – волновое взаимодействие была проведена серия экспериментов с закрытым входным отверстием соплового блока [165].

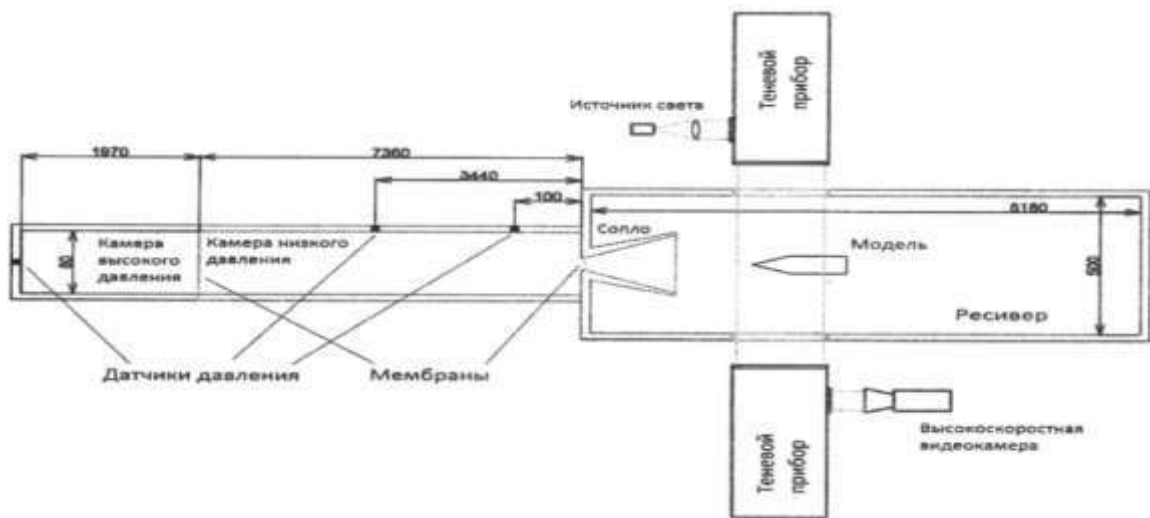


Рис. 3.35. Схематическое изображение установки ГУАТ ИПМех РАН (размеры секций указаны в мм) [165].

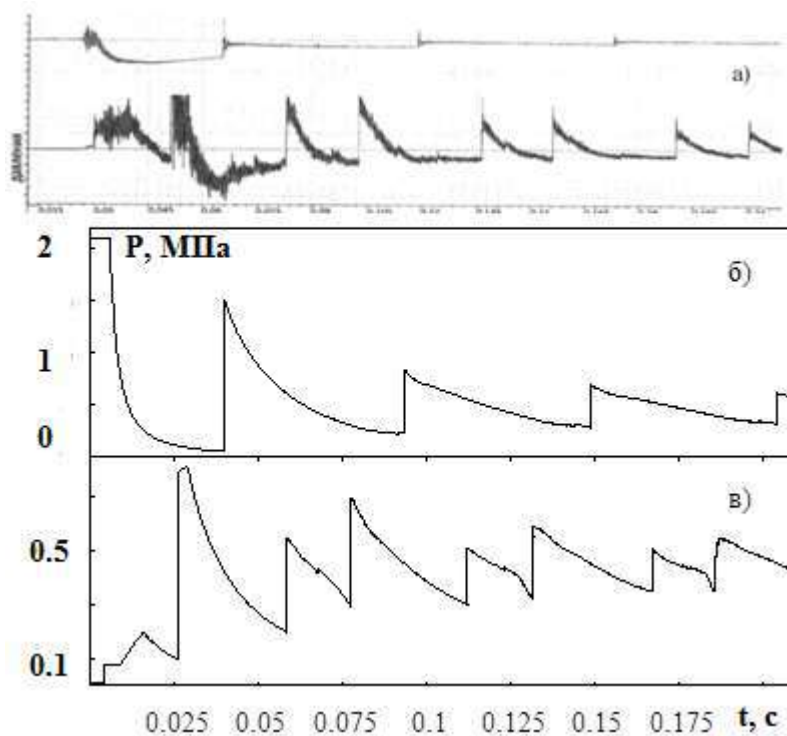


Рис. 3.36. Сравнение результатов эксперимента [165] (а) с результатами численного моделирования (б,в)

В качестве рабочего и толкающего газа использовался воздух, давления в секциях на момент раскрытия мембраны были 2.1 МПа и 0.1 МПа, датчики давления располагались на левом торце КВД и в середине КНД. На рис. 3.36 представлено сравнение типичных для этой серии экспериментов показаний датчиков давления с результатами численного моделирования. На рис. 3.36а можно видеть показания датчиков давлений, расположенных в торце КВД (верхняя кривая) и середине КНД (нижняя кривая). Графики 3.36б, 3.36в демонстрируют результаты численного

моделирования течения в установке: график давления на ЛС, что соответствует показаниям датчика в торце КВД, и график давления в середине КНД. Рассматриваемая методика моделирования позволяет "снимать" показания датчиков. Для этого в расчетную сетку вводятся фиксированные узлы в координатах, соответствующих расположению датчиков давления по длине установки.

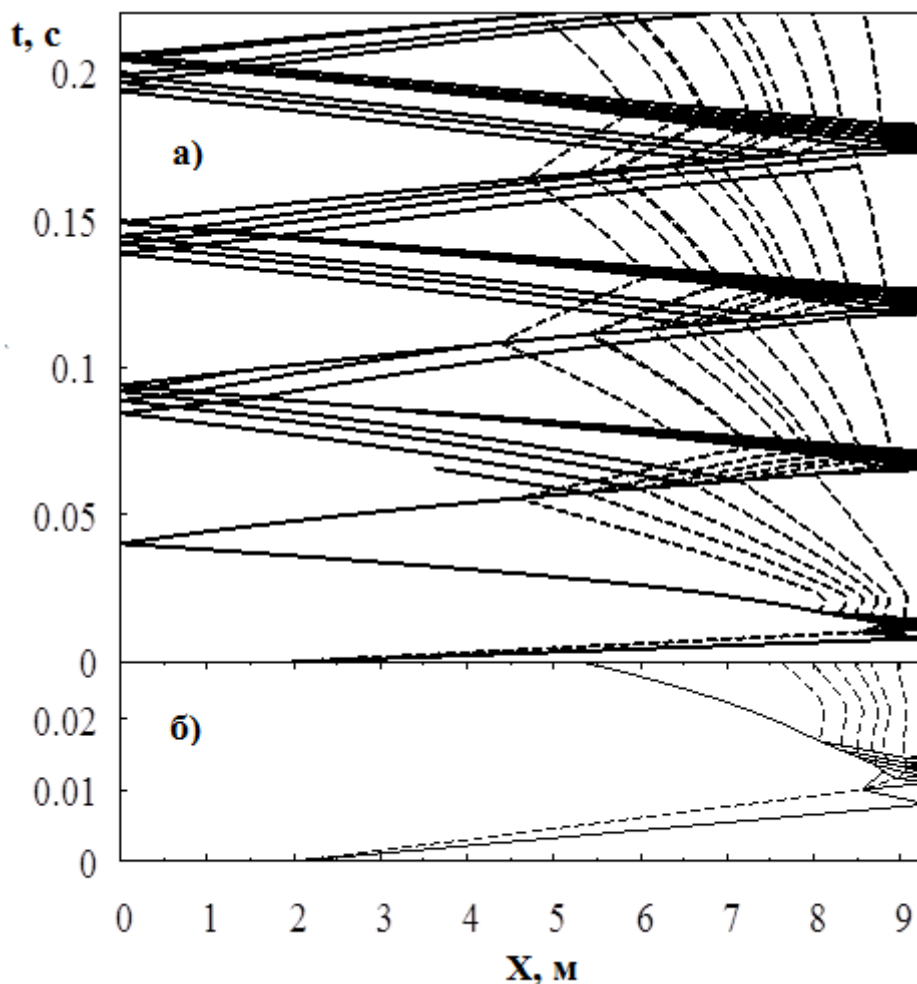


Рис. 3.37. Временная развертка течения (а) и ее увеличенный фрагмент (б)

Для экспериментаторов представляла интерес картина течения, возникающая у правого закрытого торца установки. Из рис. 3.37 видно, что в районе закрытого соплового блока реализуется сложная ударно – волновая структура. 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. 3.36).

3.7. Примеры численного моделирования химически реагирующих течений

Численное моделирование детонации в ударной трубе

Экспериментальному и расчетно-теоретическому исследованию детонации газовых, газокапельных и твердых взрывчатых веществ посвящено большое количество статей и монографий [18, 19, 24, 31, 37, 48-50, 58,82-93, 132-141, 161, 162, 175-180, 186-191, 193, 217, 231, 241, 245, 247,251- 254, 258, 262, 270, 274, 280, 281, 289, 290, 298,300].

Описанные в настоящей главе вычислительные методики использовались для анализа результатов экспериментов, которые проводились на ударной трубе (УТ) в НИИМех МГУ Павловым В. А. Подробное описание установки и проведенных экспериментов приводятся в [204]. Данная задача также будет рассмотрена в главе 3. Опишем качественную картину моделирования эксперимента, восстановленную в результате численного моделирования. В экспериментах рассматривалась горючая смесь водорода с кислородом, разбавленная аргоном. Расчетным путем [78, 95, 226] получена картина течения в УТ, которая состоит из КВД длиной 1 м и КНД длиной 4,5 м, разделенных диафрагмой (рис. 3.38). КНД наполнялась горючей смесью водорода с кислородом, разбавленной аргоном, а КВД - гелием (He).

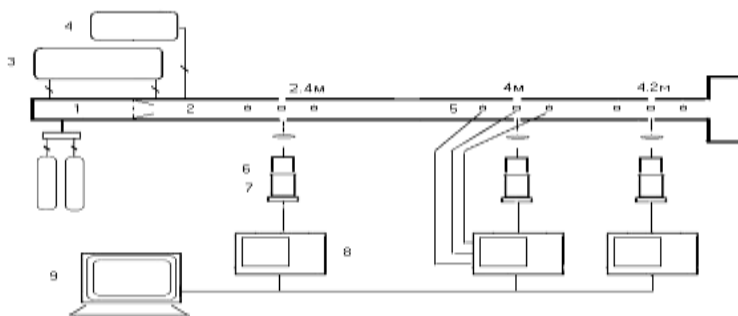


Рис. 3.38. 1- КВД; 2 – КНД; 3-система откачки; 4- смеситель; 5-пьезодатчики; 6- спектрограф; 7- фотоумножитель; 8- осциллограф; 9-компьютер

Для моделирования химических превращений в горючей смеси использовалась смесь, включающая 10 компонентов: H_2 , OH , H_2O , O_2 , O_3 , H_2O_2 , HO_2 , H , O , Ar , теплофизические свойства которых заимствовались из [121], и кинетический механизм, состоящий из 45 обратимых реакций [140]. Рассмотрим результаты численного моделирования экспериментов № 32 из [204]. Давление в КВД: $p_{КВД} = 390474$ Па; в КНД: $p = 12159$ Па, $T = 298,15$ К, смесь, состоящая из 4 % водорода, 4 % кислорода и 92 % аргона. На рис. 3.39 представлена временная развертка процесса. В начальный момент времени мембрана, разделяющая камеры высокого и низкого давлений, разрывается, происходит распад разрыва (РР). Образуются: УВ, которая распространяется по КНД, КР, отделяющий инертный газ от горючей смеси, и ВВР,

распространяющийся в инертном газе. Температура за головной УВ составляет 1302 К, что превосходит температуру самовоспламенения горючей смеси. При $t \approx 0,00045$ с смесь воспламеняется на КР, образуется волна горения, которая при $t \approx 0,00095$ с догоняет головную УВ. В результате распада разрыва головная ударная волна ускоряется и образуется нестационарная пересжатая ДВ. По мере своего продвижения по УТ ДВ ослабевает и к моменту времени $t \approx 0,0025$ с выходит на режим распространения, близкий к стационарному. Таким образом, временную развертку течения можно условно разделить на три области: 1) от начального РР до образования нестационарной пересжатой ДВ; 2) нестационарная пересжатая ДВ; 3) стационарная пересжатая ДВ.

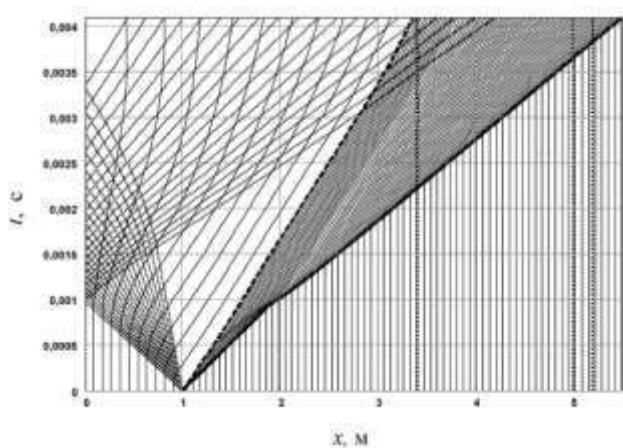


Рис. 3.39. Развертка течения при численном моделировании эксперимента № 32 [204]

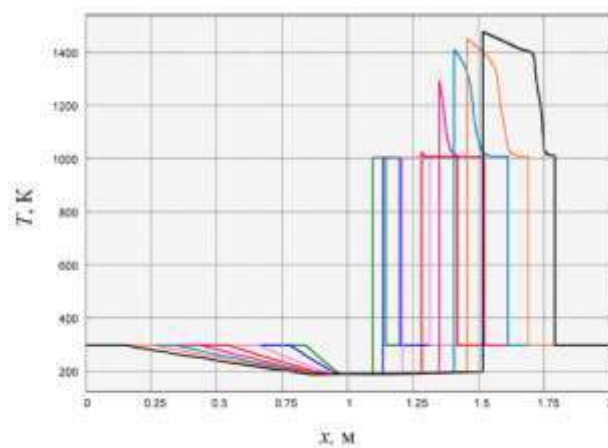


Рис. 3.40. Распределения температуры при воспламенении горючей смеси при образовании волны горения

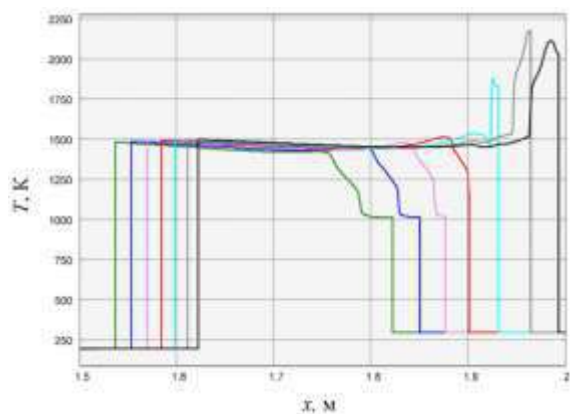


Рис. 3.41. Распределение температуры в зоне образования нестационарной пересжатой ДВ

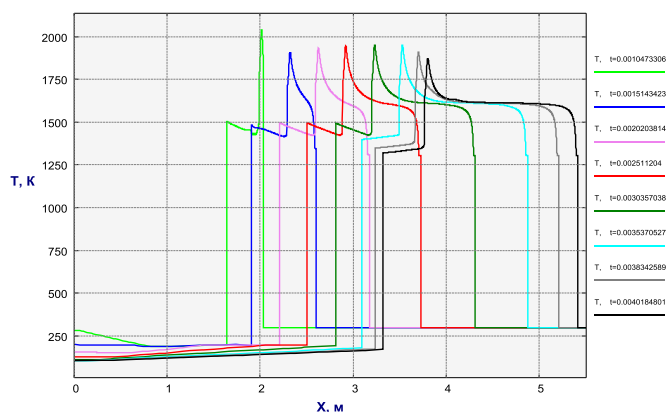


Рис. 3.42. Распределение температуры в зоне образования стационарной пересжатой ДВ.

Распределения температуры в первой области в различные, последовательно идущие моменты времени (моменты времени могут быть идентифицированы по

временной развертке течения (рис.3.39), $t = 0,0001552, 0,0002143, 0,0003313$ с), изображены на рис. 3.40. Из графиков видно, что сначала распределения температуры близки к наблюдаемым при РР в нереагирующем газе, а именно: участок постоянных параметров перед УВ, скачек температуры на УВ, участок постоянных параметров между УВ и КР, скачек температуры на КР, участок постоянных параметров между УВ и ВВР, монотонный рост температуры в ВВР, участок постоянных параметров между ВВР и левым торцом установки. Далее наблюдается воспламенение горючей смеси на КР при $t \approx 0,00045$ с и образование волны горения между КР и УВ. Распределения температуры во второй области приведены на рис. 3.40-3.41. Хорошо виден процесс взаимодействия волны горения с УВ ($t = 0.00097$ с) и момент образования нестационарной пересжатой ДВ $t = 0,00097 - 0,001$ с, который сопровождается резким ростом температуры от 1500 до 2200 К (рис. 3.41). Этому моменту времени соответствует ускорение головной УВ (излом на траектории УВ, рис. 3.39). Распределения температуры в третьей области изображены на рис. 3.42. На последовательности графиков температуры можно наблюдать формирование стационарной ДВ, в частности, видна структура, характерная для стационарной ДВ, а именно: скачек температуры на УВ с 298.15 до 1310 К, небольшой участок постоянных параметров (соответствует задержке воспламенения в горючей смеси), резкий рост температуры (соответствует собственно воспламенению горючей смеси) и участок параметров близких к постоянным (соответствует переходу системы к состоянию термодинамического равновесия). Необходимо отметить, что во время эксперимента для корректного измерения времени задержки воспламенения необходимо убедиться, что скорость головной УВ не изменяется во времени.

3.8. Примеры численного моделирования многофазных реагирующих течений

Распад двух разрывов в двухфазной среде

При моделировании двухфазных течений с ударными волнами и контактными разрывами могут возникать пересечения траекторий частиц одной и той же начальной фракции между собой [60]. Например, при течении в ударной трубе это связано с тем, что частицы дисперсной фазы по-разному разгоняются газами, находящимися между ударной волной и контактными разрывом, контактными разрывом и закрытым торцом. Как правило, газ слева от контактного разрыва более плотный и поэтому быстрее разгоняет

частицы. В результате этого, если рассматривать $X-t$ диаграмму течения в ударной трубе, траектории частиц, находящихся дальше от открытого торца ударной трубы в начальный момент времени, пересекают траектории исходно более близких частиц. Однако это не означает, что частицы сталкиваются. В главе 1 уже отмечалось, что в настоящей работе рассматриваются такие двухфазные течения, в которых объем, занимаемый частицами, много меньше объема, занимаемого газом, поэтому вероятность столкновения частиц мала. Таким образом, ситуация пересечения траекторий частиц на $X-t$ диаграмме соответствует тому, что частицы, занимавшие в начальный момент времени элементарные объемы ΔV_1 и ΔV_2 , в момент пересечения занимают общий объем ΔV_3 . Таким образом, в некоторой точке пространства оказываются частицы с различными массами, скоростями и температурами. Алгоритм корректного расчета областей в которых траектории частиц пересекаются приведен в разделе 3.2.

Рассмотрим течение в закрытом с обоих концов канале постоянного сечения. Канал состоит из трех секций, отделенных друг от друга. Первая - заполнена азотом под давлением 50 атм, вторая-двухфазной смесью азота и частиц хрома при нормальном давлении, третья - азотом при давлении 10 атм; температура газа и частиц во всех секциях одинаковая и равна 300 К, скорость нулевая. В начальный момент времени перегородки мгновенно удаляются и по двухфазной смеси навстречу друг другу распространяются ударные волны (рис. 3.43). В средней камере образуются два потока частиц, направленных навстречу друг другу. Первый состоит из частиц, через которые прошла левая ударная волна, второй – из частиц, через которые прошла правая ударная волна (рис.3.43). После встречи ударных волн в средней камере реализуется течение с большим числом ударных волн и контактных разрывов, которые явно выделяются в расчете, однако, чтобы не загромождать рис. 3.43, на нем не приводятся. Потоки частиц смыкаются, и в середине второй области образуется складка, т.е. траектории частиц пересекаются. На рис. 3.44 представлена эволюция во времени лагранжевой координаты $R_s(x)$ (число частиц, содержащихся в начальный момент времени между правой граничной траекторией и текущей координатой x). Однозначная в начальный момент функция становится трехзначной вскоре после взаимодействия ударных волн (кривые 3-5 рис. 3.44). Расчет зоны пересечения траекторий частиц проводится с первым порядком точности, т.к. граница складки, которая является линией разрыва правых частей уравнений газовой динамики, явно не выделялась.

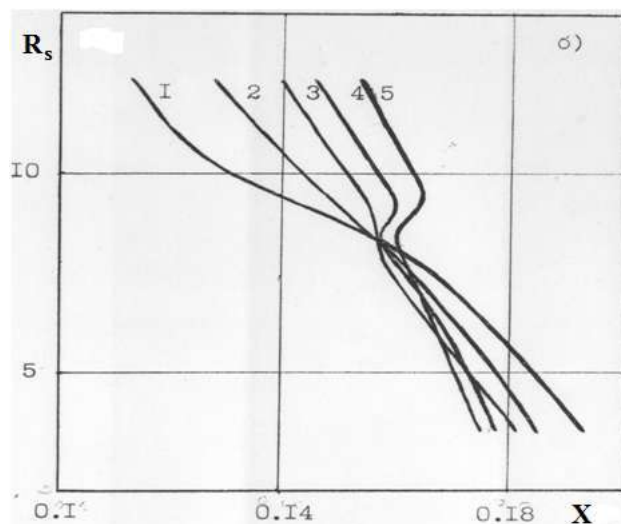
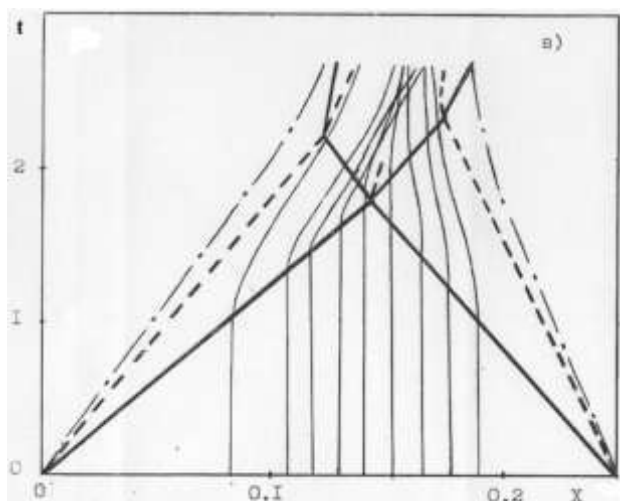


Рис. 3.43. Временная развертка течения. Рис. 3.44. Образование складки.

Численное моделирование течения в установке детонационно-газового напыления

Задача моделирования двухфазного течения в установке детонационно-газового напыления подробно рассмотрена в [60]. В настоящем разделе кратко приведем некоторые результаты, которые иллюстрируют разработанные в главе вычислительные алгоритмы применительно к численному моделированию течений в технологических установках, основу процесса в которых составляют высокоскоростные двухфазные нестационарные потоки.

Рабочий цикл установки (выстрел) для детонационно-газового напыления состоит из следующих стадий :

- продувка ствола инертным газом;
- заполнение ствола взрывчатой смесью и напыляемым порошком;
- инициирование детонации и распространение детонационных волн по горючей смеси;
- истечение смеси продуктов детонации и порошка через открытый конец ствола в атмосферу.

Стабильность воспроизведения в сериях выстрелов параметров частиц напыляемого порошка, вылетающих из ствола установки, во многом зависит также от стабильности и надежности работы систем продувки ствола инертным газом, заполнения ствола взрывчатой смесью и подачи порошка. Синхронизация работы систем продувки инертным газом, заполнения взрывчатой смесью и подачи порошка сама по себе еще не обеспечивает стабильности работы установки в сериях выстрелов. Дополнительным условием обеспечения стабильности является воспроизводимость распределения параметров двухфазного потока по длине ствола к моменту инициирования детонации в каждом последующем выстреле.

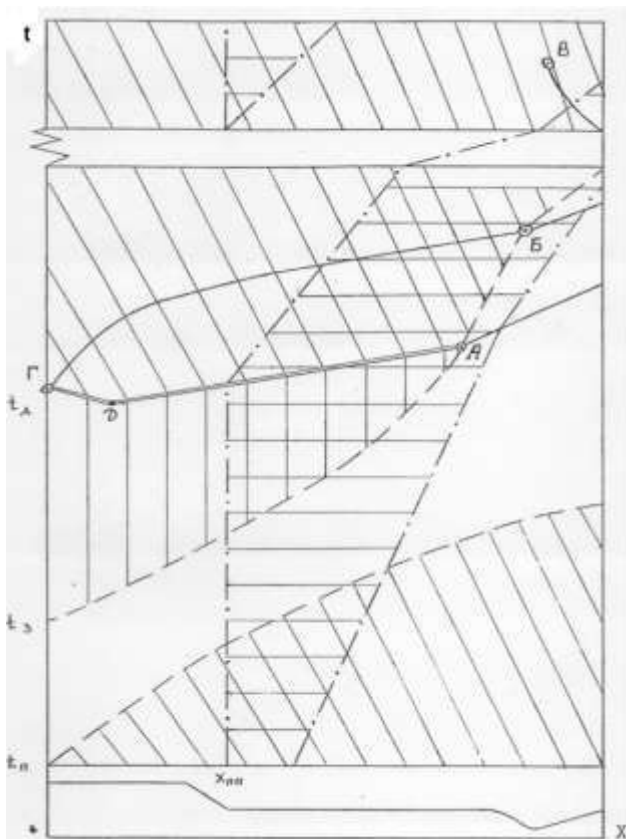


Рис. 3.45. Качественная картина течения в установке детонационно-газового напыления.

Для проверки выполнения данного условия необходимо рассчитывать сразу несколько последовательных полных циклов работы установки. Типичная картина течения в стволе установки детонационно-газового напыления, которая легла в основу используемой модели течения, представлена на рисунке, в нижней части которого схематически изображен профиль установки. Предполагается, что продувка начинается в момент времени t_{II} , что весь ствол на этот момент заполнен продуктами детонации от предыдущего выстрела. Штриховой линией, начинающейся в точке с координатами (X_T, t_{II}) , обозначена траектория контактного разрыва, отделяющего инертный газ, используемый для продувки, от продуктов детонации. Заполнение ствола взрывчатой смесью начинается в момент времени t_3 . Штриховой линией, начинающейся в точке с координатами (X_T, t_3) , обозначена траектория контактного разрыва, отделяющего взрывчатую смесь от инертного газа. Инициирование детонации происходит в момент времени t_D в точке X_D , после чего в обе стороны от X_D точки распространяются детонационные волны, обозначенные двойными сплошными линиями. Левая детонационная волна добегает до закрытого торца и отражается в виде ударной волны, которая распространяется по продуктам детонации (сплошная кривая, начинающаяся в точке Γ). Правая детонационная волна догоняет в точке A контактный разрыв, разделяющий взрывчатую смесь и инертный газ, вырождается в ударную (сплошная

кривая, начинающаяся в точке *A*) и выходит из ствола через его открытый торец. Отраженная ударная волна, образовавшаяся в результате вырождения левой детонационной волны у закрытого торца, догоняет контактный разрыв, разделяющий продукты детонации и инертный газ, в точке *B*, взаимодействуя с ним, изменяет свою интенсивность и выходит из ствола через его открытый торец. Истечение продуктов детонации начинается после того, как контактный разрыв, разделяющий продукты детонации и инертный газ (штриховая кривая *AB*), выходит из ствола через его открытый торец. На заключительных этапах стадии истечения продуктов детонации давление в стволе может упасть настолько, что в расширяющейся части насадка может образоваться мостообразный скачек уплотнения, который по мере дальнейшего понижения давления в стволе будет двигаться от выходного сечения соплового насадка в сторону его минимального сечения. Далее начинается режим дозвукового истечения, и появляется возможность проникновения внешних возмущений в ствол, причем скорость истечения может замедлиться до нуля, что приводит к затеканию смеси неопределенного состава в канал. Может наблюдаться режим попеременного втекания и вытекания газа из канала. Дозвуковой режим истечения сохраняется, по-видимому, и в ходе продувки и заполнения ствола взрывчатой смесью вплоть до момента времени, который соответствует выходу из насадка ударной волны, образовавшейся в результате вырождения правой детонационной волны. Работа системы подачи порошка как правило не синхронизирована с рабочим процессом во всей установке, и порошок подается в ствол в течение всего того времени, пока давление транспортирующего газа в магистралях подачи порошка превышает давление газов в стволе в сечении подачи порошка X_{III} . После резкого возрастания давления в стволе, вызванного прохождением детонационной волны, подача порошка автоматически прекращается, а после последующего понижения в конце стадии истечения снова возобновляется. Область распространения частиц при такой работе пневмодозатора ограничена на плоскости ($X-t$) сечением X_{III} выходным сечением X_a и двумя предельными траекториями, которые на рисунке нанесены штрих-пунктиром. Область распространения частиц заштрихована горизонтальными линиями, взрывчатой смеси - вертикальными, продуктов детонации - наклонными, а область распространения инертного газа осталась незаштрихованной. Необходимо отметить, что в отсутствии соплового насадка, мостообразный скачек не

возникает и режим дозвукового истечения начинается сразу же после того, как давление в выходном сечении сравнивается с атмосферным.

При построении математической модели двухфазного течения в установке детонационно-газового напыления были использованы ряд упрощающих предположений [60]. Для исходной горючей смеси, газов продувки и атмосферного использовались калорическое и термическое уравнения состояния идеального газа с различными постоянными показателями адиабаты и молекулярными весами. Для моделирования продуктов детонации используется равновесное приближение, предложенное в [200]. В расчетах детонационная волна моделируется как ударная, а вместо условия Чепмена-Жуге используется соотношение вдоль характеристики семейства C^+ . Для описания трения и теплообмена газов со стенками каналов используются полуэмпирические соотношения, приводимые в [106]. При детонационно-газовом напылении за детонационной волной реализуются температуры (3000 - 4500 К), существенно превышающие температуры плавления материалов, обычно используемых при напылении частиц. Считается, что плавление протекает равновесно, для нахождения температуры частиц используется модель (Глава 1), в которой учитывается случай, когда частица состоит из двух металлов.

При задании граничных условий, моделирующих работу систем продувки и заполнения канала ствола взрывчатой смесью, предполагается, что при открытии клапана, разделяющего подводящие магистрали и полость ствола, в начальном сечении расчетной области происходит распад разрыва в двух различных, соприкасающихся газах, имеющих различные давление и температуру. Давление и температура подаваемого газа слева от разрыва, полагаются равными его давлению и температуре в подводящих магистралях или в ресивере. Если контактный разрыв, полученный в результате решения задачи Римана, распространяется внутрь расчетной области то соответствующая стадия работы установки считается запущенной. В последующие моменты времени предполагается, что в подводящих магистралях сохраняются полная энтальпия, энтропия и элементный состав. В каждый последующий момент времени в начальном сечении решается задача о распаде разрыва (аналогичная той, что решается в момент открытия клапана) и, если контактный разрыв направлен вне расчетной области, то в последующие моменты времени при расчете точки во входном сечении используется условие “непротекания”. Вышеописанные граничные условия на левой

границе расчетной области $X = X_T$ используются сначала для моделирования стадии продувки ствола, а затем и стадии заполнения канала взрывчатой смесью. После прекращения подачи взрывчатой смеси (т.е. при $t > t_D$) в качестве граничного условия на левой границе используется условие "непротекания". Стадия инициирования детонации в разработанной модели описывается следующим образом. В момент времени инициирования детонации в сечении инициирования разрешаются соотношения типа Ренкина-Гюгонио с замыкающим условием Чепмена-Жуге. В качестве значений скорости, давления и температуры до детонационной волны используются текущие значения соответствующих параметров. Для нахождения параметров газа за детонационной волной используется условие термодинамического равновесия продуктов детонации [200]. Для расчета параметров газа на левой границе в момент инициирования детонации решается автомодельная задача о плоской детонационной волне, распространяющейся по газу с постоянной скоростью Чепмена-Жуге [232].

Работа системы подачи частиц моделируется с помощью постановки граничных условия в сечении подачи частиц, а именно: $m_s = m_s^0, u_s = u_s^0, T_s = T_s^0, F n_s m_s u_s = G_s(t)$ ($G_s(t)$ - массовый расход). Постановка граничных условий на границе канал-атмосфера подробно приведена в [60] и частично в главе 3. На рис. 3.46 и 3.47 изображены $X-t$ - диаграммы первого и второго рабочих циклов установки, соответственно, графики распределения скорости и давления вдоль ствола в момент инициирования детонации приведены соответственно на рис. 3.48. Совместный анализ соответствующих графиков и диаграммы показывает, что процессы продувки ствола и его заполнения взрывчатой смесью перед первым выстрелом протекают следующим образом. После открытия клапана продувки у закрытого торца ствола образуется ударная волна, которая распространяется по покоящемуся атмосферному газу, заполняющему ствол, в направлении к его открытому торцу (сплошная кривая, выходящая из точки $X=0, t=t_{II}$). Следом за ударной волной, с существенно меньшей скоростью, движется контактный разрыв, разделяющий газы продувки и атмосферный, заполняющий ствол (штриховая линия выходящая из точки $(0, t_n)$). При этом скорость газа продувки на входе в ствол сначала нарастает, а затем спадает до нуля. После этого момента, подача продуваемого газа в ствол прекращается на некоторое время до тех пор, пока давление у закрытого торца не станет меньше давления продувки в подводящих магистралях. После этого момента, подача продуваемого газа в ствол снова возобновляется и продолжается уже вплоть до закрытия клапана продувки. После

открытия клапана заполнения в момент времени $t = t_3$, у закрытого торца ствола образуется ударная волна, которая распространяется по газу продувки, заполняющему ствол (сплошная кривая, выходящая из точки $(0, t_3)$). Следом за ударной волной, однако с меньшей скоростью, движется контактный разрыв, разделяющий взрывчатую смесь и газ продувки (штриховая линия, выходящая из точки $(0, t_3)$).

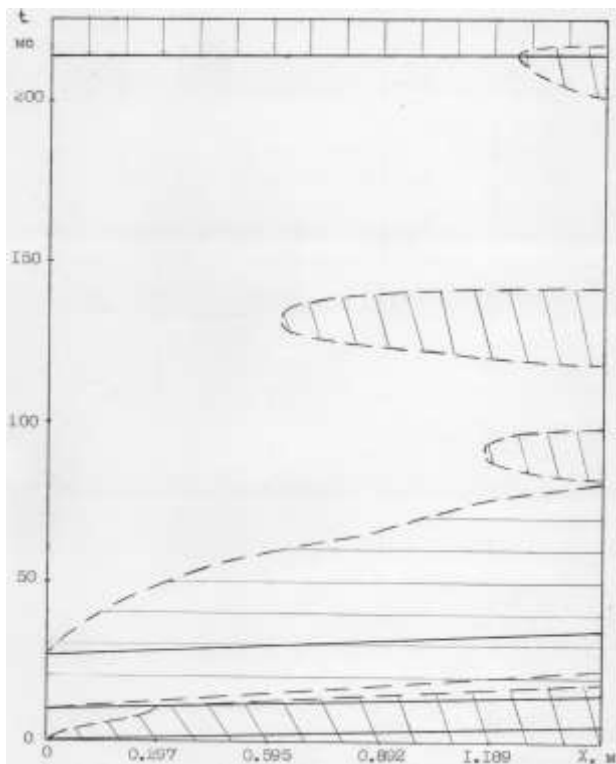


Рис. 3.46. Временная развертка первого цикла установки

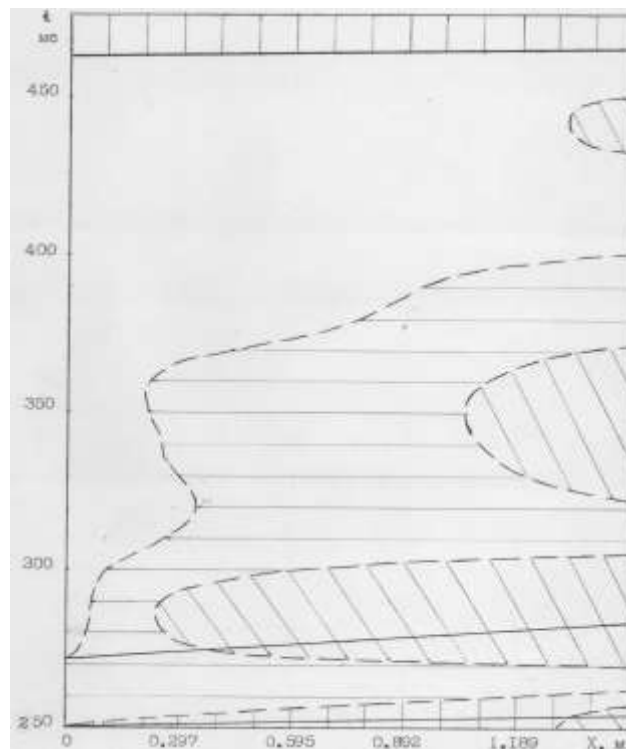
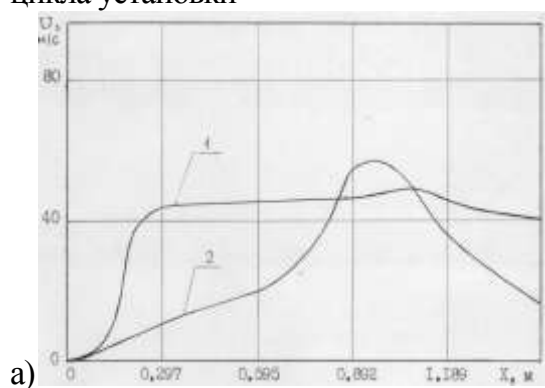
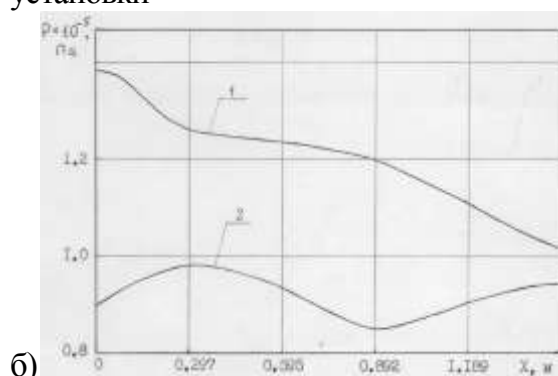


Рис. 3.47. Временная развертка второго цикла установки



а)



б)

Рис. 3.48. Распределение скорости (а) и давления (б) перед первым (1) и вторым (2) выстрелами.

В ходе продувки ствола и заполнения его взрывчатой смесью возникают довольно интенсивные колебания столба газов, заполняющих ствол. Соответствующие колебания возбуждаются возмущениями параметров поля течения газа, которые возникают в моменты открытия и закрытия клапанов и которые затем распространяются по газу. В ходе колебаний столба газов, заполняющих ствол, стадии сжатия обычно чередуются со

стадиями расширения. Причем на стадии сжатия в ствол может затекать атмосферный газ, который затем на стадии расширения выталкивается обратно (рис. 3.46). На рис. 3.46 видно, что на стадии заполнения ствола взрывчатой смесью в первом рабочем цикле она может вытекать в атмосферу. Это происходит, в частности, в промежутках времени между сотой и сто двадцатой, и стосороковой и двухсотой миллисекундами. Указанный эффект очевидно приводит к снижению экономичности установки. Все описанные выше эффекты, а именно: колебания столба газов, заполняющих ствол, втекание в ствол атмосферного газа и вытекание из него взрывчатой смеси наблюдаются и в течение второго рабочего цикла установки (рис. 3.47), который начинается с продувки на двухсотпятидесятый миллисекунде. Сравнение $X-t$ - диаграмм первого (рис. 3.46) и второго (рис. 3.47) рабочих циклов, а также графиков поведения во времени параметров потока у закрытого и открытого торцов ствола подтверждает их качественное совпадение по характеру чередования отдельных явлений, но при этом показывает их существенное отличие по количественным параметрам (по длительности, по амплитудам и т. д.).

На основании проведенных расчетов можно сделать ряд рекомендаций по изменению кулачка программного механизма. Кулачок необходимо перепрофилировать так, чтобы до минимума сократить длительность стадии продувки клапанов. В кулачке, который используется на установке в настоящее время, длительность указанной стадии завышена в несколько раз, что приводит, по-видимому, к существенному разбавлению горючей смеси и, как следствие этого, к существенному уменьшению температуры и скорости истечения не только продуктов детонации, но и напыляемого порошка. Для режима работы с частотой четыре выстрела в секунду длительность стадии заполнения, по-видимому, также завышена, что приводит к вытеканию горючей смеси из ствола в атмосферу. Для каждого режима работы с той или иной частотой выстрелов необходимо использовать свой, подходящим образом спрофилированный кулачок программного механизма.

Далее приведем некоторые результаты численного моделирования двухфазного течения в установке Днепр-2 на стадии истечения продуктов детонации. Предполагалось, что в момент времени t_{II} (рис. 3.46) частицы распределены равномерно по стволу установки между сечениями X_{in} и X_{uk} . Рассматривались частицы карбида вольфрама WC ($T_{пл}=3053$ К, $\rho_L=15770$ кг/м³), никеля Ni ($T_{пл}=1726$ К, $\rho_L=8902$ кг/м³)

и спеченного порошка ВН-20 (20% Ni и 80% WC) и взрывчатая смесь ацетилена с кислородом $C_{O_2} = 9/17$. Зависимость скорости и температуры частиц карбида вольфрама, вылетающих из ствола, приведена соответственно на рис. 3.49аб. Из графиков видно, что до момента времени $t = 3.5$ мс скорость вылетающих частиц увеличивается, затем давление и плотность газа в канале ствола уменьшается, и скорость частиц начинает снижаться, в момент времени $t = 7.0$ мс давление в установке становится равным атмосферному, и скорость газа быстро уменьшается. В момент времени $t = 12$ мс начинается затекание газа из атмосферы в установку, и вылет частиц прекращается. Аналогичная картина движения газа и частиц на выходе из установки наблюдается для Ni (рис. 3.49вг) и ВН-20 на рис. 3.49де. После прохождения детонационной волны мелкие частицы карбида вольфрама быстро к моменту времени $t = 1$ мс приходят в расплавленное состояние, далее их температура отслеживает температуру газа (рис. 3.49б), доходит до температуры кристаллизации карбида вольфрама, с $t = 6$ мс по $t = 7.5$ мс происходит переход из жидкого состояния в твердое (имеется ввиду, что часть материала частицы, вылетающей из установки, может находиться в жидком, а часть - в твердом состоянии). Частицы карбида вольфрама диаметром 50 мкм до $t = 2$ мс вылетают в твердом состоянии, с $t = 2$ мс до $t = 7$ мс в полужидком, затем опять в твердом. В отличие от частиц карбида вольфрама частицы никеля (рис. 3.49вг) на протяжении всего процесса напыления вылетают в жидком состоянии. Зависимость от времени температуры частиц спеченного порошка ВН-20 на вылете из установки представлена на рис. 3.49г. Температура частиц намного превышает температуру плавления никеля, поэтому весь никель, входящий в ВН-20, жидкий. Графики зависимости температуры от времени для спеченного порошка (рис. 3.49де) во многом напоминают аналогичные графики для частиц карбида вольфрама, отличие состоит в том, что 50 микронные частицы ВН-20, начиная с момента времени $t = 2.5$ мс до $t = 6$ мс, вылетают полностью жидкими.

На основе результатов численного моделирования движения и теплообмена частиц с учетом возможности плавления их материала можно сделать вывод [60], что для получения качественного покрытия необходимо, чтобы напыляемые частицы имели твердое ядро. Однако расчеты показывают, что это условие может нарушаться для мелких и нетугоплавких частиц практически в течение всей стадии напыления.

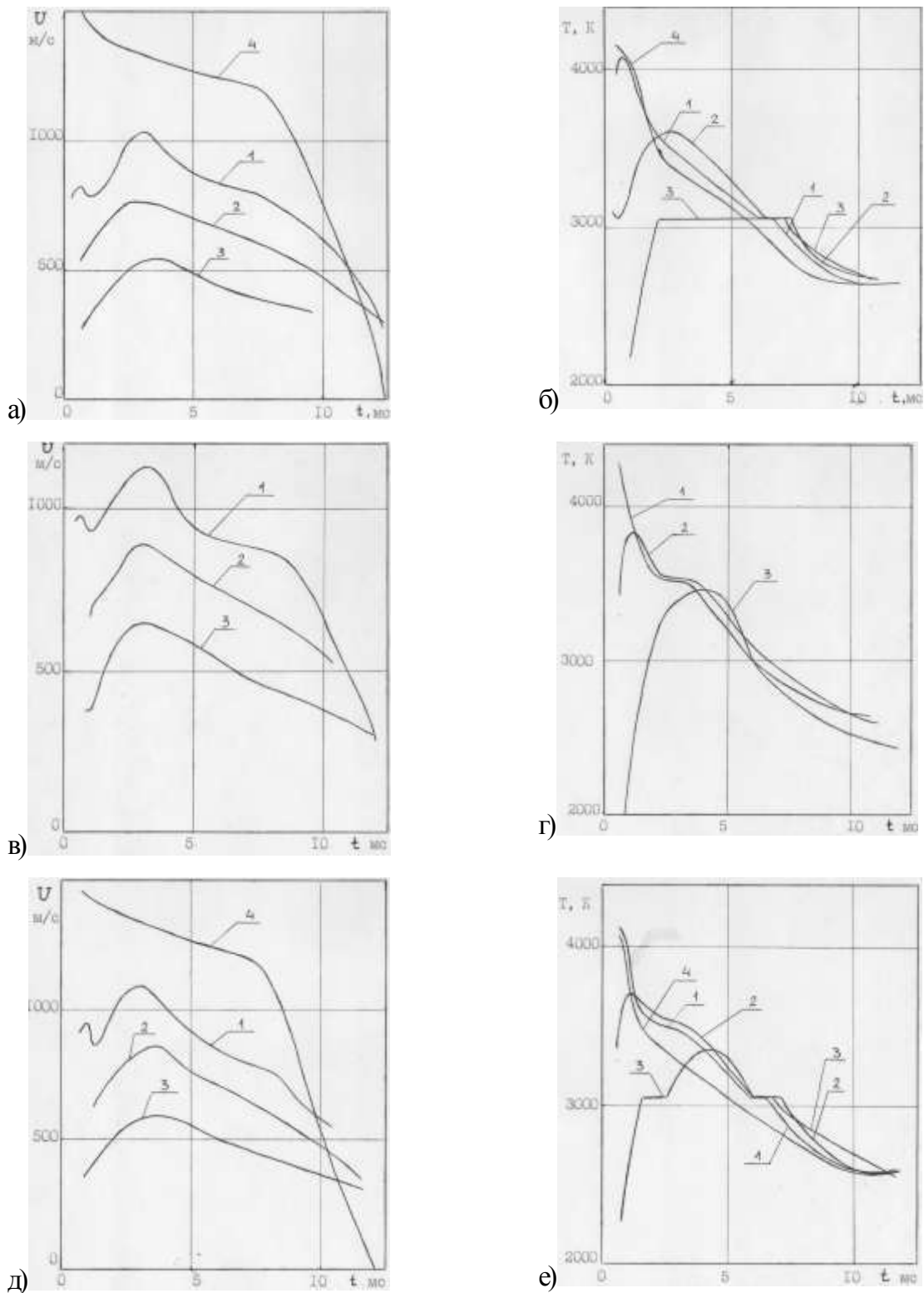


Рис. 3.49. Зависимость от времени скорости (а, в, д) и температуры (б, г, е) WC (а, б), Ni (в, г), VN-20 (д, е) в выходном сечении установки. 1- $d = 10 \mu\text{м}$, 2- $d = 30 \mu\text{м}$, 3- $d = 50 \mu\text{м}$, 4- скорость (температура) газа.

Исключение составляют только тугоплавкие частицы карбида вольфрама размера 50 мкм и более, а также спеченные частицы тех же размеров. Также возможно использование спеченных частиц, представляющих собой зерна карбида вольфрама, спаянные в конгломерат самим же вольфрамом. Никель в них может использоваться в

качестве материала лужения, покрывающего зерна и заполняющего промежутки между ними. Поскольку для достаточно крупных частиц таких порошков, входящий в них карбид вольфрама остается твердым. В качестве предпочтительных размеров частиц можно рекомендовать размеры 50 мкм или близкие к ним.

В целом анализ результатов расчетов показывает, что необходима синхронизация подачи порошка с рабочим циклом напыления. Из расчетов видно, что при непрерывной подаче частицы, вылетающие из ствола в начале стадии напыления, как правило недостаточно прогреты, а частицы, вылетающие в конце стадии, не только плохо прогреты, но и имеют при этом слишком маленькую скорость.

Выводы

В третьей главе работы разработан и оттестирован 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. Вдоль каждой сеточной линии вычисляются все параметры течения, скорость движения сеточной линии определяется ее природой (траектории, ударные волны и др.) или задается. Сильному разрыву соответствует две сеточных линии, имеющие одинаковые координаты и скорости распространения, но различный набор параметров. В рамках модели многолистной газовой динамики реализован алгоритм расчета бесстолкновительного пересечения траекторий частиц. В случае обнаружения пересечений траекторий частиц на всех сеточных линиях, находящихся в зоне пересечения, рассчитывается группа наборов параметров частиц, характеризующая каждую ветвь образующейся сборки.

ГЛАВА 4. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕТОНАЦИИ

Введение

Научный и практический интерес к изучению высокоскоростного горения и детонации газовых, газокапельных и металлогазовых горючих смесей обусловлен как с необходимостью создания систем взрывобезопасности и пожаротушения, направленных на предотвращение и подавление детонации, так и с желанием научиться управлять детонационным горением, чтобы использовать его в перспективных технологических процессах и в энергетических установках многоцелевого назначения. В настоящее время существует большое количество литературы, в которой приводятся результаты исследований высокоскоростного горения и детонации газовых, газокапельных и металлогазовых горючих смесей, в частности [26, 58, 134-139, 148, 191, 202, 231, 247, 258, 262].

4.1. Газофазная детонация

4.1.1. Классическая теория детонации. Детонационная адиабата.

Классическая теория детонации в газах была сформулирована, развита, математически обоснована и исследована в работах В.А. Михельсона, А.А.Гриба, Я.Б.Зельдовича, К.П.Станюковича, Р.И.Солоухина и других. В соответствии с ней ДВ, распространяющаяся по взрывчатой смеси, представляет из себя совокупность УВ и примыкающей к ней тонкой зоны, в которой протекают экзотермические химические реакции, которые заканчиваются установлением химического равновесия, причем зона химических превращений распространяется со скоростью УВ [135-139]. Без ограничения общности мы будем рассматривать детонацию и горение в “стационарный” постановке [139], когда УВ покоится, а поток неравновесной горючей смеси втекает в нее со сверхзвуковой скоростью. Рассматриваются случаи, когда в трубе постоянного сечения реализуются режимы течения, сопровождающиеся воспламенением горючей смеси [139, 253]. Во-первых, когда в трубу втекает “холодный” сверхзвуковой поток, тогда источником воспламенения выступает УВ, в которой температура смеси поднимается выше температуры самовоспламенения – сильная детонация. Во вторых, когда в трубу втекает “горячий” (температура смеси выше температуры самовоспламенения) сверхзвуковой поток – слабая детонация. В-третьих, когда в трубу втекает “горячий” дозвуковой поток – слабая дефлаграция. Вопросы, связанные с формированием входного потока, в разделе не рассматриваются. В том случае, когда

температура смеси превышает температуру самовоспламенения, в смеси начинают протекать экзотермические химические реакции, горючая смесь воспламеняется и сгорает, и на некотором расстоянии устанавливается состояние химического равновесия, после чего параметры в трубе (при отсутствии каких бы то ни было потерь) перестают меняться. Если температура смеси ниже температуры самовоспламенения, то параметры в трубе не меняются.

Во всех рассматриваемых случаях для анализа течения необходимо решить нелинейную систему дифференциально-алгебраических уравнений, являющуюся следствием законов сохранения, приведенных в первой главе при сделанных предположениях о характере течения:

$$\rho u = \rho_0 u_0, \quad (4.1)$$

$$p + \rho u^2 = p_0 + \rho_0 u_0^2, \quad (4.2)$$

$$h + \frac{u^2}{2} = h_0 + \frac{u_0^2}{2}, \quad (4.3)$$

$$p = p(\rho, T, \gamma), \quad (4.4)$$

$$h = h(\rho, T, \gamma), \quad (4.5)$$

$$\frac{d\gamma_i}{dx} = \frac{W_i(\rho, T, \gamma)}{\rho_0 u_0}, \quad i = 1, \dots, N. \quad (4.6)$$

В первом случае считается, что в начальном сечении находится УВ, параметры слева от УВ равны начальным:

$$u_{\text{Л}} = u_0 > a_0, \quad p_{\text{Л}} = p_0, \quad T_{\text{Л}} = T_0 < T_{\text{В}}, \quad \gamma_{i\text{Л}} = \gamma_{i0}, \quad i = 1, 2, \dots, N,$$

параметры справа от УВ пересчитываются с использованием соотношений Ренкина-Гюгонио (4.1)-(4.3), дополненными термическим (4.4) и калорическим (4.5) уравнениями состояния и условием неизменности концентраций при переходе через УВ. Далее интегрируется система (4.1)-(4.6) с начальными данными, равными значениям параметров течения справа от УВ в точке x_0 :

$$u(x_0) = u_{\text{П}}, \quad p(x_0) = p_{\text{П}}, \quad T(x_0) = T_{\text{П}}, \quad \gamma_i(x_0) = \gamma_{i0}, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (4.7)$$

Во втором случае:

$$u(x_0) = u_0 > a_0, \quad p(x_0) = p_0, \quad T(x_0) = T_0 > T_{\text{В}}, \quad \gamma_i(x_0) = \gamma_{i0}, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (4.8)$$

В третьем случае:

$$u(x_0) = u_0 < a_0, \quad p(x_0) = p_0, \quad T(x_0) = T_0 > T_{\text{В}}, \quad \gamma_i(x_0) = \gamma_{i0}, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (4.9)$$

Здесь T_B – температура самовоспламенения горючей смеси.

Необходимо отметить, что система (4.1) – (4.6) имеет особенность при равенстве скорости газа замороженной (более подробно об этом написано в Главе 2) скорости звука. В частности, из (4.1)-(4.6) путем эквивалентных преобразований может быть получено дифференциальное уравнение для изменения скорости:

$$(M^2 - 1) \frac{du}{dx} = \frac{u}{\rho^2 h_T} \sum_{i=1}^N (\rho_{\gamma_i} h_T - h_{\gamma_i} \rho_T) W_i, \quad (4.10)$$

из которого следует, что если при решении системы (4.1)-(4.6) в некоторой точке выполняются условия $M = 1$ и $W_i \neq 0$, то решение системы (4.1)-(4.6) не существует. Эквивалентным данному выводу можно считать утверждение, что при интегрировании системы (4.1)-(4.6) могут получаться концентрации γ_i , $i = 1, 2, \dots, N$, при которых система нелинейных алгебраических уравнений (4.1)-(4.5) не имеет решения.

Если решение системы (4.1)-(4.6) существует, то при больших значениях пространственной координаты устанавливается состояние химического равновесия, которому соответствует равенство нулю правых частей уравнений химической кинетики (4.6): $W_i(p, T, \gamma) = 0$ (см. главу 2). В том случае, если все химические реакции обратимые (в настоящей работе рассматривается именно такой случай), то конечное состояние, к которому стремится решение системы (4.1)-(4.6), не зависит от механизма химических превращений и может быть найдено из системы (4.1)-(4.5), дополненной условиями химического равновесия, которые определяют равновесные концентрации как неявно заданные функции двух термодинамических параметров и начального элементного состава (см. главу 2):

$$\gamma_i = \gamma_i(T, V, \gamma_k^0), \quad V = 1/\rho. \quad (4.11)$$

Рассмотрим конечное состояние, к которому стремится решение системы (4.1)-(4.6). Из (4.1)-(4.3) путем эквивалентных преобразований могут быть получены выражения для адиабаты Гюгонио:

$$h - h_0 - \frac{1}{2}(V + V_0)(p - p_0) = 0, \quad (4.12)$$

прямой Михельсона:

$$p - p_0 - \frac{u_0^2}{V_0^2}(V_0 - V) = 0, \quad (4.13)$$

а также связь скорости с термодинамическими параметрами:

$$u^2 = V^2 \frac{p - p_0}{V_0 - V}. \quad (4.14)$$

Соотношения (4.12)-(4.13), дополненные уравнениями состояния (4.4), (4.5) и (4.11), задают на плоскости p - V однопараметрическое множество конечных состояний системы (4.1)-(4.6) (рис. 4.1), параметром, в котором является начальная скорость смеси газов - u_0 (см. 4.13).

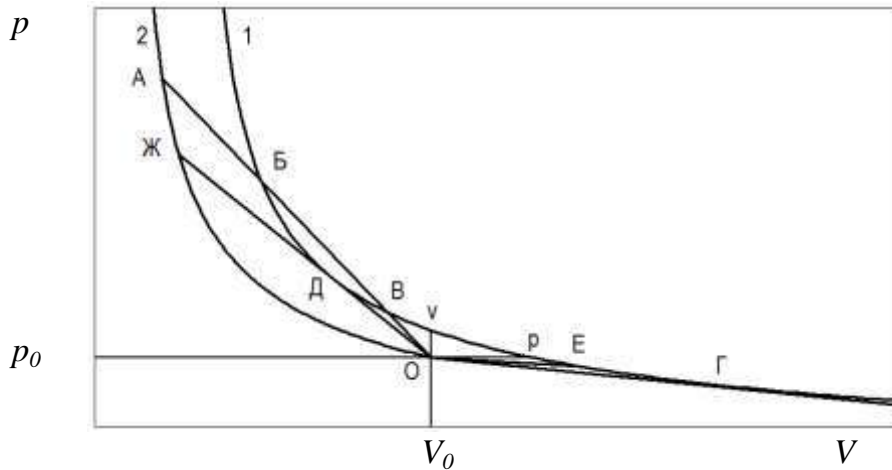


Рис. 4.1. p - V диаграмма

На рисунке 4.1 схематично приведены равновесная ударная адиабата (кривая 1), задаваемая соотношениями (4.12), (4.11), (4.4), (4.5); прямые Михельсона (4.13), соответствующие различным значениям u_0 (ОЖ, ОА, ОГ, ОЕ); ударная адиабата (кривая 2), задаваемая соотношениями (4.12), (4.4), (4.5) и условием неизменности начального состава $\gamma_i = \gamma_{i0}$, $i = 1, 2, \dots, N$. Решением рассматриваемой задачи является точка пересечения равновесной адиабаты и прямой Михельсона. Соответственно, если угол наклона прямой Михельсона к оси абсцисс больше угла наклона (ОД) и меньше угла наклона (ОГ), то решение отсутствует. Кроме этого, нефизическим является область адиабаты между точками "В" и "P", так как на данном отрезке $\frac{p - p_0}{V_0 - V}$ неположительно.

Точка Д называется детонационной точкой ЧЖ (или просто точкой ЧЖ) и соответствует минимально возможной скорости распространения ДВ. Точка Г – точка ЧЖ дефлаграции и соответствует максимально возможной скорости распространения волны горения [139, 232, 253].

Можно показать, что в точках касания Д и Г выполняется условие равенства скорости смеси равновесной скорости звука:

$$u^2 = a^2. \quad (4.15)$$

Запишем полные дифференциалы (4.11), (4.12) в переменных p, V :

$$\left(\frac{\partial h}{\partial p}\right)_V dp + \left(\frac{\partial h}{\partial V}\right)_p dV - \frac{1}{2}(V + V_0)dp - \frac{1}{2}(p - p_0)dV = 0,$$

$$dp + \frac{u_0^2}{V_0^2} dV = 0 \quad .$$

Тогда условие касания прямой Михельсона равновесной адиабаты записывается как равенство соответствующих производных dp/dV :

$$\frac{\left(\frac{\partial h}{\partial V}\right)_p - \frac{1}{2}(p - p_0)}{\left(\frac{\partial h}{\partial p}\right)_V - \frac{1}{2}(V + V_0)} = \frac{u_0^2}{V_0^2}, \quad (4.16)$$

Подставим (4.13) в (4.16), приведем подобные и с использованием (4.1) получим:

$$u^2 = V^2 \frac{\left(\frac{\partial h}{\partial V}\right)_p}{\left(\frac{\partial h}{\partial p}\right)_V - V} \quad . \quad (4.17)$$

Правая часть (4.17) совпадает с полученными ранее (глава 2) выражениями для квадрата скорости звука. Выше точки Д (рис. 4.1) - $u^2 < a^2$, на участке ДV - $u^2 > a^2$, на участке PГ - $u^2 < a^2$, ниже точки Г - $u^2 > a^2$ [6-8].

Для рассматриваемых в настоящей главе трех случаев развития процесса, конечному состоянию соответствуют точки, лежащие на различных участках равновесной адиабаты. Первому соответствует участок, лежащий выше точки Д, второму – участок (ДV), третьему участок (PГ).

Необходимо отметить, что независимо от механизма химических превращений, траекторией процесса на фазовой плоскости p - V является прямая Михельсона.

Будем считать, что продукты сгорания представляют из себя смесь совершенных газов:

$$p = \frac{RT}{V} \sum_{i=1}^N \gamma_i \quad \text{и} \quad h = \sum_{i=1}^N \gamma_i H_i^0(T), \quad (4.18)$$

тогда с использованием (4.18) выражение для равновесной адиабаты (4.12) примет вид:

$$F(p, T) = \sum_{i=1}^N \gamma_i(p, T) H_i^0(T) - \sum_{i=1}^N \gamma_{i0} H_i^0(T_0) - \frac{1}{2}(p - p_0) \left(\frac{RT \sum_{i=1}^N \gamma_i(p, T)}{p} + V_0 \right) = 0. \quad (4.19)$$

При этом $F_T(p, T) = \sum_{i=1}^N (\gamma_{iT}(p, T) H_i^0(T) + \gamma_{iT}(p, T) C_{pi}^0(T)) - \frac{R(p - p_0)}{2p} \sum_{i=1}^N (\gamma_i(p, T) + T \gamma_{iT}(p, T))$.

При фиксированном давлении (4.19) представляет собой нелинейное уравнение для определения температуры, которое может быть решено итерационным методом. Входящие в (4.19) мольно-массовые концентрации γ_i в состоянии равновесия рассматриваются как функции температуры и давления, они и их производные по температуре находятся с высокой точностью на каждой итерации решения (4.19) по методике, приведенной в Главе 2. После нахождения температуры, удельный объем находится из (4.18), скорость смеси газов из (4.14).

Для построения равновесной адиабаты из физических соображений выбираются $p_{MAX} > p_0$ и $p_{MIN} < p_0$, и делается необходимое число шагов на участках $p_{MAX} > p > p_0$ и $p_0 > p > p_{MIN}$. Положение точек ЧЖ Д и Г определяется методом половинного деления на отрезке, где выражение $u - a$ меняет знак. Участок между точками “V” и ”p” (рис. 4.1) ударной адиабаты также может быть рассчитан по предлагаемому алгоритму (ему соответствуют мнимые значения скорости).

Аналогичным способом может быть рассчитана ударная адиабата смеси газов, при этом концентрации γ_i считаются независимыми от температуры и давления и равны своим начальным значениям $\gamma_i = \gamma_{i0}$.

Рассмотрим стехиометрическую водородо-воздушную смесь, находящуюся при стандартном давлении $p_0 = 101325$ Па и повышенной, близкой к температуре самовоспламенения, температуре - $T_0 = 800$ К, продукты сгорания состоят из 13 компонентов: H_2 , OH , H_2O , O_2 , O_3 , H_2O_2 , HO_2 , N_2 , NO , H , O , N , Ar , термодинамические свойства которых заимствуются из [121].

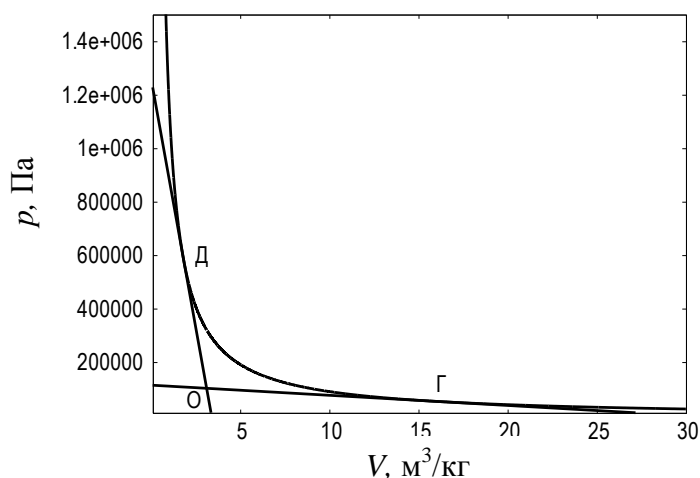


Рис. 4.2. Равновесная адиабата продуктов сгорания водородо-воздушной стехиометрической смеси ($p_0 = 101325$ Па, $T_0 = 800$ К)

На рис. 4.2 приведена рассчитанная равновесная адиабата продуктов сгорания (координаты точек на плоскости p - V О {3.13,101325}, Д {1.82,588679}, Г {16.00, 52429}, скорости и температуры в точках ЧЖ детонации (Д) $u_0 = 1906.9$ м/с, $T = 3025.9$ К, дефлаграции (Г) $u_0 = 192.7$ м/с, $T = 2443.0$ К.

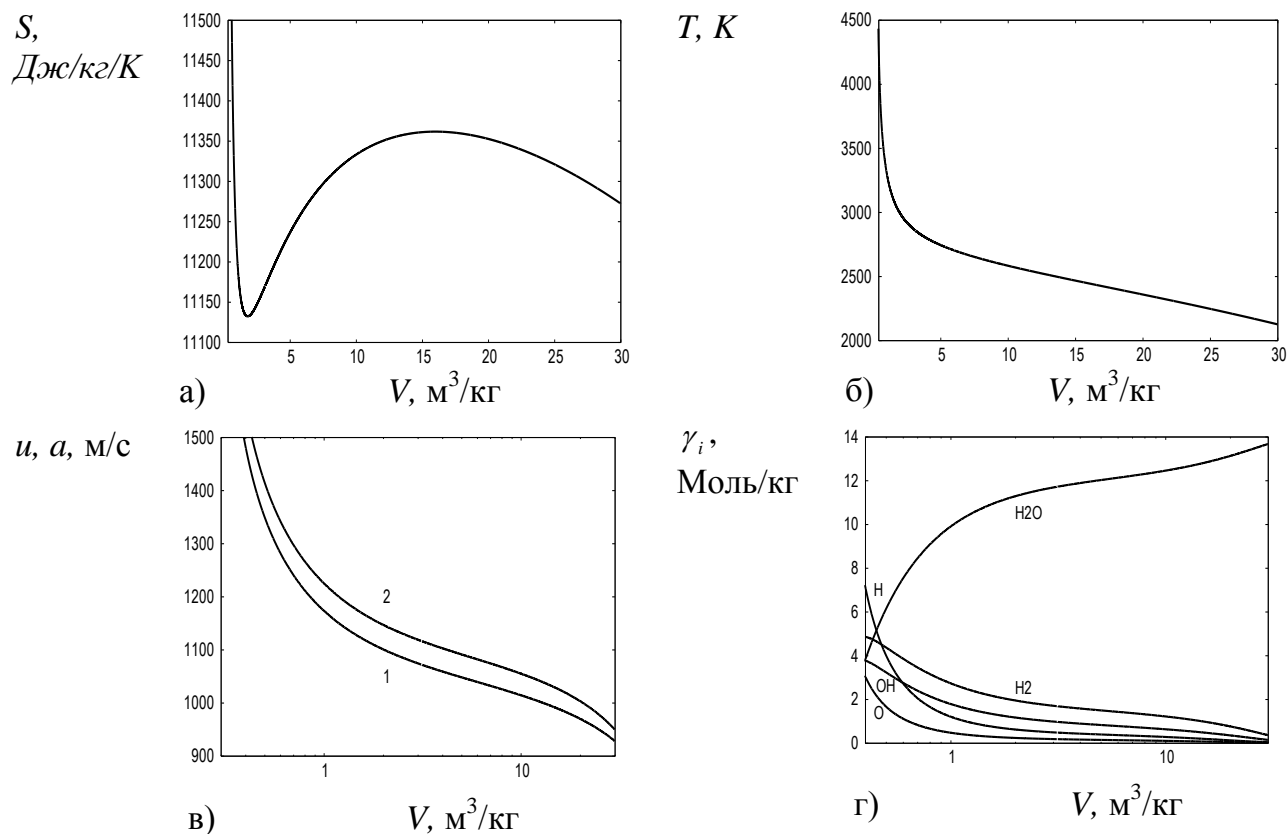


Рис. 4.3. Распределение параметров вдоль равновесной адиабаты водородо-воздушной стехиометрической смеси (а) - энтропия, б) - температура, в) - равновесная (1) и замороженная (2) скорости звука, г) - мольно-массовые концентрации, $p_0 = 101325$ Па, $T_0 = 800$ К)

Необходимо отметить, что при $p_0 = 101325$ Па и $T_0 = 298.15$ К результаты существенно отличаются: О {1.17,101325}, Д {0.65,1582660}, Г {15.40, 48180}, скорости и температуры в точках ЧЖ детонации - $u_0 = 1967.6$ м/с, $T = 2950.5$ К, дефлаграции - $u_0 = 71.1$ м/с, $T = 2190.3$ К.

Представленные на рис. 4.3 изменения параметров, характеризующих продукты сгорания вдоль равновесной адиабаты, качественно совпадают с аналитическими результатами [232]. А именно: энтропия (рис. 4.3а) имеет минимум в детонационной точке ЧЖ и максимум в дефлаграционной; температура монотонно убывает (рис. 4.3б); замороженная скорость звука (рис. 4.3в, кривая 2) в каждой точке превосходит равновесную (рис. 4.3в, кривая 1); с уменьшением температуры количество паров воды в продуктах сгорания увеличивается (рис. 4.3г).

Рассмотрим систему (4.1)-(4.6) для случая, когда продукты сгорания являются смесью совершенных газов. Получим:

$$u/V = Q_0, \quad (4.20)$$

$$p + u^2/V = I_0, \quad (4.21)$$

$$\sum_{i=1}^N \gamma_i H_i^0(T) + \frac{u^2}{2} = H_0. \quad (4.22)$$

$$T = pV \left(R \sum_{i=1}^N \gamma_i \right)^{-1} \quad (4.23)$$

$$\frac{d\gamma_i}{dx} = \frac{W_i(V, T, \gamma)}{\rho_0 u_0}, \quad i = 1, \dots, N \quad (4.24)$$

В соответствии с (4.20)-(4.23) V , T , входящие в правые части (4.24), можно рассматривать как неявно заданные функции Q_0 , I_0 , h_0 и γ_i , $i = 1, 2, \dots, N$ (если система (4.20)-(4.23) имеет решение).

При построении алгоритма решения системы нелинейных алгебраических уравнений (4.20)-(4.23) при фиксированных концентрациях γ_i , целесообразно в качестве искомой переменной использовать скорость u . Это позволяет непосредственно контролировать приближение к особой точке $u = a$ и обеспечить одностороннюю сходимость (в этом случае параметры фазового пространства всегда находятся в области, где решение существует) итерационного процесса для получения решения (или диагностики отсутствия решения) при данном значении пространственной координаты. Для нахождения скорости методом Ньютона решается уравнение:

$$F(u) = \sum_{i=1}^N \gamma_i H_i^0(T(u)) + \frac{u^2}{2} - h_0,$$

$$F_u(u) = \sum_{i=1}^N \gamma_i C_{pi}^0(T(u))(I_0 - 2Q_0 u) \left(Q_0 R \sum_{i=1}^N \gamma_i \right)^{-1} + u,$$

$$\text{здесь } V = u/Q_0, \quad p = I_0 - Q_0 u, \quad T = u(I_0 - Q_0 u) \left(Q_0 R \sum_{i=1}^N \gamma_i \right)^{-1}$$

Новое приближение скорости находится по формуле $u^{n+1} = u^n - \alpha \frac{F(u^n)}{F_u(u^n)}$,

При этом параметр $0 < \alpha < 1$ выбирается таким образом, чтобы выполнялось условие $(u^{n+1} - a^{n+1})(u^n - a^n) > 0$.

Система обыкновенных дифференциальных уравнений (4.24) интегрируется численно методом Пирумова (описанным в Главе 2), причем на каждой итерации V и T , входящие в правые части, находятся из (4.20)-(4.23). Если решение (4.20)-(4.23) отсутствует ($\alpha \approx 0$, а $|F(u^n)| \gg \varepsilon$ (ε - заданная точность)), то шаг интегрирования (4.24) уменьшается и вычисления повторяются. В том случае, если шаг интегрирования становится меньше минимально заданного, то диагностируется случай отсутствия решения системы (4.1)-(4.6) (запирание течения).

Режим сильной детонации

Рассмотрим случай, когда входящий холодный сверхзвуковой поток тормозится и нагревается в УВ. Горючая смесь состоит из водорода и кислорода разбавленных аргоном $0.4 H_2 + 0.2 O_2 + 0.4 Ar$ и находится при нормальных условиях ($T = 298,15\text{ К}$, $p = 101325\text{ Па}$). Продукты сгорания включают 10 компонентов: H_2 , OH , H_2O , O_2 , O_3 , H_2O_2 , HO_2 , H , O , Ar , термодинамические свойства которых заимствуются из [121]. Для описания химических превращений используется механизм, включающий 45 обратимых стадий, предложенный в [140].

На рис. 4.4, 4.5 приведены рассчитанные ударная адиабата (кривая 1) и равновесная детонационная адиабата (кривая 2). Изменение вдоль адиабат разности скоростей - $u-u_0$, температуры - T и скорости потока перед волной (скорости детонации) - u_0 приведены на рис. 4.6, мольно-массовых концентраций компонентов на рис. 4.7. Параметры продуктов детонации в точке ЧЖ соответствуют точке Д на рис. 4.4-4.5 и точке минимума на графике скорости потока (кривая 3, рис. 4.6).

Рассмотрим картину течения. Начальное состояние соответствует т. O на фазовой плоскости $p-V$ (рис. 4.4) и $T-V$ (рис. 4.5). Пусть скорость потока 2500 м/с, что существенно выше скорости детонации ЧЖ для данной смеси, тогда, решив систему (4.19)-(4.22), мы получим параметры течения за УВ, которым соответствует точка "А" (рис. 4.4, 4.5), лежащая на ударной адиабате (кривая 1, рис. 4.4,4.5). Далее интегрируем систему (4.19)-(4.23) до тех пор, пока рассчитанные параметры не перестанут меняться. Полученное конечное состояние соответствует точке "Е" на равновесной детонационной адиабате (кривая 2, рис. 4.4, 4.5), которая рассчитана по оригинальным алгоритмам расчета равновесных состояний многокомпонентных газовых смесей, приведенным в главе 2.

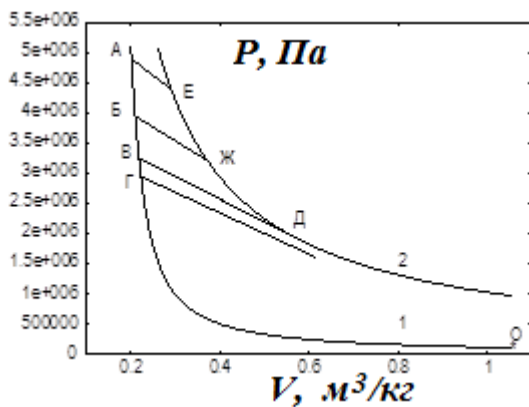


Рис. 4.4. p - V диаграмма.

1 – ударная адиабата, 2 – равновесная детонационная адиабата, т. О – начальное состояние горючей смеси; АЕ – отрезок прямой Михельсона, соответствующий скорости $u_0=2500$ м/с, Б-Ж – 2250 м/с, В-Д – 2047.13 м/с, Г – 1950 м/с

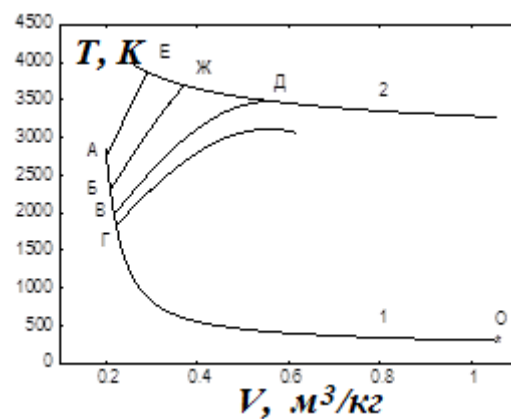


Рис. 4.5. T - V диаграмма.

Необходимо отметить, что обеспечение высокоточного выхода при интегрировании жесткой системы дифференциально-алгебраических уравнений (4.19)-(4.23) в точку, лежащую на равновесной детонационной адиабате, а также то, что траекторией в фазовом пространстве p - V является отрезок прямой линии (прямой Михельсона) [АЕ], является необходимым элементом самотестирования разработанных вычислительных алгоритмов. Рассмотренный случай соответствует пересечатой ДВ. Аналогично был проведен расчет для случая скорости потока 2250 м/с, ему соответствует отрезок [БЖ] (рис. 4.4, 4.5). Кривая [ВД] рис. 4.4, 4.5 соответствует детонации ЧЖ и скорости потока, равной 2047.13 м/с, рассчитанная скорость (минимальная скорость при которой система (4.20)-(4.24) имеет решение) с точностью до 0.01 м/с соответствует скорости детонации ЧЖ, определенной в результате термодинамического расчета. Также приводятся результаты интегрирования системы (4.20)-(4.24) для случая, когда скорость потока равна 1950 м/с. Из рисунка 4.4 видно, что прямая Михельсона (проходит через точку Г) не пересекает равновесную детонационную адиабату, происходит запирание потока (рис. 4.8), скорость продуктов сгорания равна замороженной скорости звука, при этом состояние равновесия не достигается. Необходимо отметить, что в точке ЧЖ равновесная скорость звука равна 1125.04 м/с, а замороженная - 1193.22 м/с, истинной (характеристической) [3,4,6] скоростью звука при неравновесных течениях является замороженная скорость звука, т.е. течение в ДВ остается дозвуковым. На рис. 4.9 представлены графики изменения в волне детонации скорости газа и замороженной скорости звука, полученные численно при изменении начальной скорости потока на 0.01 м/с. Из рисунка видно, что графики фактически совпадают вплоть до $x=0.01$ м, затем при $u_0=2047.12$ м/с поток ускоряется

(кривая 2), скорость становится равной скорости звука и в соответствии с (4.10) происходит запаривание потока. Непрерывный переход через скорость звука в рассматриваемой стационарной неравновесной постановке невозможен.

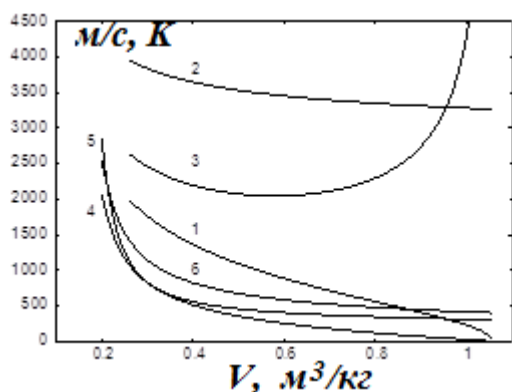


Рис. 4.6. Изменение параметров течения вдоль детонационной (1-3) и ударной адиабат (4-6). 1, 4 – $u_0 - u$, 2, 5 – T , 3, 6 – u_0

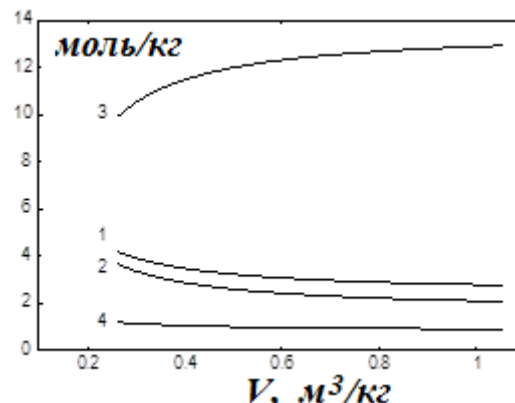


Рис. 4.7. Изменение мольно-массовых концентраций компонентов вдоль детонационной адиабаты 1 – H_2 , 2 – OH , 3 – H_2O , 4 – O_2

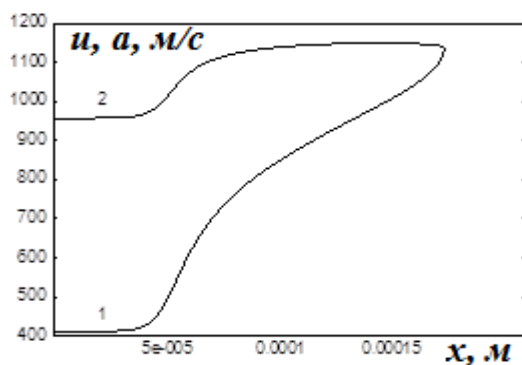


Рис. 4.8. Зависимость скорости (1) и замороженной скорости звука (2) от расстояния от ударной волны ($u_0 = 1950$ м/с).

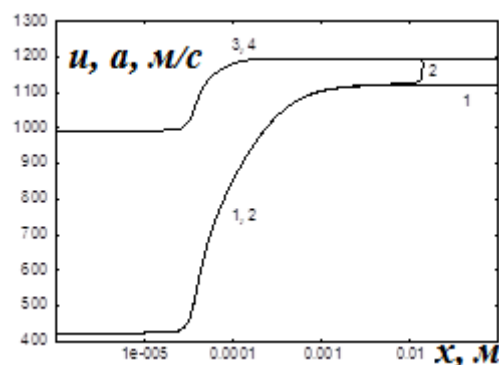


Рис. 4.9. Зависимость скорости (1,2) и замороженной скорости звука (3,4) от расстояния от ударной волны (1, 3 – $u_0 = 2047.13$ м/с, 2, 4 – $u_0 = 2047.12$ м/с)

На рисунках 4.10, 4.11 приведены графики изменения температуры и концентраций в ДВ в зависимости от продольной координаты.

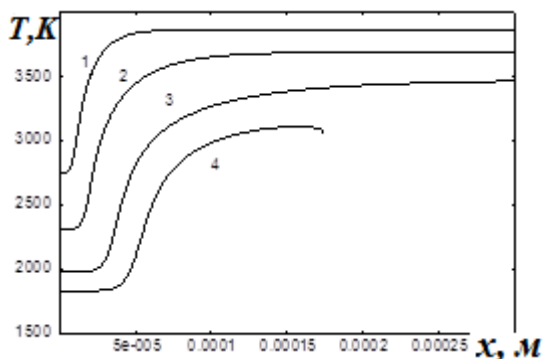


Рис. 4.10. Зависимость температуры от расстояния от ударной волны (1 – $u_0 = 2500$ м/с, 2 – $u_0 = 2250$ м/с, 3 – $u_0 = 2047.13$ м/с, 4 – $u_0 = 1950$ м/с)

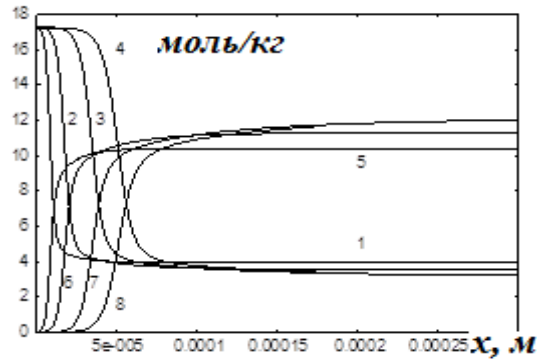


Рис. 4.11. Зависимость мольно-массовых концентраций компонент от расстояния от ударной волны (1-4 – H_2 ; 5-8 – H_2O ; 1, 5 – $u_0 = 2500$ м/с; 2, 6 – $u_0 = 2250$ м/с; 3, 7 – $u_0 = 2047.13$ м/с; 4, 8 – $u_0 = 1950$ м/с)

Режим слабой детонации

Рассмотрим случай, когда "горячая" ($T = 950\text{K}$, $p = 101325\text{Па}$), предварительно перемешанная горючая смесь ($0.4\text{ H}_2 + 0.2\text{ O}_2 + 0.4\text{ Ar}$) поступает в канал постоянного сечения со сверхзвуковой скоростью.

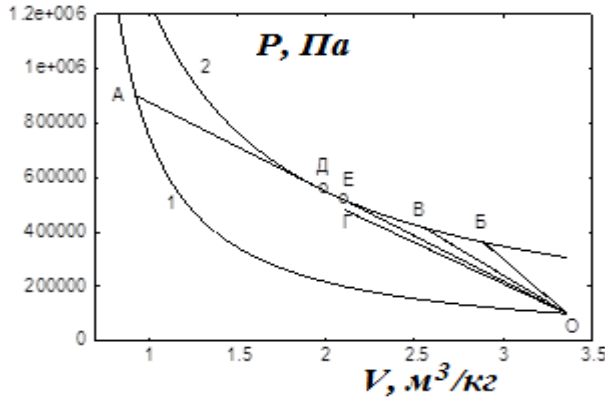


Рис. 4.12. p - V диаграмма.

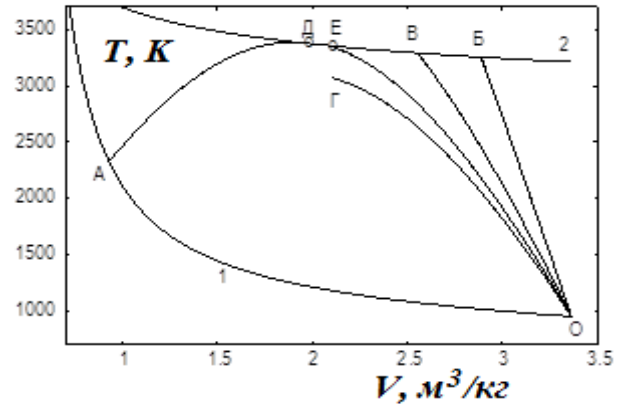


Рис. 4.13. T - V диаграмма.

1 – ударная адиабата, 2 – равновесная детонационная адиабата, т. О – начальное состояние горючей смеси; ОБ – отрезок прямой Михельсона, соответствующий скорости $u_0 = 2500\text{ м/с}$, ОВ – 2100 м/с , ОЕ – 1928.76 м/с , ОГ – 1850 м/с , АД – детонации ЧЖ – $u_0 = 1934.87\text{ м/с}$

Данному начальному состоянию (т. О, рис. 4.12, 4.13) соответствуют ударная и равновесная детонационная адиабата (рис. 4.12, 4.13), кривые 1 и 2, соответственно. Начальная температура превышает температуру самовоспламенения смеси, на некотором расстоянии от начальной точки смесь воспламеняется и сгорает. Результаты интегрирования системы дифференциально-алгебраических уравнений (4.20)-(4.27) приводятся на рисунках 4.12-4.17. На фазовых плоскостях p - V (рис. 4.12) и T - V (рис. 4.13) представлены траектории, на которых существует решение – ОБ ($u_0=2500\text{ м/с}$), ОВ ($u_0=2100\text{ м/с}$), ОЕ ($u_0=1934.87\text{ м/с}$), и траектория, на которой решение отсутствует – ОГ ($u_0=1850\text{ м/с}$). Если решение существует, то оно заканчивается в точке на равновесной детонационной адиабате в области, расположенной ниже точки Д, которая соответствует режиму слабой детонации [139, 253]. Существует минимальное значение скорости u_0 , при котором существует решение рассматриваемой задачи.

На рисунке 4.14 приведены зависимости от пространственной координаты скорости продуктов сгорания и скорости звука, при уменьшении u_0 данные скорости на момент перехода к состоянию термодинамического равновесия сближаются (кривые 1, 5 и 2, 6). При $u_0 = 1934.87\text{ м/с}$ скорость продуктов сгорания и замороженная скорость звука совпадают (кривые 3, 7 рис. 4.14), при дальнейшем уменьшении u_0 решение у системы (4.20)-(4.24) отсутствует (кривые ОГ, рис. 4.12, 3.13, кривые 4, 8, рис. 4.14).

Необходимо отметить, что минимальная скорость, при которой существует решение, несколько больше скорости детонации ЧЖ, которая равна 1928.76 м/с. Это связано с тем, что в случае слабой детонации (кривая 1, рис. 4.15) мы приближаемся к скорости ЧЖ сверху, а при сильной снизу (кривая 4, рис. 4.15), поэтому при приближении сверху скорость потока вначале достигает замороженной скорости звука (кривая 2, рис. 4.15), минимальная скорость потока, при этом подбирается из условия, чтобы одновременно достигалось состояние термодинамического равновесия, т.е. чтобы соответствующая точка лежала на равновесной детонационной адиабате (рис. 4.15). В случае сильной детонации, достигается равновесная скорость звука (кривые 4, 5, рис. 4.15), которая несколько меньше замороженной скорости звука (кривая 3, рис. 4.15).

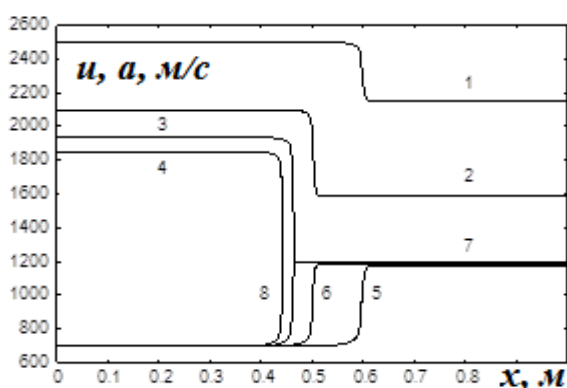


Рис. 4.14. Зависимость скорости (1-4) и скорости звука (5-8) от продольной координаты (1, 5 – $u_0 = 2500$ м/с; 2, 6 – $u_0 = 2100$ м/с; 3, 7 – $u_0 = 1934.87$ м/с; 4, 8 – $u_0 = 1850$ м/с)

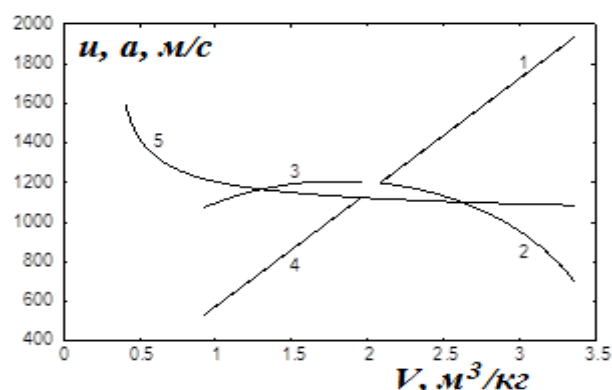


Рис. 4.15. Зависимость скорости (1, 4) и скорости звука (2,3) от удельного объема при слабой и сильной детонации (1, 2 – слабая детонация – $u_0 = 1934.87$ м/с, 3, 4 – Детонация ЧЖ – $u_0 = 1928.76$ м/с, 5 – изменение равновесной скорости звука вдоль детонационной адиабаты

На рис. 4.16, 4.17 приведены графики изменения температуры и концентраций в слабой ДВ в зависимости от продольной координаты.

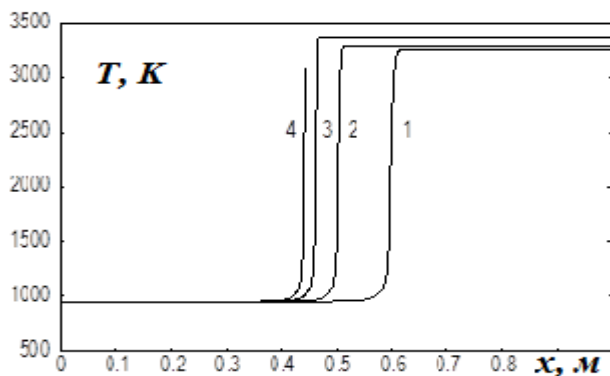


Рис. 4.16. Зависимость температуры от продольной координаты

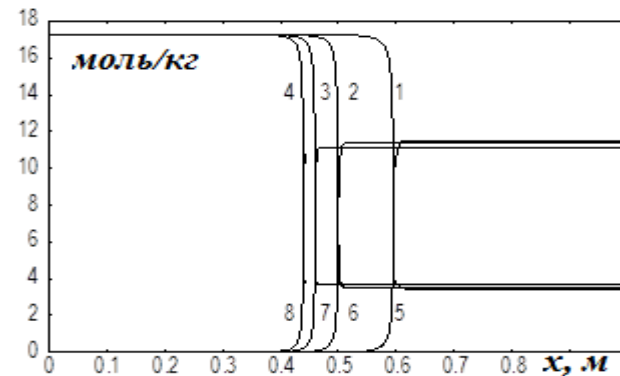


Рис. 4.17. Зависимость мольно-массовых концентраций компонент от продольной координаты

(1 – $u_0 = 2500$ м/с, 2 – $u_0 = 2100$ м/с, 3 – $u_0 = 1934.87$ м/с, 4 – $u_0 = 1850$ м/с)

Режим слабой дефлаграции

Рассмотрим случай, когда “горячая” ($T = 950\text{ К}$, $p = 101325\text{ Па}$), предварительно перемешанная горючая смесь ($0.4\text{ H}_2 + 0.2\text{ O}_2 + 0.4\text{ Ar}$) поступает в канал постоянного сечения с дозвуковой скоростью.

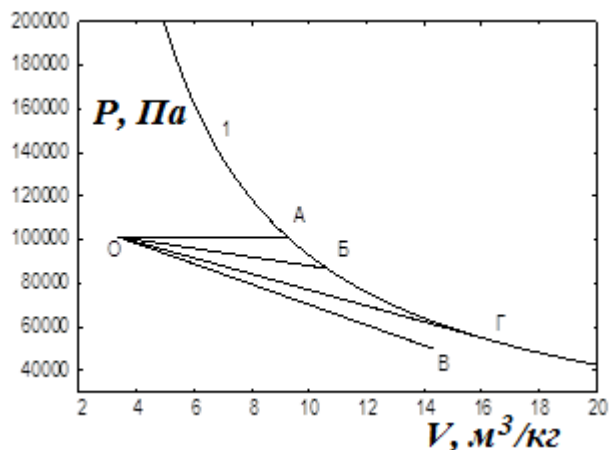


Рис. 4.18. p - V диаграмма.

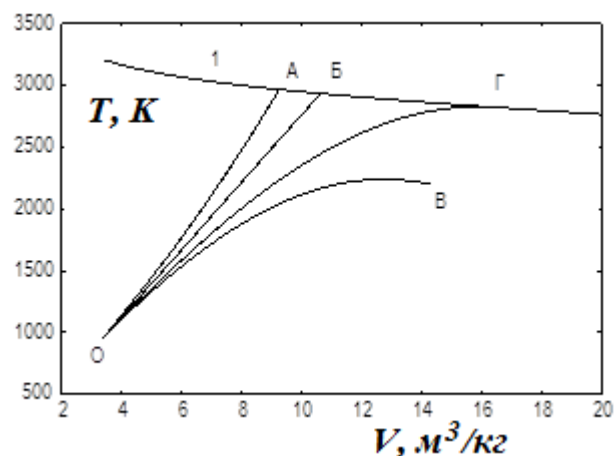


Рис. 4.19. T - V диаграмма.

1 – равновесная дефлаграционная адиабата, т. О – начальное состояние горючей смеси; ОА – отрезок прямой Михельсона, соответствующий скорости $u_0 = 10\text{ м/с}$, ОБ – 100 м/с , ОГ – 203.424 м/с , ОВ – 230 м/с

Данному начальному состоянию соответствуют т. О рис. 4.18, 4.19 и равновесная дефлаграционная адиабата рис. 4.18, 4.19, кривая 1. На рисунках 4.18-4.23 приведены результаты расчетов четырех вариантов, варьировалась начальная скорость потока u_0 (10, 100, 203.424, 230 м/с). Точка ЧЖ дефлаграции соответствовала скорости - $u_0 = 203.424\text{ м/с}$ (кривые ОГ, рис. 4.18, 4.19), при больших скоростях решение системы (4.20)-(4.24) отсутствовало (кривые ОВ, рис. 4.18, 4.19). Для связи фазовой плоскости с физической на рис. 4.20 приведены графики зависимости удельного объема от продольной координаты.

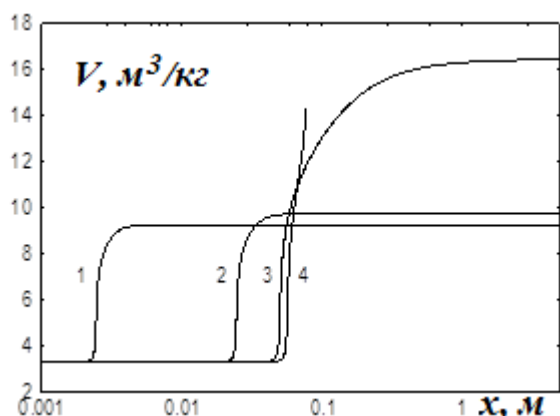


Рис. 4.20. Зависимость удельного объема от продольной координаты

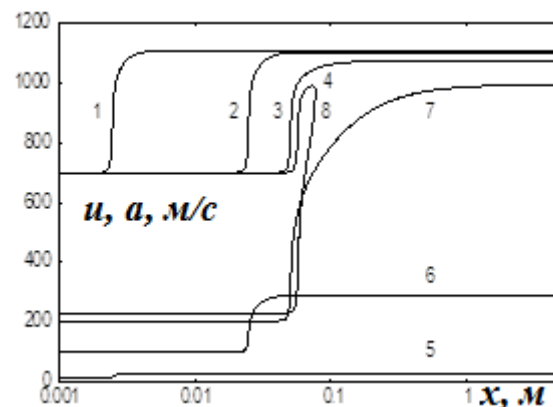


Рис. 4.21. Зависимость скорости (5-8) и замороженной скорости звука (1-4) от продольной координаты.

(1 – $u_0 = 10\text{ м/с}$, 2 – $u_0 = 100\text{ м/с}$, 3 – $u_0 = 203.424\text{ м/с}$, 4 – $u_0 = 230\text{ м/с}$)

На рисунках 4.22, 4.23 приведены графики изменения температуры и концентраций в волне дефлаграции в зависимости от продольной координаты.

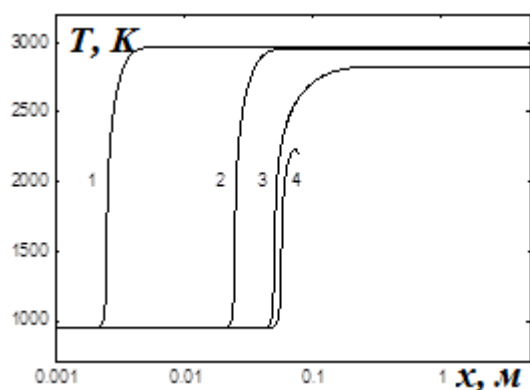


Рис. 4.22. Зависимость температуры от продольной координаты (1 – $u_0 = 10$ м/с, 2 – $u_0 = 100$ м/с, 3 – $u_0 = 203.424$ м/с, 4 – $u_0 = 230$ м/с)

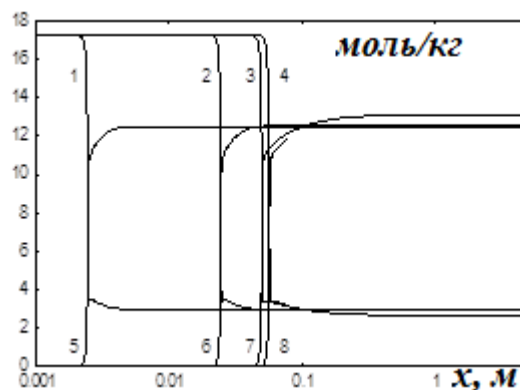


Рис. 4.23. Зависимость мольно-массовых концентраций компонент от продольной координаты (1-4 – H_2 ; 5-8 – H_2O ; 1, 5 – $u_0 = 10$ м/с; 2, 6 – $u_0 = 100$ м/с; 3, 7 – $u_0 = 203.424$ м/с; 4, 8 – $u_0 = 230$ м/с)

Дозвуковой поток в канале постоянного сечения при подводе тепла (в рассматриваемом случае в результате протекания экзотермических химических реакций) ускоряется (рис. 4.21). В точке ЧЖ достигается равенство скорости продуктов сгорания равновесной скорости звука (кривая 7, рис. 4.21), при этом замороженная скорость звука (кривая 4, рис. 4.21) более чем на 70 м/с превосходит равновесную. Запирание потока иллюстрируют кривые 4, 8, рис. 4.21, скорость потока становится равной замороженной скорости звука, при этом состояние термодинамического равновесия не достигается.

4.1.2. Численное моделирование одномерного стационарного равновесного течения в сопле с детонационной волной

Необходимым этапом при создании современных двигательных установок является математическое моделирование физико-химических процессов, протекающих в камере сгорания и сопле. В настоящем разделе рассматривается случай сжигания топлива в стационарной детонационной волне (ДВ) в сопле Лавалья со сверхзвуковым потоком на входе и выходе в случае, когда горючая смесь и продукты сгорания представляют собой смесь совершенных газов [8, 88, 313]. Вопросы, связанные с иницированием детонации, не рассматриваются. При численном моделировании предполагается, что течение одномерное, эффекты вязкости, теплопроводности и диффузии не учитываются. Течение газа на входе в сопло задается сверхзвуковым. Решается прямая задача теории сопла, течение газа до ДВ считается “замороженным” (химический состав не меняется), а после ДВ “равновесным” (состав продуктов

сгорания удовлетворяет условиям термодинамического равновесия). В том случае, если ДВ реализуется в сужающемся канале, она является пересжатой, координата ДВ определяется из условия равенства скорости продуктов сгорания равновесной скорости звука в критическом сечении (рис. 4.24а). В случае, если ДВ реализуется в критическом сечении или в расширяющейся части сопла, для обеспечения последующего ускорения потока до сверхзвуковых скоростей она должна соответствовать режиму ЧЖ (рис. 4.24б).

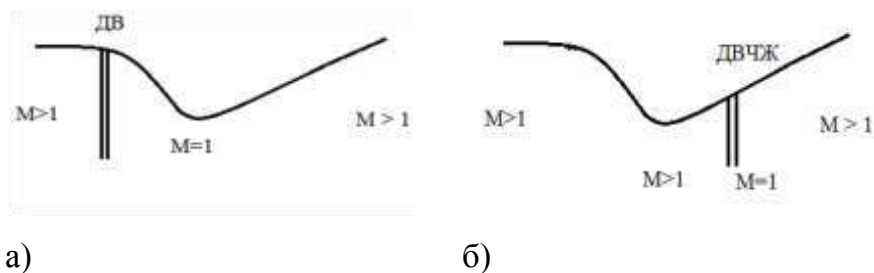


Рис. 4.24. Расположение стационарной ДВ в сужающейся (а) и расширяющейся (б) части канала

Необходимо отметить, что при наличии противодействия в расширяющейся части сопла может образовываться УВ (данный случай не рассматривается), наличие которой приводит к дозвуковому режиму истечения. Также может происходить запираение потока в том случае, если поток тормозится до звуковой скорости в сужающейся части сопла или противодействие слишком велико.

Физико-математическая модель

Система уравнений, описывающая квазиодномерные стационарные течения реагирующего газа в канале переменного сечения, при сделанных выше предположениях в случае отсутствия сильных разрывов имеет вид [8, 208]:

$$\frac{d}{dx} \rho u F = 0, \quad (4.25)$$

$$\frac{d}{dx} (\rho u^2 + p) F = p \frac{dF}{dx}, \quad (4.26)$$

$$\frac{d}{dx} \rho u \left(h + \frac{u^2}{2} \right) F = 0, \quad (4.27)$$

$$p = p(\rho, T, \gamma), \quad (4.28)$$

$$h = h(\rho, T, \gamma). \quad (4.29)$$

На входе в канал считаются заданными:

$$u(x_0) = u_0 > a_0, \quad p(x_0) = p_0, \quad T(x_0) = T_0 < T_B, \quad \gamma_i(x_0) = \gamma_{i0}, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (4.30)$$

Здесь ρ , u , p , T , a , h , γ_i - плотность, скорость, давление, температура, скорость звука, энтальпия и мольно-массовые концентрации смеси газов соответственно, T_B - температура самовоспламенения горючей смеси, $F = F(x)$ - заданная зависимость

площади канала от продольной координаты. Уравнения (4.25)-(4.27) выражают законы сохранения массы, импульса и энергии, (4.28), (4.29) – термическое и калорическое уравнение состояния, соответственно.

В случае ”замороженного” течения состав смеси не меняется, и система уравнений (4.21)-(4.27) дополняется условиями:

$$\gamma_i(x) = \gamma_{i0} \quad . \quad (4.31)$$

В “равновесном” случае γ_i находятся из условий термодинамического равновесия (4.32) и уравнений сохранения элементного состава (4.33) (см. Главу 2).

$$\mu_i(\rho, T, \gamma) = \sum_{k=1}^{N_e} A_i^k z_k, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (4.32)$$

$$\sum_{i=1}^N A_i^k \gamma_i = \sum_{i=1}^N A_i^k \gamma_{i0} = \gamma_k^0, \quad k = 1, 2, \dots, N_e. \quad (4.33)$$

Здесь N_e - число элементов, N – количество рассматриваемых компонентов, μ_i - химический потенциал i -ого компонента, γ_k^0 - мольно-массовые концентрации элементов – известные величины, определяемые по начальному составу, z_k — неизвестные параметры. Соотношения (4.32)-(4.33) задают концентрации как неявно-заданные функции плотности, температуры и элементного состава,

$$\gamma_i = \gamma_i(\rho, T, \gamma^0) \quad (4.34)$$

В сечениях сопла, в которых находятся линии разрыва параметров, выполняются соотношения Ренкина-Гюгонио, являющиеся следствием интегральных законов сохранения, индексом ”Л” помечены параметры до волны, индексом ”П” – за волной.

$$\rho_L u_L = \rho_P u_P, \quad (4.35)$$

$$p_L + \rho_L u_L^2 = p_P + \rho_P u_P^2, \quad (4.36)$$

$$h_L + \frac{u_L^2}{2} = h_P + \frac{u_P^2}{2}. \quad (4.37)$$

В случае УВ соотношения (4.35)-(4.37) дополняются условиями неизменности концентраций при переходе через УВ

$$\gamma_{iЛ} = \gamma_{iП}. \quad (4.38)$$

В случае равновесной ДВ концентрации за волной удовлетворяют условиям термодинамического равновесия (4.32)-(4.33),

$$\gamma_{iЛ} = \gamma_{i0}, \quad \gamma_{iП} = \gamma_i(\rho_P, T_P, \vec{\gamma}^0). \quad (4.39)$$

Существует минимальная скорость $u_{л}$, при которой система (4.35)-(4.37), (4.39) имеет решение.

Из выражений (4.25)-(4.30) путем эквивалентных преобразований с использованием первого начала термодинамики (4.40)

$$dG = -SdT + Vdp + \sum_{i=1}^N \mu_i d\gamma_i, \quad (4.40)$$

могут быть получены уравнения для прироста энтропии

$$\rho u T dS = 0 \quad (4.41)$$

и изменения скорости потока

$$(M^2 - 1)du = u \frac{F_x}{F} dx, \quad (4.42)$$

здесь M — число Маха ($M = \frac{u}{a}$), a — скорость звука,

$$a^2 = \frac{h_T p_\rho - h_\rho p_T}{h_T - p_T / \rho}, \quad (4.43)$$

нижние индексы “ T ”, “ ρ ”, “ x ” обозначают дифференцирование по данному параметру (в равновесном случае с учетом зависимостей (4.34) [58, 97]).

В рассматриваемом случае энтропия может меняться скачком только на ударной или детонационной волне. В областях непрерывности в ”замороженных” и “равновесных” течениях энтропия в соответствии с (4.41) не изменяется - $S = const$. Из (4.42) следует, что дозвуковой поток в сужающемся канале ($F_x < 0$) ускоряется ($du/dx > 0$), в расширяющемся канале ($F_x > 0$) замедляется ($du/dx < 0$). Сверхзвуковой поток в сужающемся канале замедляется, а в расширяющемся канале ускоряется. Для разгона потока от дозвукового до сверхзвукового необходимо одновременное выполнение условий:

$$M^2 = 1 \text{ и } F_x = 0. \quad (4.44)$$

Соотношения (4.25)-(4.44) справедливы при произвольных уравнениях состояния (4.25), (4.29). Рассмотрим случай, когда продукты сгорания являются смесью совершенных газов. В этом случае выражение потенциала Гиббса для смеси [121] имеет вид

$$G(p, T, \gamma) = \sum_{i=1}^N \gamma_i [RT \ln(p\gamma_i / p_0 \sum_{j=1}^N \gamma_j) + G_i^0(T)]. \quad (4.45)$$

Соответствующие термическое и калорическое уравнения состояния имеют вид:

$$p = \rho R \sum_{i=1}^N \gamma_i T \text{ и } h = \sum_{i=1}^N \gamma_i H_i^0(T), \quad (4.46)$$

где $H_i^0(T) = G_i^0(T) + TS_i^0(T)$, $S_i^0(T) = -dG_i^0(T)/dT$.

Путем эквивалентных преобразований система обыкновенных дифференциальных уравнений (4.25)-(4.27) может быть сведена к системе нелинейных алгебраических уравнений.

$$\rho u F = \rho_0 u_0 F_0 = Q_0 \quad (4.47)$$

$$\sum_{i=1}^N \gamma_i H_i^0(T) + \frac{u^2}{2} = \sum_{i=1}^N \gamma_{i0} H_i^0(T_0) + \frac{u_0^2}{2} = h_0 \quad (4.48)$$

$$\sum_{i=1}^N \gamma_i \left(-R \ln \left(\frac{\rho R T \gamma_i}{p_0} \right) + S_i^0(T) \right) = \sum_{i=1}^N \gamma_{i0} \left(-R \ln \left(\frac{\rho_0 R T_0 \gamma_{i0}}{p_0} \right) + S_i^0(T_0) \right) = S_0 \quad (4.49)$$

Соотношения (4.47), (4.48) выполняются не только в областях непрерывности течения, но и на ударных и ДВ (см. (4.35)-(4.37)). В этом случае индекс “0” соответствует параметрам перед волной, параметры без индекса соответствуют параметрам за волной. При переходе через ударную и детонационную волну энтропия возрастает, и вместо (4.49) необходимо использовать связь между давлением и плотностью, которая является следствием (4.35)-(4.37) и носит название – прямая Михельсона-Релея,

$$p - p_0 - \rho_0^2 u_0^2 \left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho} \right) = 0. \quad (4.50)$$

Система (4.46)-(4.49) в случае замороженного течения дополняется условиями неизменности концентраций (4.31), в “равновесном” случае из (4.32), (4.33), (4.40), (4.45) могут быть получены N_e нелинейных алгебраических уравнений (4.51)

$$\sum_{i=1}^N A_i^k \exp \left[\left(\sum_{k=1}^{N_e} A_i^k z_k - G_i^0(T) \right) / RT \right] = \gamma_k^0, \quad k = 1, 2, \dots, N_e, \quad (4.51)$$

из которых могут быть найдены z_k , а концентрации γ_i рассчитаны из (4.52):

$$\gamma_i = \frac{p_0}{\rho R T} \sum_{i=1}^N A_i^k \exp \left[\left(\sum_{k=1}^{N_e} A_i^k z_k - G_i^0(T) \right) / RT \right], \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (4.52)$$

До ДВ течение считается “замороженным”, параметры находятся из системы (4.46)-(4.49), (4.31), за ДВ – “равновесным”, решается система (4.47)-(4.49), (4.51), (4.52), при этом энтропия за ДВ находится из (4.47), (4.48), (4.50)-(4.52).

Рассмотрены несколько элементарных задач, решение которых позволяет проанализировать реализующееся течение в канале переменного сечения. Заданными

считаются параметры газа в начальном сечении (4.30), соответственно и расход газа Q_0 , и полная энтальпия H_0 . Необходимо отметить, что решение задач зависит исключительно от соотношения площадей канала во входном (0), критическом (*) и выходном (K) сечениях, в результате в рассматриваемых точках находится полный вектор параметров: $\rho, u, p, T, a, h, S, \gamma_i$.

Задача 1 ($\Pi_{1,L}^{I,J}, I=P,3; J=D,C; L=0,*,K, x$). Расчет замороженного (3) или равновесного (P) течения при заданном значении энтропии S . Решается система уравнений (4.46)-(4.49), при этом может быть найден дозвуковой (Д) или сверхзвуковой корень (С). Задача может не иметь решения.

Задача 2 ($\Pi_{2,L}^I, I=P,3; L=0,*,K, x$). Расчет замороженного (3) или равновесного (P) течения при условии равенства скорости газа скорости звука в текущем сечении канала. Решаются уравнения (4.46)-(4.48), дополненные условиями (4.31) или (4.34) и условием

$$u = a. \quad (4.53)$$

Задача 3 ($\Pi_{3,L}^I, I=P,3; L=0,*,K, x$). Расчет параметров течения за стационарной ударной или ДВ, помещенной в рассчитываемое сечение (x), параметры перед волной рассчитываются из решения задачи 1 в "замороженной" постановке ($\Pi_{3,x}^{3,C}$). Скорость газа перед волной должна быть больше скорости звука или скорости, соответствующей волне ЧЖ. Решаются уравнения (4.46)-(4.48), (4.50), дополненные условиями неизменности концентраций (4.31) в случае УВ или условиями термодинамического равновесия (4.51)-(4.52) в случае ДВ.

Алгоритм расчета течения в сопле с детонационной волной

1. Рассчитываются параметры в начальном сечении. Решается задача 1 в замороженной постановке ($\Pi_{1,0}^{3,C}$).
2. Рассчитываются параметры замороженного звукового течения в критике ($\Pi_{2,*}^3$). Если $S_{2,*}^3 < S_{1,0}^{3,C}$, то в сужающейся части сопла происходит запираение течения и рассматриваемая задача решения не имеет. Если $S_{2,*}^3 \geq S_{1,0}^{3,C}$, то рассчитываются параметры в начальном сечении в предположении, что в нем реализуется ДВ ($\Pi_{3,0}^P$) и в критическом сечении в предположении, что в нем реализуется равновесное звуковое течение ($\Pi_{2,*}^P$). Если $S_{2,*}^P > S_{3,0}^P$, то в рассматриваемом сопле ДВ не реализуется.

3. Рассчитываются параметры равновесного звукового течения и замороженного сверхзвукового течения в начальном, критическом и выходном сечении сопла ($\Pi_{2,L}^P$, $\Pi_{1,L}^3$, $L=0, *, K$). Помимо основного набора параметров вычисляется величина скорости потока перед волной, соответствующая случаю, когда в рассчитываемом сечении

$$\text{находится ДВЧЖ: } u_{Л2,L} = \sqrt{\frac{P_{2,L}^P - P_{1,L}^{3,C}}{\rho_{2,L}^P - \rho_{1,L}^3} \frac{\rho_{2,L}^P}{\rho_{1,L}^3}}; L=0, *, K.$$

$$3.1. u_{1,0}^{3,C} > u_{Л2,0} \quad \text{и} \quad u_{1,*}^{3,C} > u_{Л2,*} \Rightarrow \text{ДВ в т. х: } x_0 < x < x_*;$$

$$3.2. u_{1,*}^{3,C} < u_{Л2,*} \text{ (или не сущ.) и } u_{1,K}^{3,C} > u_{Л2,K} \Rightarrow \text{ДВ ЧЖ в т. х: } x_* < x < x_K;$$

$$3.3. u_{1,*}^{3,C} < u_{Л2,*} \text{ (или не сущ.) и } u_{1,K}^{3,C} < u_{Л2,K} \Rightarrow \text{ДВ ЧЖ в сопле нет.}$$

В случае, если ДВ находится в сужающейся части сопла ($x: x_0 < x < x_*$), то для расчета координата нахождения ДВ определяется из условия равенства энтропии за ДВ энтропии в критическом сечении, т.е. $S_{3,x}^P = S_{2,*}^P$. Для расчета параметров в сопле при $X < x$ рассчитывается замороженное сверхзвуковое течение ($\Pi_{1,X}^{3,C}$), при $X=x$ рассчитывается ДВ ($\Pi_{3,x}^P$), далее с полученной энтропией при $X < x_*$ дозвуковое равновесное течение ($\Pi_{1,X}^{P,D}$), а при $x > x_*$ сверхзвуковое равновесное течение ($\Pi_{1,X}^{P,C}$).

В случае, если ДВ находится в расширяющейся части сопла ($x: x_* < x < x_K$), то для расчета положения ДВ используется условие равенства скорости потока скорости газа перед волной ЧЖ: $u_{1,x}^{3,C} = u_{Л2,x}$, т.е. при $X < x$ рассчитывается замороженное сверхзвуковое течение ($\Pi_{1,X}^{3,C}$), при $x_* < X < x$ дополнительно рассчитывается течение в предположении, что ДВ ЧЖ находится в текущем сечении ($\Pi_{2,X}^P$), далее с полученной энтропией ($S_{2,x}^P$) при $X > x$ рассчитывается сверхзвуковое равновесное течение ($\Pi_{1,X}^{P,C}$).

Особенности численной реализации

При численной реализации важно, чтобы “решатели“ задач 1-3 приводили к одинаковым результатам при смене режима течения. Например в результате решения задачи 1 в дозвуковой и сверхзвуковой постановках и задачи 2 должны получаться одни и те же параметры в сечениях сопла, в которых скорость потока равна скорости звука. Для достижения данного результата при решении задачи 1 обеспечивается выполнение на каждой итерации условия $u > a$ при поиске сверхзвукового корня (соответственно

$u < a$ при поиске дозвукового корня). При нахождении начального приближения скорости (u), удельный объем (V) и температура (T), входящие в соотношения (4.47) и (4.48), представляются как функции скорости. Из (4.47) следует, что $V = u \frac{F}{Q_0}$, $\frac{dV}{du} = \frac{F}{Q_0}$.

Температура, при заданных скорости и удельном объеме с учетом (4.32-4.33), (4.46)

может быть найдена из (4.48) соответственно, $\frac{dT}{du} = \frac{u + \frac{F}{Q_0} \sum_{i=1}^N H_i^0(T) \left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial V} \right)_T}{\sum_{i=1}^N \left(\gamma_i \frac{dH_i^0(T)}{dT} + H_i^0(T) \left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial T} \right)_v \right)}$. При

этом в равновесном случае в качестве элемента используется оригинальная вычислительная процедура, решающая задачу расчета равновесного состава газовой смеси при заданных плотности, температуре и элементном составе (уравнения (4.51-4.52)) [97], в результате решения которой находятся концентрации компонентов γ_i , а также $\left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial V} \right)_T$ и $\left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial T} \right)_p$, $i=1, \dots, N$, т.е. реализуется зависимость (4.34), в замороженном

случае концентрации считаются неизменными. Далее из соотношения (4.43) находится скорость звука. Если значение скорости потока оказывается меньше (больше) скорости звука, а ищется сверхзвуковой (дозвуковой) корень, то начальное приближение скорости увеличивается (уменьшается) до тех пор, пока не выполнится условие, что $u > a$ ($u < a$). Окончательное значение скорости потока в рассматриваемой точке находится из решения уравнения (4.49) итерационным методом, при этом считается, что плотность и температура являются функциями скорости, также на каждой итерации контролируется условие $u > a$ (или $u < a$). Отсутствие решения соответствует случаю ”запирания потока”.

Результаты математического моделирования

Рассмотрим течение стехиометрической водородо-воздушной горючей смеси, втекающей в канал (рис. 4.15) [134] со сверхзвуковой скоростью u_0 ($T_0 = 400$ К, $p_0 = 101325$ Па, скорость детонации ЧЖ в покоящейся смеси составляет 1955.1 м/с). Продукты сгорания включают 13 компонентов (H_2O , H_2 , N_2 , OH , O_2 , O_3 , HO_2 , H_2O_2 , NO , Ag , H , O , N), свойства которых заимствуются из [121]. В соответствии с вышеприведенным алгоритмом проанализируем характер течения в канале, для этого

решим задачи 1 и 2, для канала 1 с начальными скоростями $u_0 = 2800, 2200, 2035, 2010$ м/с и для канала 2 - $u_0 = 2800, 2200, 2105, 2080$ м/с, результаты поместим в таблицу 4.1.

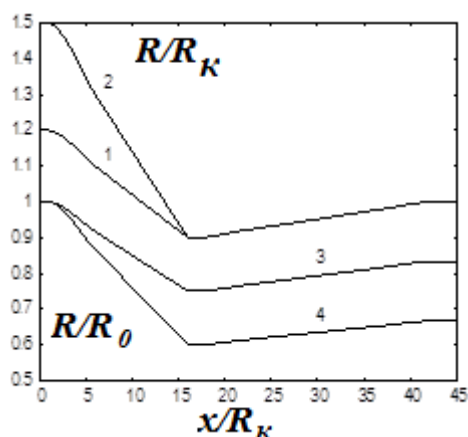


Рис. 4.25. Зависимость безразмерного радиуса сопла от продольной координаты (R_K – радиус среза сопла, R_0 – радиус входного сечения сопла; 1, 3 – контур 1; 2, 4 – контур 2)

Таблица 4.1

	Сопло № 1									Сопло № 2							
		I		II		III		IV		I		II		III		IV	
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17
1	$u_{1,0}^{3,C}$	2800		2200		2035		2010		2800		2200		2105		2080	
2	$u_{J2,0}^P$	2198	>0	2009	>0	1970	>0	1965	>0	2198	>0	2009	>0	1986	>0	1980	>0
3	$S_{3,0}^P$	11029		10791		10748		10743		11029		10791		10765		10758	
4	$u_{1,*}^{3,C}$	2747		2130		1958		1932		2695		2060		1957		1930	
5	$u_{J2,*}^P$	2188	>0	1998	>0	1962	<0	1957	<0	2176	>0	1986	>0	1966	<0	1965	<0
6	$S_{2,*}^P$	10944		10633		10562		10552		10779		10475		10433		10423	
7	$S_{3,*}^P$	10825		10599		-		-		10669		10455		-		-	
8	$u_{1,K}^{3,C}$	2768		2158		1989		1963		2721		2095		1994		1968	
9	$u_{J2,K}^P$	2192	>0	2002	>0	1965	>0	1960	>0	2182	>0	1992	>0	1970	>0	1966	>0
10	$S_{2,K}^P$	11022		10709		10637		10626		10857		10549		10508		10497	
11	x	7.72		13.62		20.14		38.87		12.14		15.30		23.12		39.90	
12	R_x	1.07		0.95		0.91		0.99		1.05		0.93		0.92		0.99	
13	$u_{1,x}^{3,C}$	2780		2144		1962		1960		2733		2071		1967		1965	

В столбцах 3, 5, 7, 9, 11, 13, 15, 17 приводится знак разности скоростей замороженного течения и скорости потока перед ДВ ЧЖ $u_{1,L}^{3,C} - u_{J2,L}^P$, $L=0, *, K, x$, если бы она находилась в соответствующем сечении. В вариантах I и II соответствующие разности в начальном и критическом сечениях положительны (столбцы 3,5 и 11, 13) и, следовательно, ДВ находится в сужающейся части канала в точках, соответствующих координате, приведенной в строке 11, и радиусу – строка 12. Уменьшение начальной скорости потока приводит к перемещению ДВ вниз по потоку (столбцы 2, 4 и 10, 12). В вариантах III и IV $u_{1,*}^{3,C} - u_{J2,*}^P < 0$, а $u_{1,K}^{3,C} - u_{J2,K}^P > 0$, следовательно, ДВ ЧЖ находится в

расширяющейся части канала в точках, соответствующих координате, приведенной в строке 11 и радиусу – строка 12.

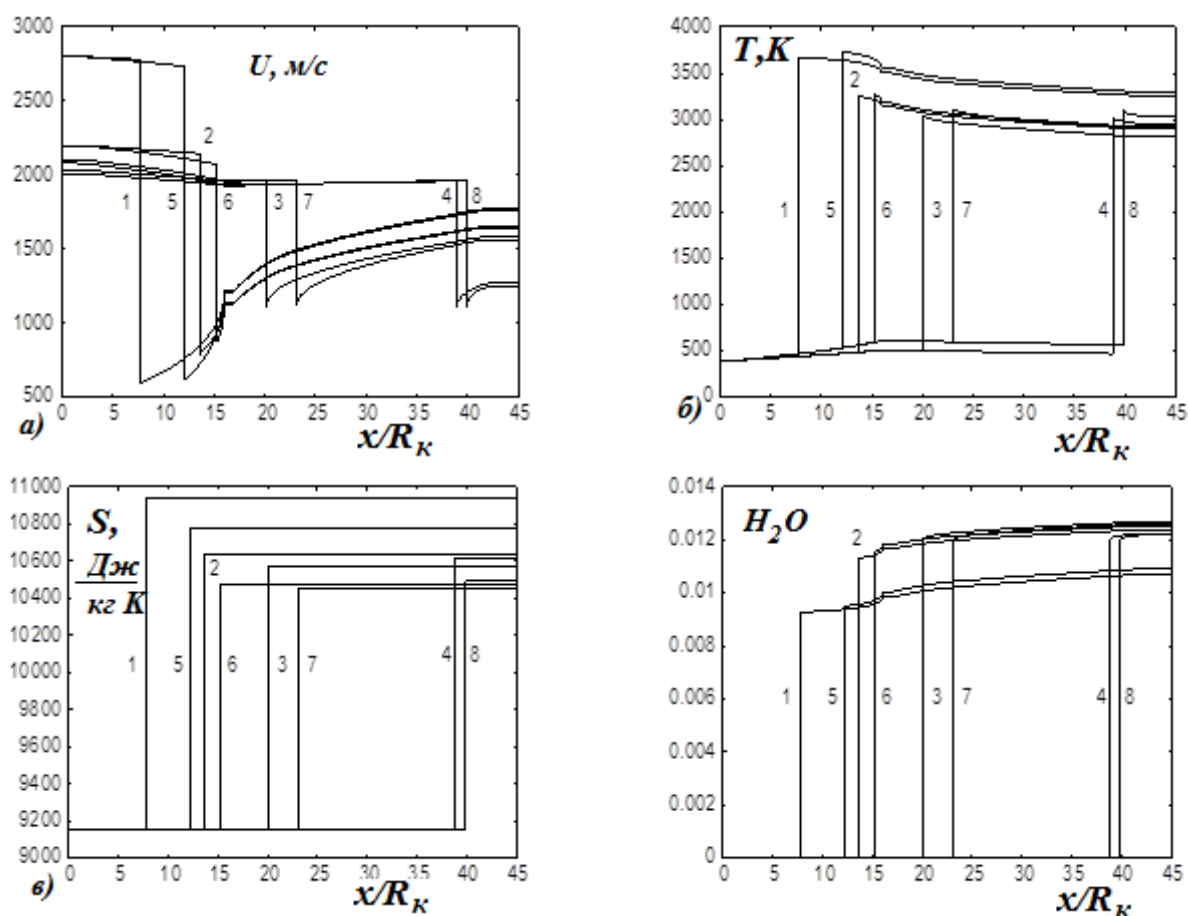


Рис.4.26. Зависимость параметров в сопле от продольной координаты. (а)-скорость, б) - температура, в) – энтропия, г) – концентрация воды; кривые 1-4 – сопло 1; 5-8 – сопло 2; 1, 5 - $u_0 = 2800$ м/с, 2, 6 - 2200 м/с; 3 - 2035 м/с; 4 – 2010 м/с; 7 - 2105 м/с; 8 - 2080 м/с)

После определения координаты ДВ в соответствии с п. 3 вышеприведенного алгоритма могут быть рассчитаны распределения параметров в сопле (рис. 4.26). Сверхзвуковой поток (рис. 4.26а) в сужающейся части канала тормозится и ускоряется в расширяющейся. Дозвуковой поток (рис. 4.26а) ускоряется в сужающейся части канала до скорости звука, которая достигается в минимальном сечении сопла. В рассмотренных вариантах температура (рис. 4.26б) горючей смеси до ДВ ниже температуры самовоспламенения. Энтропия потока (рис. 4.26 в) постоянна на участках от входного сечения канала до ДВ и от ДВ до выходного сечения, на ДВ она увеличивается скачком. Концентрация паров воды (рис. 4.26г) до ДВ равна нулю, в ДВ горючая смесь сгорает и концентрация воды возрастает скачком до своего равновесного значения.

Существуют минимальные скорости входного потока, при которых ДВ может находиться в расширяющейся (контур 1 (рис. 4.25)– 2062 м/с, 2 – 2078 м/с) и в сужающейся (1 – 2091 м/с, 2 – 2115 м/с) частях канала.

При известных давлении (p_0), температуре (T_0) и составе горючей смеси в начальном сечении в результате решения уравнений (4.35)-(4.38) может быть построена RR – диаграмма (рис. 4.27) рассматриваемого течения. По оси абсцисс (рис. 4.27) откладывается отношение критического радиуса сопла к начальному, по оси ординат – отношение радиуса, в котором находится стационарная ДВ к начальному.

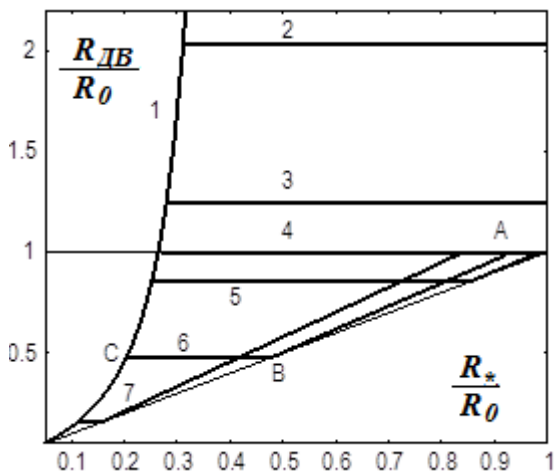


Рис. 4.27. RR -диаграмма

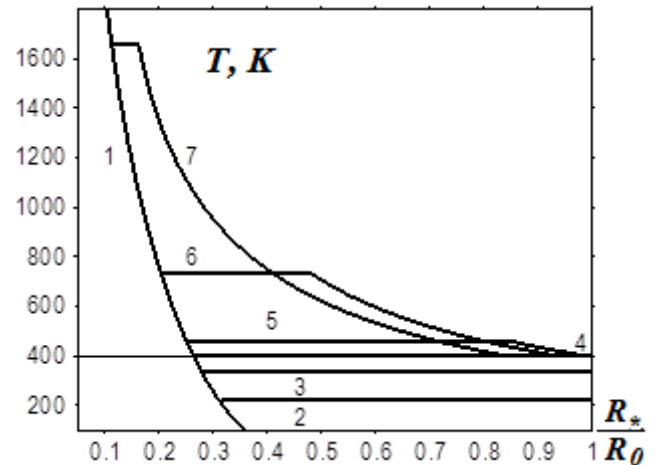


Рис. 4.28. Температура топлива перед ДВ

($p_0=101325$ Па, $T_0=400$ К, 1 – безразмерный радиус запираания течения; 2 - $u_0 = 1800$ м/с, 3 – 1900 м/с, 4 – 1955.1 м/с; 5 – 2000 м/с; 6 – 2200 м/с; 7 -2800 м/с)

Кривые 2 и 3 (рис. 4.27-4.28) соответствуют начальной скорости потока меньшей, чем скорость горючей смеси перед стационарной волной ЧЖ (ей соответствует $u_0 = 1955.1$ м/с – кривая 4). В этом случае в канале возможно существование стационарной волны ЧЖ в расширяющейся части, при отношении текущего радиуса канала к начальному, превосходящем единицу ($u_0=1800$ м/с, кривая 2 - $\frac{R_{DV}}{R_0} \approx 2.1$ (рис. 4.17), $u_0 = 1900$ м/с, кривая 3 - $\frac{R_{DV}}{R_0} \approx 1.2$ (рис. 4.27)). При этом критический радиус сопла должен превышать значение, при котором в сужающемся канале поток тормозится до звукового (кривая 1) и происходит запираание сопла. Режиму ЧЖ во всей области значений R_* / R_0

соответствует кривая 4, при этом ДВ ЧЖ реализуется в сечении где $\frac{R_{DV}}{R_0} = 1$ (рис. 4.27).

Если в начальном сечении сопла скорость потока превосходит скорость,

соответствующую режиму ЧЖ, то допускаются различные режимы течения, которые можно проиллюстрировать рассмотрев кривую 6 ($u_0=2200$ м/с, рис.4.27-4.28). Если отношение радиуса критического сечения к начальному $R_* / R_0 > 0.92$ (правее т. А, рис. 4.27), то решение рассматриваемой задачи отсутствует (звуковое течение в критическом сечении требует большей энтропии, чем может быть достигнута в ДВ). Участок АВ кривой 6 (рис. 4.27) соответствует пересжатой ДВ в сужающейся части канала в точке, соответствующей $\frac{R_{DV}}{R_0}$, точка В отвечает режиму ЧЖ в критическом сечении $\frac{R_{DV}}{R_0} =$

$\frac{R_*}{R_0} \approx 0.5$. При дальнейшем уменьшении критического радиуса сопла ДВ ЧЖ находится

в расширяющейся части канала, при этом $\frac{R_{DV}}{R_0} \approx 0.5$, точка С соответствует $\frac{R_*}{R_0} \approx 0.2$,

при $\frac{R_*}{R_0} < 0.2$ происходит запирание потока. Необходимо отметить, что для

корректности используемой модели температура потока перед ДВ (рис. 4.28) должна быть ниже температуры самовоспламенения горючей смеси. На RR диаграмме (рис. 4.27) могут быть найдены точки, соответствующие рассмотренным течениям в каналах 1 и 2 (рис. 4.25). Например, в канале 1 - $\frac{R_*}{R_0} = 0.75$ - проведем соответствующую

вертикальную прямую , $\frac{R_K}{R_0} = 0.83$ - проведем соответствующую горизонтальную

прямую, найдем скорости u_0 , соответствующие точкам с координатами (0.75, 0.75) и (0.83, 0.83) получим 2115 м/с и 2078 м/с соответственно. Также может быть рассчитана точка (0.75, 1.0) , соответствующая максимальной скорости потока, при которой в канале может существовать ДВ - $u_0=3941$ м/с. Таким образом, при $3941 > u_0 > 2115$ ДВ находится в сужающейся части канала, при $2115 > u_0 > 2078$ ДВ ЧЖ в расширяющейся части канала. В случае например, $u_0 = 2800$ м/с (рис. 4.27), находим точку пересечения

вертикальной прямой $\frac{R_*}{R_0} = 0.75$ с кривой 7 (рис. 4.27), получаем точку (0.75, ~0.9),

следовательно, расположению пересажатой ДВ соответствует $\frac{R_{DV}}{R_0} \approx 0.9$ (рис. 4.17) и продольная координата ДВ $\frac{X}{R_k} \approx 7.5$ (рис. 4.15, кривая 3, рис. 4.26, кривая 1).

Течение в сопле с двумя критическими сечениями

Как уже отмечалось, в равновесном и замороженном случаях параметры потока не зависят от продольной координаты, а являются функцией исключительно отношения площадей (радиусов) текущего и начального сечения сопла (рассматривается случай $R_0 > R > R_*$) и соотношения в нем между скоростью потока и скоростью звука. Форма канала при этом между начальным и минимальным сечением является несущественной. Сверхзвуковой поток в сужающемся канале тормозится, и для любых начальных параметров потока существует значение радиуса канала, при котором поток становится звуковым; если этот радиус больше критического происходит запираание потока, и стационарное решение в таком канале отсутствует. Значению радиуса канала, при котором происходит запираание замороженного потока, отображено кривой 1 на рисунке 4.27. Энтропия, достигаемая в стационарной детонационной волне, является возрастающей функцией скорости потока перед ней. Поэтому, если энтропия за помещенной в начальном сечении детонационной волной оказывается ниже, чем энтропия в критическом сечении, при предположении, что в нем реализуется звуковое равновесное течение, то на участке между входным сечением и критическим ДВ реализоваться не может. В этом случае решением рассматриваемой задачи может являться только волна Чепмена-Жуге, которая реализуется между критическим и выходным сечением канала, причем при радиусах канала, превышающих радиус входного сечения. Данному случаю соответствуют кривые 2 и 3 рис. 4.27. Предельным является случай, когда скорость потока на входе в канал равна в точности скорости детонации Чепмена-Жуге, тогда в случае, если $R_* < R_0$ для любого из допустимых радиусов критического сечения детонационная волна Чепмена-Жуге реализуется между критическим и выходным сечением канала при $R = R_0$. Этому случаю соответствует кривая 4 рис. 4.27. Если скорость потока на входе в канал превосходит скорость Чепмена-Жуге, то существует максимальное предельное значение критического радиуса, начиная с которого решения со стационарной детонационной волной с последующим разгоном потока до сверхзвуковых скоростей не существует. Предельное значение критического радиуса соответствует равенству энтропий за детонационной

волной, помещенной в критическое сечение, и при реализуемом в нем звуковом равновесном течении. Иначе говоря, когда детонационная волна Чепмена-Жуге попадает точно в минимальное сечение. Отсутствию решения соответствует полочка вблизи единицы по оси абсцисс на кривых 5-7 рис. 4.27. Уменьшение радиуса критического сечения приводит к тому, что в канале существует решение с пересжатой детонационной волной между начальным и минимальным сечениями. Например, отрезок АВ на кривой 6 рис. 4.27 (аналогичные отрезки имеются на кривых 5, 7, которые соответствуют другим начальным скоростям потока). Точка **B** соответствует радиусу минимального сечения сопла, при котором пересжатая детонационная волна переходит в волну Чепмена-Жуге. При дальнейшем уменьшении минимального радиуса канала радиус, при котором находится детонационная волна Чепмена-Жуге не меняется, при этом она располагается справа от минимального сечения. Данному случаю соответствует постоянный участок левее точки **B** рис. 4.27.

Необходимо отметить, что в ряде работ [181, 253] показано, что ударные волны, расположенные в сужающемся канале являются неустойчивыми, а в расширяющемся канале - устойчивыми. В связи с этим представляет интерес рассмотреть течение со стационарной детонационной волной в канале с двумя критическими сечениями.

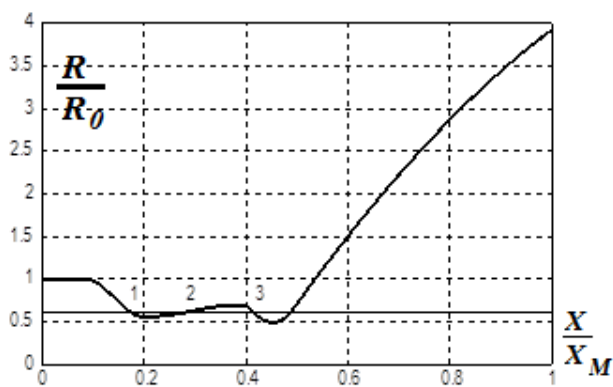


Рис. 4.29. Сопло с двумя критическими сечениями. $R_1/R_0=0.560$, $R_2/R_0=0.694$, $R^*/R_0=0.493$.

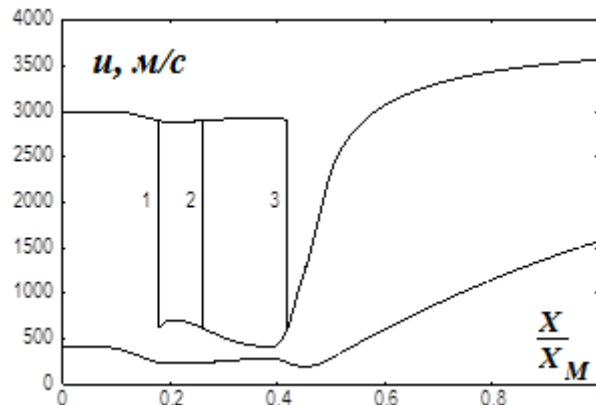


Рис. 4.30. Распределения скорости

Будем считать, что радиус начального сечения – R_0 , радиус первого минимального сечения – R_1 , максимальный радиус второго участка – R_2 , минимальный радиус сопла – R^* . Тогда из проведенного выше качественного анализа следует, что стационарная пересжатая детонационная волна в таком сопле в зависимости от начальной скорости может быть расположена либо на одном, либо на трех участках. При $R_0 > R > R_2$ - на участке 1, при $R_2 > R > R_1$ - на участках 1, 2, 3, при $R_1 > R > R^*$ на участке 3. Причем

устойчивой детонационной волна будет только на участке 2. Приведенная на рисунке 4.27 **R-R** диаграмма позволяет предсказать положение стационарной детонационной волны, в рассматриваемом случае $R^*/R_0=0.5$, видно, что при скорости потока 2200 м/с, ДВ должна находиться рядом с минимальным сечением сопла, а при – 2700 м/с – при $R/R_0=0.56$. Расчеты показывают, что минимальная скорость входного потока, при которой существует устойчивая стационарная детонационная волна – 2698 м/с. На рис. 4.30 приведены рассчитанные распределения скорости при начальной скорости потока 3000 м/с для различных положений стационарной пересжатой детонационной волны. Положение ДВ соответствует одинаковым отношениям $R/R_0=0.5875$, но относится к разным участкам сопла. Необходимо отметить, что графики скорости и других параметров течения в рассматриваемой постановке полностью подобны и ложатся друг на друга. Из графиков видно, что, как и следовало ожидать, сверхзвуковой поток разгоняется в расширяющемся канале и тормозится в сужающемся, а дозвуковой поток разгоняется в сужающемся канале и тормозится в расширяющемся. Полученные в результате равновесных расчетов результаты являются хорошим начальным приближением для нестационарных расчетов, которые позволят ответить на вопрос об устойчивости стационарной детонационной волны в канале с двумя критическими сечениями. Нестационарные расчеты, учитывающие неравновесные химические реакции, подтверждают вывод, сделанный в [181, 253], что устойчивым является детонационная волна в расширяющемся канале (кривая 2, рис. 4.30), при этом, если в качестве начального приближения для нестационарного расчета задать кривую 3, то решение с течением времени приходит в положение 2, в котором стабилизируется.

Необходимо отметить, что реальная картина течений с детонационными волнами является крайне сложной, многомерной и многофакторной [8, 21, 134, 139, 182, 191, 280]. Приведенная в данном разделе математическая постановка задачи может быть полезной при предварительном анализе течения, а также в качестве начальных данных для многомерного моделирования.

4.1.3. Распад разрыва в детонирующем газе

Приводятся результаты численного решения задачи о распаде разрыва на границе “инертный газ – горючая смесь”. В качестве инертного газа рассматривался гелий, в качестве горючей смеси – гремучий газ, разбавленный аргоном. Задача решалась в

“замороженной”, “равновесной” и “неравновесной” постановках [60, 72, 79, 300]. Показано, что параметры стационарной пересжатой детонационной волны, определенные в результате численного решения нестационарных уравнений химически неравновесной газовой динамики, могут быть получены из решения автомодельной задачи о распаде разрыва в “равновесной” постановке.

Моделирование нестационарных течений химически реагирующего многокомпонентного газа с детонационными волнами является сложной и трудоемкой задачей. Для практически важных приложений часто представляет интерес не моделирование процесса инициирования детонации, а предсказание параметров уже сформировавшихся детонационных волн. В разделе показывается, что в ряде случаев параметры плоских стационарных детонационных волн, которые получаются при ресурсоемком численном решении нестационарных уравнений физической газовой динамики, могут быть рассчитаны без больших вычислительных затрат [79]. Необходимо отметить, что используемые вычислительные алгоритмы разработаны для произвольных многокомпонентных смесей.

В начальный момент времени, предшествующий распаду разрыва (РР), задано кусочно-постоянное распределение параметров с разрывом при $X=0$, левое полупространство заполнено инертным газом гелием (He), находящимся (рис. 4.31) под высоким давлением, правое - горючей смесью водорода с кислородом, разбавленной аргоном ($8\%(O_2+H_2)+92\%Ar$, данная смесь экспериментально исследовалась в [204]). Газы в обоих полупространствах покоятся, температура одинаковая и равна 298.15 К. Эффекты, связанные с вязкостью, теплопроводностью и диффузией, не учитываются.

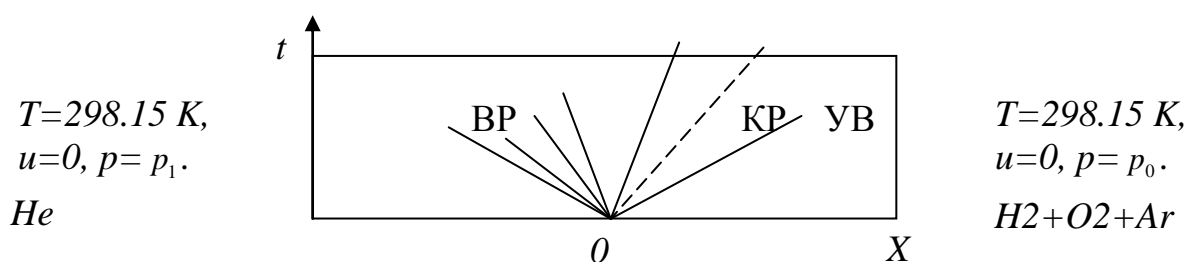


Рис. 4.31. Схема течения.

В рассматриваемом случае [79] временная развертка течения (рис.4.1), реализующаяся после РР, включает: ударную волну (УВ), распространяющуюся по горючей смеси, контактный разрыв (КР) и веер волн разрежения (ВР), распространяющийся в инертном газе [107]. Для описания течения в областях

непрерывности используются уравнения физической газовой динамики в дифференциальной форме [107].

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho(e + \frac{u^2}{2}) \\ \rho \gamma_j \end{bmatrix} + \frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho u(e + \frac{u^2}{2} + p/\rho) \\ \rho u \gamma_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ W_j, j=1, \dots, N \end{bmatrix}, \quad (4.54)$$

где t - время, x – пространственная координата, ρ , u , p , e - плотность, скорость, давление, внутренняя энергия смеси соответственно, γ_j , W_j - мольно-массовые концентрации j -ой химической компоненты и скорость её изменения в единице объема смеси, N - число учитываемых компонент.

В областях разрыва параметров течения (контактный разрыв, ударная волна) выполняются соотношения типа Ренкина-Гюгонио [232], являющиеся следствием интегральных законов сохранения и связывающие параметры слева и справа от рассматриваемого разрыва.

$$\begin{aligned} \rho_{\Pi}(D - u_{\Pi}) &= \rho_{\Pi}(D - u_{\Pi}), \\ p_{\Pi} + \rho_{\Pi}(D - u_{\Pi})^2 &= p_{\Pi} + \rho_{\Pi}(D - u_{\Pi})^2, \\ \rho_{\Pi}(D - u_{\Pi})(e_{\Pi} + \frac{p_{\Pi}}{\rho_{\Pi}} + \frac{(D - u_{\Pi})^2}{2}) &= \rho_{\Pi}(D - u_{\Pi})(e_{\Pi} + \frac{p_{\Pi}}{\rho_{\Pi}} + \frac{(D - u_{\Pi})^2}{2}). \end{aligned} \quad (4.55)$$

Здесь D – скорость разрыва.

Для замыкания системы (4.54)-(4.55) используется модель термодинамики, приведенная в [121], включающая калорическое и термическое уравнения состояния для смеси совершенных газов.

$$p = R \sum_{i=1}^N \gamma_i \rho T, \quad e = \sum_{i=1}^N \gamma_i e_i^0(T). \quad (4.56)$$

Здесь T – температура, $e_i^0(T)$ - стандартные внутренние энергии индивидуальных веществ [121].

В случаях, когда химические реакции не происходят ($W_i \equiv 0$, “замороженная” постановка) и, когда химические реакции за УВ происходят с бесконечно большой скоростью (“равновесная” постановка, концентрации γ_i удовлетворяют уравнениям $W_i(\rho, T, \vec{\gamma}) = 0$), рассматриваемая задача является автомодельной, и все искомые параметры течения зависят от переменной $\xi = \frac{x}{t}$. В этих случаях решение задачи о

распаде разрыва содержит зоны постоянных параметров (между УВ и КР и между КР и ВР) и зону переменных параметров внутри ВР [107]. Вычислительные алгоритмы получения автомодельного решения описаны в [72].

Рассмотрим автомодельную задачу о распаде разрыва на границе “инертный газ – горючая смесь” в двух постановках. Первая – “замороженная” - состав газовой смеси при переходе через УВ не меняется, вторая – “равновесная” - параметры горючей смеси перед УВ остаются неизменными, а за УВ удовлетворяют условиям химического равновесия [72].

Рассматривается распад разрыва на границе, слева – гелий (He), находящийся под высоким давлением; справа - горючая смесь - $8\%(O_2+H_2)+92\%Ar$. При численном моделировании считается, что в состав продуктов сгорания входят 10 компонент, а именно - $H_2, OH, H_2O, O_2, O_3, HO_2, H_2O_2, H, O, Ar$, теплофизические свойства которых заимствованы из [121]. Варьируется начальный перепад давлений p_1/p_0 . На рис. 4.32-4.35 приведены результаты решения “замороженной” и “равновесной” задач, а именно: зависимости от начального перепада давлений, 2 - скорости УВ, распространяющейся по горючей смеси, 3, 4, 5 – давления, мольной доли воды и температуры соответственно справа от КР.

Из рисунков 4.32-4.35 видно, что решение задачи о распаде произвольного разрыва в “замороженной” постановке не зависит от абсолютной величины давления p_0 , а зависит только от перепада давлений p_1/p_0 . В “равновесной” постановке зависимость решения от p_0 начинает проявляться при $p_1/p_0 > 100$. Необходимо отметить, что алгоритм решения задачи о распаде произвольного разрыва в предположении, что продукты сгорания за УВ находятся в состоянии термодинамического равновесия, сходится в случае, когда давление на КР меньше давления в точке Чепмена-Жуге (область левее точки А рис. 2-5). Однако в этом случае рассчитанная скорость УВ (рис. 4.32) относительно газа за ней превосходит скорость звука, следовательно, данное решение нефизично [232]. Решения, расположенные правее точки минимума (т. А рис. 4.32-4.35), соответствуют распространению по горючей смеси пересжатой детонационной волны (ДВ) [232].

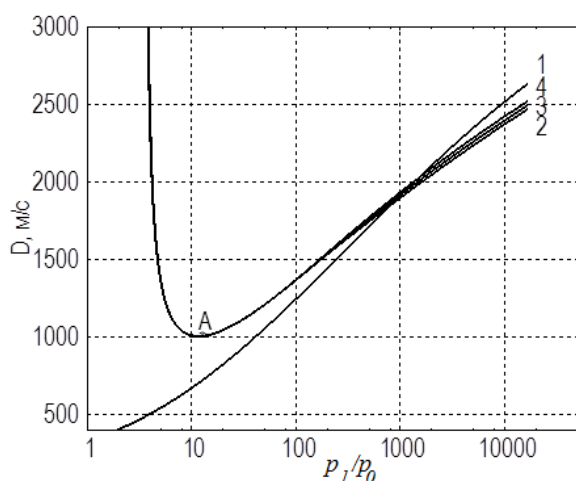


Рис. 4.32. Зависимость скорости УВ от начального перепада давлений. 1 – неизменный состав, 2 – 4 – за УВ – термодинамическое равновесие.

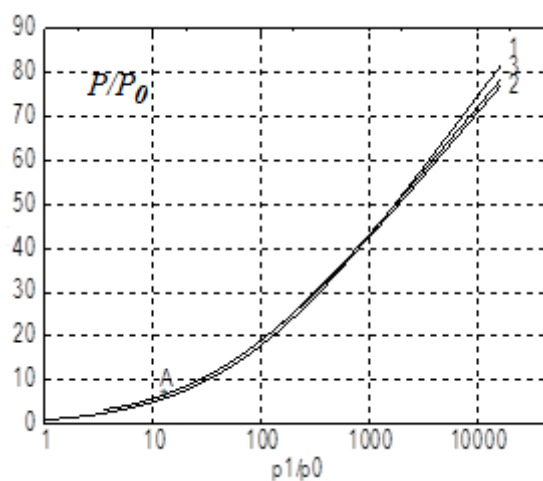


Рис. 4.33. Зависимость давления на КР от начального перепада давлений. 1 – неизменный состав, 2 – 3 – за УВ – термодинамическое равновесие.

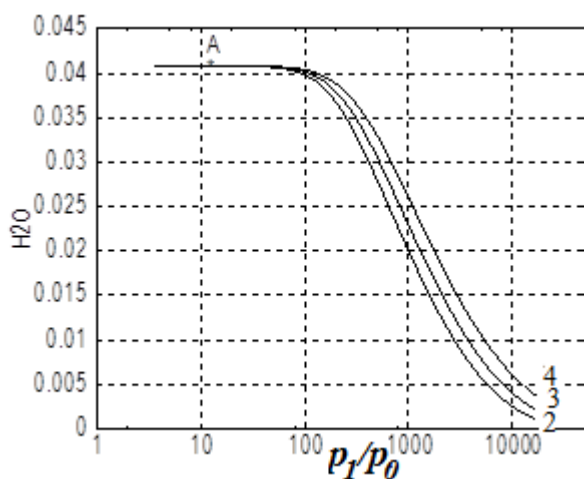


Рис. 4.34. Зависимость мольной доли паров воды справа от КР от начального перепада давлений.

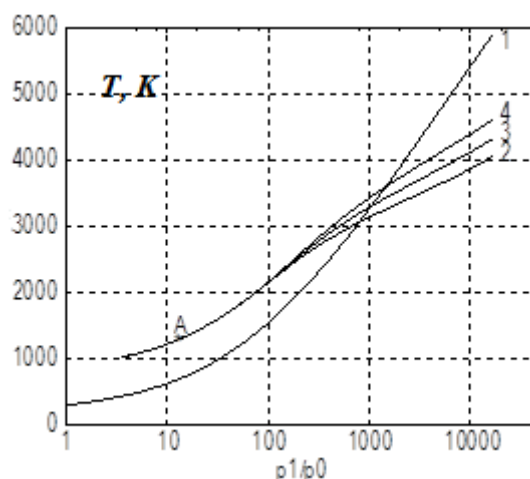


Рис. 4.35. Зависимость температуры справа от КР от начального перепада давлений. 1 – неизменный состав, 2 – 4 – за УВ – термодинамическое равновесие.

(2 - $p_0 = 6079.5 \text{ Па}$, 3 - $p_0 = 24318 \text{ Па}$, 4 - $p_0 = 97272 \text{ Па}$, А – точка Чепмена-Жуге)

Распад разрыва в неравновесно реагирующем

Также задача о распаде разрыва решалась в квазиодномерной нестационарной “неравновесной” постановке, подробно описанной в главе 1. В соответствии с которой считается, что химические реакции протекают с конечными скоростями, а вид правых частей W_i определяется используемыми моделями термодинамики и химической кинетики. При математическом моделировании считалось, что на ударной волне выполняются соотношения Ренкина-Гюгонио, дополненные условиями неизменности концентраций химических компонент. Для численного интегрирования системы уравнений с частными производными используется оригинальный сеточно-

характеристический метод [41, 59, 60, 74, 300], позволяющий моделировать одномерные нестационарные течения реагирующего газа с явным выделением ударных волн и контактных разрывов, описанный в главе 3.

Рассматривается нестационарное течение [60, 300], возникающее в ударной трубе после разрыва диафрагмы, отделяющей взрывчатую газовую смесь при нормальном давлении от инертного газа при высоком давлении (рис. 4.23). Данное течение ранее изучалось как экспериментально [184, 231, 274], так и с помощью численного моделирования, например [128, 202]. Качественная картина течения приведена на рис. 2.4. В начальный момент времени считается, что диафрагма мгновенно удаляется, и происходит распад разрыва. В результате распада по взрывчатой смеси распространяется ударная волна (УВ), а по инертному газу - центрированный веер волн разрежения, ограниченный начальной (НХ) и замыкающей (ЗХ) характеристиками (рис. 4.36). Для численного решения данной задачи применяется описанный в главе 3 сеточно-характеристический метод, основанный на явном выделении ударной волны, контактного разрыва, а также начальной и замыкающей характеристик веера волн разрежения. Все параметры течения вычислялись в узлах адаптированной разностной сетки, которая строилась одновременно с расчетом течения следующим образом.

В области течения реагирующего газа соответствующие узлы располагались в точках пересечения с временными слоями $t=const$ некоторого набора фиксированных траекторий газа $x=const$, где x - лагранжева координата [60]. Количество таких траекторий, расположенных между контактным разрывом и ударной волной, увеличивалось на одну через равные промежутки времени Δt_z . При этом начальный узел каждой новой траектории всегда располагался на ударной волне. После того, как число всех таких траекторий становилось равным N , одновременно с добавлением новой траектории удалялась одна из старых. При этом удаляемая траектория удовлетворяла условию минимальной погрешности при интерполяции параметров течения в точке с ее координатами. Выбор конкретного значения для Δt_z осуществлялся следующим образом. Перед проведением расчетов инициирования детонации численно решалась существенно менее трудоемкая задача вида “взрыв в бомбе постоянного объема”. Для ряда взрывчатых смесей имеются достаточно надежные экспериментальные данные по временам задержки и пределам воспламенения, которые получены в условиях, приближенно описываемых данной задачей. Численно определялся момент времени,

который соответствовал максимуму dT/dt и который можно условно назвать временем самовоспламенения τ_{CB} . Время подвода траекторий определялось следующим образом $\Delta t_z = 1.8\tau_{CB}/L_{max}$. В области инертного газа узлы разностной сетки перераспределялись на каждом новом временном слое так, чтобы в каждой из двух подобластей, а именно: между начальной и замыкающей характеристиками веера, а также между замыкающей характеристикой и контактными разрывом, содержалось фиксированное число равностоящих узлов.

Рассчитано течение, возникающее в ударной трубе после разрыва диафрагмы, отделяющей стехиометрическую смесь водорода с кислородом при стандартных условиях ($T=300$ К, $p=101325$ Па) от инертного газа гелия при высоком давлении ($T=300$ К, $p=40520000$ Па) [60, 300]. Используемый в расчетах механизм окисления водорода приведен в таблице 4.2, которая взята из [127]. Результаты тестирования данного механизма на задаче о самовоспламенении в бомбе постоянного объема приведены на рис. 4.38. Удовлетворительное совпадение с экспериментальными данными по временам задержки воспламенения в широком диапазоне температур свидетельствует о достаточно высокой достоверности данного механизма.

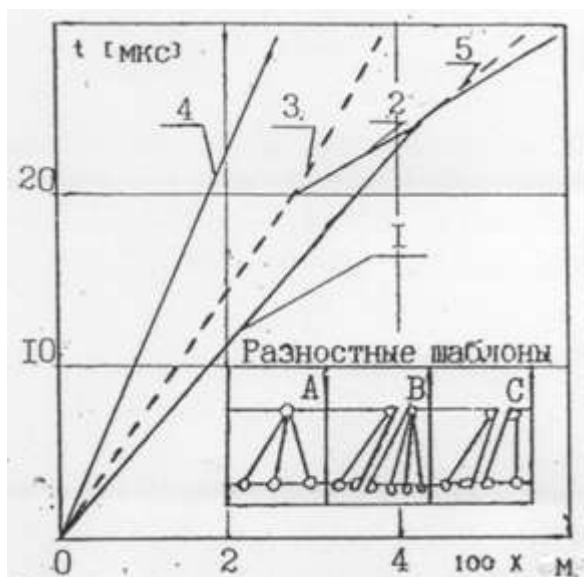


Рис. 4.37. Временная развертка течения. 1 – УВ, 2 – фронт воспламенения, 3, 5 – КР, 4 – замыкающая характеристика ВВР

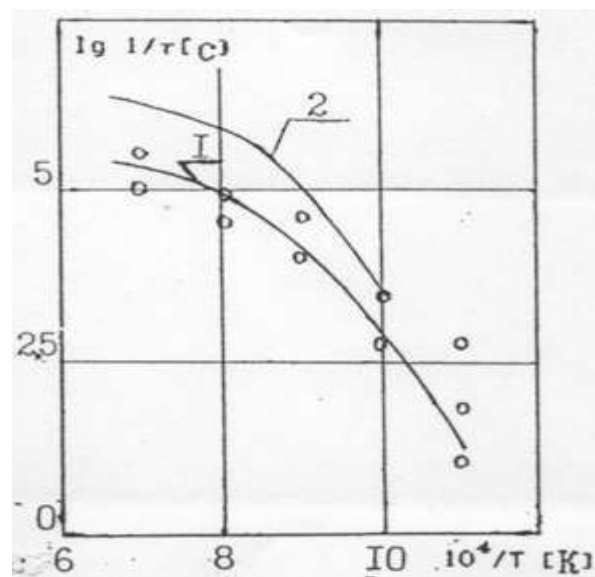
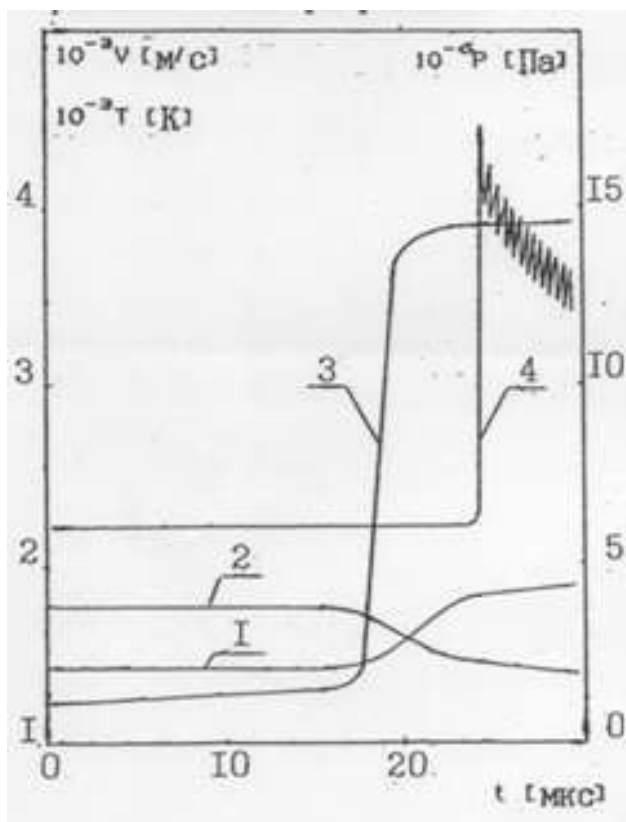


Рис. 4.38. Время задержки самовоспламенения для смеси $2H_2+O_2$. Расчет: $P_0=101325$ Па (1), 2026500 Па (2). Эксперимент [231] – маркер “o”.



Реакции	K		
	A	n	E/R
H + O → +H ₂ O	2.000E 8	0	0510
O + H ₂ → +OH + H	1.500E 4	1	1490
H ₂ + OH → +H + H ₂ O	2.200E 7	0	2710
OH + OH → +O + H ₂ O	6.300E 6	0	550
H ₂ + H → +H + H ₂	2.200E12	-1	51610
H ₂ O + H → +OH + H	2.610E10	0	53800
OH + H → +O + H	1.535E10	0	51300
O ₂ + H → +O + O	9.000E12	-1	59400
H ₂ + O → +OH + OH	1.000E 7	0	19260
HO ₂ + H → +H + O ₂	2.400E 9	0	23100
HO ₂ + H ₂ → +H ₂ O + H	9.000E 5	0	11000
HO ₂ + H ₂ → +OH + H ₂ O	1.000E 5	0	12000
HO ₂ + H → +OH + OH	1.700E 8	0	900
HO ₂ + O → +OH + O	2.400E 7	0	0
HO ₂ + OH → +H ₂ O + O	3.800E 4	0	10600
HO ₂ + OH → +H ₂ O + O ₂	1.100E 7	0	300
HO ₂ + H ₂ O → +OH + H ₂ O ₂	1.770E 7	0	16900
H ₂ O + OH → +H ₂ O + H	3.010E 8	0	41100
HO ₂ + HO ₂ → +H ₂ O ₂ + O ₂	4.000E 6	0	0
H ₂ O + H → +OH + OH	1.200E11	0	22900
OH + O → +H ₂ O + H	8.000E12	0	0
H + HO ₂ → +H ₂ O + O	1.140E 7	0	300
H + HO ₂ → +H + O ₂	2.500E 7	0	350
H ₂ + O → +H ₂ O + O	8.000E 7	0	27000
H ₂ + O → +H ₂ O + H	3.070E 1	0	10990
H ₂ + O → +H ₂ O + H	3.000E 2	0	0
O + H ₂ O → +H ₂ O + H	9.000E 1	0	6000
O + H ₂ O ₂ → +H ₂ O + O ₂	2.000E 5	0	12300
H + H ₂ O → +H + O + H ₂ O	6.000E 6	0	11000
H + HO ₂ → +H ₂ O + H	2.000E 2	0	600

Рис. 4.39. Временные зависимости. Таблица 4.2. Кинетический механизм. Параметры справа от КР: 1 – давление, 2 – скорость, 3- температура. 4 – скорость ударной волны.

Результаты численного решения задачи приведены на рис. 4.37,4.39-4.43. По ним можно отследить следующую схему развития процесса. Нагрев взрывчатой смеси в ударной волне инициирует сравнительно вялое протекание химических реакций. Однако спустя некоторое время их резкое самоускорение приводит к столь же резкому возрастанию температуры взрывчатой смеси, т. е. к ее воспламенению. Соответствующее типичное поведение температуры показано на рис. 4.39. Очевидно, что первыми воспламеняются порции взрывчатой смеси, расположенные вблизи контактного разрыва, а самовоспламенение порций газа, нагретых ударной волной в более поздние моменты времени, должно происходить также позже. Если при этом время задержки самовоспламенения было бы одинаковым для всех порций взрывчатой смеси, то фронт самовоспламенения распространялся бы по ней эквидистантно ударной волне. Однако результаты расчета, представленные на рис. 4.37, показывают, что фронт самовоспламенения догоняет ударную волну. Этому факту можно дать следующее объяснение. Воспламенение взрывчатой смеси вблизи контактного разрыва сопровождается локальным возрастанием давления, что неизбежно приводит к появлению волн сжатия, распространяющихся в обе стороны со звуковой скоростью

(см. рис. 4.40а кривая 1). Вследствие этого соседние порции взрывчатой смеси воспламеняются в условиях более высокого давления, что согласно расчетным данным, приведенным на рис. 4.38, должно приводить к уменьшению времени задержки самовоспламенения. Анализ графиков распределения параметров за ударной волной в различные моменты времени (рис. 4.40) показывает, что волна сжатия и следующий за ней фронт самовоспламенения постепенно сливаются, образуя при этом единый фронт ударного сжатия-воспламенения, т. е. детонационную волну. Правильность применения термина "детонационная волна" подтверждают, в частности, графики концентраций на рис. 4.40г.

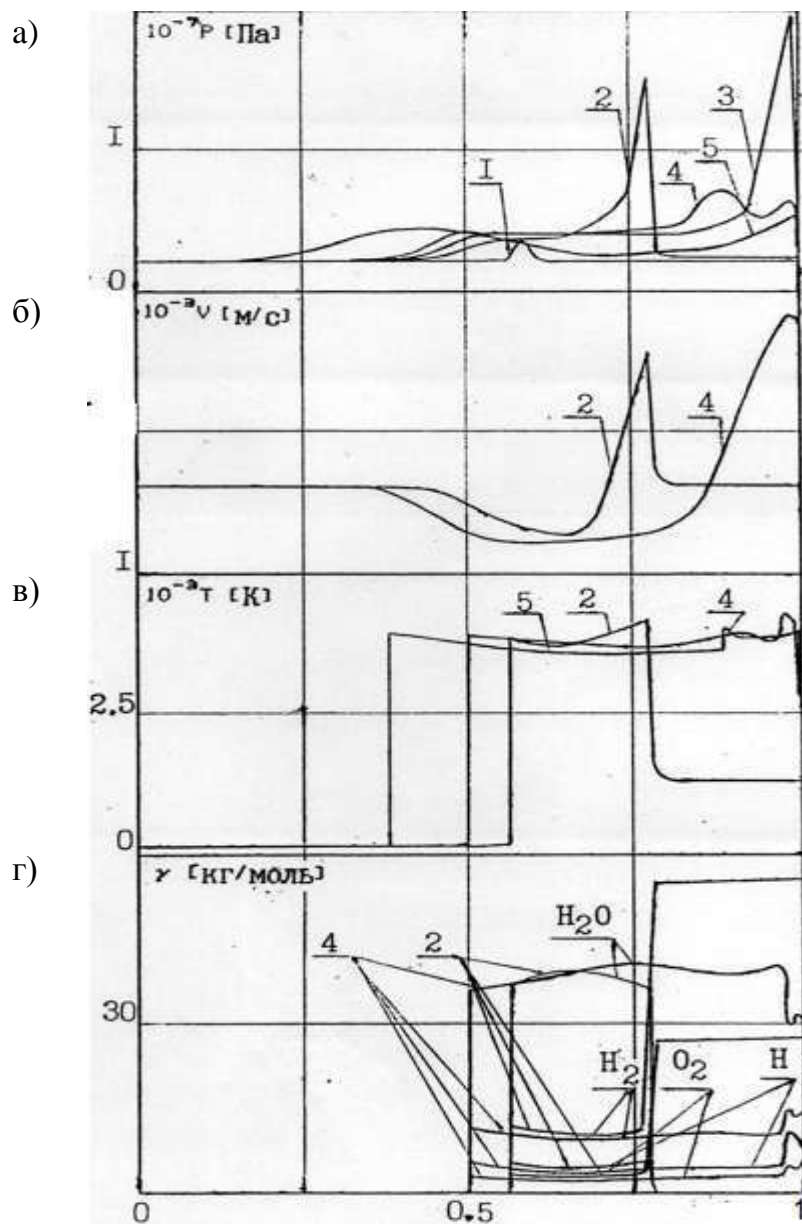


Рис. 4.40. Распределение давления (а), скорости (б), температуры (в), мольно-массовых концентраций (г) в различные моменты времени.

$$\frac{x - x_{3x}}{x - x_{yB}}$$

Образовавшаяся детонационная волна распространяется со сверхзвуковой скоростью по взрывчатой смеси, нагретой перед этим прошедшей ударной волной, и через некоторое время догоняет последнюю. (см. рис. 4.37). После этого образуется пересжатая детонационная волна, распространяющаяся уже по холодной взрывчатой смеси. Ее график скорости (кривая 4 рис. 4.39) имеет сильно осциллирующий характер. Период таких связан как с временем “подвода” новых траекторий, так и с временем задержки самовоспламенения в горючей смеси в моделируемых условиях, т.е. имеет как сеточную, так и физическую природу.

Вышеописанная картина течения качественно совпадает с наблюдаемой в экспериментах [184, 274]. При расчетах менее экзотических вариантов, для которых имеются экспериментальные данные по временам задержки воспламенения, скорости волн воспламенения и пересжатой детонации [202, 290], рассчитанные значения указанных параметров удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными [290].

Исследовалась стехиометрическая смесь водорода с воздухом $2\text{H}_2 + 5(0.2\text{O}_2 + 0.8\text{N}_2)$ [60]. В расчетах использовался кинетический механизм, заимствованный из [127], состоящий из 32 обратимых стадий и включающий 15 компонент. Зависимости времени воспламенения в бомбе постоянного объёма при начальном давлении $P = 0.1$ и 3 МПа от начальной температуры приведены на рис. 4.42. На рис. 4.41-4.45 приводятся результаты расчетов инициирования детонации ударной волной, образованной в результате распада разрыва на границе гелий - горючая смесь. Параметры инертного газа перед распадом следующие - $P = 40.53$ МПа, $T = 300$ К. Временная развертка процесса приведена на рис. 4.41, воспламенение происходит на расстоянии $X = 21$ мм через $t = 13$ мкс, волна воспламенения догоняет головную ударную волну на расстоянии $X = 27$ мм через $t = 21$ мкс. На рис. 4.43 представлены зависимости скорости головной ударной волны и контактного разрыва от времени, а на рис. 4.44 аналогичные зависимости мольных концентраций компонент справа от контактного разрыва. Профили изменения скорости, давления, температуры и мольных концентраций в различные моменты времени приведены на рис. 4.46 соответственно. После достижения волной воспламенения головной ударной волны область течения можно разбить на два участка: релаксационный участок, примыкающий к ударной волне (собственно детонация), который составляет 1 мм и область "сгоревшего газа", в которой

концентрации компонент близки к своим равновесным значениям при соответствующих давлении и температуре. Необходимо отметить, что поведение параметров газа в сгоревшем ядре (рис. 4.46) остается монотонным в каждый момент времени, несмотря на пульсации скорости головной ударной волны.

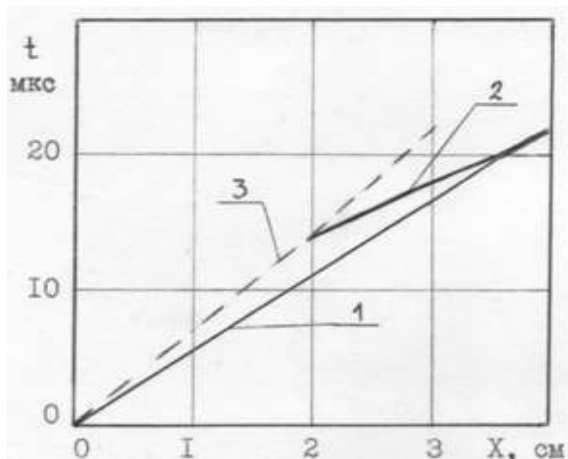


Рис. 4.41. Временная развертка течения. 1 – УВ, 2 – фронт воспламенения, 3 – КР.

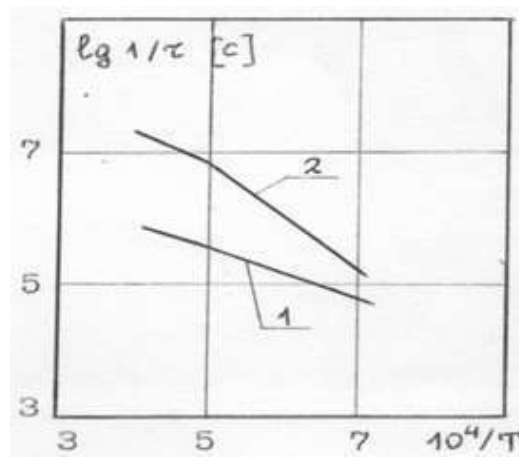


Рис. 4.42. Временя задержки самовоспламенения при заданных плотности и внутренней энергии для смеси стехиометрической смеси водорода с воздухом. $P_0=0.1$ МПа (1), 3 МПа (2).

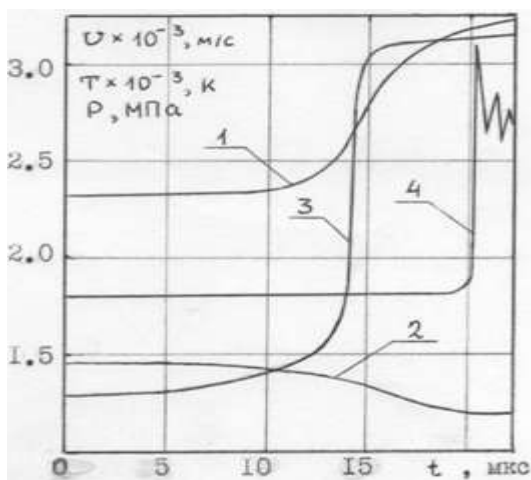


Рис. 4.43. Временные зависимости. Параметры справа от КР: 1 – давление, 2 – скорость, 3- температура. 4 – скорость ударной волны.

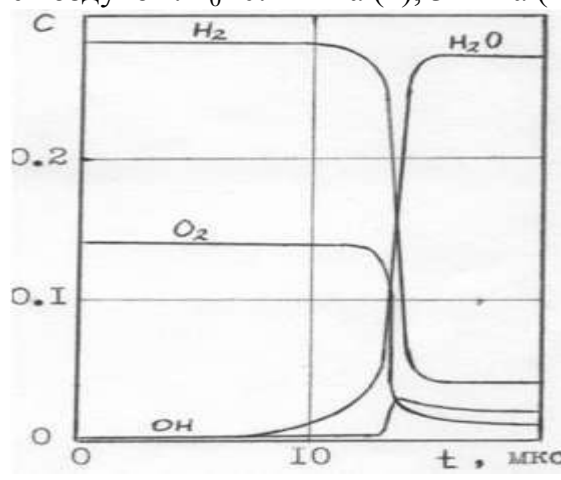


Рис. 4.44. Временные зависимости мольных долей компонент справа от КР:

Для изучения влияния на характер течения начального состава горючей смеси были проведены расчеты по инициированию детонации в водородо-воздушной горючей смеси при коэффициентах избытка окислителя $\alpha = 2$ и $\alpha = 0.5$ (Табл. 4.3).

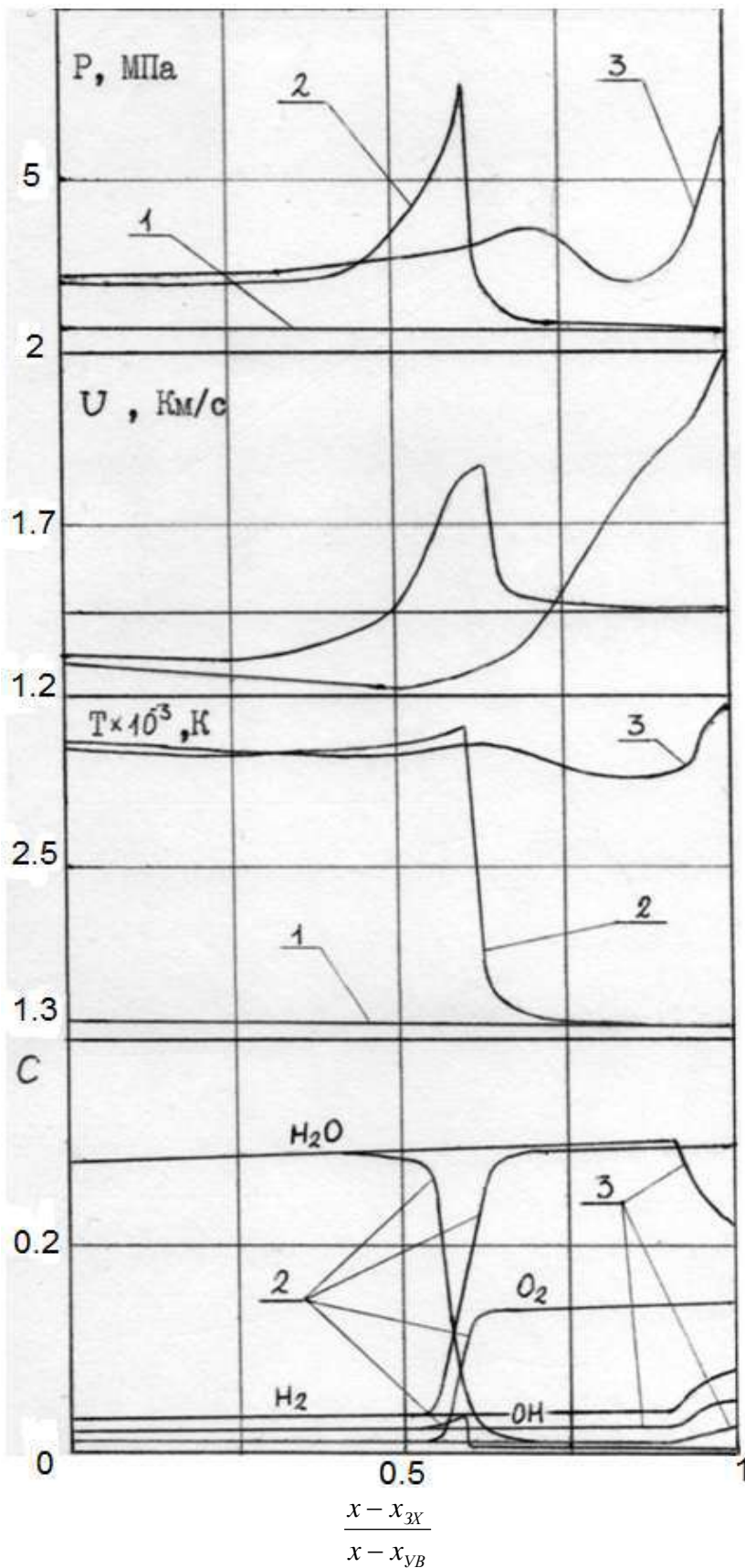


Рис. 4.45. Распределение параметров течения за ударной волной (1,2,3 – $t = (101.3, 240.7, 264.5)$ мкс.)

а) Давление

б) Скорость

в) Температура

г) Мольные доли

Расчеты при недостатке горючего ($\alpha = 2$) приводят к более быстрому воспламенению горючей смеси по сравнению с соответствующим вариантом при $\alpha = 1$, а также к более раннему взаимодействию волны горения, перешедшей в ДВ, с ударной волной. Средняя скорость ДВ растет с уменьшением α . Это связано с тем, что воздух в

горючей смеси выступает как окислитель, и избыточная его часть выступает в качестве балласта. Последнее подтверждается еще и тем, что, несмотря на то, что давление и температура после распада разрыва для вариантов $\alpha = 1$, $P = 60.8$ МПа и $\alpha = 2$, $P = 40.5$ МПа (Табл.4.3) близки, время воспламенения отличается более чем в два раза.

Таблица 4.3

Состав смеси	2 H ₂ +5Air			H ₂ +5Air	4H ₂ +5Air
	200	400	600	400	400
1. Начальная скорость УВ, м/с	1594	1792	1907	1747	1880
2. Начальная скорость КР, м/с	1257	1440	1546	1400	1490
3. Начальное давление на, КР, МПа	1.82	2.32	2.64	2.57	2.03
4. Начальная температура, за УВ, К	1141	1350	1480	1437	1230
5. Время воспламенения, мкс	141	14	4.5	10.5	41
6. Расстояние до точки воспламенения, см	-	2.1	0.7	1.5	6.0
7. Расстояние до образования ДВ, см	-	3.8	1.3	3.0	10.5
8. Время образования ДВ, мкс	-	21	6.8	16.8	56
9. Скорость пересжатой ДВ, м/с	-	2772	2825	2420	2900
10. Температура за пересжатой ДВ, К	-	3576	3550	2957	2956

Было проведено исследование влияния начальных параметров метано-воздушной горючей смеси на процесс инициирования детонации [60]. Использовался кинетический механизм, составленный из реакций, приводимых в [153], состоящий из 59 обратимых стадий и включающий 19 компонент (Табл. 4.4). Варьировались начальный перепад давления, начальная температура и состав горючего. На рис. 4.46-4.50 представлены результаты расчетов стехиометрической метано-воздушной горючей смеси [60]. В начальный момент времени в камере высокого давления было $P=40$ МПа, $T=300$ К, в камере низкого давления $P=0.1$ МПа, $T=300$ К. Качественная картина течения, возникающая после разрыва мембраны, подробно описана выше. Изучалось влияние на процесс инициирования детонации начального давления в камере высокого давления и начальной температуры в камере низкого давления. Основные параметры, характеризующие процесс, собраны в таблице 4.5.

Максимальное влияние на процесс оказывает температура газа в камере низкого давления. Увеличение температуры с 300 К до 400 К приводит к уменьшению времени задержки воспламенения и детонации почти в 20 раз. Скорость детонации и пиковые параметры несильно зависят от варьируемых величин, так средняя скорость детонационной волны находится в пределах 2500-2770 м/с, пиковое давление - 15 - 19 МПа, температура 3200 - 4000 К.

Таблица 4.4

Кинетический механизм				A	n	E/R
1	CH4	+ OH	\rightleftharpoons CH3 + H2O	6.000E+07	.0	4.278E+03
2	CH4	+ H	\rightleftharpoons CH3 + H2	2.000E+08	.0	5.838E+03
3	CH4	+ O	\rightleftharpoons CH3 + OH	2.050E+07	.0	3.926E+03
4	CH4	+ O	\rightleftharpoons CH2 + H2O	2.000E+07	.0	3.926E+03
5	CH3	+ HO2	\rightleftharpoons CH4 + O2	4.300E+05	.0	-201.
6	CH3	+ H +M	\rightleftharpoons CH4 + M	1.000E+03	.0	-8.455E+03
7	CH3	+ H2O2	\rightleftharpoons CH4 + HO2	6.500E+04	.0	2.164E+03
8	CH3	+ CH3	\rightleftharpoons CH4 + CH2	6.000E+04	.0	4.650E+03
9	CH3	+ H2CO	\rightleftharpoons CH4 + HCO	6.000E+07	.0	2.265E+03
10	CH3	+ HCO	\rightleftharpoons CH4 + CO	6.000E+07	.0	.000
11	CH2	+ H2CO	\rightleftharpoons CH4 + CO	6.000E+07	.0	.000
12	CH3	+ OH	\rightleftharpoons CH2 + H2O	6.000E+06	.0	1.389E+03
13	CH2	+ O	\rightleftharpoons HCO + H	6.000E+06	.0	.000
14	CH2	+ H2O	\rightleftharpoons H2CO + H2	6.000E+06	.0	1.258E+03
15	CH3	+ O2	\rightleftharpoons H2CO + OH	3.000E+07	.0	5.033E+03
16	CH3	+ O	\rightleftharpoons H2CO + H	1.860E+07	.0	.000
17	HCO	+ H2CO	\rightleftharpoons CH3 + CO2	6.000E+06	.0	2.265E+03
18	H2CO	+ OH	\rightleftharpoons HCO + H2O	3.600E+08	.0	755.
19	H2CO	+ H	\rightleftharpoons HCO + H2	6.000E+07	.0	755.
20	H2CO	+ O	\rightleftharpoons HCO + OH	8.400E+08	.0	2.768E+03
21	HCO	+ HO2	\rightleftharpoons H2CO + O2	5.035E+04	.0	2.818E+03
22	H	+ CO +M	\rightleftharpoons HCO + M	100.	.0	-8.556E+03
23	H2CO	+ HO2	\rightleftharpoons H2O2 + HCO	6.000E+05	.0	4.026E+03
24	HCO	+ O2	\rightleftharpoons HO2 + CO	6.000E+07	.0	3.649E+03
25	HCO	+ O	\rightleftharpoons CO2 + H	1.200E+06	.0	.000
26	HCO	+ H +M	\rightleftharpoons H2CO + M	630.	.0	-1.610E+03
27	HCO	+ OH	\rightleftharpoons CO + H2O	6.000E+07	.0	.000
28	HCO	+ H	\rightleftharpoons CO + H2	6.000E+07	.0	2.516E+03
29	HCO	+ O	\rightleftharpoons CO + OH	6.000E+05	.0	.000
30	OH	+ H2	\rightleftharpoons H + H2O	2.400E+07	.0	2.617E+03
31	OH	+ O	\rightleftharpoons H + O2	4.160E+06	.0	-393.
32	OH	+ H	\rightleftharpoons O + H2	6.900E+06	.0	3.543E+03
33	OH	+ OH	\rightleftharpoons O + H2O	1.440E+07	.0	.000
34	H	+ H +M	\rightleftharpoons H2 + M	3.600E+03	.0	.000
35	O	+ O +M	\rightleftharpoons O2 + M	1.800E+03	.0	.000
36	OH	+ H +M	\rightleftharpoons H2O + M	3.600E+04	.0	.000
37	O	+ H +M	\rightleftharpoons OH + M	1.440E+04	.0	.000
38	OH	+ OH	\rightleftharpoons H2 + O2	6.000E+04	.0	1.027E+04
39	HO2	+ H	\rightleftharpoons H2 + O2	6.000E+06	.0	.000
40	H	+ O2 +M	\rightleftharpoons HO2 + M	4.140E+03	.0	.000
41	H	+ HO2	\rightleftharpoons OH + OH	2.000E+07	.0	.000
42	O	+ HO2	\rightleftharpoons O2 + OH	6.000E+07	.0	.000
43	OH	+ HO2	\rightleftharpoons O2 + H2O	6.000E+06	.0	.000
44	H	+ HO2	\rightleftharpoons H2O + O	6.000E+05	.0	.000
45	OH	+ H2O2	\rightleftharpoons HO2 + H2O	7.800E+06	.0	905.
46	H	+ H2O2	\rightleftharpoons H2O + OH	7.050E+06	.0	2.114E+03
47	OH	+ OH +M	\rightleftharpoons H2O2 + M	161.	.0	-4.831E+03
48	O	+ H2O2	\rightleftharpoons O2 + H2O	2.800E+07	.0	3.221E+03
49	H	+ H2O2	\rightleftharpoons H2 + HO2	7.000E+06	.0	2.114E+03
50	HO2	+ HO2	\rightleftharpoons H2O2 + O2	2.400E+07	.0	755.
51	O	+ H2O2	\rightleftharpoons HO2 + OH	2.800E+07	.0	3.221E+03
52	CO	+ OH	\rightleftharpoons CO2 + H	2.900E+06	.0	2.869E+03
53	CO	+ HO2	\rightleftharpoons CO2 + OH	1.330E+08	.0	1.158E+04
54	N	+ NO	\rightleftharpoons N2 + O	2.750E+07	.0	252.
55	N	+ O2	\rightleftharpoons NO + O	1.000E+07	.0	3.674E+03
56	NO	+ NO	\rightleftharpoons N2 + O2	1.410E+09	.0	4.278E+04
57	N	+ OH	\rightleftharpoons NO + H	4.000E+07	.0	.000
58	CH2	+ O2	\rightleftharpoons CO + OH +M	6.000E+06	.0	1.761E+03
59	CH2	+ O2	\rightleftharpoons CO2 + H +M	1.800E+05	.0	.000

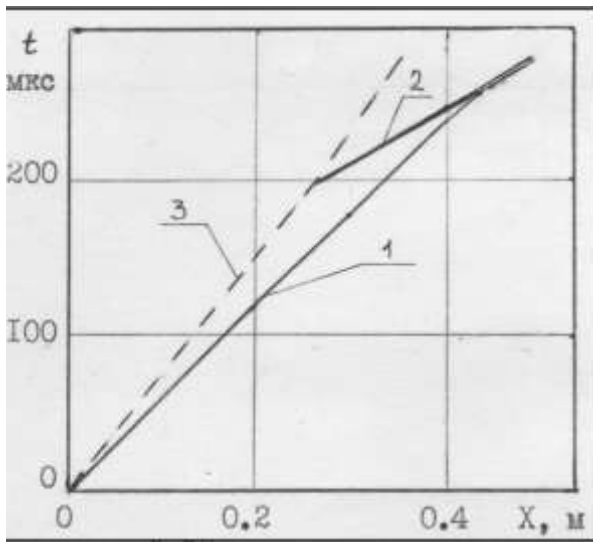


Рис. 4.46. Временная развертка течения. Метан + воздух, $\alpha = 1$ (1 – УВ, 2 – фронт воспламенения, 3 – КР).

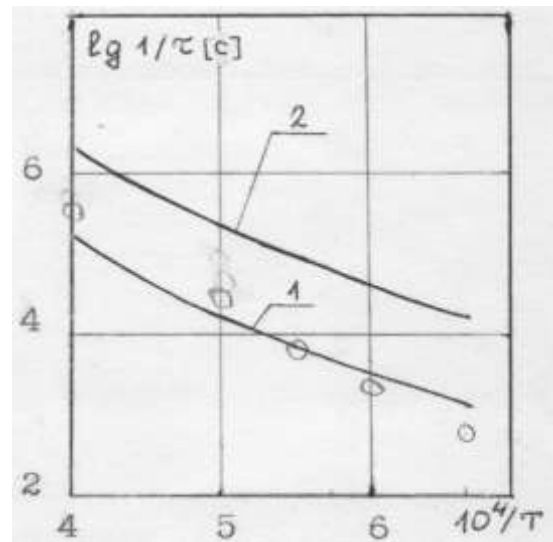


Рис. 4.47. Время задержки воспламенения при заданных плотности и внутренней энергии. 1 – 0,1 МПа, 2 – 1 МПа. Эксперимент [203]- маркеры "о".

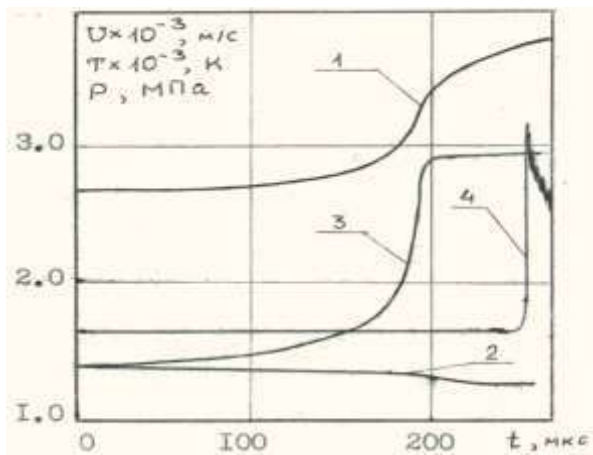


Рис. 4.48. Временные зависимости параметров взрывчатой смеси на КР: 1 – давление, 2 – скорость, 3 – температура, 4 – скорость УВ.

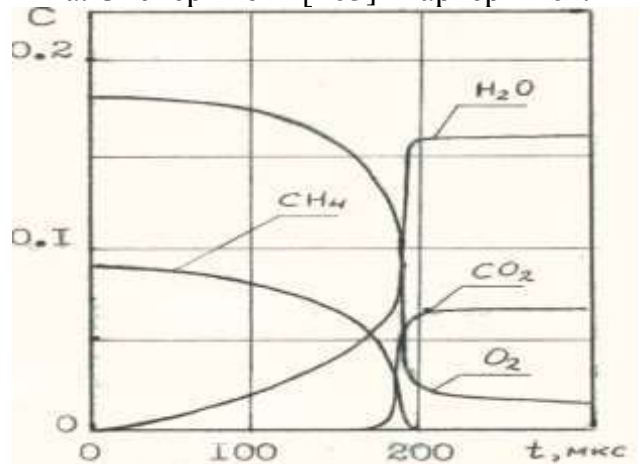


Рис. 4.49. Временные зависимости мольных долей химических компонент справа от КР.

Таблица 4.5

Состав смеси		CH ₄ + 12.5 Air		CH ₄ + 6.25 Air	
n	P _н , МПа T _н , К	40	60	40	40
		300	300	400	200
1.	Начальная скорость УВ, м/с	1680	1790	2000	1760
2.	Начальная скорость КР, м/с	1390	1500	1690	1480
3.	Начальное давление на, КР, МПа	2.7	3.08	2.95	2.89
4.	Начальная температура, за УВ, К	1490	1540	1860	1390
5.	Время воспламенения, мкс	195	75	9.5	260
6.	Расстояние до точки воспламенения, см	27	11.5	1.6	37
7.	Расстояние до образования ДВ, см	45	18.5	2.7	65
8.	Время образования ДВ, мкс	260	105	13.5	375
9.	Скорость пересжатой ДВ, м/с	2770	2500	2760'	2610
10.	Температура за пересжатой ДВ, К	3400	3800	3450.	3100

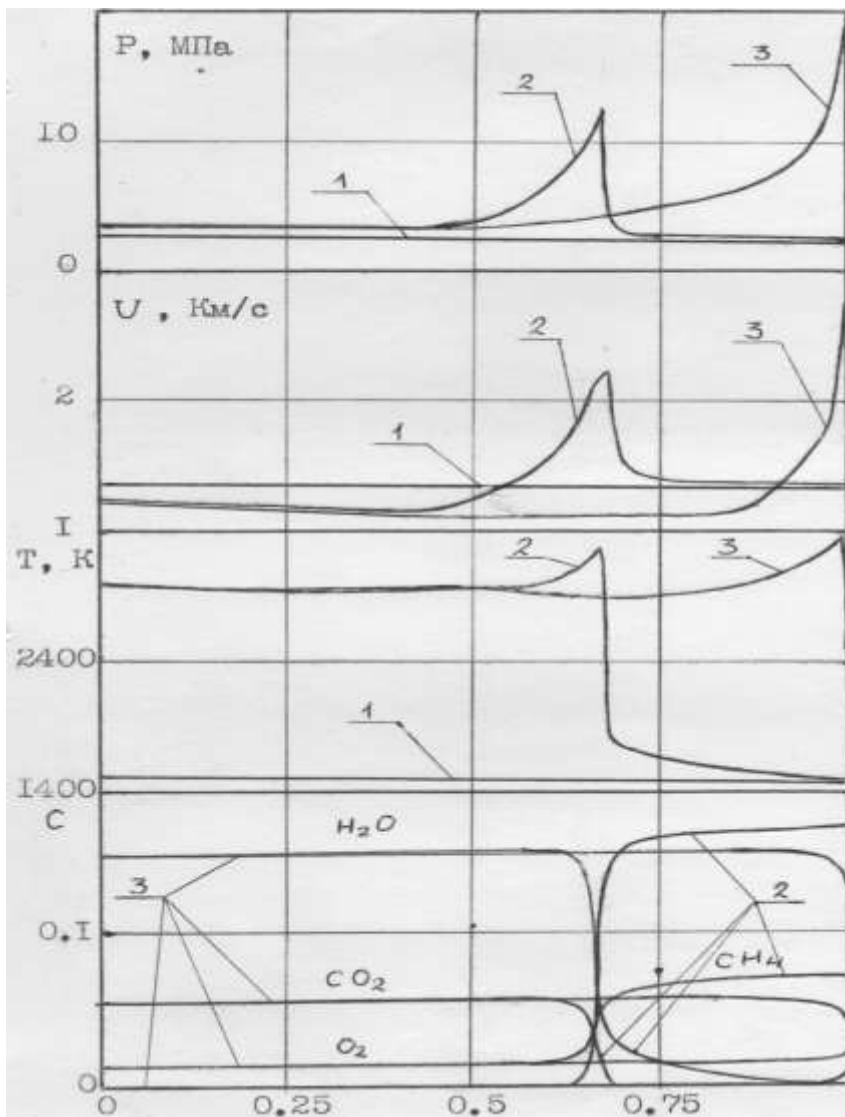


Рис. 4.50. Распределение параметров течения за ударной волной (1,2,3 – $t = 101.3, 240.7, 264.5$ мкс.)

а) Давление

б) Скорость

в) Температура

г) Мольные доли

$$\frac{x - x_{ZX}}{x - x_{YB}}$$

Изучалось влияние начального давления на параметры волны детонации в водородо-кислородной горючей смеси, разбавленной аргоном [78, 85, 226]. Для описания химических превращений применялся кинетический механизм, предложенный в [140], включающий 49 обратимых стадий, в которых участвуют перечисленные выше компоненты. Результаты тестирования кинетического механизма приведены в [78].

Временная развертка течения (рис. 4.51) включает ударную волну (УВ), распространяющуюся по горючей смеси, контактный разрыв (КР) и веер волн разрежения, распространяющийся в инертном газе. На рис. 4.52-4.53 приведены распределения температуры и давления в расчетной области в различные моменты времени. Время, которому соответствует каждая линия на графике, может быть определено по временной развертке течения (рис. 4.51), крайняя правая точка на линии соответствует точке непосредственно за УВ (кривая 1, рис. 4.51) [85]. Из рис. 4.52-4.53

видно, что на расстоянии 0.4 м от точки распада разрыва происходит воспламенение горючей смеси, и образуется волна горения, переходящая в ДВ, которая движется вслед за головной ударной волной, постепенно ускоряясь и набирая интенсивность (рис. 4.53). На расстоянии около 1 м – волна горения (детонации) взаимодействует с ударной волной (излом траектории УВ, рис. 4.51), при этом скорость УВ (рис. 4.54), а также давление и температура в зоне, непосредственно примыкающей к ударной волне, возрастают, и образуется нестационарная пересжатая детонационная волна, которая в дальнейшем (рис. 4.52-4.54) выходит на режим распространения с практически постоянной скоростью [78, 79, 85, 226]).

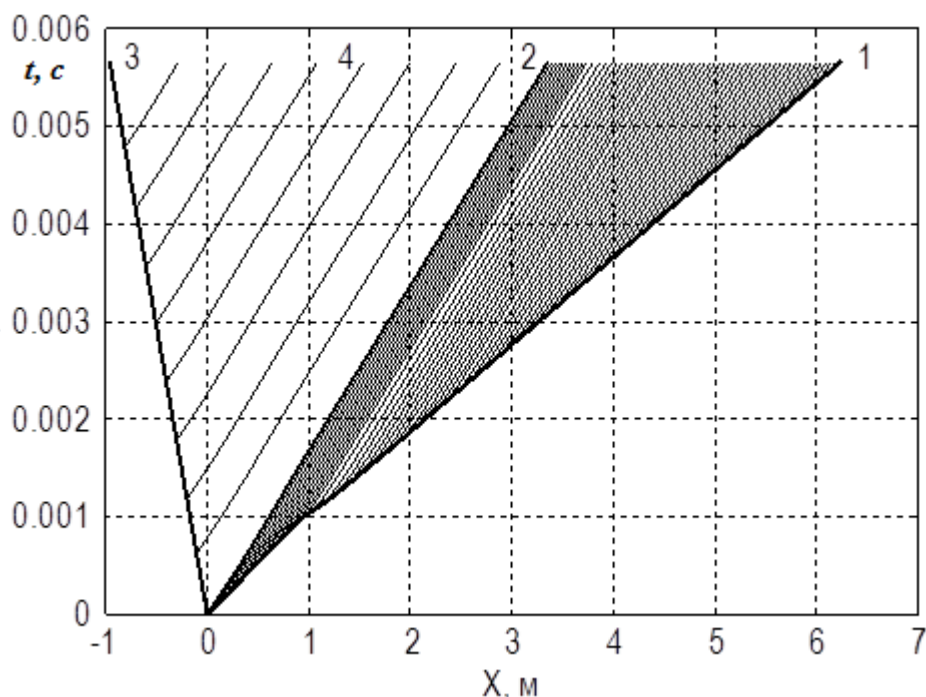


Рис. 4.51. Временная развертка течения ($p_1 = 400000 \text{ Па}$, $p_0 = 12159 \text{ Па}$).

Расчетная сетка: 1 – УВ, 2 – КР, 3 – ЗХ, 4 – ТГ ($\Delta t = 10^{-6} \text{ с.}$, изображены каждая сотая траектория из рассчитанных).

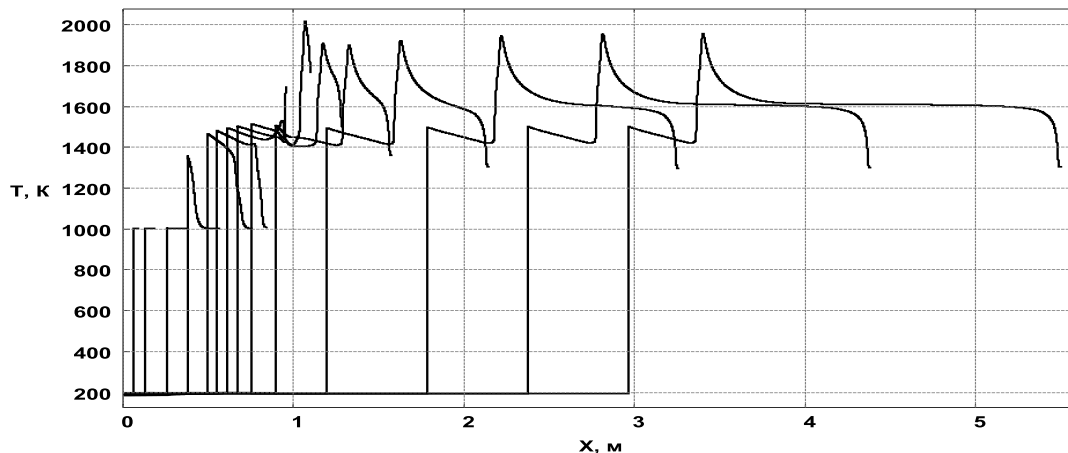


Рис. 4.52. Распределение температуры в различные моменты времени.

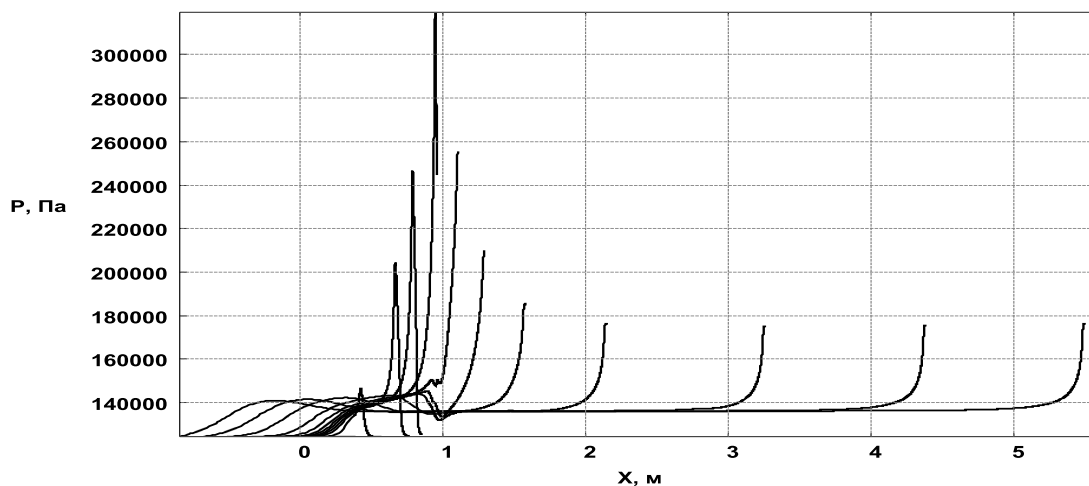


Рис. 4.53. Распределение давления в различные моменты времени.

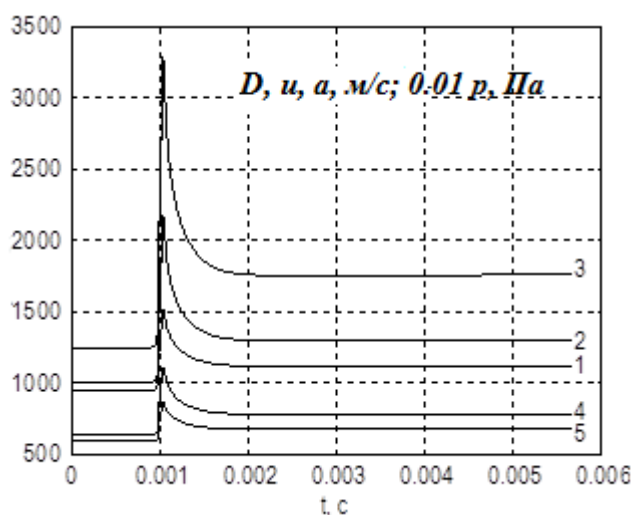


Рис. 4.54. Зависимость параметров УВ от времени (1 – скорость УВ, м/с; параметры слева от УВ: 2 – давление*0.01, Па; 3 – температура, К; 4 – скорость, м/с; 5 – скорость звука, м/с.

Ниже приводятся уравнения, описывающие течение в стационарной детонационной волне, которые получаются из системы (4.54) в предположении, что скорость УВ (D) постоянна, а все параметры течения являются функцией расстояния от УВ до рассматриваемой точки пространства ($\xi = Dt - x$).

$$e - e_0 + \frac{1}{2}(p + p_0)(V - V_0) = 0; \quad (4.57)$$

$$p - p_0 - \frac{(D - u_0)^2}{V_0^2}(V_0 - V) = 0; \quad (4.58)$$

$$\frac{d\gamma_i}{d\xi} = \frac{V_0 W_i}{(D - u_0)}, \quad i = 1, \dots, N, \quad (4.59)$$

$$\gamma_i(0) = \gamma_{i0}.$$

Здесь $V = \frac{1}{\rho}$ - удельный объем, индексом “0” помечены параметры перед УВ.

Выражение (4.57) задает на плоскости p - V ударную адиабату [232], если концентрации химических компонент при переходе через УВ остаются неизменными ($\gamma_i = \gamma_{i0}$), и – равновесную детонационную адиабату [232], если концентрации за УВ удовлетворяют условиям химического равновесия ($\gamma_i = \gamma_i(V, T)$ такие, что обращают в ноль правые части (4.59) - $W_i = 0, i = 1, \dots, N$). Выражение (4.58) при известной скорости УВ (D) задает на плоскости p - V прямую Релея [232], система обыкновенных дифференциальных уравнений (4.59) описывает изменение концентраций химических компонент. Систему (4.57)-(4.59) необходимо дополнить уравнениями состояния (4.56). Состоянию непосредственно за УВ соответствует точка C (рис. 4.55), далее независимо от используемых моделей термодинамики и химической кинетики (рассматривается случай, когда все химические реакции обратимы, и константы скоростей прямых и обратных реакций связаны через константу равновесия [121]) изменение параметров в стационарной детонационной волне происходит вдоль прямой Релея и заканчивается приходом в т. D (рис. 4.55), находящуюся на равновесной детонационной адиабате.

В рассмотренном выше варианте течения скорость распространения стационарной ДВ равнялась 1120 м/с, ей соответствует прямая Релея, помеченная цифрой 6 на рис. 4.55. Скорость Чепмена-Жуге – минимальная скорость распространения ДВ – составляет 1004.6 м/с, ей соответствует точка касания B (рис. 4.55) прямой Релея детонационной адиабаты и точка минимума на графике зависимости скорости ДВ от перепада давлений (рис. 4.56) [79]. Ветвь кривых 2-4 рис. 4.56, расположенная левее точки минимума физического смысла не имеет.

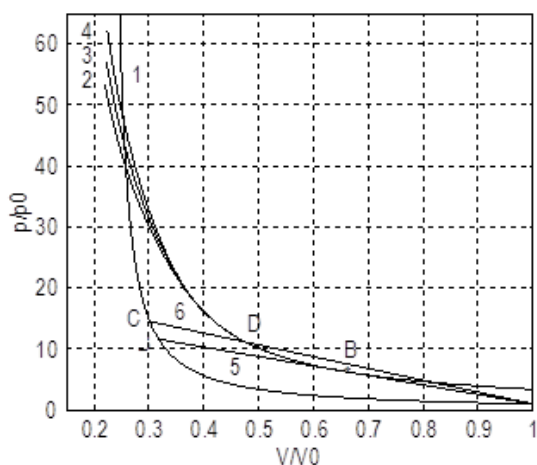


Рис. 4.55. P - V диаграмма для горючей смеси $8\%(O_2+H_2)+92\%Ar$ при температуре $T_0 = 298.15 K$. 1 – ударная адиабата; 2-4 – равновесные детонационные адиабаты, 2 - $p_0 = 6079.5 Pa$, 3 - $p_0 = 24318 Pa$, 4 - $p_0 = 97272 Pa$; 5, 6 – прямые Релея.

Исследовалось влияние начального давления горючей смеси (p_0) на структуру детонационной волны [79]. В рассматриваемом случае p_0 не влияет на положение точки

Чепмена-Жуге (рис. 4.55). В случае пересжатых ДВ при скорости распространения ДВ более 1600 м/с (рис. 4.56), начальное давление p_0 может оказывать существенное влияние на равновесные значения температуры и концентраций (рис. 4.57-4.58).

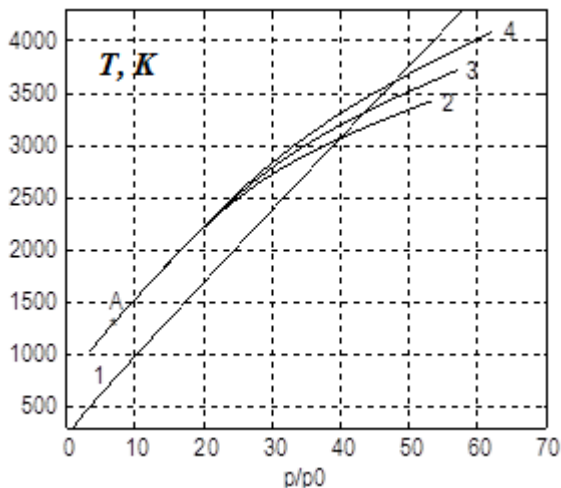
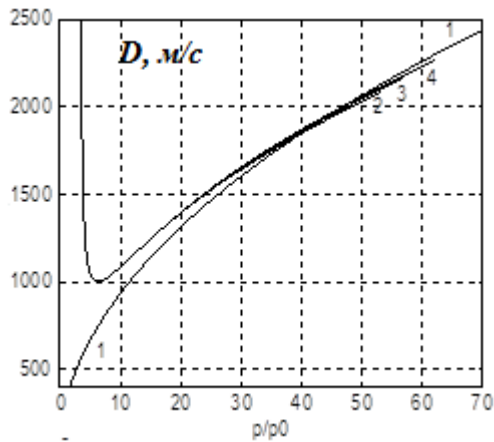


Рис. 4.57. Изменение температуры вдоль адиабаты. 1 – ударная адиабата, 2-4 – равновесная детонационная адиабата, А – точка Чепмена-Жуге. 2 - $p_0 = 6079.5 \text{ Па}$, 3 - $p_0 = 24318 \text{ Па}$, 4 - $p_0 = 97272 \text{ Па}$.

Необходимо отметить, что скорость стационарной пересжатой ДВ, полученная в результате решения нестационарных уравнений газовой динамики (рис. 4.54), составляет 1120 м/с , что с высокой степенью точности совпадает с решением автомодельной задачи о распаде разрыва в “равновесной” постановке (рис. 4.32) при соответствующем начальном перепаде давления ($p_1/p_0 = 32.9$). Аналогично температура, перепад давлений и концентрации справа от КР (рис. 4.33-4.35) совпадают с соответствующими значениями в области постоянных параметров слева от УВ (рис. 4.52-4.53).

Рис. 4.56. Зависимость скорости УВ и равновесной ДВ от перепада давления для горючей смеси $8\%(\text{O}_2+\text{H}_2)+92\%\text{Ar}$ при температуре $T_0 = 298.15 \text{ К}$. 1 – скорость УВ, 2-4 – скорость ДВ, 2 - $p_0 = 6079.5 \text{ Па}$, 3 - $p_0 = 24318 \text{ Па}$, 4 - $p_0 = 97272 \text{ Па}$.

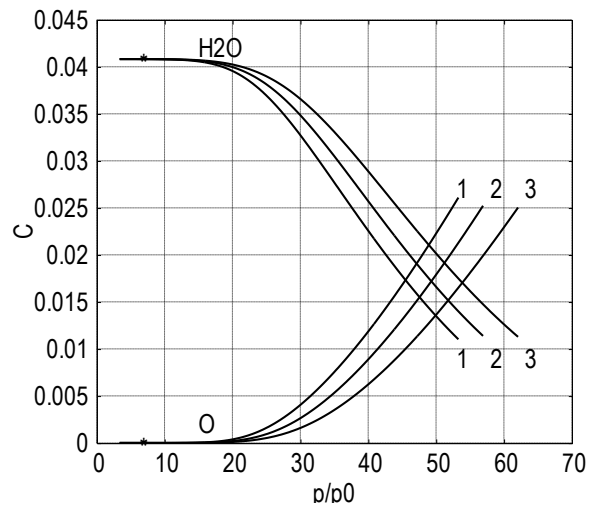


Рис. 4.58. Изменение мольных долей H_2O и O вдоль равновесной детонационной адиабаты. 1 - $p_0 = 6079.5 \text{ Па}$, 2 - $p_0 = 24318 \text{ Па}$, 3 - $p_0 = 97272 \text{ Па}$, * – точка Чепмена-Жуге

Таким образом, решение нестационарной неравновесной задачи о распаде разрыва в детонирующем газе стремится к решению автомодельной задачи о распаде разрыва в предположении, что продукты сгорания слева от УВ находятся в состоянии термодинамического равновесия.

На рис. 4.59 представлены результаты решения нестационарной неравновесной задачи о распаде разрыва, при различных начальных давлениях [79]. Во всех рассмотренных вариантах начальный перепад давлений (p_1/p_0) равнялся 32.9.

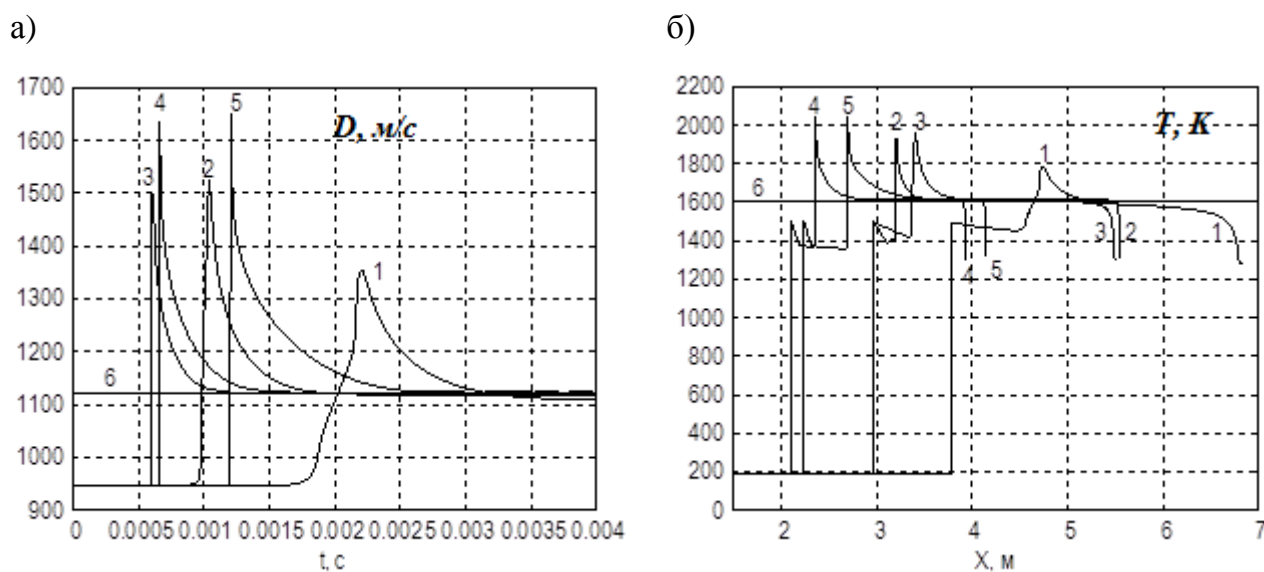


Рис. 4.59. Распределение параметров в зависимости от начального давления:

а) Зависимость скорости УВ от времени; б) Распределение температуры. 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 $p_1/p_0=32.9$.

Начальная скорость ударной волны (УВ) (рис. 4.59а), образующейся в результате распада разрыва на границе “инертный газ - горючая смесь”, а, следовательно, и температура между УВ и контактном разрывом, во всех рассмотренных вариантах были одинаковые (рис. 4.32-4.35). Графики скорости УВ (рис. 4.59а) содержат три характерных участка: 1) от начального РР до образования пересжатой ДВ - скорость УВ близка к постоянной; 2) Нестационарная пересжатая ДВ - резкий скачек скорости УВ с примыкающим участком переменной скорости УВ; 3) Стационарная пересжатая ДВ - скорость УВ близка к постоянной. Графики 1-5 рис. 4.59а соответствуют различным начальным давлениям в инертном газе ($p_1=200000-1400000$ Па) и горючей смеси ($p_0=6079.5-42556.5$ Па), что соответствует изменению давления после РР от 124395 до 435384 Па. Необходимо отметить немонотонность времени задержки воспламенения и

образования пересжатой ДВ от начального давления (рис. 4.59а). Скорости стационарной пересжатой ДВ во всех рассмотренных вариантах были близки к 1120 м/с.

На рис. 4.59б приводятся распределения температуры в стационарной пересжатой ДВ. Практически во всей области между головной УВ и КР течение химически равновесное, значение температуры (1619 К) близко к равновесному. Исключение составляет узкая зона, примыкающая к УВ, в которой течение существенно неравновесное и определяется используемым в расчетах кинетическим механизмом. Последующий немонотонный характер поведения температуры связан с наличием области нестационарного распространения пересжатой детонационной волны.

Выводы

1. Численно решена задача о распаде разрыва на границе “гелий – гремучий газ”, разбавленный аргоном в “замороженной”, “равновесной” и “неравновесной” постановках. Получено, что решение задачи о распаде разрыва в “равновесной” постановке зависит от начального перепада давления p_1/p_0 , зависимость от абсолютного значения давления p_0 в горючей смеси $8\%(O_2+H_2)+92\%Ar$ начинает проявляться при $p_1/p_0 > 100$.

2. Показано, что скорость стационарной детонационной волны, полученная в результате решения задачи о распаде разрыва в “неравновесной” постановке, зависит от начального перепада давления p_1/p_0 и в рассмотренном диапазоне параметров не зависит от абсолютного значения давления p_0 .

3. Полученные результаты показывают, что скорость стационарной ДВ и температура в зоне, примыкающей к УВ, полученные из решения уравнений нестационарной реагирующей газовой динамики, не зависят от механизма химических реакций и стремятся к соответствующим значениям, полученным в результате решения автомодельной “равновесной” задачи о распаде разрыва.

4.1.4. Численное моделирование экспериментов по определению времени задержки воспламенения за падающими ударными волнами

Приводятся физико-математическая модель и результаты численного моделирования инициирования и распространения детонационных волн в ударных трубах. Рассматривается горючая смесь водорода с кислородом, разбавленная аргоном. Расчетным путем получена детальная структура течения в ударной трубе. Приводятся результаты сравнения рассчитанных [78, 85, 226] времен задержки воспламенения с

экспериментальными данными [204]. Данные результаты вошли в [226] и приводятся в работе для иллюстрации методик численного моделирования развиваемых автором.

Результаты экспериментальных и расчетно-теоретических исследований задержки воспламенения в горючих водородо-кислородных смесях, проведенных за последние 50 лет, содержатся в большом количестве статей и ряде монографий, например в [58, 127]. Тем не менее, до сих пор ведутся работы по созданию механизмов горения, позволяющих описывать экспериментальные данные, полученные в различных условиях, и численных методик их верификации. В настоящей работе вычислительные методики, развитые в [78, 79, 85, 226], используются для анализа результатов экспериментов, которые проводились на ударной трубе (УТ) в НИИМеханики МГУ В.А. Павловым. Особенностью проводимых экспериментов является то, что начальное давление в установке составляло 0.06-0.12 атм и используемая горючая смесь водорода с кислородом была сильно разбавлена аргоном. Мольная доля аргона в горючей смеси составляет от 79 до 97 %. Таким образом, объемная доля водорода была вблизи пределов воспламенения. В экспериментах измерялась скорость головной ударной волны, образованной в результате распада разрыва на границе камер высокого и низкого давления и время задержки воспламенения горючей смеси за ударной волной - $\tau_{\text{э}}$ - время появления максимума излучения $ОН^*$ в сечении наблюдения после прохождения УВ (лабораторное время). Измерения показали, что в большинстве экспериментов, скорость УВ была близка к постоянной [204]. Из описания экспериментальных исследований оставалось неясной величина давления реализуемого в камере высокого давления. Для описания химических реакций, происходящих в разбавленных аргоном горючих смесях водорода с кислородом, сотрудниками НИИМеханики МГУ был предложен и оттестирован кинетический механизм [140]. Необходимо отметить, что используемые в экспериментах смеси могут быть проанализированы с использованием алгоритмов и программ, моделирующих химически равновесные состояния, которые приведены в главе 2. В результате численного моделирования были получены, в частности, параметры детонации Чепмена-Жуге для исследуемых смесей. Скорость детонации Чепмена-Жуге в зависимости от вида смеси, составила от 587 до 1005 м/с [85] и была ниже наблюдаемой в ряде экспериментов скорости распространения ударной волны. Автором была предложена концепция математического моделирования экспериментов, включающая методику задания начальных данных.

Для описания течения в УТ использовались одномерные нестационарные уравнения физической газовой динамики и уравнения, описывающие изменение концентраций химических компонент (4.54). Для описания химических превращений в горючей смеси использовалось 45 обратимых химических реакций, предложенных в [140]. В реакциях участвовали 10 компонент H_2 , OH , H_2O , O_2 , H_2O_2 , HO_2 , H , O , O_3 , Ar , теплофизические свойства которых брались из [121]. Численное моделирование проводилось оригинальным сеточно-характеристическим методом, позволяющим рассчитывать квазиодномерные нестационарные течения многокомпонентного реагирующего газа с явным выделением произвольного числа взаимодействующих разрывов (ударных волн, контактных разрывов, характеристик семейств C^\pm) [59, 60, 78, 226, 300], подробно описанным в главе 3. Начальные данные для численного моделирования соответствовали условиям проведения экспериментальных исследований [204]. В начальный момент времени газ в УТ покоился, температура равнялась 298.15 К, химические превращения не происходили, в КНД находилась горючая смесь при пониженном давлении, в КВД – гелий при высоком давлении. Начальное давление в КВД - $p_{КВД}$, подбиралось таким образом, чтобы в результате численного моделирования образовывалась стационарная пересжатая ДВ, распространяющаяся по горючей смеси со скоростью, наблюдаемой в экспериментах. Было предложено находить $p_{КВД}$ из решения задачи о распаде произвольного разрыва в детонирующем газе [72, 79], подробно описанной в предыдущем разделе. Считалось, что давление, температура и концентрации продуктов сгорания между УВ и КР, удовлетворяют условиям химического равновесия.

В случае, когда в начальный момент времени газ в УТ покоится, давление на контактном разрыве ищется как корень уравнения [79]:

$$F(p) = \int_{p_{КВД}}^p \frac{dp}{\rho a} + \sqrt{\left(\frac{1}{\rho_{КНД}} - \frac{1}{\rho_{II}} \right) (p - p_{КНД})} = 0. \quad (4.60)$$

Для вычисления плотности и скорости звука, входящих в подынтегральное выражение как функций давления, использовались уравнения состояния (4.56) и условие сохранения энтропии $S_{КВД}$ в веере волн разрежения,

$$S = (S_{He}^0(T) - R \ln(p/p_0)) / m_{He} = S_{КВД}. \quad (4.61)$$

Здесь m_{He} - молекулярный вес гелия. При вычислении плотности ρ_{Π} , температуры T_{Π} и мольно-массовых концентраций $\gamma_{\Pi,i}$ справа от КР использовались уравнения состояния (4.56) и выражение для равновесной детонационной адиабаты (4.62)

$$\sum_{i=1}^N \gamma_{\Pi,i} H_i^0(T_{\Pi}) - H_{КНД} - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\rho_{\Pi}} + \frac{1}{\rho_{КНД}} \right) (p - p_{КНД}) = 0. \quad (4.62)$$

При этом $\gamma_{\Pi,i}$ удовлетворяют уравнениям сохранения элементного состава и условиям термодинамического равновесия. Таким образом, плотность ρ_{Π} и концентрации $\gamma_{\Pi,i}$ в состоянии термодинамического равновесия можно считать неявно-заданными функциями p, T_{Π} и $\gamma_k^0, k=1, \dots, N_e$. Система нелинейных алгебраических уравнений (4.60)-(4.62) решается с использованием алгоритма, приведенного в главе 2. Из нее могут быть найдены значения давления p на КР, температуры и плотности, слева и справа от КР ($T_L, T_{\Pi}, \rho_L, \rho_{\Pi}$) соответственно, а также равновесные концентрации $\gamma_{\Pi,i}, i=1, \dots, N$. Данная задача имеет физически допустимые решения при скорости УВ (в рассматриваемой постановке, фактически ДВ), равной и превышающей скорость детонации Чепмена-Жуге для рассматриваемой горючей смеси. Скорости КР и УВ находятся из соотношений:

$$u = \sqrt{\left(\frac{1}{\rho_{КНД}} - \frac{1}{\rho_{\Pi}} \right) (p - p_{КНД})} = 0, \quad (4.63)$$

$$D = \rho_{\Pi} u / (\rho_{\Pi} - \rho_{КНД}). \quad (4.64)$$

Давление в КВД - $p_{КВД}$ - подбиралось в итерациях таким образом, чтобы рассчитанная из (4.60) - (4.64) скорость УВ D равнялась наблюдаемой в экспериментах [204] скорости ударной волны. В результате численного моделирования экспериментальных исследований [204] получены два режима формирования ДВ. На рис. 4.60, 4.62, 4.64 представлена картина течения, наблюдаемая в эксперименте № 32, на рис 4.61, 4.63, 4.65 – в эксперименте № 143. Моменты времени, которым соответствуют кривые, приведенные на рис. 4.62, 4.63, могут быть определены с помощью рис.4.60, 4.61. Временная развертка течения (рис. 4.60) включает УВ, распространяющуюся по горючей смеси, КР и веер волн разрежения, распространяющийся в инертном газе. Горючая смесь воспламеняется на КР, образуется волна воспламенения и опережающая её волна сжатия. При $t \sim 0.9$ мс характеристики, образующие волну сжатия, пересекаются, образуется висющаяся ударная волна, которая при $t \sim 1$ мс взаимодействует с

головной УВ, существенно ускоряя последнюю (рис. 4.64). Давление и температура (рис. 4.62) в зоне, непосредственно примыкающей к УВ, также резко возрастают, формируется нестационарная пересжатая ДВ, которая в дальнейшем (к моменту времени $t \sim 2 \text{ мс}$) выходит на режим распространения со скоростью, близкой к постоянной. В эксперименте 143 (рис. 4.61) волна сжатия не приводит к образованию висячего скачка, головная УВ монотонно ускоряясь (рис. 4.64) переходит в детонационную. Отсутствует наблюдаемый в эксперименте 32 вторичный КР (рис. 4.63). На рис. 4.64 приводятся графики скорости УВ (кривые 1, 2) и предварительно рассчитанные в результате решения задачи о распаде разрыва в детонирующем газе [72, 79]; скорости стационарной равновесной пересжатой ДВ (кривые 3, 4). Отличие скоростей при $X = 5 \text{ м}$ составляет $\sim 0.3 \%$ и уменьшается с ростом X . Необходимо отметить, что эксперименты 32 и 143 выбраны для иллюстрации развития процесса, картина выхода на стационарный режим распространения ДВ в других экспериментах может отличаться от описанной. При численном моделировании (рис. 4.60, 4.61) использовалась расчетная сетка, включающая две точки на УВ (жирная сплошная), две точки на КР (пунктир), траектории газа (штрих-пунктир), фиксированные точки (штрих-штрих-пунктир), координаты которых соответствовали датчикам в УТ, и характеристики (тонкая сплошная), число которых увеличивалось в процессе расчета. При моделировании эксперимента 32 характеристики C^+ “зарождались” на КР с шагом $\Delta t = 10^{-6} \text{ с}$ (рис. 4.60). Число траекторий выбиралось таким образом, чтобы на зону воспламенения на стационарном участке распространения ДВ приходилось не менее 5 расчетных точек. В точке пересечения характеристик при $t \sim 0.9 \text{ мс}$ и ударных волн при $t \sim 1 \text{ мс}$ (рис. 4.60) решалась задача о распаде разрыва, образовавшиеся в результате УВ и КР становились узлами разностной сетки и отслеживались в расчете.

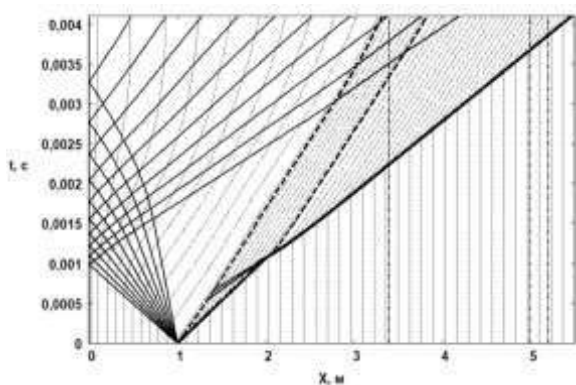


Рис. 4.60. Временная развертка течения (Эксперимент № 32)

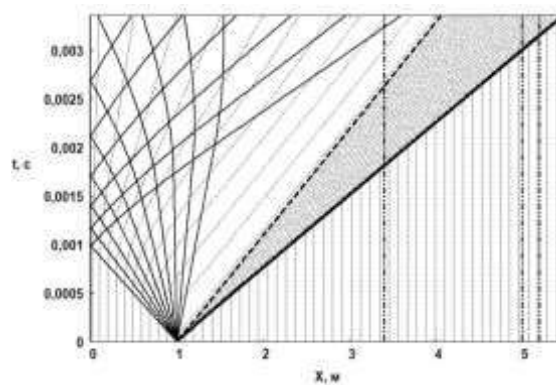


Рис. 4.61. Временная развертка течения (Эксперимент № 143)

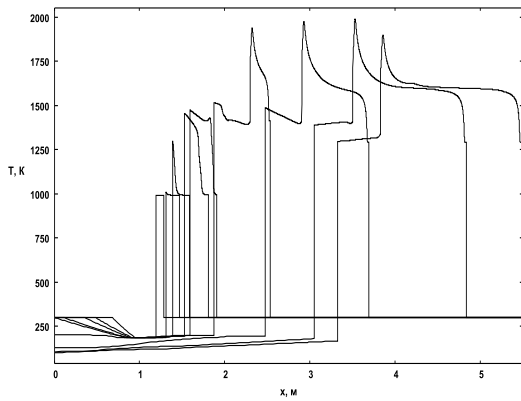


Рис. 4.62. Распределения температуры (Экс. № 32)

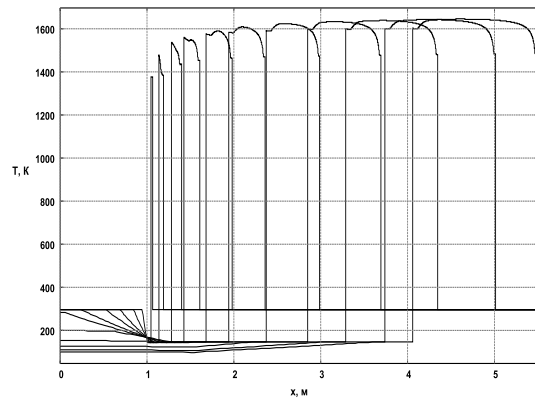


Рис. 4.63 . Распределения температуры (Экс. № 143)

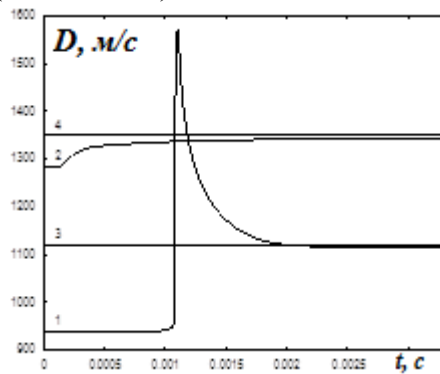


Рис. 4.64. Зависимость скорости головной УВ от времени. 1 – экс. №32, 2 – экс. № 142. 3, 4 – скорость пересжатой ДВ, полученная из решения автомодельной равновесной задачи о распаде разрыва [79].

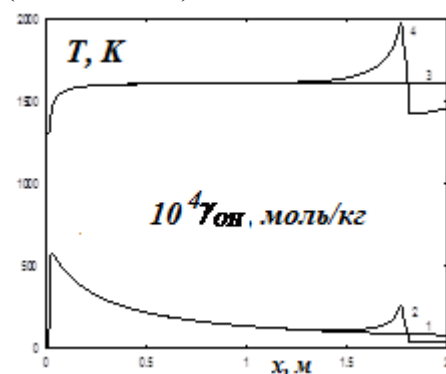


Рис. 4.65. Результаты сравнения расчетов стационарной пересжатой ДВ в нестационарной (2, 4) и стационарной (1, 3) постановках. 3, 4 - температура, 1, 2 - мольно-массовая концентрация OH .

Также было проведено численное моделирование экспериментов [204] в предположении, что по УТ распространяется стационарная пересжатая ДВ со скоростью, наблюдаемой в экспериментах ($D = const$) [78, 85, 226].

Необходимо отметить, что в некоторых экспериментах (№ 13, № 20, № 21) [204] фиксировалась скорость УВ, меньшая чем скорость детонации Чепмена-Жуге. На рис. 4.66 приведены результаты сравнения расчетов, выполненных в нестационарной и стационарной постановках, начальные данные соответствуют эксперименту 32. По оси абсцисс отложено расстояние от УВ до рассматриваемой точки. На промежутке $x \in [0..1]$ м графики совпадают, причем как по “макропараметру”, каким является температура (кривые 3, 4), так и по концентрации OH (кривые 1, 2), мольная доля которого в составе продуктов сгорания составляет менее процента. Дальнейшие различия, а именно: рост температуры и концентрации OH , связан с существованием области течения с

нестационарной пересжатой ДВ (рис. 4.64). Резкое падение температуры и концентрации OH при $X \sim 1.8$ м (рис. 4.65) соответствует контактному разрыву, образованному в результате взаимодействия волны горения и головной УВ ($t \sim 1$ мс, рис. 4.60, 4.62).

На рис. 4.66 представлены результаты сравнения с расчетными (кривые 1, 2) и экспериментальными данными (маркеры), приведенными в [25]. При расчете кривой 3, система уравнений химической кинетики решалась при фиксированных давлении и температуре, а при расчете кривой 4 – при фиксированных плотности и внутренней энергии. При этом критерии воспламенения использовались те же, что и в [25], максимум скорости изменения концентрации H_2O и максимум скорости роста температуры соответственно.

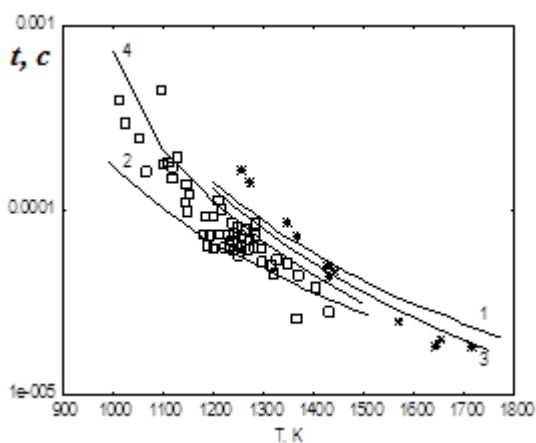


Рис. 4.66. Задержка воспламенения в стационарной детонационной волне. Кривые 1, 2 – расчетные данные [25], маркеры – эксперименты, приведенные в [25]. Кривые 3, 4 – настоящая работа.

Результаты сравнения времени расчетов с экспериментами [204] в стационарной и нестационарной постановках приводятся на рис. 4.67, 4.68. На рис. 4.67 по оси ординат в соответствии с [204] отложено произведение лабораторного времени задержки воспламенения на давление за ударной волной, выраженное в атмосферах, и молярную долю стехиометрической составляющей смесей 1-9 [204]. Как правило, экспериментальные значения “приведенного времени” лежат в области между рассчитанными. На рис. 4.67 также приводится время выхода системы на состояние термодинамического равновесия, которое характеризуется моментом лабораторного времени, когда выполняется равенство: $y_p = \frac{1}{T} \frac{dT}{d\xi}$, соответствующее значению ξ при котором температура смеси изменится на $y_p * T$, K при перемещении УВ на расстояние l м и сохранении темпов изменения температуры [226]. Приводятся времена, соответствующие $y_p = 0.001$ (*) и 0.01 (□). Видно, что время выхода на состояние

равновесия в отличие от времени задержки воспламенения слабо зависит от температуры за УВ.

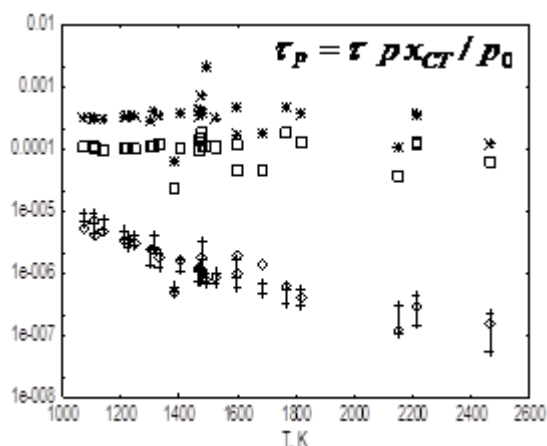


Рис. 4.67. Зависимость приведенного лабораторного времени от температуры. \diamond – эксперимент [204], + - рассчитанные τ_1, τ_2 ; *, \square – время выхода на равновесие с точностью до 1 и 0.1 % соответственно.

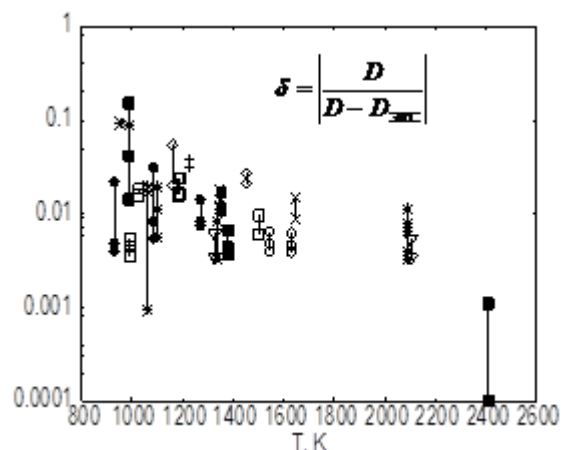


Рис. 4.68. Зависимость относительной погрешности скорости головной УВ, рассчитанной по нестационарной методике от начальной температуры за УВ.

На рисунке 4.68 приводятся зависимость модуля относительного отклонения ($\delta = \left| \frac{D}{D - D_{экс}} \right|$) между скоростью ударной волны, полученной в результате решения нестационарной задачи в момент прохождения датчика и измеренной в экспериментах, от начальной температуры за ударной волной. Необходимо отметить, что в ряде экспериментов (10, 12, 17, 33) выход на стационарный режим распространения ДВ наблюдается на втором и третьем датчике, при этом скорость распространения ДВ отличается от теоретического значения более чем на 2%. Первый тип режима формирования ДВ наблюдается в экспериментах (32-35, 81, 83, 123, 139) с начальной температурой 990 – 1200 К, второй (10, 12, 17, 41, 51, 54, 57, 62, 95, 104, 105, 109, 110, 124, 140, 142, 150) – 1200 – 2400 К. При моделировании экспериментов (77, 79, 119) при начальной температуре менее 950 К ДВ не формируется и соответственно не выходит на режим распространения, близкий к стационарному.

Выводы

1. Проведено численное моделирование [78, 85, 226] экспериментов [204] в ударных трубах по определению задержки воспламенения за ударной волной, распространяющейся по горючим смесям водорода с кислородом, разбавленных аргоном, в режиме близком к стационарному. Показано, что кинетический механизм, предложенный в [140], описывает эксперименты [204] при температурах за падающей

ударной волной более 950 К и дает завышенные значения времени задержки воспламенения при температурах менее 950 К. При проведении экспериментальных исследований при начальных температурах менее 1250 К, необходимо учитывать наличие участка существенно нестационарного распространения УВ.

2. При отработке кинетических механизмов детонационного горения и их сопоставлении с экспериментальными исследованиями на ударных трубах, необходимо учитывать “степень стационарности”, наблюдаемой ударной волны и время требуемое для перехода продуктов сгорания в состояние, близкое к равновесному.

3. Отличия расчетных и экспериментальных данных, наблюдаемые при температурах ниже 950 К, могут быть, связаны как с необходимостью уточнения констант скоростей химических реакций, так и с идеальностью используемой вычислительной модели.

4.1.5. Об использовании глобальных кинетических механизмов при численном моделировании детонации пропано-воздушной горючей смеси

Данная задача рассмотрена в [92]. Для моделирования высокоскоростного горения и детонации углеводородного горючего в кислороде и воздухе в литературе приводятся большое число кинетических механизмов, включающих от одной до нескольких сотен химических реакций [23, 239]. Количество используемых газофазных химических реакций связано с целями исследований, с интересующим диапазоном начальных условий. Часто детальные кинетические механизмы используют для конструирования брутто-механизмов химических превращений, включающих менее десяти химических реакций, которые описывают интересующие исследователя свойства реагирующей системы и позволяющие за разумные времена проводить численное моделирование многомерных течений [23, 239]. Для описания высокоскоростного горения и детонации, кинетические механизмы должны описывать особенности воспламенения и сгорания горючих смесей в рассматриваемых условиях. А именно: время задержки воспламенения, время перехода системы в состояние близкое к равновесному, параметры, характеризующие равновесное состояние, а также корректное моделирование особого режима распространения детонационных волн – детонации Чепмена-Жуге.

Рассмотрим высокоскоростное горение и детонацию пропана (часто используемого как модельное углеводородное горючее [23]) в кислороде (

$x\text{C}_3\text{H}_8 + (1-x)\text{O}_2$). Для описания химических превращений в газовой фазе в работах [23, 146] предлагается использовать пятистадийный кинетический механизм, который включает 6 веществ (C_3H_8 , O_2 , CO , CO_2 , H_2 , H_2O). При моделировании горения пропана с использованием детальных кинетических механизмов список веществ, входящих в состав продуктов сгорания существенно шире, и включает например 15 компонент: 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 рисунке 4.69 приведены результаты сравнения с экспериментальными данными [274], рассчитанных значений скорости детонации Чепмена-Жуге (алгоритм расчета описан в разделе 4.1.1) для 6 и 15 веществ и соответствующие зависимости температуры. Согласно [274] пределы существования детонации пропана в кислороде лежат в диапазоне 0.04-0.38 (стехиометрическое соотношение $x=1/6$). 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. Существенное отличие температур обусловлено наличием в продуктах сгорания с заметными концентрациями атомарных компонент H , O , а также радикала OH . Необходимо отметить, что решение рассматриваемой системы существует вне концентрационных пределов детонации, а также, что при мольных долях пропана превышающих 0.4 в составе продуктов сгорания в заметных концентрациях появляется твердый углерод.

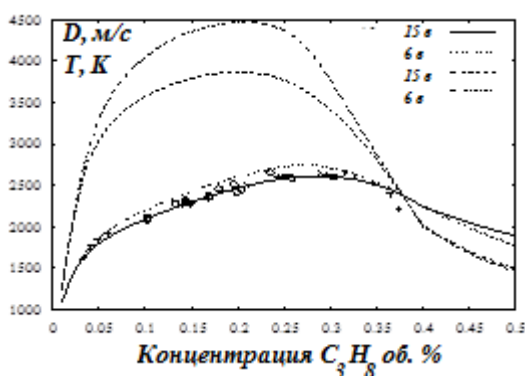


Рис. 4.69. Расчетные зависимости скорости детонации Чепмена – Жуге (две нижние кривые) и температуры (две верхние кривые) от мольной доли C_3H_8 . Маркеры – экспериментальные данные [203] ($p_0 = 101325$ Па, $T_0 = 293.15$ К).

Рассмотрим горючую смесь пропана с воздухом: $x\text{C}_3\text{H}_8 + (1-x)(0.21\text{O}_2 + 0.79\text{N}_2)$ при нормальных условиях. Пределы воспламенения: 2.3-9.5 % [274]. Стехиометрическое соотношение $x=0.04031$. В этом случае к сокращенному списку веществ добавляется N_2 , а к расширенному - NO , N_2 , N . Результаты моделирования параметров детонации

Чепмена-Жуге для четырех различных соотношений пропан-воздух ($x=0.02057$; 0.04031; 0.04988; 0.09502) приведены в таблице 4.6 (концентрации мольно-массовые).

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. Отличие по скорости детонации не превосходит полутора процентов, а по температуре – трех. Таким образом, можно считать, что при моделировании детонации в пропано-воздушных горючих смесях можно ограничить состав продуктов сгорания списком из семи веществ.

Таблица 4.6.

	18 веществ				7 веществ			
	1	2	3	4	1	2	3	4
D, м/с	1498	1800	1837	1655	1507	1826	1863	1655
T, К	2049	2822	2828	1886	2072	2906	2912	1887
P 10 ⁻⁵ Па	12.32	18.49	19.12	15.24	12.39	18.84	19.39	15.24
U, м/с	633	806	814	694	633	810	815	694
m_{Σ} , г/моль	28.57	27.67	26.73	21.95	28.57	27.77	26.86	21.95
κ	1.271	1.248	1.251	1.295	1.271	1.246	1.248	1.295
O2	3.4162	0.4180	0.0428	-	3.5291	0.7044	0.0885	-
N2	26.429	25.578	25.300	23.596	26.531	25.731	25.349	23.596
CO	0.0038	1.0831	2.6986	8.8575	0.0044	1.1345	2.6544	8.8578
CO2	2.1120	3.0208	2.3551	0.5510	2.1113	2.9695	2.3993	0.5507
H2	0.0011	0.2549	0.9174	9.9574	0.0012	0.2743	0.8918	9.9592
OH	0.0356	0.3491	0.2126	0.0001	-	-	-	-
H2O	2.8021	5.0112	5.6541	2.5852	2.8198	5.1976	5.8464	2.5855
NO	0.2042	0.3051	0.0978	-	-	-	-	-
H	0.0001	0.0625	0.1209	0.0039	-	-	-	-
O	0.0030	0.0535	0.0175	-	-	-	-	-

Для моделирования структуры детонационной волны рассмотрим модельную задачу о стационарной детонационной волне, которая сводится к решению системы дифференциально-алгебраических уравнений, состоящей из нелинейной системы алгебраических уравнений и дифференциальных уравнений химической кинетики [97], алгоритм ее решения описан в разделе 4.1.1.

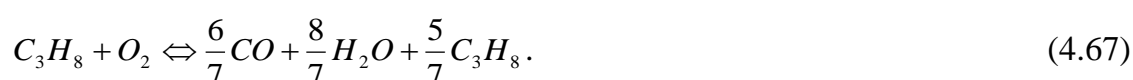
Для описания газофазных химических превращений в [23, 146] предлагается использовать упрощенный механизм, состоящий из необратимых химических реакций.



В [23] рекомендованы зависимости скоростей химических реакций от температуры, давления и концентраций участвующих в них компонент, позволяющие добиться совпадения с экспериментальными данными по задержке воспламенения смеси в широком диапазоне начальных параметров. Использование механизмов с необратимыми реакциями (или с обратимыми, но скорости которых не согласованы с моделью термодинамики) приводит к тому, что предельное состояние (стационарная точка) для рассматриваемой системы уравнений зависит от констант скоростей химических реакций и заведомо не совпадает с состоянием термодинамического равновесия. Данный факт может приводить к существенным отличиям от равновесных получаемым в результате решения макропараметрам, в частности по скорости детонации Чепмена-Жуге, температуре, молекулярному весу продуктов сгорания и др. Рассмотрим модификацию предлагаемого в [146] механизма, позволяющую считать все реакции обратимыми. В [146] рекомендуется следующая зависимость скорости брутто-реакции расходования пропана

$$\vec{W}_1 = \vec{K}_1(T, p)(\rho\gamma_{C_3H_8})(\rho\gamma_{O_2}). \quad (4.66)$$

Объемные концентрации пропана и кислорода входят в выражение (4.66) в первой степени, для корректного с термодинамической точки зрения вычисления констант скоростей обратных реакций данные степени должны быть равны стехиометрическим коэффициентам соответственно 1 и 3.5. После эквивалентных преобразований брутто-реакция может быть переписана в виде [92]



При этом для корректного расчета времени задержки воспламенения в расчетах необходимо использовать модифицированную константу скорости брутто-реакции

$$\vec{K}_1^{\rightarrow}(T, p) = \frac{7}{2} \vec{K}_1^{\rightarrow}(T, p), \text{ соответственно: } \vec{W}_1^{\leftarrow} = \vec{K}_1^{\leftarrow}(T, p)(\rho\gamma_{CO})^{\frac{6}{7}}(\rho\gamma_{H_2O})^{\frac{8}{7}}(\rho\gamma_{C_3H_8})^{\frac{5}{7}}.$$

Остальные реакции предлагается считать обратимыми с рекомендованными в [146] скоростями прямых реакций: $CO + H_2O \Leftrightarrow CO_2 + H_2$, $2H_2 + O_2 \Leftrightarrow 2H_2O$, $2CO + O_2 \Leftrightarrow 2CO_2$, при этом константы скоростей обратных реакций рассчитываются по стандартным правилам [121]

$$\frac{\vec{K}_1^{\leftarrow}(r)}{\vec{K}_1^{\rightarrow}(r)} = \exp \left[\sum_{i=1}^N (\vec{v}_i^{\leftarrow}(r) - \vec{v}_i^{\rightarrow}(r)) \left(\frac{G_i^0(T)}{RT} + \ln \frac{RT}{p_0} \right) \right], r = 1, \dots, N_R. \quad (4.68)$$

Для произвольной r -ой химической реакции вида (1.34), протекающей со скоростью $\vec{W}^{(r)} = \vec{K}^{(r)}(T, p) \prod_{i=1}^N (\rho \gamma_i)^{b_i^{(r)}}$, для случая $b_i^{(r)} > 0$, справедлива форма записи

$$\sum_{i=1}^N b_i^{(r)} M_i \Leftrightarrow \sum_{i=1}^N (b_i^{(r)} + a^{(r)} (\bar{\nu}_i^{(r)} - \bar{\nu}_i^{\prime(r)})) M_i, \quad \text{где} \quad a^{(r)} = \min_{\substack{i=1, N \\ \bar{\nu}_i^{\prime(r)} \neq 0}} \left(\frac{b_i^{(r)}}{\bar{\nu}_i^{\prime(r)}} \right). \quad \text{При этом}$$

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

Как уже отмечалось в разделе 4.1.1, в результате численного решения дифференциально-алгебраической системы уравнений могут быть получены стационарные точки системы, соответствующие минимальной скорости детонационной волны, при которой данная система имеет решение – состояние Чепмена-Жуге.

На рис. 4.70 – 4.71 представлены результаты численного моделирования при нормальном и пониженном давлении [92]. Модель с обратимыми химическими реакциями дает хорошее совпадение с результатами равновесных расчетов вплоть до избытка горючего 1.75. Отличие от равновесных значений в рассматриваемом случае связано с тем, что число независимых химических реакций меньше числа рассматриваемых веществ. Модель с необратимыми химическими реакциями дает заметное отличие по скорости детонации Чепмена-Жуге в окрестности стехиометрии и существенное отличие по температуре и молекулярному весу продуктов сгорания.

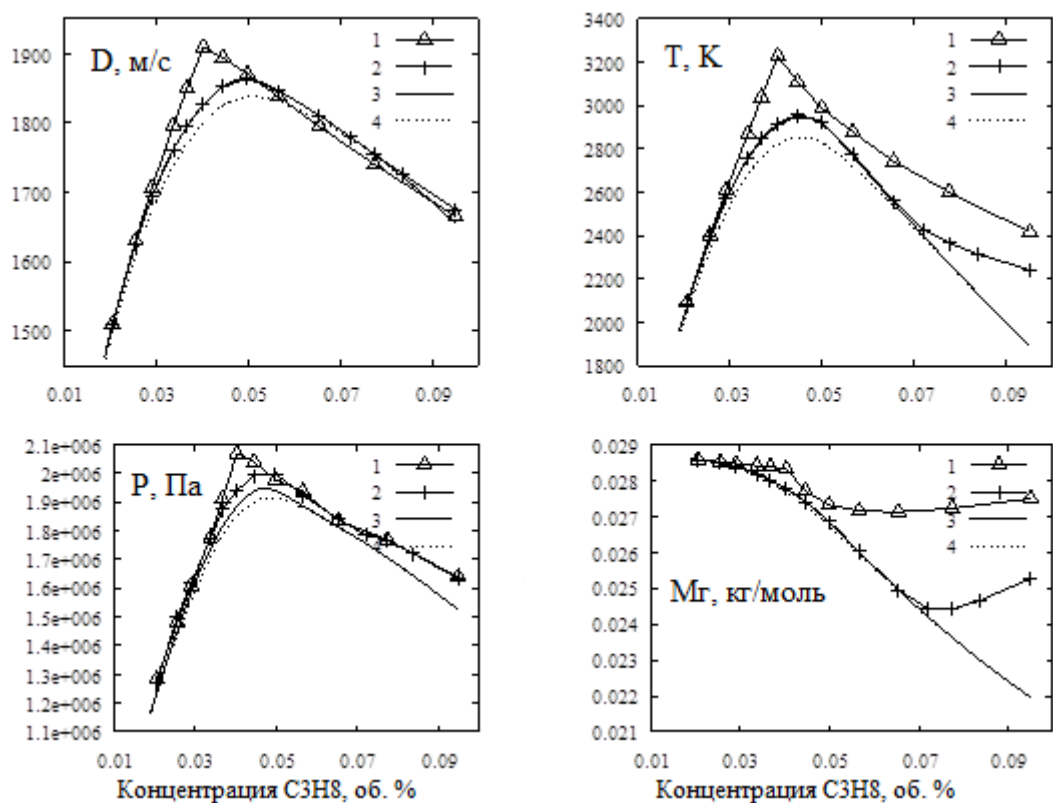


Рис. 4.70. Распределение параметров смеси в зависимости от мольной доли пропана при начальном давлении $p = 101325$ Па (1 – необратимые химические реакции, 2 – обратимые химические реакции, 3, 4 – равновесный расчет 7 и 18 веществ соответственно).

На рис. 4.72 представлены изменения температуры в пересжатой детонационной волне ($D=1900$ м/с) при различных начальных давлениях и составах. Видно, что задержки воспламенения в детонационной волне совпадают, а уровень достигаемых температур существенно отличается, причем отличие может достигать до 250 К (рис. 4.72).

Выводы

Результаты проведенных исследований показывают, что использование кинетических механизмов с необратимыми химическими реакциями для описания горения и детонации пропана в воздухе применимо, когда время перехода системы в равновесное состояние существенно превосходит время, интересное для исследования. Если это не так, то при численном моделировании необходимо использовать механизмы с обратимыми химическими реакциями, константы скоростей которых связаны через константы равновесия.

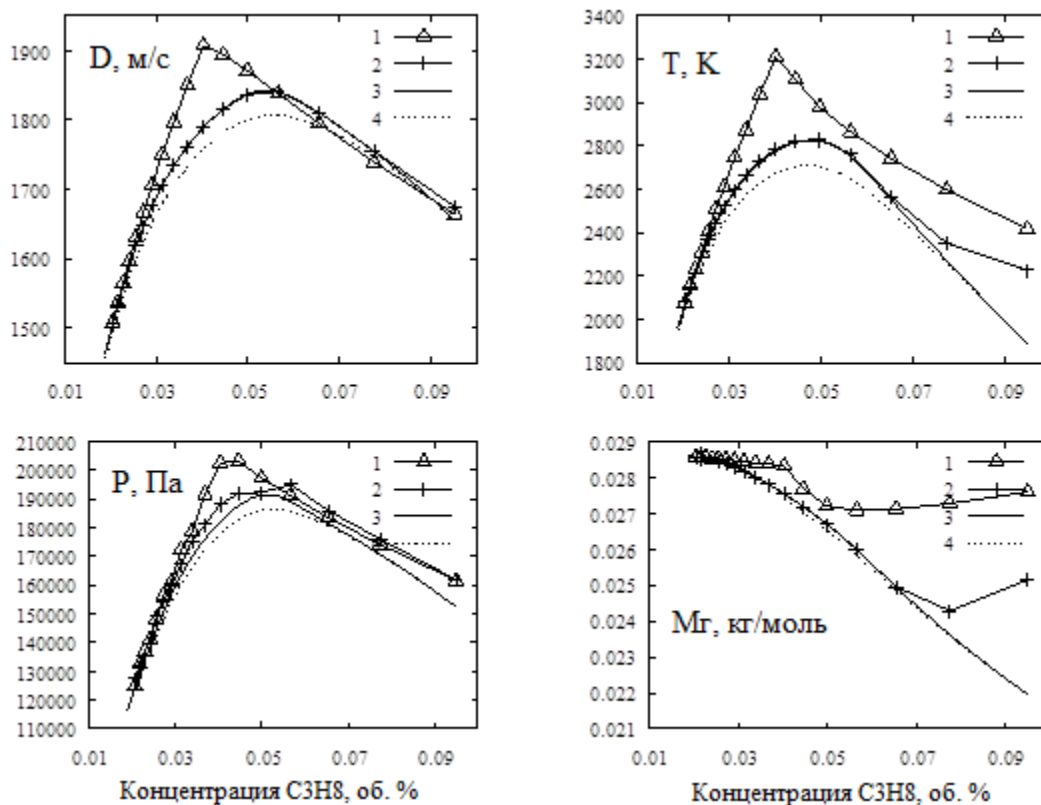


Рис. 4.71. Распределение параметров смеси в зависимости от мольной доли пропана при начальном давлении $p = 10000$ Па

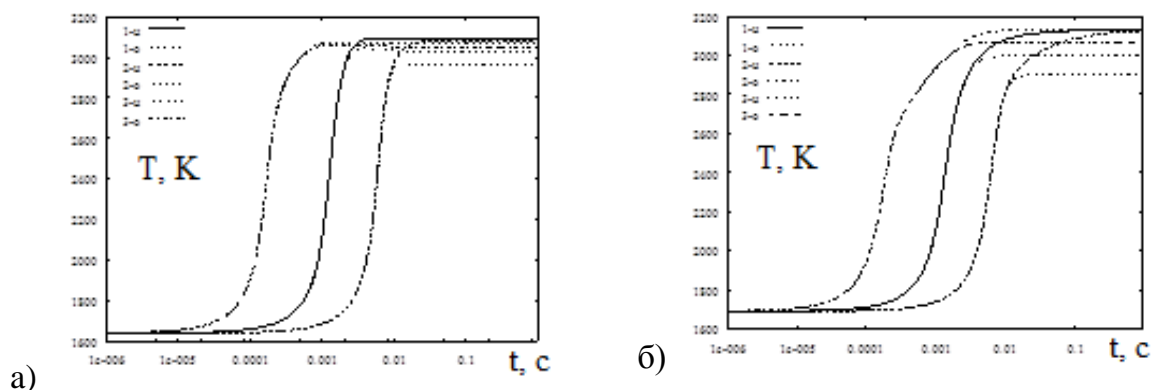


Рис. 4.72. Зависимость температуры от расстояния от ударной волны (о – обратимые, н - необратимые химические реакции) при различных начальных давлениях (0.01 МПа, 0.1 МПа, 1 МПа). а) $x = 0.04988$; б) $x = 0.03382$

4.1.6. Численное моделирование тонкой структуры цилиндрической детонационной волны в водородо-воздушной горючей смеси

В разделе исследуются режимы распространения в водородно-воздушной горючей смеси цилиндрической детонационной волны, сформированной в результате распада разрыва на границе камер высокого и низкого давления [87]. Численное моделирование проводится в квазиодномерной нестационарной постановке с использованием оригинального сеточно-характеристического метода с явным

выделением сильных и слабых разрывов [41, 59, 60, 74, 300], описанным в главе 2., который подробно описан в главе 2. Показано [87], что при приближении к скорости детонации Чепмена-Жуге: детонационная волна распространяется в пульсирующем режиме; частота пульсаций на больших расстояниях слабо зависит от параметров в камере высокого давления; шаг колебаний температуры и плотности по пространственной координате за головной ударной волной близок к измеренным в экспериментах размерам детонационной ячейки.

Результаты расчетно-теоретических и экспериментальных исследований режимов распространения и структуры детонационных волн приведены в большом числе отечественных и зарубежных работ, в частности, в [148, 161, 175, 180, 231, 247, 254]. Исследованы ячеистая структура, энергетические и асимптотические свойства детонационных волн. В последнее время особое внимание уделяется созданию двигательных установок, использующих детонационное сжигание топлива. Как правило ячеистую структуру детонационных волн связывают с двумерными и трехмерными эффектами, с наличием вязкости и турбулентности. Однако возможности квазиодномерного нестационарного моделирования далеко не исчерпаны. В [161] при рассмотрении течений со сферической и цилиндрической симметрией в зависимости от подведённой энергии описаны три режима распространения детонационных волн на больших расстояниях от места инициирования: пульсирующий, галопирующий и срыв детонации; при численном моделировании реагирующего потока использовались модельные химические кинетики. В настоящее время, в связи с развитием вычислительной техники появилась возможность моделировать описанные классиками режимы течения с использованием детальных термодинамически согласованных кинетических механизмов на разностных сетках, величина ячеек которых существенно меньше времен задержки воспламенения в рассматриваемых горючих смесях. Особенностью используемой автором методики моделирования [41, 59, 60, 74, 300] является, во первых, то, что расчетными линиями являются траектории частиц газа, вдоль которых уравнения химической кинетики записываются как обыкновенные дифференциальные во вторых, ударные волны, контактные разрывы и характеристики, образующие веера разрежения, явно выделяются и рассчитываются по специальным алгоритмам. Такой подход позволяет отслеживать распространение возмущений,

обеспечить точное выполнение законов сохранения массы и элементного состава, свести к нулю сеточную диффузию и теплопроводность.

Задание начальных данных. Результаты математического моделирования. Рассматривалась “цилиндрическая камера высокого давления” (КВД), заполненная гелием ($T_{\text{КВД}}=3000$ К), и низкого (КНД), заполненная стехиометрической водородно-воздушной смесью при нормальных условиях ($P_{\text{КНД}}=101325$ Па, $T_{\text{КНД}}=298.15$ К). Для описания химических превращений в горючей смеси использовались 8 обратимых химических реакций [50], в которых участвовали 7 компонент: H_2 , OH , H_2O , O_2 , N_2 , H , O , теплофизические свойства которых заимствовались из [121].

На рис. 4.73 приводится временная развертка течения при давлении в КВД, равном 6 МПа [87]. 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. В КНД образуется висячая УВ, которая распространяется в направлении левой границы расчетной области, в качестве которой используется жесткая стенка, отстоящая на 1 см от оси симметрии (разрешение особенностей течения, возникающих при взаимодействии УВ с осью симметрии, в данном случае не имеет принципиального значения). Происходит серия взаимодействий УВ со стенкой и контактным разрывом, в результате несколько ударных волн распространяются по горючей смеси вслед за головной УВ. Необходимо отметить, что на момент окончания численного моделирования возмущения от стенки ещё не достигли головной УВ.

При численном моделировании границами расчетной области являются левая стенка и головная ударная волна, используется подвижная разностная сетка, состоящая из траекторий газа (на рис. 4.73 приводятся каждая 200-ая траектория из оставшихся на момент окончания расчета), траектории ударных волн, контактных разрывов и характеристик. Всего в расчете задействовано 5000 траекторий газа, которые “зарождаются” на головной УВ каждые 0.01 мкс. При временах больших чем 50 мкс, одновременно с зарождением, одна траектория удаляется из области, занятой горючей смесью, при этом выбирается траектория, удаление которой приводит к минимальной погрешности расчета.

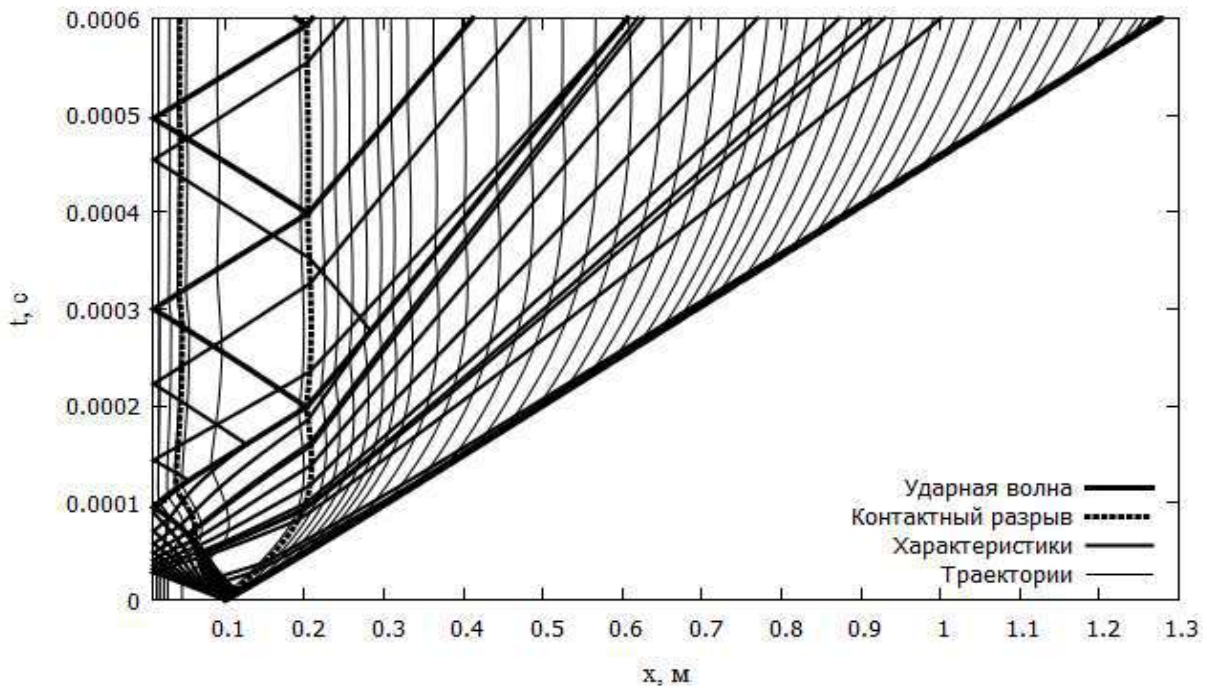


Рис. 4.73. Временная развертка течения (КВД: He , $P_{\text{КВД}} = 6$ МПа, $T_{\text{КВД}} = 3000$ К. КНД: $0.2958 H_2 + 0.1479 O_2 + 0.5563 N_2$, $P_{\text{КНД}} = 101325$ Па, $T_{\text{КНД}} = 298.15$ К).

После распада разрыва скорость УВ, распространяющейся по горючей смеси, из-за расширения газа несколько падает (рис. 4.74а). В результате взаимодействия с волной горения скорость головной УВ резко увеличивается, и образуется пересжатая детонационная волна. При приближении скорости головной УВ к скорости детонации Чепмена-Жуге (для рассматриваемой смеси из 7 компонент, рассчитанная скорость детонации Чепмена-Жуге [79] равна 1976.9 м/с) начинаются "высокочастотные" колебания скорости УВ (рис. 4.74). По мере продвижения детонационной волны "высокочастотные" колебания переходят в "низкочастотные". На расстоянии порядка 1 м от распада разрыва во всех рассмотренных вариантах (рис. 4.74) 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 (19-20 мм) 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. 4.75) и плотности. Необходимо отметить, что на все участки кривых (рис. 4.75) 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 сеточной диффузии и теплопроводности.

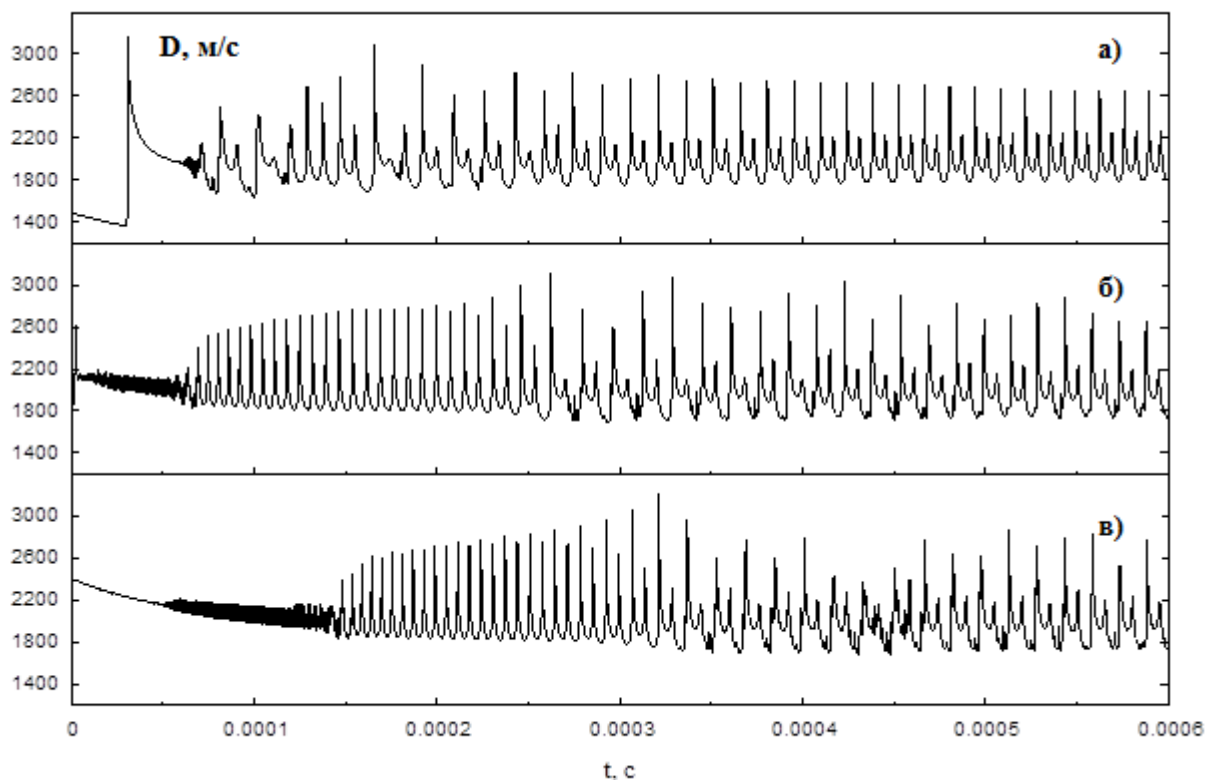


Рис. 4.74. Зависимость скорости головной ударной волны от времени а) $P_{\text{КВД}} = 3$ МПа, б) $P_{\text{КВД}} = 6$ МПа, в) $P_{\text{КВД}} = 10$ МПа.

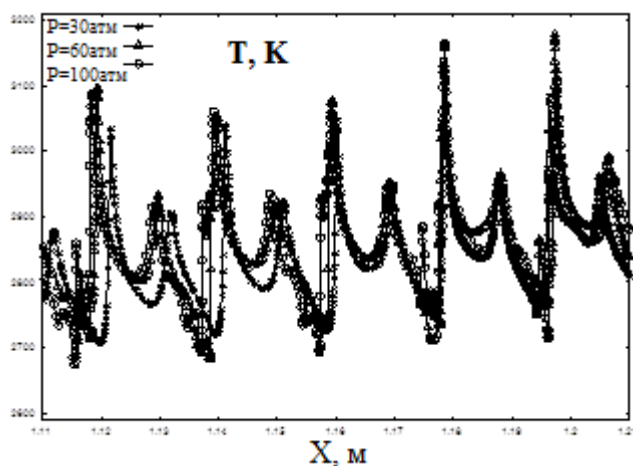


Рис. 4.75. Распределение температуры непосредственно за головной ударной волной

Расстояние между точками максимума на графиках температуры составляет 19 ± 1 мм, что удовлетворительно согласуется с экспериментальными данными о продольном размере детонационных ячеек в стехиометрических водородно-воздушных горючих смесях: $15,9 \pm 2$ мм [247].

Выводы

Путем численного моделирования получен пульсирующий режим распространения цилиндрических детонационных волн в водородо-воздушной горючей смеси. Получено, что период пульсаций на малых расстояниях от места инициирования зависит от параметров инициирования, а на больших – нет, при этом минимальное значение скорости головной ударной волны отличается на ~10% от скорости детонации Чепмена-Жуге, а среднее на ~1%. Период пульсаций параметров за головной ударной волной удовлетворительно согласуется с продольными размерами детонационных ячеек в водородо-воздушной смеси, наблюдаемыми в экспериментах. В целом, за головной ударной волной реализуется существенно ”осцилляционное” распределение температуры, плотности и концентраций, свидетельствующее на первый взгляд об ошибках при численном моделировании. Однако при подробном качественном анализе течения можно сделать вывод о том, что колебания параметров связаны исключительно с пульсациями скорости головной ударной волны, которые имеют физическую природу, заложенную в уравнения невязкой, нетеплопроводной газовой динамики, а именно существование минимальной скорости распространения стационарной детонации. Результаты проведенных расчетов свидетельствуют о возможности количественного воспроизведения некоторых режимов ячеистой детонации в квазиодномерной нестационарной постановке.

4.2. Детонация газочапельных смесей

В фундаментальной книге Митрофанова В.В. “Детонация гомогенных и гетерогенных смесей” [191] отмечается, что для любой взрывчатой смеси, в том числе и многофазной, существует равновесная кривая Гюгонио, на которой существует точка Чепмена-Жуге. Однако знание кривой Гюгонио и параметров идеальной детонации дает лишь предварительные ориентиры, но как правило, бывает совершенно недостаточным для прогнозирования реальных свойств детонационной волны в гетерогенных системах. Для этого требуется расчет всей области течения, влияющей на фронт в детонационной волне, с учетом реальной кинетики внутренних физических и химических релаксационных процессов. Митрофанов В.В. отмечает, что физико-химические и гидродинамические процессы при взрыве гетерогенных систем весьма сложны, и существующие математические модели далеко не всегда дают ответы на возникающие

практические вопросы. Поэтому часто главным средством изучения взрыва в таких системах является эксперимент. Из рассмотрения экспериментальных исследований детонации в трубах им делается вывод, что в системе “капли углеводородного горючего – газообразный кислород” детонация существует в широком интервале размеров капель (от микрометров до миллиметров) и концентраций, в том числе для малолетучих топлив, таких как керосин... для аэрозолей с каплями диаметром < 10 мкм нижний предел мало отличается от предела в газовых смесях. Из вышесказанного можно сделать вывод, что крайне важно развивать замкнутые математические модели и методы моделирования как конечных равновесных состояний многофазных систем, так и физических и химических релаксационных процессов, для которых они являются предельными (стационарными) точками. Часть результатов, вошедших в данный раздел, получены под руководством и при участии автора вошли в [193], они приводятся в настоящей работе для иллюстрации методик численного моделирования развиваемых автором.

Рассмотрим течение за стационарной УВ, распространяющейся по газочапельной смеси. Если ввести автомодельную координату: $\xi = Dt - x$ (расстояние от ударной волны до рассматриваемой точки x), то система уравнений (1.8)-(1.17) в случае испаряющихся капель жидкого горючего может быть сведена к системе дифференциально-алгебраических уравнений [76, 89, 193] (аналогичной, приведенной в разделе 1.4):

$$\rho v + n_s m_s v_s = \rho_0 v_0 + n_{s0} m_{s0} v_{s0}; \quad (4.69)$$

$$\rho v + p + n_s m_s v_s^2 = \rho_0 v_0^2 + p_0 + n_{s0} m_{s0} v_{s0}^2; \quad (4.70)$$

$$\rho v \left(e + \frac{p}{\rho} + \frac{v^2}{2} \right) + n_s m_s v_s \left(e_s + \frac{v_s^2}{2} \right) = \rho_0 v_0 \left(e_0 + \frac{p_0}{\rho_0} + \frac{v_0^2}{2} \right) + n_{s0} m_{s0} v_{s0} \left(e_{s0} + \frac{v_{s0}^2}{2} \right); \quad (4.71)$$

$$n_s v_s = n_{s0} v_{s0}; \quad (4.72)$$

$$\frac{d\rho v \gamma_i + n_s m_s v_s \gamma_{is}}{d\xi} = W_i, \quad i = 1, \dots, N; \quad (4.73)$$

$$v_s \frac{dm_s}{d\xi} = \dot{m}_s = W_s \mu_s / n_s; \quad (4.74)$$

$$v_s \frac{du_s}{d\xi} = \dot{u}_s; \quad (4.75)$$

$$v_s \frac{dm_s h_s}{d\xi} = \dot{H}_s; \quad (4.76)$$

где h_s, γ_{is} - энтальпия, число молей i -ого вещества в килограмме массы частицы, соответственно; \dot{H}_s - выражение, описывающее скорость изменения энтальпии,

$$v = D - u, \quad v_s = D - u_s \quad (4.77)$$

- скорость газа и капель относительно УВ, а индексом “0” обозначаются параметры перед УВ.

Система уравнений (4.69)-(4.76) дополняется моделями термодинамики (1.21)-(1.24), химической кинетики (1.34)-(1.38) и сопротивления и тепломассообмена (1.40)-(1.42). Начальные условия для системы обыкновенных дифференциальных уравнений задаются непосредственно за ударной волной. При переходе через ударную волну остаются неизменными масса, скорость, температура частиц и состав газовой смеси.

$$\gamma_i(0) = \gamma_{i1} = \gamma_{i0}, m_s(0) = m_1 = m_{i0}, u_s(0) = u_{s1} = u_{s0}, H_s(0) = H_{s1} = H_{s0}. \quad (4.78)$$

При решении системы (4.69)-(4.76) предполагается, что двухфазная смесь перед ударной волной находится в состоянии скоростного и температурного равновесия:

$$u_{v0} = u_{i0} = u_0, W_i \approx 0, \dot{u}_s = 0, \dot{m}_s \approx 0, \dot{H}_s = 0. \quad (4.79)$$

Также необходимо отметить, что данная система описывает газокапельное течение после впрыска частиц в поток газа. В этом случае (рис. 4.76б) $\xi \equiv x$, $v \equiv u$, $v_s \equiv u_s$, индексом “0” обозначены параметры в сечении впрыска, при этом условия (4.77) могут не выполняться.

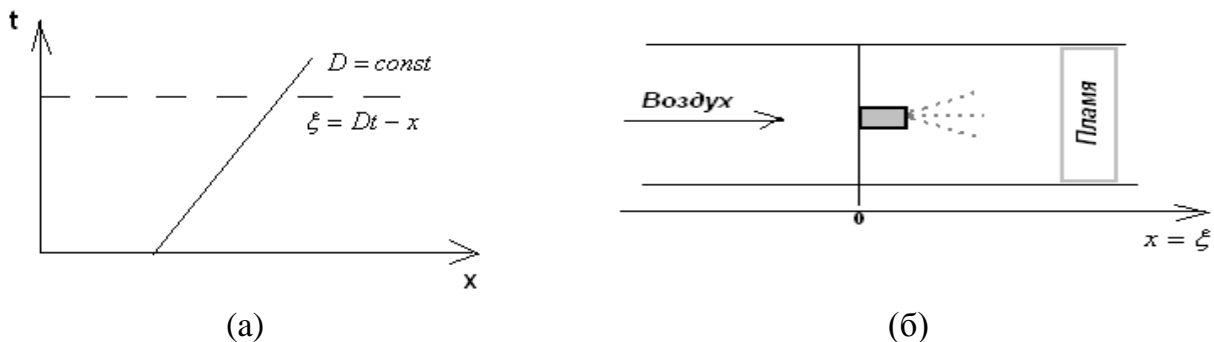


Рис. 4.76. (а) Стационарная ударная волна; (б) Случай впрыска частиц

Система уравнений (4.69)-(4.76) содержит стационарную точку, которая соответствует равенству нулю правых частей (4.73-4.76). В рассматриваемом случае возможны чисто “газофазная стационарная точка”

$$W_i(V, T, \gamma_1, \dots, \gamma_N) = 0, i = 1, 2, \dots, N \text{ и } m_s = 0, \quad (4.80)$$

и “двухфазная стационарная точка”

$$W_i(V, T, \gamma_1, \dots, \gamma_N) = 0, i = 1, 2, \dots, N ; m_s \neq 0, \dot{m}_s = 0, \dot{u}_s = 0, T_s = T. \quad (4.81)$$

Из системы (4.69-4.76) может быть получено дифференциальное уравнение для относительной скорости потока (1.51). Стационарная точка является точкой Чепмена-Жуге для газокапельных смесей. Причем, если для описания химических превращений

используется кинетический механизм, константы скоростей прямых и обратных химических реакций которого связаны через константу равновесия, то точка Чепмена-Жуге должна лежать на равновесной ударной (детонационной) адиабате, которая является фундаментальной характеристикой горючей газокапельной смеси [191, 228].

Равновесная ударная адиабата для газокапельных смесей может быть найдена при предположениях о полном испарении капель и достижении состояния термодинамического равновесия. При данных предположениях система уравнений (4.69)-(4.76) может быть записана в виде:

$$\begin{aligned} \rho v &= \rho_0 v_0 + n_{s0} m_{s0} v_{s0}; \\ \rho v^2 + p &= \rho_0 v_0^2 + p_0 + n_{s0} m_{s0} v_{s0}^2; \end{aligned} \quad (4.82)$$

$$\rho v \left(h + \frac{v^2}{2} \right) = \rho_0 v_0 \left(h_0 + \frac{v_0^2}{2} \right) + n_{s0} m_{s0} v_{s0} \left(e_{s0} + \frac{v_{s0}^2}{2} \right);$$

$$W_i(\rho, T, \gamma_1, \dots, \gamma_N) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (4.83)$$

Как уже отмечалось в главе 2, условия (4.83) эквивалентны условиям термодинамического равновесия (2.1)-(2.2):

$$\sum_{i=1}^{N_\gamma} A_K^i \gamma_i = \gamma_K^0, \quad k = 1, 2, \dots, N_e, \quad \mu_i = \sum_{K=1}^{N_e} A_K^i \mu_K, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (4.84)$$

В список веществ конечного равновесного состава могут входить и конденсированные компоненты. В случае, когда в начальный момент времени скорости газа и капель совпадают ($v_0 = v_{s0}$), алгоритм расчета равновесной ударной адиабаты для газокапельных смесей практически полностью совпадает с алгоритмом расчета равновесных ударных адиабат для газовых смесей, описанным в главе 2. Обозначим

через: $\rho^0 = \rho_0 + n_{s0} m_{s0}$, $h^0 = \frac{\rho_0 h_0 + n_{s0} m_{s0} e_{s0}}{\rho_0 + n_{s0} m_{s0}}$, тогда (4.82) примет вид:

$$\begin{aligned} \rho v &= \rho^0 v_0; \\ \rho v^2 + p &= \rho^0 v_0^2 + p_0; \end{aligned} \quad (4.85)$$

$$h + \frac{v^2}{2} = h^0 + \frac{v_0^2}{2};$$

Из (4.85) могут быть получены выражения для прямой Михельсона (4.86) и равновесной ударной адиабаты (4.87)-(4.88).

$$p - p_0 + \frac{v_0^2}{V_0^2} (V - V_0) = 0; \quad (4.86)$$

$$e - e^0 + \frac{1}{2} (p + p_0) (V - V_0) = 0; \quad (4.87)$$

$$\gamma_i = \gamma_i(V, T, \gamma_1^0, \dots, \gamma_{N_e}^0) = 0, \quad i=1, 2, \dots, N. \quad (4.88)$$

Как отмечалось в главе 2, концентрации химических компонент в состоянии термодинамического равновесия можно считать неявно заданными функциями удельного объема, температуры и элементного состава. Начальные концентрации газовой смеси и состав капель считаются известными.

$$\gamma_k^0 = \sum_{i=1}^N A_k^i \left(\gamma_i^0 + \frac{n_s^0 m_s^0}{\rho_0} \gamma_{is} \right), \quad k=1, 2, \dots, N_e. \quad (4.89)$$

В случае, если рассматривается смесь совершенных газов, и считается, что свойства жидкости не зависят от давления, то для замыкания рассматриваемой системы, используются уравнения состояния вида:

$$e = \sum_{i=1}^N \gamma_i e_i^0(T), \quad p = \frac{RT}{V} \sum_{i=1}^N \gamma_i, \quad e_s = e_s(T), \quad \rho_s = \rho_s(T) \quad (4.90)$$

Необходимо отметить, что равновесная адиабата задает множество достижимых стационарных точек для системы (4.69)-(4.76) при различных значениях начальной скорости v_0 . Причем верхняя детонационная ветвь равновесной ударной адиабаты соответствует случаю течения за ударной волной, а нижняя - дефлаграционная, течению после впрыска капель.

С точки зрения автора при исследовании высокоскоростного горения и детонации газочапельных смесей расчеты по модели (4.69)-(4.76) являются необходимым этапом перед проведением дорогостоящих многомерных расчетов. После выбора модели химической кинетики (W_i), моделей сопротивления и теплообмена ($\dot{u}_s, \dot{m}_s, \dot{H}_s$), решение задачи (4.69)-(4.76) при различных начальных данных позволяют определять при характерных параметрах рассматриваемой задачи размеры зон релаксации, задержку воспламенения, характерные времена испарения капель и установления состояния близкого к термодинамическому равновесию, а также проверять на сколько точно используемые модели описывают идеальные предельные равновесные состояния для рассматриваемого топлива.

4.2.1. Моделирование детонации смеси метанола с воздухом.

Метанол среди углеводородных горючих занимает особое место. Во-первых метанол рассматривается как перспективное топливо. Во-вторых, метанол является моновеществом и простейшим жидким углеводородом с хорошо изученными термодинамическими и теплофизическими свойствами. Перед проведением

моделирования детонационных волн в метаноле-воздушных горючих смесях приведем результаты апробирования моделей химической кинетики и тепломассообмена на экспериментальных данных. Для моделирования химических превращений использовалось 56 обратимых реакций (Таблица 4.7) [299, 302], 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 . Термодинамические и теплофизические свойства веществ, газофазная химическая кинетика, сопротивление и тепломассообмен моделировались в соответствии с математической моделью [49, 76, 89, 193], приведенной в главе 1. Результаты тестирования используемых моделей воспламенения, испарения метанола в кислороде приводятся в [49]. На рис. 4.76 приведены результаты сравнения рассчитанного [49] и измеренного в экспериментах [242,278] приведенного времени самовоспламенения смеси метанол-кислород-аргон ($f_B = t_{max} [C_{O_2}]^{0.5} [C_{CH_3OH}]^{0.1}$, t_{max} - время воспламенения в секундах, C – начальные концентрации в моль/см³) за отраженной волной.

Течение в ударной трубе моделировалось по методике [49], описанной в главе 3. На рис. 4.91-4.93 с экспериментальными данными сравниваются параметры, описывающие убывание диаметра капель. Результаты сравнения показывают, что за счет варьирования параметра β удается достичь удовлетворительного согласия с экспериментальными данными. В целом можно констатировать, что изменение параметра β от 0.1 до 0.9 не влияет на качественное поведение результатов.

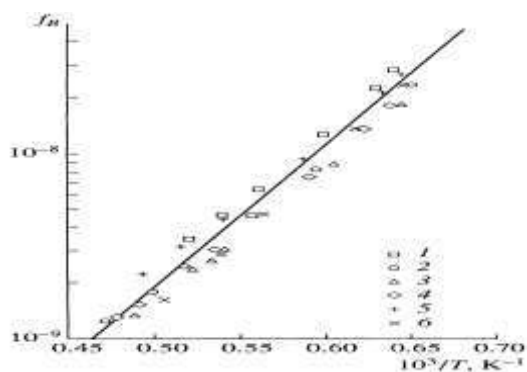


Рис. 4.91. Время воспламенения. Эксперимент [261,299], маркеры – расчет.
 1- $0.02CH_3OH+0.04O_2$; 2- $0.01CH_3OH+0.02O_2$;
 3- $0.0075CH_3OH+0.015O_2$; 4- $0.01CH_3OH+0.01O_2$;
 5- $0.01CH_3OH+0.04O_2$; 6- $0.02CH_3OH+0.01O_2$;

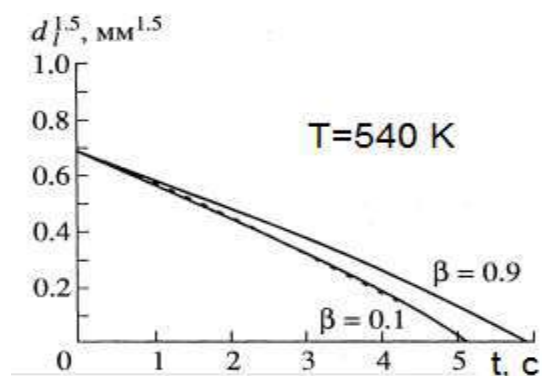


Рис. 4.92. Зависимость диаметра капель от времени. Эксперимент [288] – пунктир; сплошные – расчет.

Таблица 4.7. Реакции горения метанола в кислороде [299]

Реакция		Коэффициенты ф-лы Аррениуса			
		A	n	E/R	
CH3OH+ M	<=>	CH3 + OH + M	3.162E+12	0.00	3.349E+05
CH3O+ O2	<=>	CH2O+ HO2	3.981E+07	0.00	2.131E+05
CH3O+ OH	<=>	CH2O+ H2O	3.981E+06	0.00	8.373E+03
CH3O+ O	<=>	CH2O+ OH	1.585E+06	0.00	9.629E+03
CH3O+ H	<=>	CH2O+ H2	3.162E+07	0.00	2.931E+04
CH3O+ H	<=>	CH3 + H2O	5.012E+06	0.00	2.219E+04
CH3O+ CH3	<=>	CH2O+ CH4	1.995E+05	0.00	4.103E+04
CH3O+ HO2	<=>	CH2O+ H2O2	6.310E+06	0.00	8.122E+04
CH2O+ M	<=>	CH2O+ H + M	2.512E+07	0.00	1.214E+05
CH2O+ O2	<=>	CH2O+ HO2	1.000E+06	0.00	2.512E+04
CH4 + M	<=>	CH3 + H + M	1.259E+11	0.00	3.701E+05
CH4 + H	<=>	CH3 + H2	1.259E+08	0.00	4.982E+04
CH4 + OH	<=>	CH3 + H2O	3.162E-03	3.08	8.373E+03
CH4 + O	<=>	CH3 + OH	1.585E+07	0.00	3.852E+04
CH4 + HO2	<=>	CH3 + H2O2	1.995E+07	0.00	7.536E+04
CH3 + HO2	<=>	CH3O+ OH	1.585E+07	0.00	0.00
CH3 + OH	<=>	CH2O+ H2	3.981E+06	0.00	0.00
CH3 + O	<=>	CH2O+ H	1.259E+08	0.00	8.373E+03
CH3 + O2	<=>	CH3O+ O	2.512E+07	0.00	1.214E+05
CH2O+ CH3	<=>	CH4 + HCO	1.000E+04	0.500	2.512E+04
CH3 + HCO	<=>	CH4 + CO	3.162E+05	0.500	0.00
CH3 + HO2	<=>	CH4 + O2	1.000E+06	0.00	1.675E+03
CH3O+ M	<=>	CH2O+ H + M	5.012E+07	0.00	8.792E+04
CH3O+ O2	<=>	CH2O+ HO2	1.000E+06	0.00	2.512E+04
CH2O+ M	<=>	HCO + H + M	5.012E+10	0.00	3.014E+05
CH2O+ OH	<=>	HCO + H2O	5.012E+08	0.00	2.637E+04
CH2O+ H	<=>	HCO + H2	3.981E+06	0.00	1.591E+04
CH2O+ O	<=>	HCO + OH	5.012E+07	0.00	1.926E+04
CH2O+ HO2	<=>	HCO + H2O2	1.000E+06	0.00	3.349E+04
HCO + OH	<=>	CO + H2O	1.000E+08	0.00	0.00
HCO + M	<=>	H + CO + M	1.585E+08	0.00	7.954E+04
HCO + H	<=>	CO + H2	1.995E+08	0.00	0.00
HCO + O	<=>	CO + OH	1.000E+08	0.00	0.00
HCO + HO2	<=>	CH2O+ O2	1.000E+08	0.00	1.256E+04
HCO + O2	<=>	CO + HO2	3.162E+06	0.00	2.931E+04
CO + OH	<=>	CO2 + H	12.6	1.30	-3.349E+03
CO + HO2	<=>	CO2 + OH	1.000E+08	0.00	9.629E+04
CO + O + M	<=>	CO2 + M	6.310E+03	0.00	1.716E+04
CO2 + O	<=>	CO + O2	2.512E+06	0.00	1.834E+05
H + O2	<=>	O + OH	1.995E+08	0.00	7.033E+04
H2 + O	<=>	H + OH	1.995E+04	1.00	3.726E+04
H2O + O	<=>	OH + OH	3.162E+07	0.00	7.703E+04
H2O + H	<=>	H2 + OH	1.000E+08	0.00	8.499E+04
H2O2+ OH	<=>	H2O + HO2	1.000E+07	0.00	7.536E+03
H2O + M	<=>	H + OH + M	1.995E+10	0.00	4.400E+05
H + O2 + M	<=>	HO2 + M	1.585E+03	0.00	-4.187E+03
HO2 + O	<=>	OH + O2	5.012E+07	0.00	4.187E+03
HO2 + H	<=>	OH + OH	2.512E+08	0.00	7.954E+03
HO2 + H	<=>	H2 + O2	2.512E+07	0.00	2.931E+03
HO2 + OH	<=>	H2O + O2	5.012E+07	0.00	4.187E+03
H2O2+ O2	<=>	HO2 + HO2	3.981E+07	0.00	1.783E+05
H2O2+ M	<=>	OH + OH + M	1.259E+11	0.00	1.905E+05
H2O2+ H	<=>	HO2 + H2	1.585E+06	0.00	1.591E+04
O + H + M	<=>	OH + M	1.000E+04	0.00	0.00
O2 + M	<=>	O + O + M	5.012E+09	0.00	4.814E+05
H2 + M	<=>	H + H + M	1.995E+08	0.00	4.019E+05

A: моль, м³, с

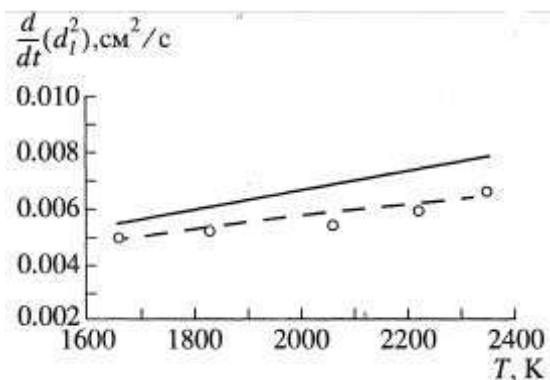


Рис. 4.93. Зависимость скорости изменения диаметра от температуры. Эксперимент [246] – маркеры. Расчет – сплошная ($\beta = 0.1$), пунктир ($\beta = 0.9$)

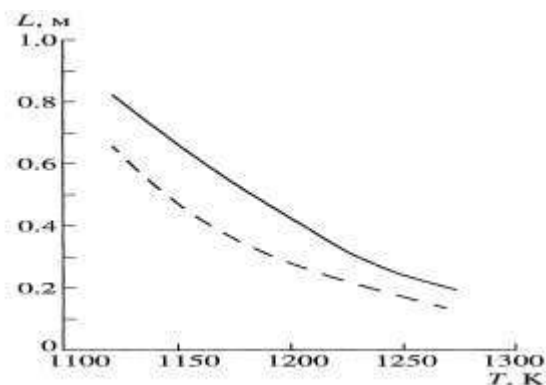


Рис. 4.94. Зависимость расстояния до видимого фронта пламени от сечения впрыска метанола от температуры. Эксперимент [287] – пунктир. Расчет – сплошная.

На рис. 4.94 приводятся результаты сравнения расчетных и экспериментальных данных при впрыске капель метанола в высокотемпературный воздух в слабо расширяющемся канале [49]. Метанол испаряется, происходят экзотермические реакции в результате которых смесь воспламеняется. В экспериментах визуально через окошки в трубе фиксируется место свечения продуктов сгорания. Результаты расчетов качественно совпадают с экспериментальными данными, количественные отличия связаны с тем, что видимый свет пламени проявляется в экспериментах несколько раньше, чем диагностируемая в расчетах точка минимума на графике температуры, которая соответствует моменту времени, когда тепло выделяемое в экзотермических реакциях начинают преобладать над тепловыми потерями, связанными с реакциями диссоциации.

В целом, исходя из анализа промоделированных экспериментов, можно сделать вывод о том, что разработанная модель удовлетворительно описывает процессы воспламенения и горения газочапельных смесей метанола с воздухом.

Было проведено численное моделирование структуры стационарной детонационной волны в двухфазной горючей смеси метанола с воздухом [76, 193] при нормальных условиях ($p_0 = 101325$ Па, $T_0 = 298.15$ К, $u_0 = u_{0s} = 0$). Начальный диаметр капель брался равным 10 мкм, масса капель составляла 10% от массы воздуха. Расчеты проводились на отрезке от 0 до 10 м от ударной волны. Решалась система дифференциально-алгебраических уравнений (4.69)-(4.76), дополненная моделями термодинамики, химической кинетики, межфазного сопротивления и тепломассообмена. Варьировалось число Маха ударной волны. На рис. 4.95

представлены рассчитанные зависимости от продольной координаты относительной скорости газа и скорости звука [76, 193]. При числах Маха менее 3.3 решение системы существует, но воспламенение горючей смеси отсутствует. При числах Маха 3.5–4.5 решение рассматриваемой системы отсутствует, кривые относительной скорости газа и скорости звука сходятся, происходит заклинивание течения, число Маха становится равным единице, при этом состояние равновесия не достигается. При числах Маха более 4.7 решение системы существует, при этом происходит воспламенение горючей смеси и образование детонационной волны (ДВ). Минимальное число Маха, при котором образуется ДВ, равно 4.673, что соответствует скорости УВ $D \approx 1620$ м/с.

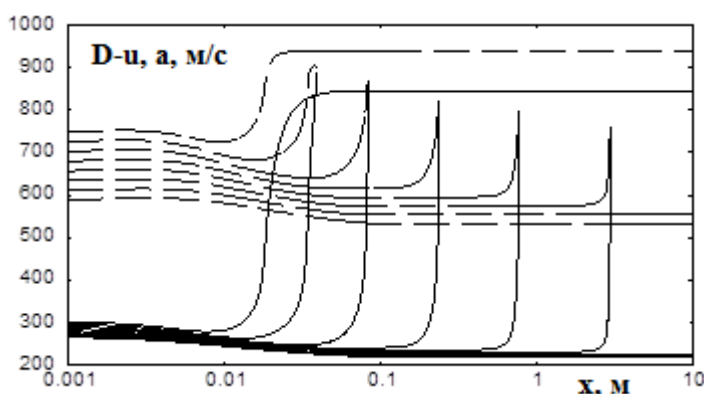


Рис. 4.95. Распределения относительной скорости газа (сплошная кривая) и скорости звука (пунктирная кривая) при числах Маха ударной волны 3.3, 3.5, 3.7, 3.9, 4.1, 4.3, 4.5, 4.7. $0.79N_2 + 0.21O_2 +$ капли метанола (CH_3OH), $d_s^0 = 10$ мкм, $M_l/M_v = 0.1$.

Исследовалось влияние отношения массы капель метанола к массе воздуха на минимальную скорость ДВ. Зависимость минимальной скорости ДВ (кривая 2) и максимальной температуры (кривая 3) представлено на рис. 4.96. Кривая (1) соответствует скорости равновесной детонации Чепмена – Жуге, полученной из решения (4.86)-(4.88). Минимальная скорость ДВ в газокapельной среде до массовых долей жидкой фазы $M_l/M_v \approx 0.3$ практически совпадает со скоростью детонации Чепмена-Жуге, определенной в результате равновесного расчета (рис. 4.81a). При $M_l/M_v > 0.3$, кинетика испарения и механизм химических превращений оказывают существенное влияние на минимальную скорость ДВ, и она начинает превышать равновесную скорость детонации. Варьировались начальный диаметр капель метанола в диапазоне от 5 до 50 мкм и отношение массы капель к массе воздуха от 5 до 50%. На рисунках 4.96б - 4.96г представлены изменения характерных параметров течения в ДВ.. Цифрой 1 помечены графики с недостаточным количеством горючего $M_l/M_v = 0.05$. Процесс воспламенения начинается после полного испарения капель (рис. 4.96б, 4.96г), при этом, температура падает до 900 К; расстояние от ударной волны, на котором происходит воспламенение, равно 140 см (рис. 4.96б); скорость газа в волне

воспламенения падает, температура после воспламенения практически не изменяется и остается на уровне 1550 К. Данный вариант соответствует случаю, когда за ударной волной уровень параметров течения достаточен для воспламенения горючей смеси, но развитие детонации вряд ли возможно, тем не менее процесс заканчивается установлением термодинамического равновесия, при этом стационарная точка лежит на равновесной адиабате.

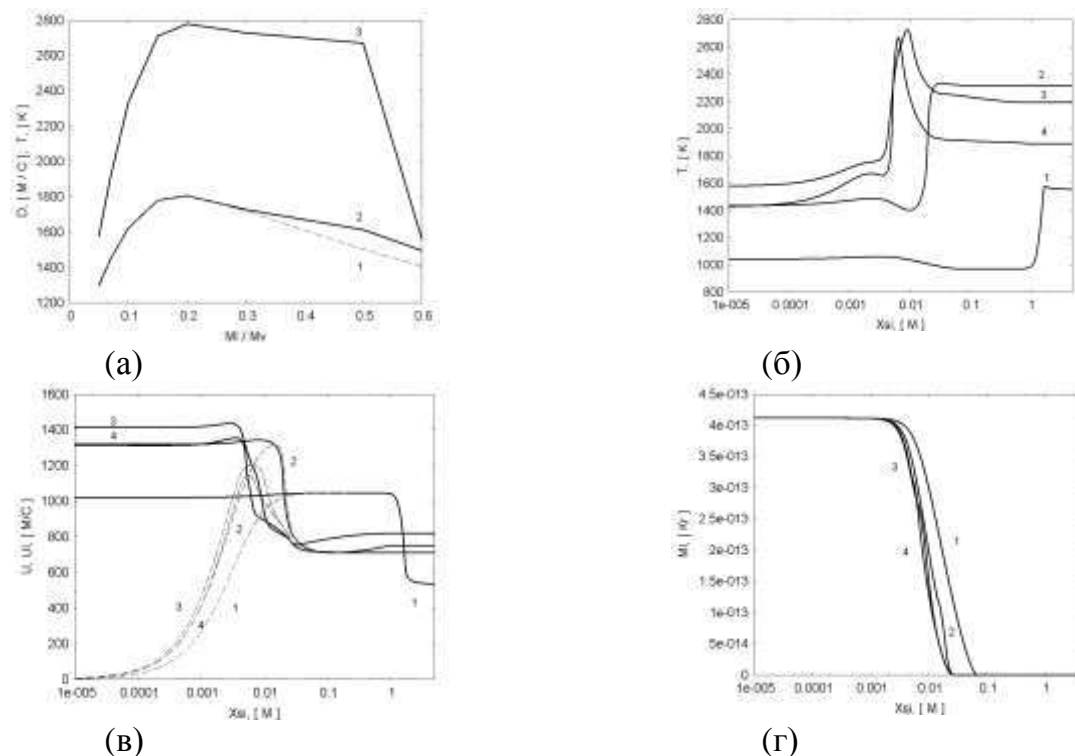


Рис. 4.96. Параметры детонации Чепмена-Жуге в смеси $0.79N_2 + 0.21O_2$ + капли метанола (CH_3OH) в зависимости от отношения массы капель к массе воздуха. $d_s^0 = 10$ мкм; (а) – скорость в точке Чепмена-Жуге (газофазная) – кривая 1, минимальная скорость ДВ (газочапельная смесь) – кривая 2, максимальная достигаемая температура – 3, (б) распределение температуры, (в) – скорость газа - сплошная кривая и капля - пунктирная, (г) – масса капли; M_1/M_v 1 – 0.05, 2 – 0.1, 3 – 0.3, 4 – 0.5.

Как уже отмечалось выше, точка Чепмена-Жуге является объективной характеристикой горючей смеси, она в равновесном случае не зависит от кинетики протекаемых процессов, а зависит исключительно от термодинамических свойств топлива и продуктов сгорания. Поэтому, если процесс горения заканчивается на равновесной адиабате выше точки Чепмена-Жуге, то мы его будем называть пересжатой детонацией, несмотря на то, что кинетика реального процесса может быть такова, что состояние Чепмена-Жуге находится от ударной волны на значительном расстоянии.

Учет реальных свойств веществ, участвующих в процессе, приводит к тому, что в высокотемпературной области ударная и равновесная ударная (детонационная) адиабата

пересекаются. Точка пересечения соответствует ситуации, когда потери тепла, связанные с диссоциацией, превосходят количество тепла, выделяющегося в экзотермических реакциях. Т.е. использовать топливо в условиях выше точки пересечения для извлечения работы не имеет смысла.

При $M_l/M_v = 0.1$ точки воспламенения горючей смеси и полного испарения капель горючего практически совпадают. Наиболее интенсивному испарению капель соответствует участок снижения температуры газовой фазы, предшествующий воспламенению (рис. 4.96б). При $M_l/M_v = 0.3-0.4$ воспламенение горючей смеси происходит тогда, когда капли горючего еще полностью не испарились (рис. 4.96б, 4.96г), кислород, содержащийся в газовой фазе, при этом полностью расходуется, так как соотношение горючее-окислитель выше стехиометрического. Соответственно после роста температуры в волне воспламенения следует ее спад, связанный с испарением капель в среду, где уже отсутствуют молекулы окислителя (рис. 4.96б).

Рассмотрим поведение решения на фазовой плоскости $V-T$. При $M_l/M_v = 0.1$ и $d_s^0 = 10$ мкм. Скорость детонации Чепмена-Жуге составляет 1619.8 м/с (кривая 1, рис. 4.97, 4.98). Температура за ударной волной - 1400 К (рис. 4.98); в начале наблюдается небольшой рост температуры из-за сопротивления капель газовому потоку, потом уменьшение температуры, связанное с интенсивным испарением капель, затем устойчивый рост температуры из-за экзотермических реакций, между продуктами испарения метанола и кислородом, входящим в состав воздуха (в случае пересжатой детонации, кривые 2, 3 рис. 4.98, снижения температуры не происходит). Процесс заканчивается достижением системой состояния термодинамического равновесия – точки на равновесной детонационной адиабате.

Для выявления влияния влияний скоростей химических реакций на параметры течения были проведены расчеты, в которых предполагалось, что неравновесным является только процесс испарения, а процессы в газовой фазе протекают равновесно (кривая 1-1 рис. 4.97 - 4.99). Из рисунков видно, что при повышенных температурах и вблизи стехиометрии равновесные и неравновесные фазовые траектории близки ($M_l/M_v = 0.1-0.2$). При понижении температуры или удалении от стехиометрии ($M_l/M_v = 0.3$) фазовые траектории заметно отличаются. Из проведенной серии расчетов можно сделать вывод, что в высокотемпературной области для описания процессов в газовой фазе можно использовать равновесную модель. Использование равновесного

подхода при моделировании процессов в газовой фазе позволяет существенно экономить время вычислений, так как в этом случае нет необходимости решать жесткую систему уравнений химической кинетики. Этот факт можно использовать при моделировании многомерных течений.

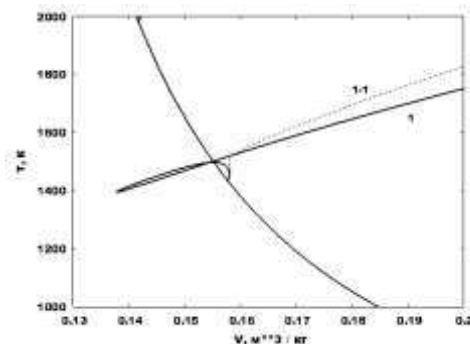
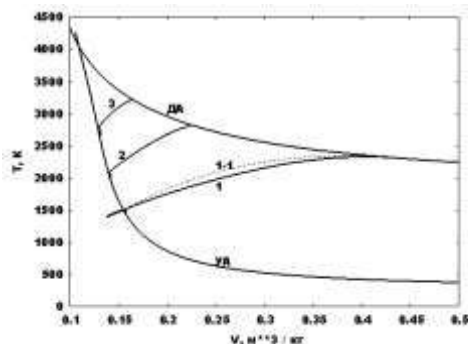
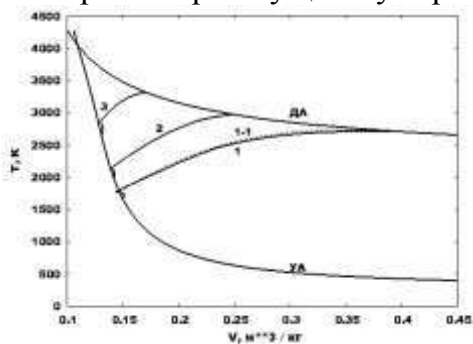
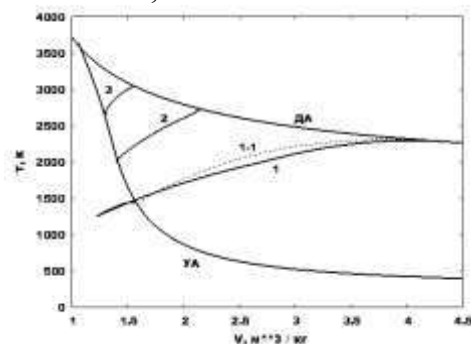


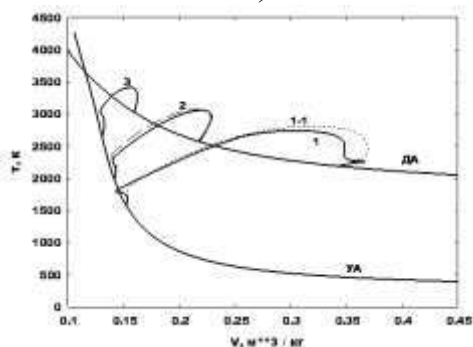
Рис. 4.97. $V-T$ диаграмма (метанол/воздух=0.1, $d=10$ мкм, $P=1$ атм.).
 Рис. 4.98. $V-T$ диаграмма (увеличенный фрагмент).
 УА - ударная адиабата, ДА –детонационная адиабата, 1-1-равновесная модель, 1,2,3 – неравновесная модель. 1-детонация Чепмена-Жуге $D=1619.8$ м/с – минимальная скорость при которой существует решение; 2 - $D=2000$ м/с; 3 – $D=2400$ м/с



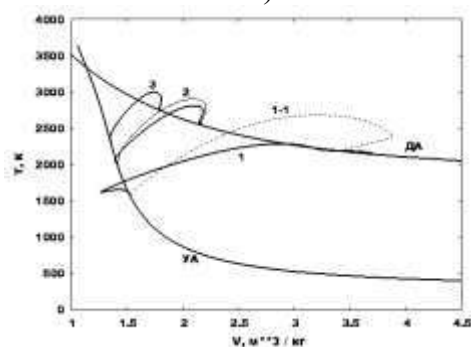
а)



б)



в)



г)

Рис. 4.99. $V-T$ диаграмма процесса.
 1-1-равновесная модель, 1,2,3 – неравновесная модель. 1-детонация Чепмена-Жуге, 2 - $D=2000$ м/с; 3 – $D=2400$ м/с, а) Метанол/воздух=0.15, $d=10$ мкм, $P=1$ атм, 1 - $D=1780$ м/с; б) Метанол/воздух=0.1, $d=10$ мкм, $P=0.1$ атм, 1 - $D=1608.5$ м/с; в) Метанол/воздух=0.3, $d=10$ мкм, $P=1$ атм, 1 - $D=1725.6$ м/с; г) Метанол/воздух=0.3, $d=10$ мкм, $P=0.1$ атм, 1 - $D=1717.1$ м/с, 3 - $D=2200$ м/с.

Необходимо отметить, что термодинамический подход к моделированию многофазных течений обеспечивает автоматическое совпадение начала и конца фазовых

траекторий в равновесном и неравновесном случаях (рис.4.99), что является крайне важным в задачах многомерного моделирования, так как обеспечивает правильный учет тепловых эффектов при испарении и горении топлива.

4.2.2 Моделирование высокоскоростного горения и детонации тяжелого углеводородного горючего с воздухом

Особенностью моделирования процессов с участием тяжелого углеводородного топлива (керосин, бензин и дизельное топливо), состоит в том, что оно не является моновеществом и состоит из большого числа углеводородов, каждый из которых характеризуется определенным набором теплофизических свойств [86, 89, 193]. В настоящее время отсутствуют физико-математические модели, которые позволяют детально описать процесс испарения капли тяжелого углеводородного горючего в окислительную среду и обеспечить надежное совпадение с экспериментальными данными. Тем не менее, ряд практически важных задач [251] может быть рассмотрен в рамках механики сплошных сред, в соответствии с которой в каждой ячейке пространства присутствует большое число капель, причем объемной долей капель по сравнению с газом можно пренебречь. При этом считается, что капля тяжелого углеводородного горючего представляет собой “псевдовещество”, теплофизические и термодинамические свойства которого подбираются из согласования с экспериментальными данными: динамики изменения температуры капли; длин и времен испарения; по количеству тепла, которое передается газу при сгорании; переносным свойствам и др. При этом для построения замкнутых физико-математических моделей используемая модель капли и продукты ее испарения должны удовлетворять фундаментальным законам сохранения и термодинамики.

Теплофизические свойства углеводородных топлив

Для моделирования углеводородного горючего в работе использовалось ”бруттовещество” с условной формулой C_xH_y (бензин - $C_{8.12}H_{16.53}$, керосин - $C_{9.32}H_{18.2}$, дизельное топливо - $C_{12.33}H_{22.1}$), теплофизические свойства которого в жидком и газообразном состоянии определялись на основе справочных данных по свойствам углеводородного топлива [32, 35, 121, 130, 133, 221, 237]. В таблице 4.8 приведены некоторые свойства углеводородных топлив, заимствованные из справочников [32, 35, 121, 130, 133, 221, 237]. На их основе может быть разработана методика восстановления теплофизических

свойств углеводородных топлив как в жидком, так и в газообразном состояниях. Необходимо отметить, что теплофизические свойства сильно зависят от марки используемого топлива. Продукты испарения топлив представляют из себя смесь сложного состава. В работе используются два подхода для описания газофазных продуктов испарения. 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 (методы расчета равновесного состава приведены в главе 2) на простейшие углеводороды, входящие в кинетический механизм.

При задании термодинамических свойств веществ, как газообразных, так и жидких, используется единая форма описания. По имеющимся термодинамическим данным восстанавливаются выражения для потенциалов Гиббса газообразных и жидких компонентов и их смесей. Считается, что все газы являются совершенными, а свойства жидкостей зависят от температуры и давления. Для определения выражения для потенциала Гиббса в этом случае достаточно знать энтальпию образования вещества $\Delta_f H^0(298.15)$, стандартную энтропию $S_0(298.15)$, зависимость теплоемкости от температуры $C_p(T)$ и уравнение состояния, связывающее давление, температуру и молярный объем. Все остальные термодинамические величины рассчитываются путем дифференцирования выражения для потенциала Гиббса. Для газообразных компонентов как правило используются аппроксимации, в двух диапазонах температур - от 300 К до 1000 К и от 1000 К до 6000 К. При температурах ниже 300 К и выше 6000 К, теплоемкости считаются постоянными и равными соответствующим значениям при 300 К и 6000 К все остальные термодинамические величины рассчитываются с учетом этого предположения. Такой способ задания термодинамических свойств гарантирует выполнение всех термодинамических законов и тождеств и позволяет построить универсальные, всегда сходящиеся вычислительные алгоритмы.

Более подробно способы восстановления термодинамических свойств газообразных и жидких углеводородных топлив описаны в [193].

Таблица 4.8. Физико-химические свойства углеводородных топлив

		Бензин	Керосин	Дизельное топливо
1	Условная формула	C8.12H16.53	C9.32H18.2	C12.33H22.1
2	Молекулярная масса [Кг/кмоль]	114,0	130,0	170,0
3	Энтальпия образования жидкости [КДж/моль]	-222,2	-253,4	-331,3
4	Температура кипения, T_K [К]	373	473	523
5	Критическая температура, T_{KP} [К]	543	633	678
6	Плотность жидкости, [K_2 / M^3]	751-1.0056(T-293)	819-0.804(T-293)	850-0.695(T-293)
7	Давление насыщенных паров $Lg(P)$, [Па]	9.22-1540/T	9.19-1900/T	9.18-2050/T
8	Теплота испарения [КДж/кг], l_s	$l = l_s ((1 - T/T_{KP}) / (1 - T_K/T_{KP}))^{0.4}$		
		315,0	267,5	210,0
9	Теплоемкость жидкости, [Дж/кг/К]	2061.5+5.47(T-293)	2003.0+5.05(T-293)	1988.0+5.0(T-293)
10	Теплоемкость газообразного горючего, [Дж/кг/К]	1955+2.5(T-293)	2055+2.1(T-293)	2100+2.0(T-293)
11	Вязкость газовой фазы, η [Па/с]	$\eta = \eta_0 (T/T_0)^n, T_0 = 273 K$		
		η_0 2.73e-6 1.98	3.84e-6 1.74	4.0e-6 1.7
12	Теплопроводность газовой фазы, λ [Вт/м/К]	$\lambda = \lambda_0 (T/T_0)^n, T_0 = 273 K$		
		λ_0 0.0139 1.48	0.00855 2.13	
13	Коэффициент диффузии паров в воздухе, D [M^2 / c]	$D = D_0 P / P_0 (T/T_0)^m, P_0 = 101325 Pa, T_0 = 273 K$		
		D_0 8.45e-6 2	5.01e-6 2	7.3e-6 2

На рис. 4.100 представлено сравнение восстановленной зависимости теплоты парообразования углеводородного топлива (вычисленной с использованием восстановленной зависимости для потенциала Гиббса) с расчетами по эмпирическим формулам приведенным в таблице 4.8. Восстановленные свойства жидкого и газообразного керосина верифицировались на экспериментальных работах по определению времени и равновесной температуре испарения одиночных покоящихся капель, а также по расстоянию полного испарения капель,двигающихся в спутном потоке воздуха (рис. 4.102) [193]. Наилучшее согласие используемой модели с экспериментальными и расчетными данными было достигнуто при $\beta=0.8$.

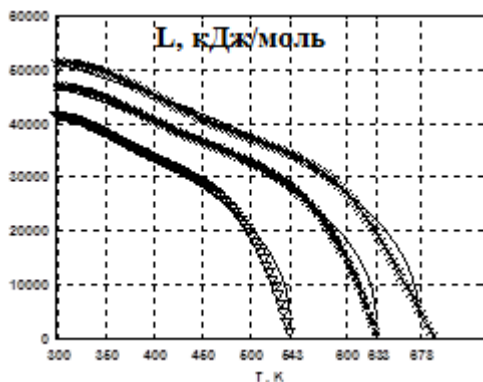


Рис.4.100. Теплота парообразования (Маркеры - расчет по восстановленным зависимостям потенциалов Гиббса жидкой и газовой фаз (× - дизельное топливо, * - керосин, ∇ - бензин), сплошные линии - эмпирические формулы [25, 34, 121,130, 133,221,237].

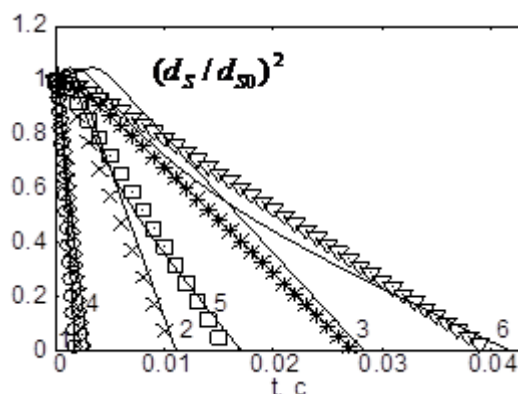
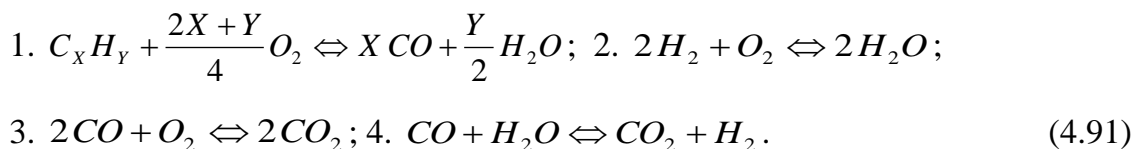


Рис.4.101. Временная зависимость относительного квадрата диаметра испаряющейся одиночной капли керосина в воздухе $T_{s0} = 298.15$ К (Расчет – сплошные линии:1-6; Маркеры – данные [283] (○, ×, * – без скоростного отставания, $T_0 = 1000$ К; 4, 5, 6, ◇, □, ∇- $u_0 - u_{s0} = 20$ м/с, $T_0 = 600$ К; 1, 4, ○, ◇- $d_{s0} = 20$ мкм; 2, 5, ×, □ - $d_{s0} = 50$ мкм, 3, 6, *, ∇, - $d_{s0} = 80$ мкм)

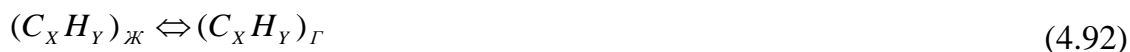
Химические превращения в газовой фазе

Необходимо отметить, что при построении физико-математических моделей высокоскоростного горения и детонации важно использовать согласованные модели термодинамических свойств веществ и химической кинетики. Для этого необходимо чтобы все химические и фазовые превращения считались обратимыми, и константы скоростей прямых и обратных реакций согласовывались между собой в рамках принципа детального равновесия.

При моделировании волн горения и детонации в смеси керосина с воздухом в неравновесной постановке (решается система 4.69-4.76) рассматривается смесь, состоящая из 5 компонентов: C_xH_y , O_2 , CO , CO_2 , H_2O , H_2 , N_2 , химические превращения между которыми описываются брутто-механизмом [248], заимствованным из [23] и модифицированным в [86].

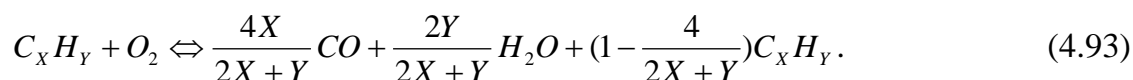


Процесс испарения горючего может быть описан химической реакцией [129]



Расчеты по “неравновесной” модели проводились для случаев, когда реакции 1-3 считались необратимыми [23] и, когда все реакции считались обратимыми.

Аппроксимации констант скоростей прямых реакций заимствовались из [23]. Необходимо отметить, что выражение для скорости первой реакции [23] имеет вид $\vec{W}^{(1)} = \vec{K}^{(1)}(T, p) y_{C_x H_y} y_{O_2}$. Объемные концентрации компонентов y_i входят в выражение для $\vec{W}^{(1)}$ в первой степени. Поэтому для того чтобы первую реакцию можно было считать обратимой, то для обеспечения выполнения термодинамических соотношений она должна быть переписана в виде



Математическое моделирование стационарных волн детонации и дефлаграции в газокапельной керосино-воздушной смеси

Приведем результаты полученные в [86, 193]. Проанализируем, на сколько модель продуктов сгорания (4.91)-(4.93) соответствует реальным продуктам высокотемпературного сгорания керосина в воздухе (керосин моделировался псевдовеществом $C_{9,32}H_{18,2}$). Для этого, численно решив систему нелинейных алгебраических уравнений (4.86-4.88), рассчитаем равновесную адиабату продуктов сгорания. При численном моделировании считалось, что продукты сгорания керосина в воздухе включают 26 веществ: $CO, CO_2, CH, CH_2, CH_3, CH_4, C_2H_2, C_2H_4, C_2H_6, HCO, CH_2O, H_2, OH, H_2O, O_2, H_2O_2, HO_2, NO, N_2, CN, HCN, C^*(сажа), C, H, O, N$, начальная температура смеси равнялась 298, 15 К, давление 101325 Па, варьировалась отношение массы жидкого керосина к массе воздуха.

На рисунках 4.102-4.103 представлены равновесные адиабаты на фазовых плоскостях $p-V$ и $p-T$ при различных отношениях начальных расходов жидкого керосина и воздуха M_K / M_{Air} . При переходе соотношения горючее-окислитель через стехиометрию $0.05 < M_K / M_{Air} < 0.15$ (кривые 1-3, рис. 4.102-4.103) наблюдается немонотонность изменения параметров в точке Чепмена-Жуге. Давление в точках Чепмена-Жуге детонации имеет минимум при $M_K / M_{Air} \approx 0.3$, в точках Чепмена-Жуге дефлаграции – слабо зависит от M_K / M_{Air} (рис. 4.102). Температура сильно зависит от M_K / M_{Air} и имеет максимальное значение в окрестности стехиометрии (рис. 4.103.).

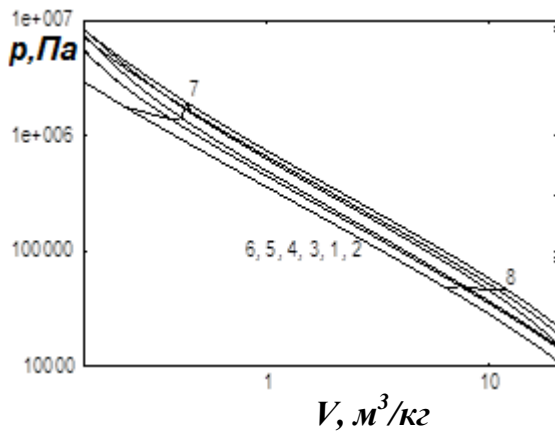


Рис.4.102. p - V диаграмма.

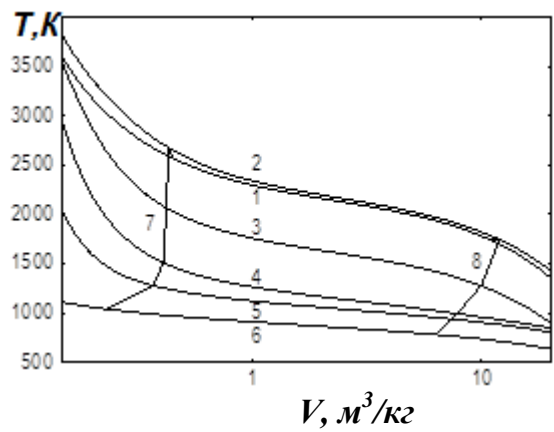


Рис. 4.103. V - T диаграмма.

При различных отношениях массы керосина к массе воздуха 1- 0.05; 2 – 0.1; 3 – 0.15; 4 – 0.2; 5 – 0.3; 6 – 1.0; 7 – точки Чепмена-Жуге детонации, 8 – точки Чепмена-Жуге дефлаграции

На рисунке 4.104 представлены результаты сравнения V - T диаграмм рассчитанных для 26- компонентных продуктов сгорания и для 7-компонентных. Видно, что в диапазоне $0.15 \leq M_K / M_{Air} \leq 0.2$ адиабаты и точки Чепмена-Жуге близки. Заметное отличие наблюдается выше точки Чепмена-Жуге детонации при $M_K / M_{Air} = 0.1$ и в окрестности точки Чепмена-Жуге дефлаграции при $M_K / M_{Air} = 0.2$.

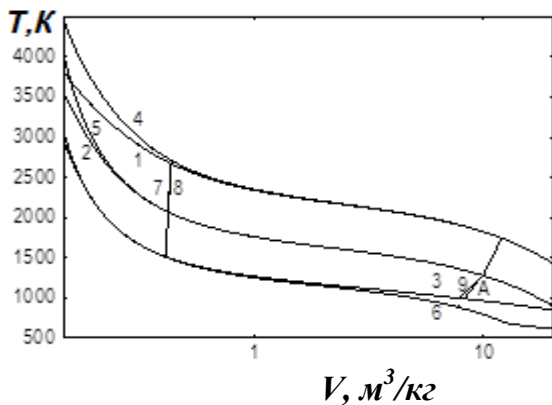


Рис.4.104. V - T диаграмма при различных отношениях массы керосина к массе воздуха. Полный (1-3, 7, 9) и сокращенный (4-6, 8,А) набор веществ 1, 4- 0.1; 2, 5 – 0.15; 3, 6 – 0.2; 7, 8; 9, А – точки Чепмена-Жуге

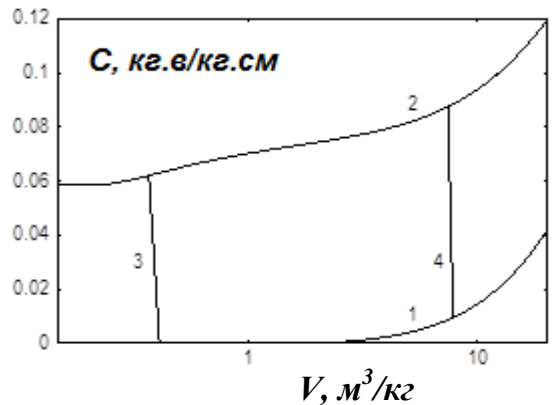


Рис. 4.105. Зависимость массовой доли твердого углерода от удельного объема вдоль равновесной адиабаты при различных отношениях массы керосина к массе воздуха. 1- 0.2; 2 – 0.3; 3, 4 – точки Чепмена-Жуге

Содержание твердого углерода (сажи) в продуктах сгорания в заметных концентрациях начинает проявляться при дефлаграции при $M_K / M_{Air} = 0.2$ (рис. 4.105) и

составляет около 2 % по массе, при $M_K / M_{Air} = 0.3$ сажа присутствует и при детонации и при дефлаграции.

Были проведены расчеты [193] параметров детонации Чепмена-Жуге (рис. 4.106) и нормальной стационарной волны горения при разных начальных температурах (рис. 4.107). Предполагалось, что капли полностью испаряются и, что продукты сгорания за ударной волной находятся в состоянии термодинамического равновесия ("идеальная" модель). Сравнивались результаты численного моделирования по "упрощенной" (продукты сгорания включали 7 компонентов) и "полной" (продукты сгорания состояли из 26 веществ) моделям. Результаты расчетов с высокой точностью совпали вплоть до $M_K / M_{Air} = 0.3$. При $M_K / M_{Air} > 0.3$ наблюдалось несовпадение результатов, связанное с появлением сажи в составе продуктов сгорания, возможность наличия которой не учитывается при моделировании с использованием упрощенной модели.

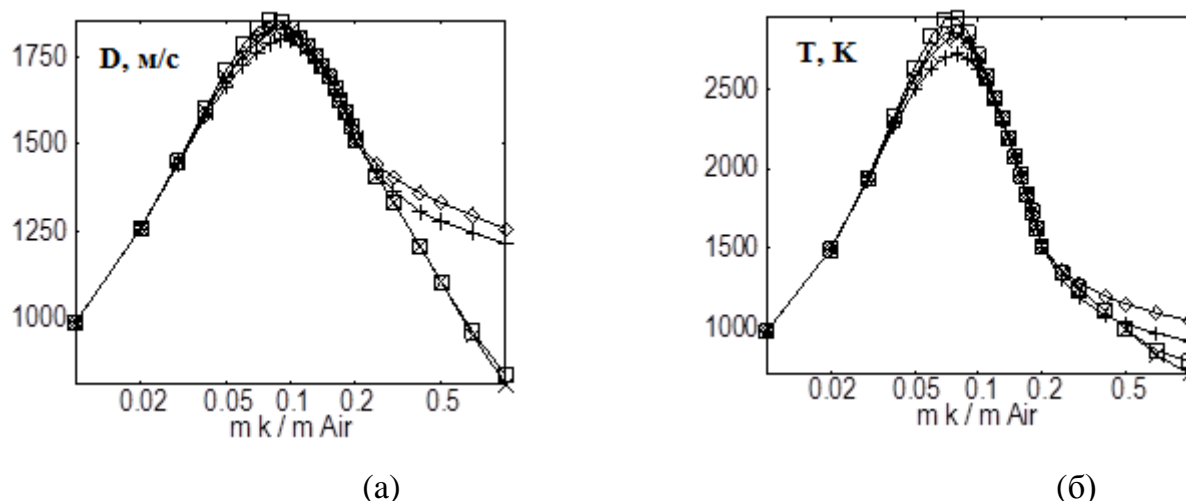
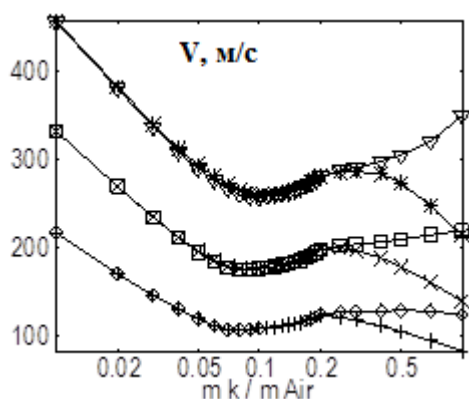
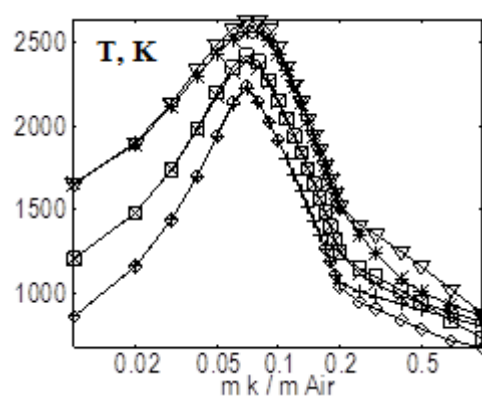


Рис. 4.106. Зависимость параметров детонации керосино-воздушной горючей смеси в состоянии Чепмена-Жуге от соотношения керосин-воздух: (а) скорость ДВ; (б) температура за ДВ. (\diamond , \square - $p_0 = 101325$ Па, $+$, \times - $p_0 = 10132,5$ Па). Модели: \diamond , $+$ - "полная", \square , \times - "упрощенная"

Расчеты по "неравновесной" модели проводились для двух случаев, когда реакции 1-3 считались необратимыми [23] и, когда все реакции считались обратимыми. Температурные аппроксимации констант скоростей прямых реакций брались из [23]. Рассчитанные параметры детонации Чепмена-Жуге по "равновесной" и "неравновесной" с обратимыми реакциями моделям (рис. 4.108) близки при соотношении горючее-окислитель < 0.3 (стехиометрическое соотношение ~ 0.07) и удовлетворительно согласуются с данными [244].

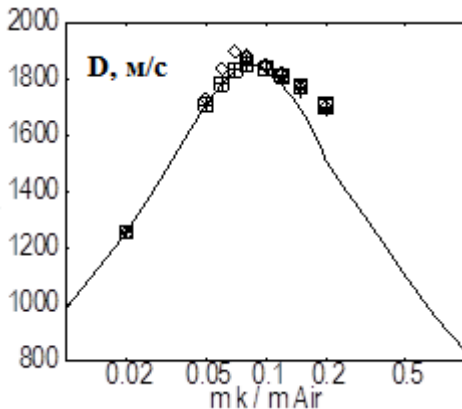


(a)

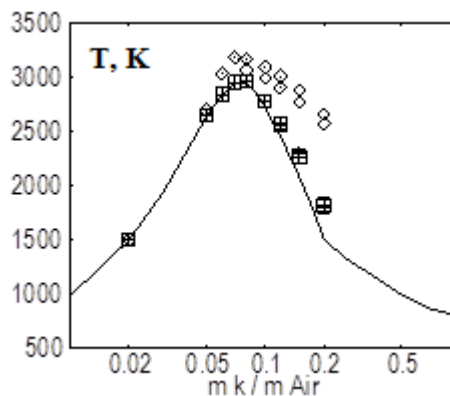


(б)

Рис. 4.107. Зависимость параметров продуктов сгорания в волне горения от соотношения керосин-воздух: (а) максимальная скорость; (б) температура. ($\nabla, *$ - $T_0 = 1500$ К, \square, \times - $T_0 = 1000$ К, $\diamond, +$ - $T_0 = 600$ К). Модели: $\nabla, \square, \diamond$ - “упрощенная”; $*, \times, +$ - полная



(a)



(б)

Рис. 4.108. Зависимость параметров детонации керосино-воздушной горючей смеси в состоянии Чепмена-Жуге от отношения массы керосина к массе воздуха при разных начальных диаметрах ($d_s^0 = 10; 50$ мкм): (а)- скорость ДВ; (б)- температура за ДВ. Модели: сплошная линия - “идеальная”; \square - “равновесная”; $+$ - “неравновесная обратимая”; \diamond - “неравновесная необратимая”

Расчеты показывают, что при использовании “неравновесной” модели с необратимыми реакциями получаются завышенные значения температуры (рис. 4.108, 4.109), а также, что конечные температуры, достигаемые в ДВ, зависят от начального диаметра каплей (кривые 3, 6), что качественно неверно. Задержки воспламенения, рассчитанные по всем моделям в рассмотренных вариантах близки.

На рис. 4.110. приводятся траектории процессов на фазовой плоскости “удельный объем - температура” ($V-T$). При моделировании процессов с использованием “равновесной” и “неравновесной-обратимой” моделей траектория заканчивается на равновесной адиабате, а при “неравновесной - необратимой” - нет.

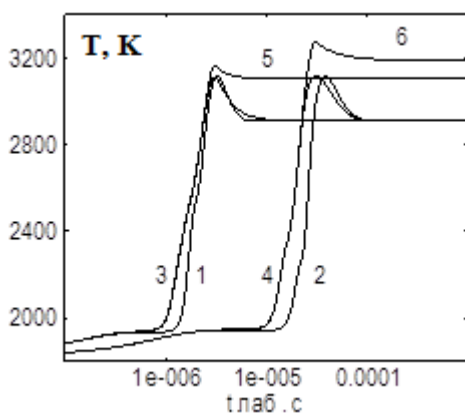


Рис. 4.109. Распределение температуры в ДВ ($m_k/m_{air}=0.1$). Модели: 1, 2 - “равновесная”; 3, 4 - “неравновесная обратимая”; 5, 6 - “неравновесная необратимая”; 1, 3, 5 - начальный диаметр капель $d_s^0=10 \mu\text{м}$; 2, 4, 6 - $d_s^0=50 \mu\text{м}$

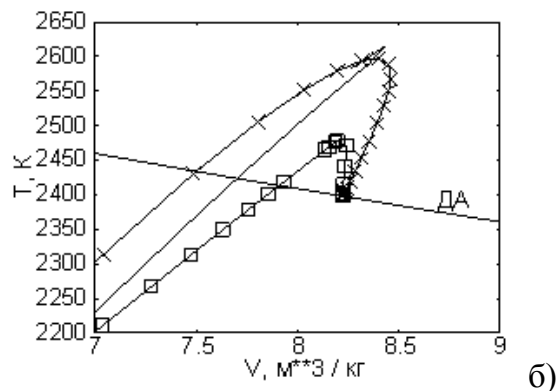
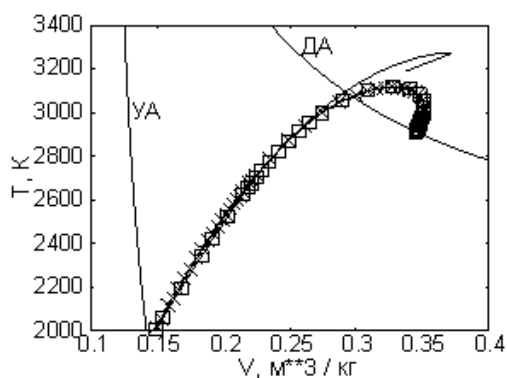


Рис. 4.110. (а) Изменение температуры в ДВ ($T_0 = 298.15 \text{ К}$); (б) температуры в ВГ ($T_0 = 1000 \text{ К}$) на фазовой плоскости V-T ($p_0 = 101325 \text{ Па}$, $d_s^0 = 50 \mu\text{м}$): $m_k/m_{air}=0.1$. Модели: \times - “равновесная”; \square - “неравновесная - обратимая”; сплошная линия - “неравновесная - необратимая”.

Необходимо отметить, что при больших массовых долях горючего в смеси переход системы в равновесное состояние происходит на значительных расстояниях от головной ударной волны, что накладывает ограничения на использование “равновесной” модели.

Численное моделирование инициирования детонации в бензино-воздушной горючей смеси

Рассматривается нестационарное течение, возникающее в канале после распада разрыва, разделяющего в начальный момент времени области высокого и низкого давления. Камера высокого давления заполнена инертным газом, камера низкого давления - смесью, состоящей из жидкого углеводородного горючего, распыленного в воздухе [60, 209]. Для численного моделирования использовался оригинальный сеточно-характеристический метод, описанный в главе 3.

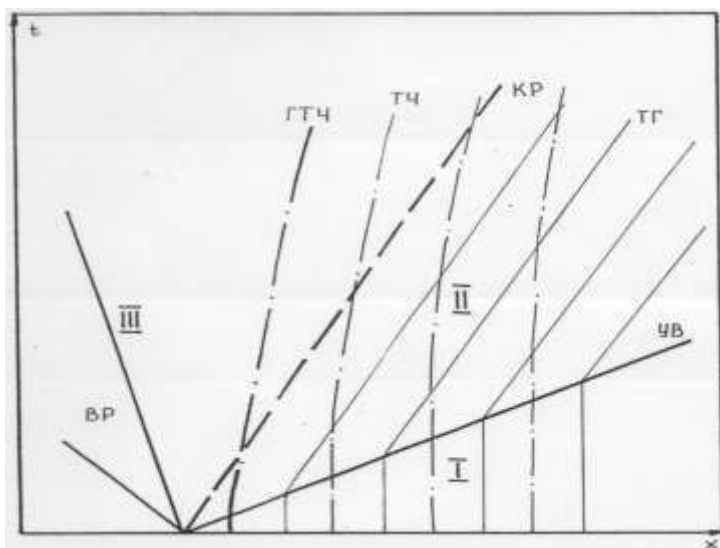


Рис. 4.111. Качественная картина течения после распада разрыва (УВ - ударная волна, КР - контактный разрыв, ВР - веер волн разрежения, ГТЧ - левая граничная траектория частиц, ТЧ - траектория частиц, ТГ - траектория газа).

Образовавшиеся в поле течения поверхности разрыва разделяют расчетную область на три подобласти, в которых протекание физико-химических процессов происходит по-разному. В области 1 (рис. 4.111), расположенной между правой границей расчетной области и головной ударной волной, процесс испарения протекает медленно, и параметры течения меняются слабо. Область 2 находится между контактным разрывом и головной ударной волной, в ней реализуются параметры течения, достаточные для воспламенения горючей газокапельной смеси. Непосредственно после распада разрыва температура за ударной волной составляет 2200 К, давление 5 МПа, скорость ударной волны 1950 м/с. Область 3 расположена между левой границей расчетной области и контактным разрывом, температура в ней ниже 300 К и, следовательно, химические реакции заморожены, а процесс испарения практически не протекает. Исходя из вышесказанного при конструировании расчетной сетки необходимо, чтобы подавляющее большинство узлов размещалось в области 2. При проведении численного моделирования использовался следующий алгоритм конструирования расчетной сетке. Перед началом расчета задавались расчетные узлы только в областях 2 и 3 (необходимо отметить, что параметры двухфазного течения также определяются на линиях разрыва - на ударной волне, контактном разрыве, граничных траекториях частиц, границах расчетной области - эти линии рассчитываются всегда, и при конструировании расчетной области речь идет только о внутренних узлах). Внутренние узлы в область 2 добавлялись во время расчета через

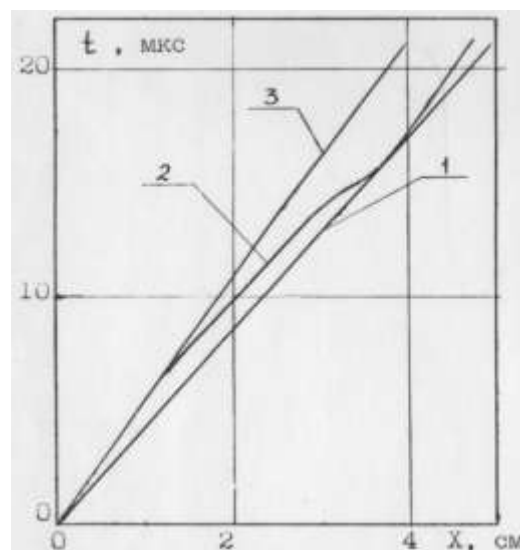


Рис. 4.112. Временная развертка течения. 1-ударная волна, 2-фронт воспламенения, 3-контактный разрыв, 4-граничная траектория поля частиц.

равные промежутки времени в точке, где в текущий момент времени находится головная ударная волна с параметрами, взятыми слева от нее. Траектории газа зарождались с шагом по времени $\Delta t = 0.1$ мкс, а траектории частиц $\Delta t = 1.0$ мкс. Количество подводимых траекторий для каждой из фаз ограничивалось сверху. В том случае, если в расчетной области 2, к моменту подвода траекторий их уже находилось максимальное число, одна из имеющихся траекторий удалялась. В случае частиц удалялась траектория с минимальной массой, причем вначале просматривалась область между левой граничной траекторией и контактном разрывом. В случае газа удалялась траектория из области, расположенной между контактном разрывом и точкой с максимальной температурой. При этом удалялась такая траектория, для которой сумма квадратов отклонений значений характерных параметров течения между значениями их на траектории и данными полученными путем интерполяции по соседним точкам, является минимальной. Подобный метод построения расчетной сетки обеспечивает, во-первых, расчет начального участка с минимальным числом расчетных узлов; во-вторых, достаточное количество расчетных точек в окрестности головной ударной волны после того как она провзаимодействовала с фронтом горения; в-третьих, расчетные узлы удаляются из области с минимальными градиентами параметров течения.

Камера высокого давления заполняется воздухом с давлением $P = 40$ МПа и нормальной температурой $T = 300$ К. В камере низкого давления содержится смесь, состоящая из воздуха ($P=0.1$ МПа, $T = 300$ К) и капель бензина ($C_{8.1}H_{16.5}$) с начальным диаметром $d = 10$ мкм и температурой $T = 300$ К, равномерно распределенных по длине трубы. Термодинамические и теплофизические данные заимствовались из [25, 34, 121, 130, 133, 221, 237] и механизм газозфазных химических реакций [153], дополненный реакциями с ацетиленом и этиленом. При численном моделировании считалось, что бензин при испарении равновесно распадается на молекулярный водород, метан, ацетилен и этилен. Процесс горения начинается у контактного разрыва и сопровождается ростом давления и температуры справа от него (рис. 4.112). В момент времени $t=5.5$ мкс рост температуры прекращается, это соответствует моменту практически полного выгорания кислорода (рис. 4.113). Таким образом, в последующие моменты времени, окислитель на контактном разрыве отсутствует, а горючее из-за испарения продолжает поступать (траектории частиц "входят" справа в траектории газа (рис. 4.111), поэтому

является таким ярко выраженным, как в случае газофазной детонации [197, 202], что связано с диссипативным влиянием частиц и процесса испарения. На рис. 4.115б представлено распределение параметров, соответствующее полному испарению конденсата в окрестности контактного разрыва, концентрации химических компонент и температура справа от контактного разрыва замораживаются (рис. 4.112-4.113). В момент времени $t = 15.5$ мкс фронт горения достиг головной ударной волны и несколько ускорил ее (рис. 4.111-4.112). Ускорение ударной волны привело к выполаживанию профиля давления справа от нее рис. 4.115в. В более поздние моменты времени скорость головной ударной волны уменьшается, и стремится к своему стационарному значению, а фронт горения несколько отдалается от нее рис. 4.112. В поле течения между контактным разрывом и ударной волной к этому времени уже имеется хорошо оформившаяся зона чистого газа, примыкающая к контактному разрыву (рис. 4.115г).

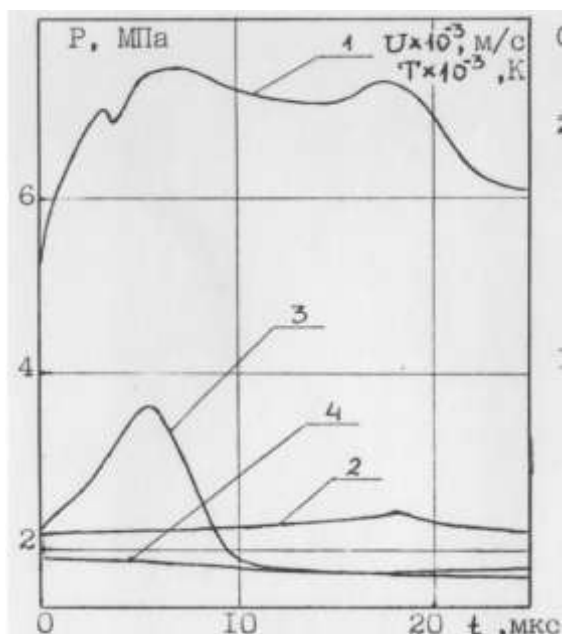


Рис 4.113 . Временные зависимости параметров взрывчатой смеси на КР (1-давления, 2-скорость, 3-температура), 4-скорость ударной волны.

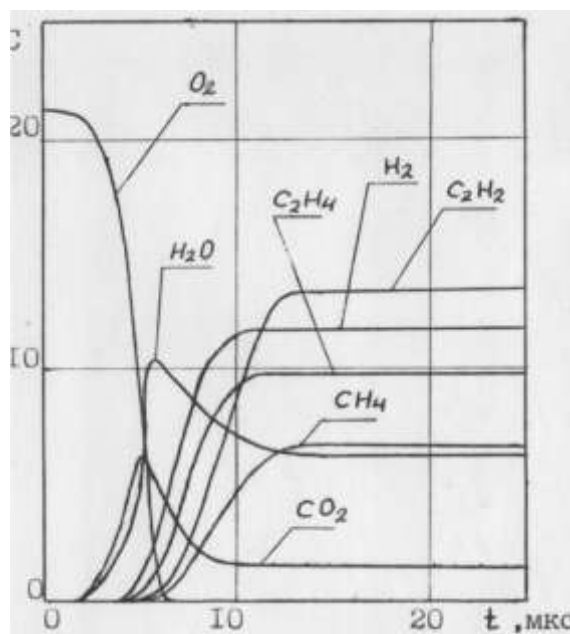
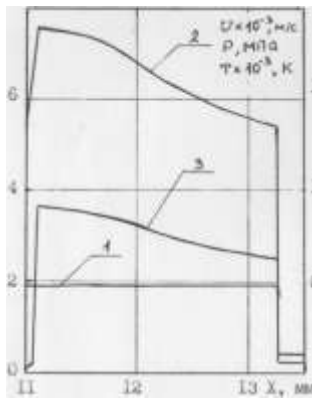
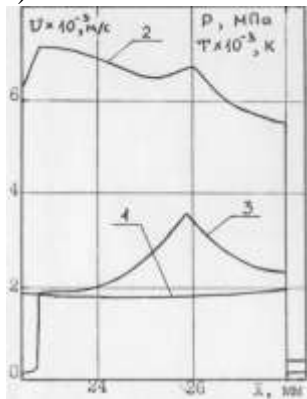
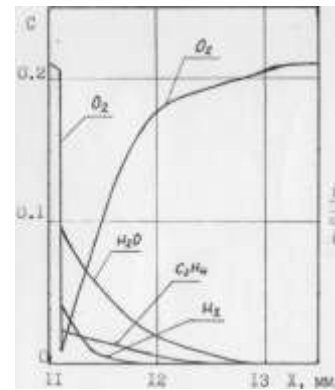
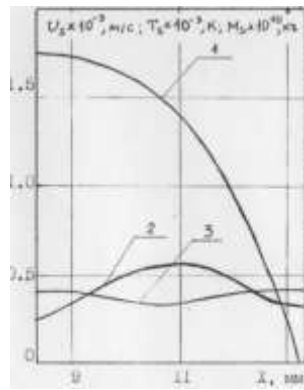


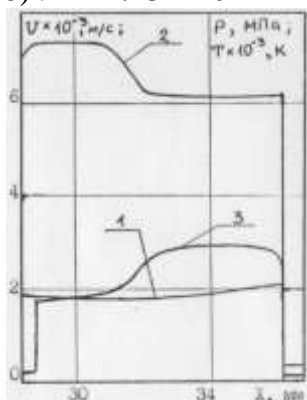
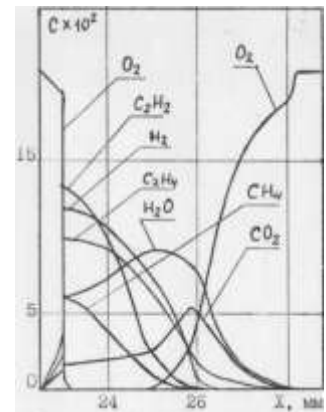
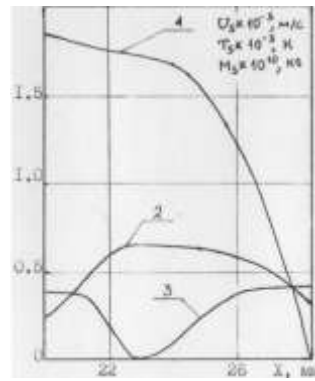
Рис. 4.114. Временные зависимости мольных долей химических компоненты на КР.



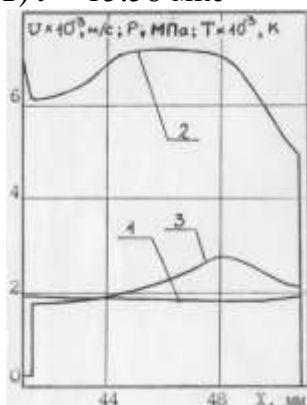
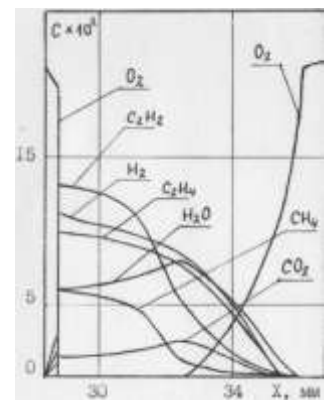
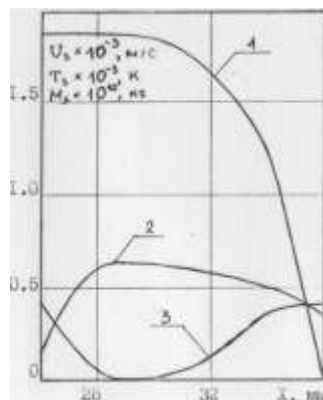
а) $t = 5.78$ мкс



б) $t = 12.23$ мкс



в) $t = 15.58$ мкс



г) $t = 22.15$ мкс

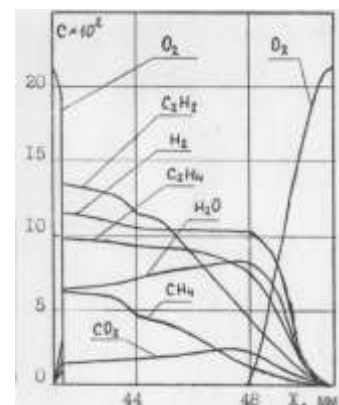
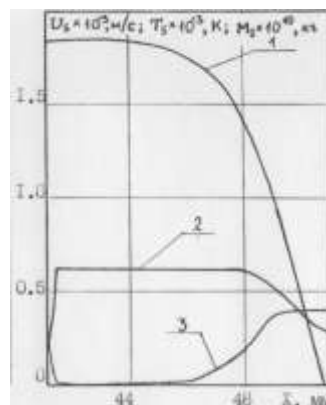


Рис. 4.115. Распределение параметров газа и капель в канале.

1-скорость, 2-давление, 3-температура

1-скорость, 2-температура, 3-масса одной частицы

Мольные доли

Таким образом, в результате численного моделирования определен ряд

характерных этапов процесса инициирования детонации в бензино-воздушных газокапельных смесях сильной ударной волной, во многом совпадающей с развитием газофазной детонации [191]. А именно: воспламенение горючей смеси справа от контактного разрыва, образование волны горения, взаимодействие волны горения с ударной волной, образование зоны чистого газа справа от контактного разрыва, совместное движение головной ударной волны и фронта горения по горючей смеси.

Численное моделирование детонации керосина в воздухе в модельной ударной трубе

Рассчитывалось одномерное нестационарное течение газокапельной смеси керосина с воздухом, учитывались процесс испарения капель и газофазные химические превращения (решалась система уравнений (1.1)-(1.8), дополненная моделями термодинамики, химической кинетики и сопротивления, и тепломассообмена капель с газом) [89, 193]. Численное моделирование проводилось с использованием оригинального сеточно-характеристического метода [41, 59, 60, 74, 300], описанного в главе 3. Сеточными линиями при этом являлись: траектории газа и частиц; траектории ударной волны, контактного разрыва и характеристик, образующих веер волн разрежения; граничные траектории частиц, а также границы расчетной области. При этом ударные волны, контактные разрывы и граничные траектории частиц моделировались двумя подвижными узлами расчетной сетки, координата и скорость движения которых были равны, а перепады параметров удовлетворяли условиям динамической совместности. Число расчетных узлов разностной сетки выбиралось из условия сходимости результатов и составляло в зависимости от начальных данных от 5 до 10 тысяч узлов.

Исследовалось течение в ударной трубе (рис. 4.116), заполненной воздухом, возникающее после распада разрыва на границе камер высокого ($X < 1 м$) и низкого давления ($X > 1 м$). Капли керосина равномерно заполняли область при $2 < X < 9 м$. После распада разрыва образовывалась ударная волна, распространяющаяся вправо, которая при прохождении через газокапельную область инициировала испарение капель керосина, а также воспламенение и детонацию горючей смеси [89, 193].

Временная развертка течения (рис. 4.116) приведена схематично [89, 193] и объединяет на одном рисунке три варианта расчета течений при различных значениях отношения массы капель к массе воздуха. Во всех трех расчетах траектории

характеристик, образующих веер волн разрежения, контактный разрыв и граничная траектория частиц практически сливаются, существенно отличаются только траектории головной ударной волны рис. 4.116. Необходимо отметить, что в рассматриваемых вариантах реализуются существенно более мягкие условия, чем рассмотренные в предыдущем параграфе, начальная скорость ударной волны составляет 1290 м/с, температура за ударной волной – 1000 К.

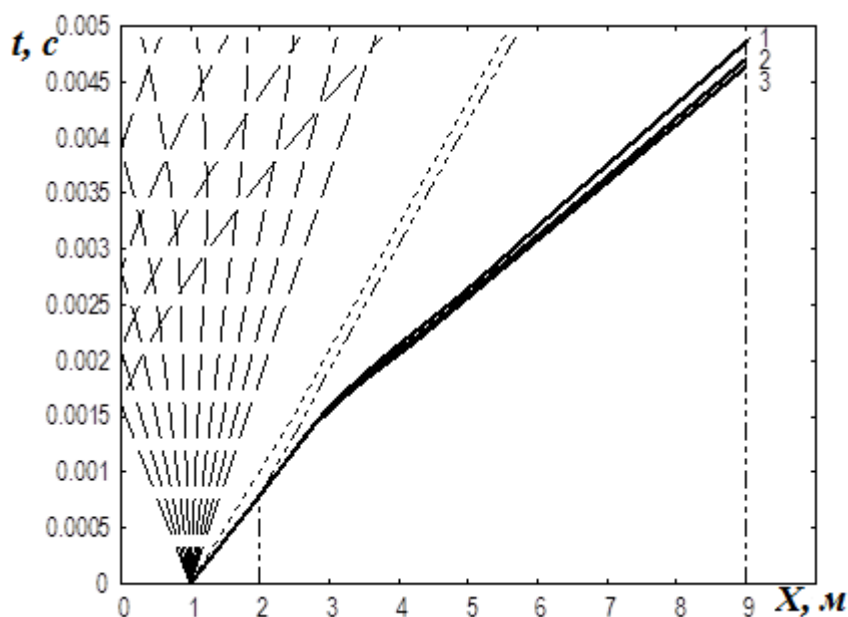


Рис. 4.116. Временная развертка течения в ударной трубе (крупный пунктир – характеристики, образующие веер волн разрежения; пунктир – контактный разрыв; штрих-пунктир – границы области распространения капель керосина; сплошная линия – траектория головной ударной волны при различных значениях отношения массы капель к массе воздуха (1 – 0.06, 2 – 0.08, 3 – 0.1).

Ударная волна (рис. 4.117) после входа в газок капельную область в начале несколько замедляется. После того как капли испаряются, начинаются экзотермические химические реакции и образуется волна горения, сопровождающаяся ростом давления, которая распространяется вслед за ударной волной. Перед фронтом горения образуется ударная волна, которая в момент времени около 1.4 мс догоняет головную ударную волну (рис. 4.118), что приводит к заметному увеличению ее скорости до 2000-2150 м/с и температуры за ней, что в конечном итоге приводит к образованию пересжатой детонационной волны. К моменту времени около 3 мс детонационная волна выходит на режим распространения, близкий к стационарному.

Необходимо отметить, что при численном моделировании получена картина течения, в которой одновременно присутствуют два очага воспламенения, что качественно совпадает с наблюдаемой в экспериментах, выполненных в институте Химической физики РАН. Второй очаг воспламенения возник непосредственно за головной ударной волной после ускорения ударной волны (рис. 4.117) и росту

температуры за ней (рис. 4.118). При дальнейшем распространении детонационной волны по каналу очаги воспламенения слились, образовав непрерывную область “сгоревшего” газа (рис. 4.102, кривая 4), между головной ударной волной и контактным разрывом.

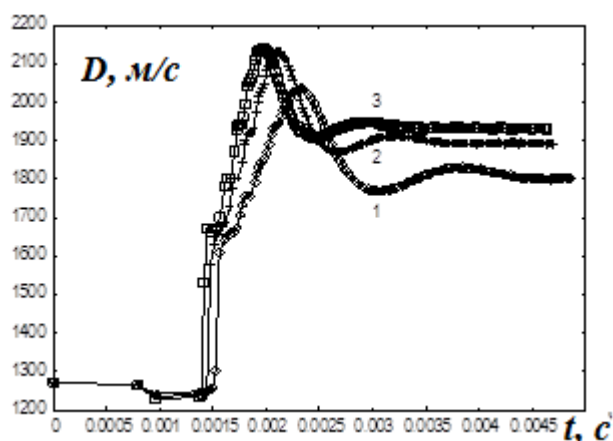


Рис. 4.117 Зависимость скорости ударной волны от времени при различных значениях отношения массы каплей к массе воздуха (1 – 0.06, 2 – 0.08, 3 – 0.1). Диаметр каплей керосина – 40 мкм.

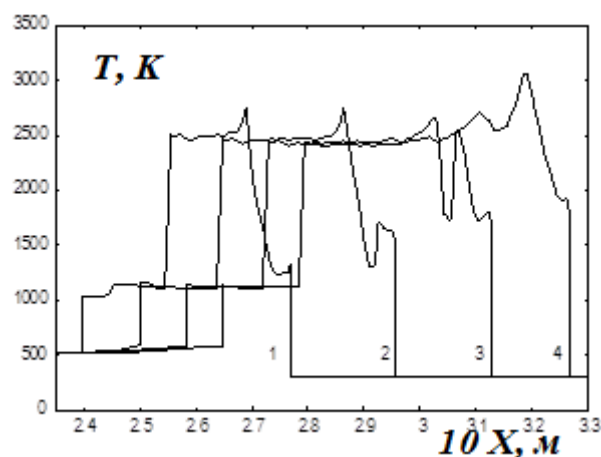


Рис. 4.118. Распределение температуры в различные моменты времени (1 – 1.41 мс, 2 – 1.53 мс, 3 – 1.63 мс, 4 – 1.70 мс). Отношение массы каплей к массе воздуха – 0.1.

Выводы

В разделе рассчитаны равновесные адиабаты продуктов сгорания керосино-воздушных горючих смесей при различных отношениях начальных масс керосина и воздуха ($0.05 \leq M_K / M_{Air} \leq 0.4$). Проведено численное моделирование стационарных волн детонации и дефлаграции в стандартных условиях при отношении начальных масс керосина и воздуха в диапазоне от 0.01 до 1. Численно получена структура стационарных волн горения и детонации в газокapельных керосино-воздушных горючих смесях, включающая нагрев и испарение каплей, воспламенение и сгорание горючей смеси. Исследовано влияние массовой доли керосина на минимальную скорость стационарной детонации и максимальную скорость газа, при которой существует стационарная волна дефлаграции. Показано, что использование модели горения с необратимыми реакциями может приводить к завышенным значениям температуры продуктов сгорания, а также к зависимости конечной температуры от диаметра каплей при неизменной массовой доле горючего. Расчетным путем получено, что параметры стационарных волн горения и детонации асимптотически стремятся к равновесным значениям – точке на равновесной адиабате.

Проведено численное моделирование детонации газокпельных смесей “бензин-воздух” и “керосин-воздух” в модельной ударной трубе. Численно получена временная развертка процесса, включающая: взаимодействие падающей ударной волны с газокпельной горючей смесью; нагрев горючей смеси; испарение капель горючего с последующими экзотермическими химическими реакциями; образование волн горения, сжатия и детонации; выход детонационной волны на режим распространения, близкий к стационарному.

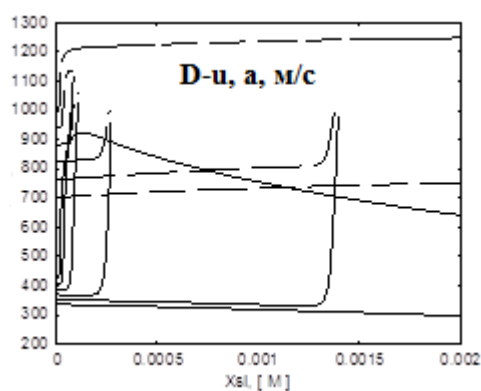
4.2.3. Моделирование влияния капель воды на структуру детонационной волны в горючих смесях

В разделе рассматриваются вопросы, связанные с влиянием капель воды на детонацию и дефлаграцию горючих газовых смесей [71, 76, 93, 193]. При построении физико-математической модели процесса считается, что течение одномерное, объемная доля частиц в газе мала, эффекты вязкости теплопроводности и диффузии существенны только при взаимодействии частиц с газом, химические реакции протекают в газовой фазе. Дробление и коагуляция капель не рассматриваются. В процессе горения в поток газа поступают пары воды, которые участвуют в реакциях горения.

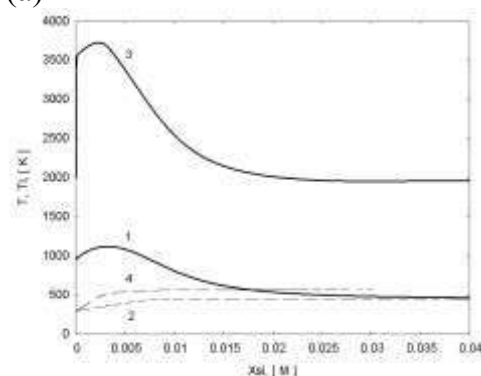
Стационарные газокпельные течения, возникающие в канале постоянного сечения за стационарной ударной волной (УВ), распространяющейся по горючей смеси со скоростью D и после впрыска частиц в начальном сечении, при сделанных выше предположениях описываются системой (4.69)-(4.76). В случаях, рассмотренных в разделах 4.2.1-4.2.2 капли представляли собой горючее, а газообразная среда являлась окислителем. В данном разделе рассматривается случай, когда газовая смесь содержит и горючее, и окислитель, а впрыскиваемые капли воды используются, как правило, для снижения температуры и подавления горения. Как уже отмечалось выше, в зависимости от начальных данных система дифференциально-алгебраических уравнений может иметь решение без воспламенения, может не иметь решения, а также может описывать стационарную волну детонации или дефлаграции.

Рассмотрим течение модельной горючей смеси $0.4H_2 + 0.2O_2 + 0.4Ar$ с добавлением капель воды диаметром 10 мкм с расходом, равным расходу газа. Для моделирования горения использовался кинетический механизм, включающий 19 обратимых реакций, в которых участвовали 9 компонент [58]. В результате численного моделирования установлено, что решение системы существует при $M \leq 3.2$; при

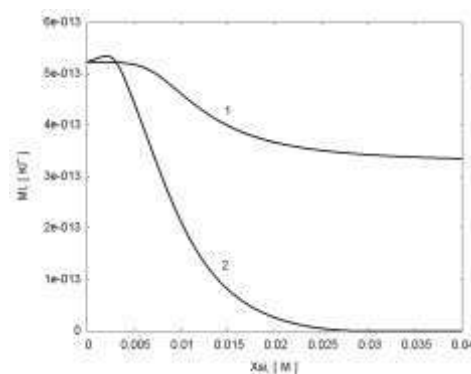
$M = 3.4 - 5.0$ система решения не имеет и при $M \geq 5.2$ решение существует. Решение системы при $M \leq 3.2$ соответствует случаю установления двухфазного равновесия (рис. 4.119). Масса капля воды при этом устанавливается равной 3.310^{-13} кг, что примерно соответствует 63% от начальной (рис. 4.119б), температура продуктов сгорания и капля воды сравниваются и равны 490 К (рис. 4.119в). Повышение температуры горючей смеси непосредственно за фронтом ударной волны незначительное. Решение системы при $M \geq 5.2$ соответствует случаю полного испарения капля воды (рис. 4.119б), воспламенению горючей смеси за фронтом ударной волны, температура доходит до 3700 К, (рис. 4.119в), с последующим снижением температуры до равновесного значения 1950 К.



(а)



(в)



(б)

Рис. 4.119. Распределение параметров за УВ при различных числах Маха в смеси $0.4H_2 + 0.2O_2 + 0.4Ar$ + капли воды ($d_s^0 = 10$ мкм, $m_{H_2O} / m_T = 1$, $u_0 = 0$, $p_0 = 101325$ Па, $T_0 = 298.15$ К). (а) - относительная скорость газа (сплошная кривая) и скорость звука (пунктирная кривая) при числах Маха ударной волны 3.2, 3.6, 4.0, 4.4, 4.8, 5.2; (б) - масса одиночной капли 1 - $M=3.2$; 2 - $M=5.2$; (в) 1, 3 - температура газа; 2, 4 - температура капли; 1, 2 - $M= 3.2$; 3, 4 - $M= 5.2$

Для рассматриваемой смеси минимальная скорость УВ, при которой происходит воспламенение газодисперсной смеси с полным испарением капля, составляет 1997 м/с, что соответствует $M=5.02$.

Рассматривалась стехиометрическая водородо-воздушная горючая смесь с добавлением капля воды [93, 193]. Изучалось влияние отношения начальных расходов воды и расхода водородо-воздушной смеси (m_{H_2O} / m_T) на значения параметров в точках Чепмена-Жуге детонации и дефлаграции для случая, когда капли полностью

испарились. На рис. 4.120 приводятся распределения скорости волны, давления, температуры и концентрации паров воды вдоль равновесных адиабат, а также значения параметров, соответствующие точкам Чепмена-Жуге детонации и дефлаграции [191].

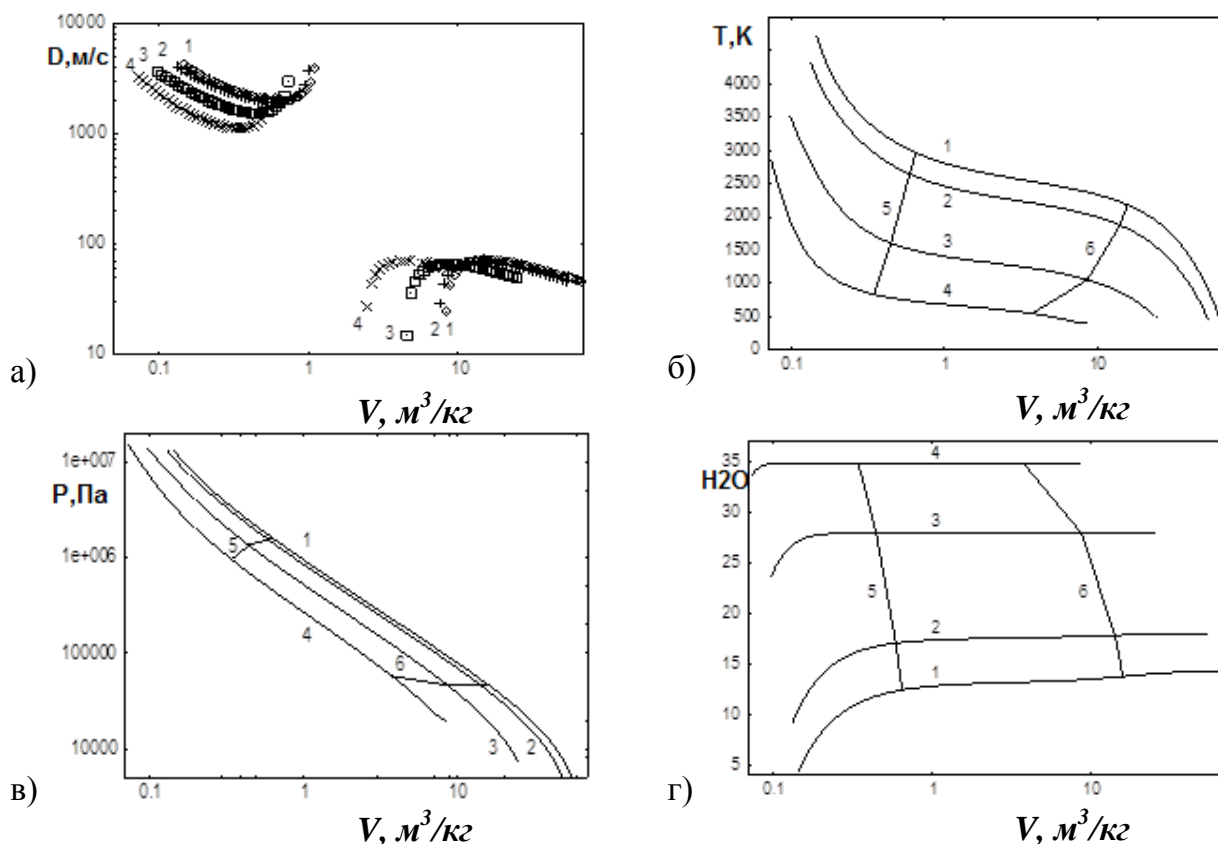


Рис. 4.120. Зависимость скоростей волн детонации и дефлаграции (а), температуры (б), давления (в), мольно-массовой концентрации паров воды (г) вдоль равновесной адиабаты от удельного объема при различных соотношениях расходов капель и топлива (1 – 0; 2 – 0.1; 3 – 0.5; 4 -1).

Необходимо отметить, что на рис. 4.120 отражен участок, соответствующий минимальным значениям скорости волны (участок отсутствия маркеров на рис. 4.104а, $V \sim 1-2 \text{ м}^3/\text{кг}$). Скоростям Чепмена-Жуге детонации и дефлаграции соответствуют точки минимума на кривых в левой части рисунка и точки максимума на кривых в правой части рис. 4.120а. Добавление капель воды приводит к уменьшению скорости детонации Чепмена-Жуге (кривые 1-4), температуры и давления (кривые 5, рис. 4.120б-4.120в). При равенстве расходов воды и водородо-воздушной смеси температура продуктов сгорания в точке Чепмена-Жуге уменьшается более чем в 3 раза по сравнению с чисто газофазной горючей смесью. При $m_{\text{H}_2\text{O}}/m_{\text{T}} > 0.3$ продукты сгорания практически полностью состоят из паров воды и азота (рис. 4.120г). Скорость волны дефлаграции и давление слабо зависят от $m_{\text{H}_2\text{O}}/m_{\text{T}}$ (рис. 4.120а).

Расчет структуры стационарной детонационной волны в газокпельных смесях (неравновесный расчет).

Были проведены расчеты детонации стехиометрической водородо-воздушной горючей смеси с добавлением капель воды в неравновесной постановке при стандартных условиях ($p = 1 \text{ атм.}$, $T = 298.15 \text{ К}$) [93, 193]. Для моделирования химических превращений использовался кинетический механизм, включающий 19 обратимых стадий [58]. Учитывался неравновесный процесс испарения капель, варьировались массовая доля и начальный диаметр капель воды. Типичные распределения параметров течения в детонационной волне представлены на рис. 4.121. Температура за ударной волной (рис. 4.121а) составляет около 1500 К, что существенно превышает температуру самовоспламенения водородо-воздушной горючей смеси, инициируется протекание экзотермических реакций, на некотором расстоянии от ударной волны происходит самовоспламенение горючей смеси и температура поднимается до $\sim 2900 \text{ К}$, при этом давление (рис. 4.121б) и скорость (рис. 4.121в) газа уменьшаются, концентрация паров воды в смеси возрастает (рис. 4.121г). Данная картина течения очень похожа на структуру детонационной волны в случае отсутствия капель (кривая 1), так как капли воды еще не успели испариться и оказывают слабое влияние на процесс самовоспламенения. Далее наблюдается влияние капель на структуру течения, которое сопровождается даже нагревом газа в случае значительных массовых долей капель (кривые 4, 5 рис. 4.121б). На расстоянии 2-5 см от фронта ударной волны капли начинают активно испаряться, что приводит к увеличению содержания паров воды в составе продуктов сгорания (рис. 4.121г), к снижению температуры (рис. 4.121а), росту давления (рис. 4.121б) и скорости (рис. 4.121в) потока. В представленных на рисунках вариантах зона активного протекания процесса испарения составляет от 10 см до 1 м.

Описанная картина течения соответствует случаю, когда времена испарения капель существенно превосходят время задержки воспламенения горючей смеси. В случае, когда данные времена сравнимы, картина течения может существенно отличаться. Так, если мы рассмотрим капли воды с начальным диаметром 1 мкм (рис. 4.122), то при $m_{\text{H}_2\text{O}}/m_{\text{T}} = 0.239$ (кривая 2) наблюдается вышеописанная картина течения, а при $m_{\text{H}_2\text{O}}/m_{\text{T}} = 0.240$ (кривая 3) процесс испарения приводит к существенному понижению температуры горючей смеси, а следовательно к увеличению

времени задержки воспламенения. В первом случае горючая смесь воспламеняется на расстоянии около 1 мм от ударной волны, а во втором - на расстоянии 6 см. При $m_{H_2O} / m_T = 0.250$ (кривая 5) фронт самовоспламенения находится на расстоянии более 1 м от ударной волны и о детонационной волне, по-видимому, может идти речь только в теоретическом смысле как о некоторой структуре распределения параметров, отвечающей решению рассматриваемой системы уравнений.

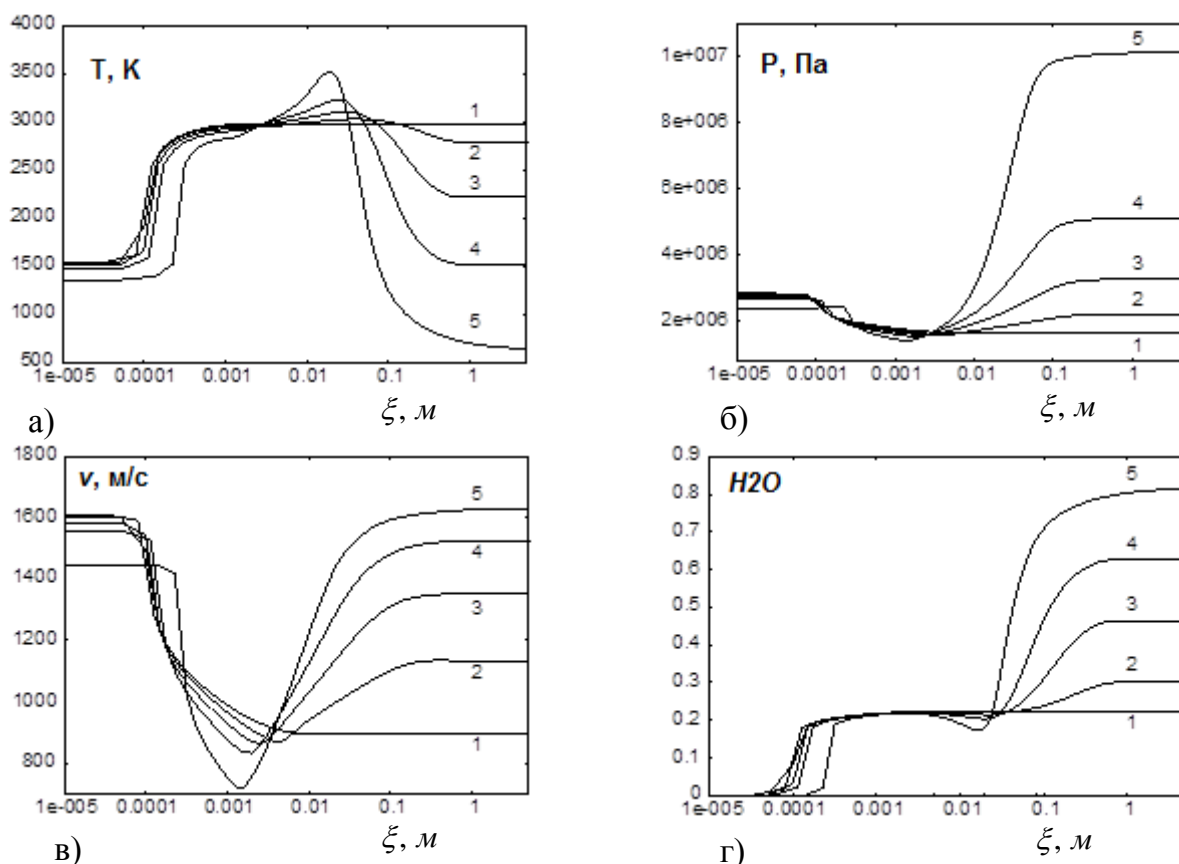


Рис. 4.121. Зависимость температуры (а), давления (б), относительной скорости (в), массовой доли воды (г) от продольной координаты в волне Чепмена-Жуге при различных отношениях массы капель к массе топлива (1 – 0; 2 – 0.1; 3 – 0.4; 4 – 1.0; 5 – 3.0). Начальный диаметр капель воды – 50 мкм.

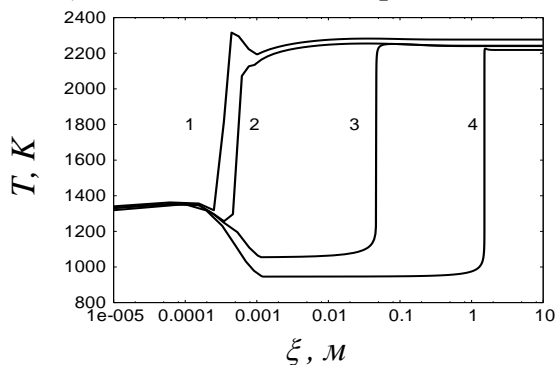


Рис. 4.122. Зависимость температуры в волне Чепмена-Жуге от продольной координаты при различных отношениях массы капель к массе топлива (1 – 0.230; 2 – 0.239; 3 – 0.240; 4 – 0.250). Диаметр капель воды – 1 мкм

Для анализа получаемых решений рассмотрим протекающий процесс на фазовых плоскостях $p-V$ и $V-T$ ($m_{H_2O} / m_T = 0.4$). Кривая 1 рис. 4.123 - ударная адиабата - соответствует состоянию смеси, реализуемому за ударной волной, т.е. началу

траектории на фазовой плоскости, далее параметры описывают кривую (линии 4-8), которая, если решение существует, заканчивается на равновесной детонационной адиабате (линия 2) или обрывается (линия 4), если решения у системы уравнений нет. Из рисунков 4.123 видно, что точки начала и окончания траектории зависят исключительно от массовой доли воды и не зависят от диаметра капель (кривые 5-6, 7-8). В случае чисто газовой детонации фазовой траекторией процесса на плоскости p - V является отрезок прямой линии. В случае газокпельной смеси траектория соответствует поведению системы качественно описанному выше.

Необходимо отметить, что кривые 4–8 получены путем интегрирования достаточно сложной системы дифференциально- алгебраических уравнений, причем для получения стационарной точки требуется выполнить несколько тысяч, а иногда и сотен тысяч шагов, а кривая 2 получена путем решения системы нелинейных алгебраических уравнений. Точное попадание решения дифференциально-алгебраических уравнений в точку, лежащую на кривой 2, свидетельствует о высокой точности разработанных алгоритмов численного интегрирования, обеспечивающих точное выполнение законов сохранения массы, импульса, энергии и химических элементов в газокпельной реагирующей смеси.

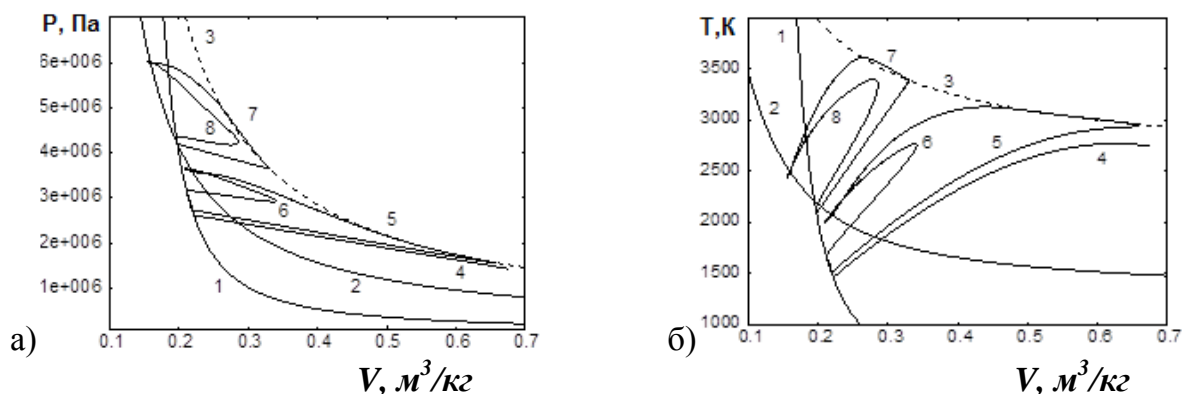


Рис. 4.123. p - V диаграмма (а), V - T диаграмма (б). 1- ударная адиабата; 2 – детонационная адиабата; 3 – детонационная адиабата, соответствующая отсутствию капель воды; 4 – $D=1900$ м/с – решение отсутствует ($d = 50$ мкм); 5 – $D= 1942$ м/с – минимальная скорость при которой существует решение ($d = 50$ мкм); 6 – $D = 1942$ м/с, $d = 1$ мкм; 7 – $D = 2400$ м/с, $d = 50$ мкм; 8 - $D= 2400$ м/с, $d = 1$ мкм

Также было проведено исследование влияния капель воды на параметры детонации Чепмена-Жуге [93, 193]. В частности, обнаружено (рис. 4.124), что длины полного испарения капель воды различного начального диаметра нелинейно зависят от массовой доли капель. При малых содержаниях капель воды и росте их массовой доли длины испарения капель уменьшаются, а при больших содержаниях капель воды в

смеси (для 10 мкм - $m_{H_2O}/m_T > 0.5$, для 50 мкм - $m_{H_2O}/m_T > 1.0$) длина полного испарения капель увеличивается с ростом m_{H_2O}/m_T . Такое поведение системы связано с тем, что скорость испарения прямо пропорциональна температуре стационарного испарения капель и обратно пропорциональна парциальному давлению паров воды во внешней среде. Температура стационарного испарения и концентрация паров воды растут с ростом m_{H_2O}/m_T . При больших массовых долях воды существуют режимы, когда на больших расстояниях от ударной волны реализуется двухфазное равновесие, при котором скорости и температуры продуктов сгорания и капель воды сравниваются, и капли перестают испаряться.

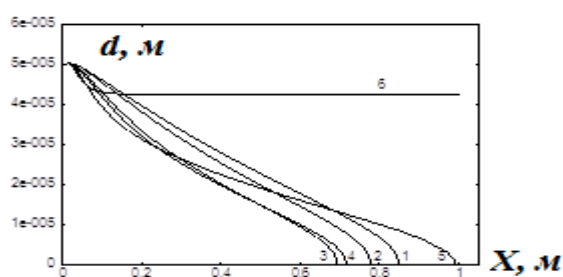


Рис. 4.124. Зависимость диаметра капели в волне Чепмена-Жуге от продольной координаты при различных отношениях массы капели к массе топлива (1 – 0.1; 2 – 0.2; 3 – 0.7; 4 – 1.0, 5 – 2.0; 6 – 5.0). Диаметр капели воды – 50 мкм.

С увеличением массовой доли капель наблюдается снижение скорости детонации Чепмена-Жуге и температуры смеси (рис. 4.125). Аналогичная тенденция наблюдается и при уменьшении диаметра капель при фиксированной массовой доле. Необходимо отметить, что скорость детонации Чепмена-Жуге и температура смеси при наличии капель выше, чем рассчитанная в идеальной постановке с полным испарением капель (штрих-пунктирные кривые). В результате численного моделирования было получено, что для капель диаметром менее 50 мкм существует предельная массовая доля капель, начиная с которой решение рассматриваемой системы существует при всех рассмотренных режимах, и режим детонации Чепмена-Жуге отсутствует. Отсутствие режима Чепмена-Жуге свидетельствует о достаточности количества впрыскиваемой воды для затухания детонации [93, 193]. Уменьшение диаметра впрыскиваемых капель приводит к существенному уменьшению массовой доли воды, необходимому для затухания детонации. При начальном диаметре капель $d = 50 \text{ мкм}$ затухание детонации происходит при $m_{H_2O}/m_T \sim 3.5$ (кривые 2,6), при $d = 10 \text{ мкм}$ - $m_{H_2O}/m_T \sim 0.7$ (кривые 3,7), при $d = 1 \text{ мкм}$ - $m_{H_2O}/m_T \sim 0.4$ (кривые 4,8). Необходимо отметить, что при уменьшении начального диаметра капель рассчитанные значения скорости волны и температуры в волне Чепмена-Жуге становятся близки к соответствующим значениям, полученным в равновесном расчете, не учитывающем неравновесное испарение капель (кривые 4, 8 и

9, 10 соответственно). Равновесный расчет в отличие от неравновесного не позволяет предсказывать массовую долю капель воды, приводящую к затуханию детонации.

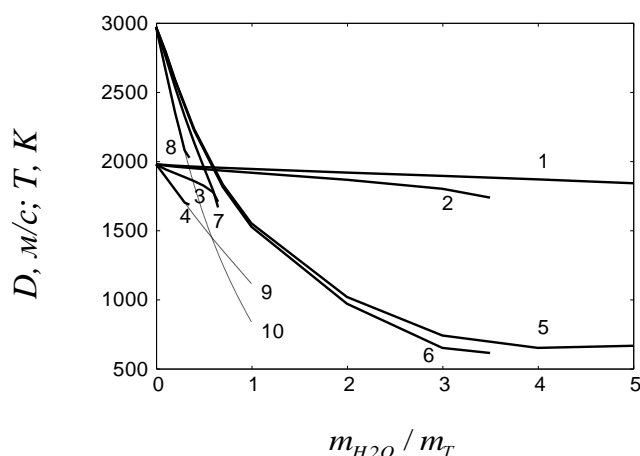


Рис. 4.125. Зависимость скорости детонации Чепмена-Жуге (1-4,9) и температуры (5-8,10) от отношения массы капель к массе топлива при различных диаметрах капель (100 мкм – 1,5; 50 мкм – 2,6; 10 мкм – 3,7; 1 мкм – 4,8). Линии 9 и 10 соответствуют равновесному расчету.

Результаты проведенных исследований показывают, что массовая доля и начальный диаметр капель воды оказывают сильное влияние на параметры детонационных волн в водородо-воздушной горючей смеси. При начальных диаметрах капель менее 10 мкм существуют пороговые значения массовой доли капель, ответственные за структуру волны Чепмена-Жуге, а именно увеличение массовой доли капель на доли процента приводит к увеличению толщины волны в несколько десятков раз. Пиковые значения температуры и давления, наблюдаемые в детонационных волнах при впрыске капель воды, могут существенно превышать соответствующие значения для чисто газовой горючей смеси. При начальных диаметрах капель менее 50 мкм обнаружены массовые доли капель, начиная с которых детонация в горючей смеси затухает. Причем уменьшение диаметра капель приводит существенному уменьшению необходимой для затухания детонации массовой доли капель.

Также было проведено исследование влияния на воспламенение и детонацию водородо-воздушных смесей капель воды, распыленной в объем, занимаемой горючей смесью [71]. Рассматривается нестационарное течение, возникающее в горючей смеси после прихода ударной волны на границу раздела – “воздух – водородо-воздушная смесь с распыленными каплями воды”. Математическая модель квазиодномерного нестационарного течения реагирующей газокapельной смеси подробно описана в главе 1 и включает в себя уравнения переноса массы, импульса и энергии двухфазной смеси и уравнения переноса и химических превращений, содержащихся в ней компонент, дополненные подмоделями термодинамики, химической кинетики, а также моделями сопротивления и межфазного теплообмена. 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, траекториями ударной волны и контактного разрыва и граничной траекторией частиц.

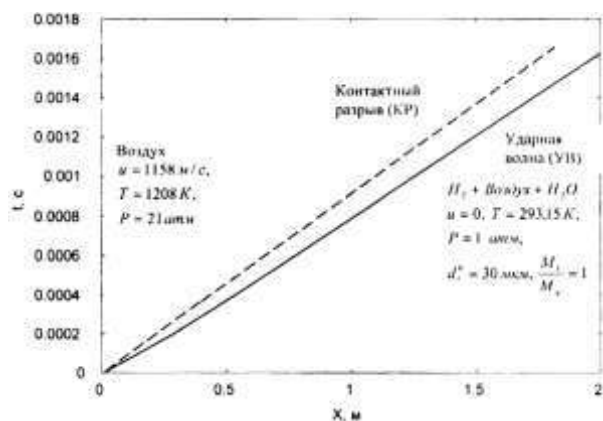


Рис. 4.126. Временная развертка течения в ударной трубе.

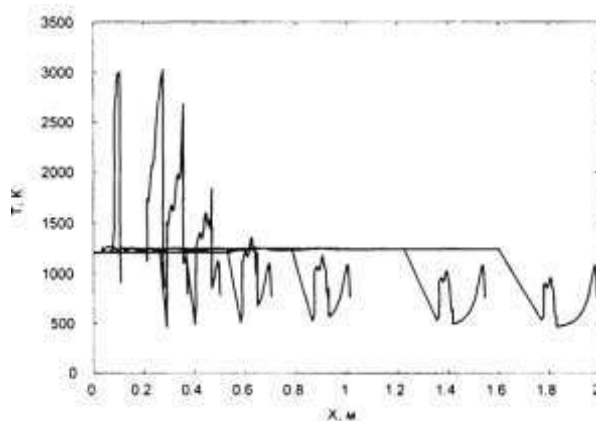


Рис. 4.127. Распределения температуры в различные моменты времени.

На рисунках 4.126-4.127 представлены результаты расчета течения возникающего после прихода ударной волны на границу раздела “воздух - стехиометрическая водородо-воздушная смесь с каплями распыленной воды”. Начальные параметры смеси приведены на рис. 4.126. Из рис. 4.127 видно, что волна горения, возникшая в газок капельной смеси, затухает, максимальная температура за ударной волной в момент времени t_1 - 2700 К, а в момент времени t_2 - 1100 К, тем не менее, фронт горения, хорошо видимый на рис. 4.128, наблюдается и в момент времени t_2 . Ему соответствует резкое уменьшение массы одиночной капли воды (рис. 4.130), а также зона быстрого изменения концентраций O_2 , H_2 и H_2O (рис. 4.131).

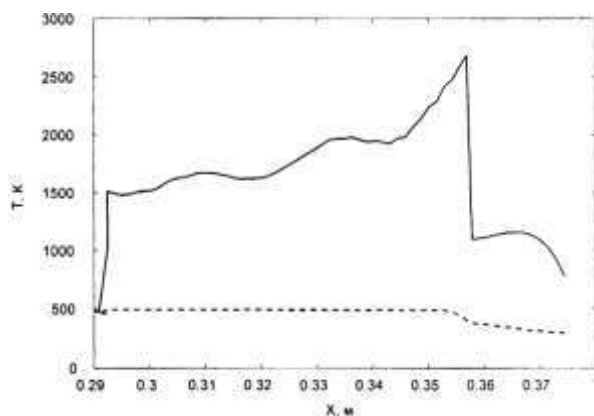


Рис. 4.128. Температура продуктов сгорания (сплошная линия) и капель воды при $t_1 = 0,27$ мс

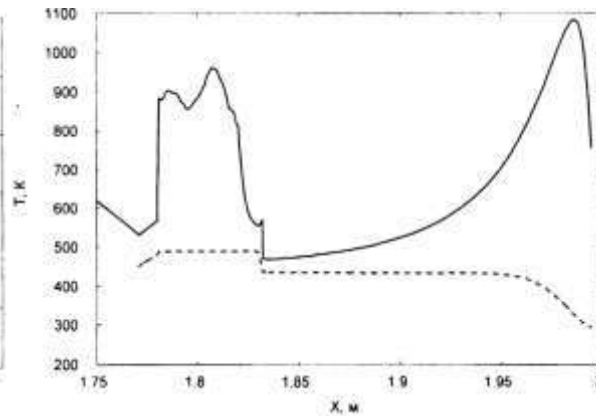


Рис. 4.129. Температура продуктов сгорания (сплошная линия) и капель воды при $t_2 = 1,62$ мс

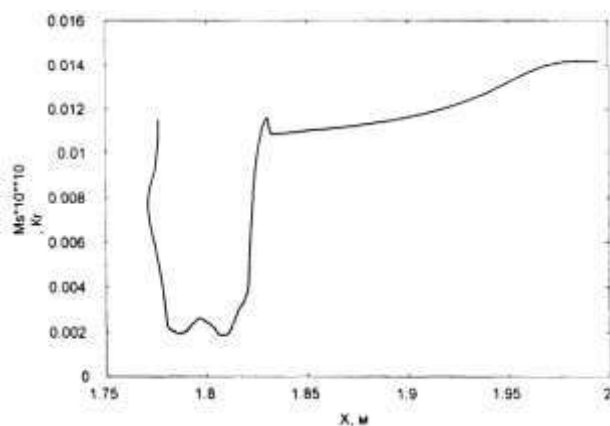


Рис. 4.130. Масса капли при $t_2 = 1,62$ мс

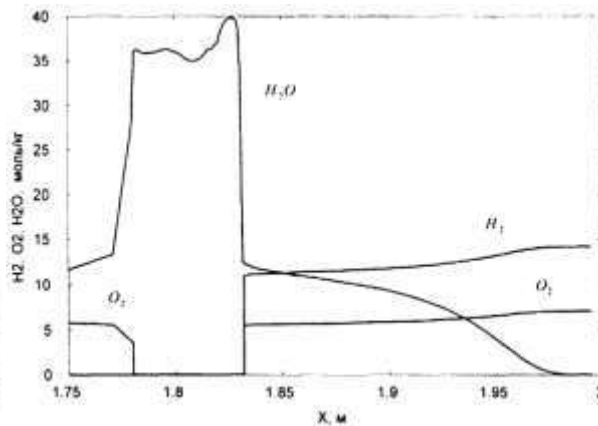


Рис. 4.131. Мольно-массовые концентрации некоторых компонент при $t_2 = 1,62$ мс

При исследовании зависимости процесса воспламенения горючей смеси от массовой доли частиц воды M_l/M_g и начального диаметра каплей d_l^0 , были обнаружены различные режимы течения: образование незатухающей волны горения; подавление волны горения; отсутствие образования волны горения. На рис. 4.132 показано влияние на процесс образования волны горения массовой доли и диаметра каплей воды d_l^0 , по оси ординат отложено время задержки воспламенения (момент резкого роста температуры вблизи контактного разрыва). Необходимо отметить, что при массовой доле каплей 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 массовой доле впрыскиваемых частиц 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.

Вопросы, связанные с образованием устойчивой волны горения после воспламенения, в рамках данного исследования 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 каплей [71].

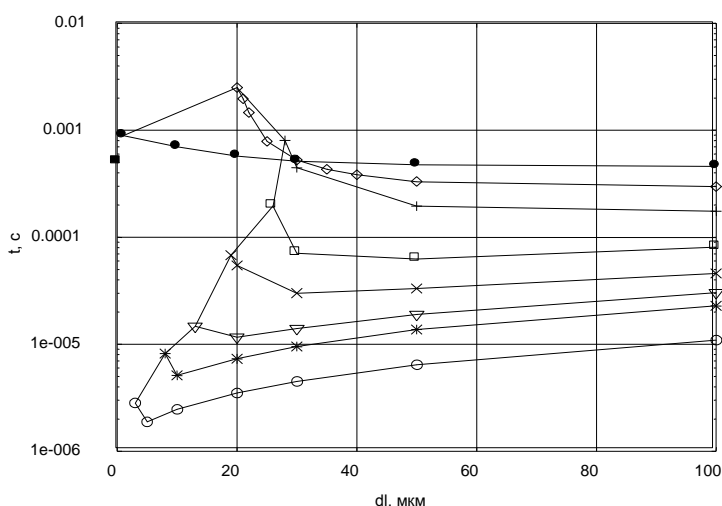


Рис. 4.132. Зависимость задержки воспламенения от диаметра капель воды при различной начальной массовой доли воды (\diamond - 0.05, \bullet - 0.01, $+$ - 0.1, \square - 0.2, \times - 0.3, ∇ - 0.4, $*$ - 0.5, \circ - 1.0).

4.3. Моделирование детонации металлогазовых горючих смесей

Приводится физико-математическая модель, позволяющая описывать процессы самовоспламенения, горения и детонации горючих металлогазовых смесей. Разработана упрощенная физико-математическая модель процесса. 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. Расчетным путем определены структура и минимальная скорость распространения стационарной детонационной волны. Показано, что вычисленные в волнах параметры асимптотически стремятся к своим равновесным значениям. Разработанные физико-математическая модель и вычислительные алгоритмы могут быть использованы при создании методик моделирования горения и детонации металлогазовых смесей в многомерной постановке [83, 84, 91].

В настоящее время большой теоретический и практический интерес вызывают задачи образования и распространения волн горения и детонации в многофазных средах, состоящих из частиц горючего и газообразного окислителя. Особый интерес среди них представляют проблемы, связанные с горением и детонацией воздушных смесей с углеводородами и частицами металлов, в частности алюминия, магния и бора. Горение металлизированных топлив и углеводородов имеет как много общих закономерностей, так и ряд принципиальных отличий. Горение капель углеводородного топлива происходит в газовой фазе, горят продукты испарения, при этом температура самих

капель существенно ниже температуры продуктов сгорания. Горение газозвесей металлических частиц сопровождается протеканием поверхностных и газофазных химических реакций, образованием конденсированных продуктов на поверхности частицы и в продуктах сгорания, при этом температура частиц может превышать температуру окружающих газов. Обзоры результатов экспериментальных и расчетно-теоретических исследований горения металлогазовых и углеводородных топлив содержатся в большом количестве статей и монографий [103, 110, 111, 113, 129, 147, 188, 191, 203, 245, 256].

В разделе приводятся результаты численных исследований процесса самовоспламенения, горения и детонации взвесей алюминия, магния и бора в воздухе за ударной волной, распространяющейся с постоянной скоростью [83, 84, 91]. Считается, что материал частиц испаряется и одновременно участвует в реакциях изменения состава капли (образовании оксидов алюминия, магния, бора). В газовой фазе происходят химические превращения, приводящие к образованию различных соединений, состоящих из элементов, входящих в состав горючего и воздуха, количество и фазовый состав которых существенно зависит от соотношения горючего и окислителя. Процесс сгорания заканчивается установлением скоростного, температурного, фазового и химического равновесия. При построении физико-математической модели процесса, считается, что течение одномерное; объемная доля частиц в газе мала; эффекты вязкости теплопроводности и диффузии существенны только при взаимодействии частиц с газом; химические реакции протекают в газовой фазе и на поверхности частиц. Дробление и коагуляция частиц не рассматриваются. Для описания рассматриваемых течений используется система дифференциально-алгебраических уравнений [83, 84, 91] (4.69)-(4.76), приведенная в разделе 4.2.

В разделе рассматривается высокотемпературный случай ($T > 2000$ К), когда химические превращения, протекающие в газовой фазе, можно рассматривать в равновесном приближении [129]. Как уже отмечалось выше, в этом случае концентрации химических компонент могут быть найдены из решения нелинейной системы уравнений

$$W_i(\rho, T, \gamma_1, \dots, \gamma_N) = 0, \quad i = 1, \dots, N$$

или из решения эквивалентной ей системы уравнений химического равновесия.

$$\frac{P_0 V}{RT} \sum_{i=1}^N A_K^i \exp\left(\sum_{l=1}^{N_e} A_l^i Z_l - G_i^0(T)/RT\right) = \gamma_K^0, k=1, \dots, N_e \quad)$$

$$\gamma_i = \frac{P_0 V}{RT} \exp\left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i Z_K - G_i^0(T)/RT\right), \quad V = \frac{1}{\rho}.$$

Здесь $\gamma_K^0 = \sum_{i=1}^N A_K^i \gamma_i, k=1, \dots, N_e$ - заданное число молей k -го элемента в газовой фазе.

Данная система нелинейных алгебраических уравнений позволяет рассчитать концентрации химических компонент в состоянии термодинамического равновесия, т. е. задает функцию

$$\gamma_i = \gamma_i(V, T, \gamma_1^0, \dots, \gamma_{N_e}^0), \quad i = 1, \dots, N.$$

Как показано в главе 2, данная система может быть использована для расчета равновесного состава при наличии жидких и твердых компонент. Жидкая и твердая фаза при этом трактуется как совершенный газ, состоящий из кластеров данного вещества, включающих K молекул [129]. При этом, выражения для молекулярного веса и молярного потенциала Гиббса такого “газа” имеют вид:

$$\mu_s^* = K * \mu_s, \quad G_s^*(p, T, \gamma) = RT \ln(p \gamma_s^* / p_0 \sum_{(j)} \gamma_j) + K * G_s^0(T). \quad)$$

Здесь μ_s - молекулярный вес, $G_s^0(T)$ - стандартный молярный потенциал Гиббса жидкой фазы [121]. При численном моделировании константа K принимается равной 1000, при этом ошибка при определении массовой доли жидкой фазы составляет десятые доли процента.

Модели сопротивления и теплообмена испаряющейся частицы характеризуют зависимости $\dot{u}_s, \dot{m}_s, \dot{H}_s$ от текущих значений параметров капель и обтекающего их газа. Используются полуэмпирические критериальные зависимости для квазистационарных, континуальных режимов теплообмена и сопротивления одиночных испаряющихся капель, обтекаемых многокомпонентным газом, приведенные в главе 1.

Неравновесными считаются процессы теплообмена между газом и частицами:

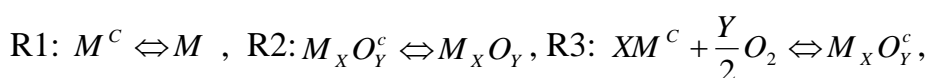
$$\sum_{r=N_r+1}^{N_r+N_{rs}} (\vec{v}_i^{(r)} - \vec{v}_i^{(r)}) (\vec{W}^{(r)} - \vec{W}^{(r)}) = \sum_{r=1}^{N_{rs}} \dot{m}_i^r \neq 0.$$

Используется гипотеза о том, что процесс испарения происходит в “тонком слое” вокруг частицы, в котором плотность постоянна [129] и равна плотности газа. Будем считать, что мольно-массовые концентрации газовых компонент участвующих в процессе межфазного массообмена, у поверхности частиц вычисляются из условия равенства потенциалов Гиббса компонент, участвующих в реакциях испарения (конденсации) и поверхностных реакциях окисления, вычисленных при температуре частицы T_s и плотности газа, а остальные γ_i^S из условий химического равновесия в газовой фазе.

Выражение для потока i -ого компонента в реакции испарения (конденсации) в соответствии с диффузионной моделью [129, 212, 249] может быть записано в виде

$$\dot{m}_i^r = \pi d \frac{m_{Si} \rho_S}{\rho_{Si} m_S} \bar{D}_i \bar{\rho} \delta_{mi}^0 \ln \left(\frac{1 - \alpha_i \bar{\gamma}_i \mu_i}{1 - \alpha_i \gamma_i^S \mu_i} \right). \quad (4.94)$$

Здесь α_i - параметр, вообще говоря, зависящий от кинетики межфазного массообмена (в расчетах $\alpha_i = 1$). Для описания межфазного массообмена и поверхностных реакций рассматриваются три реакции.



M – символ молекулы металла, индекс “с” относится к твердой и жидкой фазам, X, Y – число атомов металла и кислорода в молекуле оксида. Концентрации металла, оксида металла и кислорода у поверхности частиц (γ_i^S) находятся из условий равновесия реакций R1, R2, R3 соответственно. Скорости испарения (конденсации) металла и оксида металла определяются по формуле (4.94), а скорости притока (оттока) кислорода к частице по формуле (4.94) – диффузионная модель или из (4.95) – кинетическая модель.

$$\dot{m}_{O_2}^{R3} = \pi d_s^2 \frac{m_J \rho_S}{\rho_J m_S} \delta_{mO_2}^0 K T_S^m \left(\frac{d_S}{d_S^0} \right)^n \rho \exp(-E/T_S) (\gamma_{O_2} - \gamma_{O_2}^S), \quad (4.95)$$

$$J = \begin{cases} M, & \gamma_{O_2} > \gamma_{O_2}^S \\ M_X O_Y, & \gamma_{O_2} < \gamma_{O_2}^S. \end{cases}$$

Здесь K, n, m, E – константы, подбираемые из условия согласия скорости массообмена с экспериментальными данными. Модель сопротивления и теплообмена частиц металла с газом приведена в главе 1.

Моделирование детонации частиц алюминия в воздухе

Исследуется процесс самовоспламенения и детонации взвеси алюминия в воздухе за ударной волной [75, 83, 103, 110, 171, 172, 188, 191, 213, 245, 247, 256], распространяющейся с постоянной скоростью. За ударной волной происходит прогрев частиц до температуры воспламенения за счет теплообмена с газовой фазой и гетерогенной экзотермической химической реакции образования окисной пленки Al_2O_3 . После воспламенения алюминий одновременно участвует в реакциях изменения состава капли (образования оксида алюминия) и испарения, при этом температура частиц может существенно превышать температуру окружающей среды. В газовой фазе происходят химические превращения, приводящие к образованию соединений алюминия с кислородом и азотом, количество и фазовый состав которых существенно зависит от соотношения алюминия и кислорода в горючей смеси. Процесс сгорания заканчивается установлением скоростного, температурного, фазового и химического равновесия. В процессе окисления капля становится многокомпонентной и состоит из алюминия (Al) и оксида алюминия (Al_2O_3). В интересных для практики случаях в процессе нагрева частиц могут достигаться температуры плавления и кипения алюминия ($T_m^{Al}=933.61$ К, $T_b^{Al}=2792$ К) и оксида алюминия ($T_m^{Al_2O_3}=2327$ К, $T_b^{Al_2O_3}=3253$ К).

Для описания межфазного тепломассообмена и изменения состава частиц используется сокращенный по сравнению с [110] кинетический механизм поверхностных реакций, включающий реакции испарения (конденсации) R1: $Al^C \Leftrightarrow Al$, R2: $Al_2O_3^C \Leftrightarrow Al_2O_3$ и реакции окисления алюминия R3: $4Al^C + 3O_2 \Leftrightarrow 2Al_2O_3^C$, индекс “с” относится к твердой и жидкой фазам. Стехиометрическое соотношение: $(m_{Al}/m_{Air})_{CT} = 0.262$. Скорости реакций R1-R3 в первом приближении можно найти из соотношений (4.91).

Для иллюстрации работы модели на рис. 4.133, 4.134 приведены результаты расчета испарения капель алюминия в воздухе без учета газофазных химических превращений. Из рис. 4.133 видно, что вначале более горячий воздух нагревает частицы и инициирует поверхностную экзотермическую реакцию образования оксида (R3), протекание которой приводит к нагреву частиц до температуры 2500 К, которая существенно превышает температуру воздуха. При этом происходит плавление алюминия при температуре 933 К (рис. 4.133, 4.134), образование твердого, а при

достижении температуры плавления (2327 К) жидкого окисла. Далее, так как массовая доля капель небольшая и алюминий полностью расходуется в процессе поверхностной реакции окисления (рис.4.134, кривые 1, 2), происходит остывание капель и выравнивание температур газа и частиц (рис. 4.133). При этом окись кристаллизуется (рис. 4.133, 4.134), к моменту времени $t = 0.1$ с капля полностью состоит из окиси алюминия Al_2O_3 (рис. 4.134).

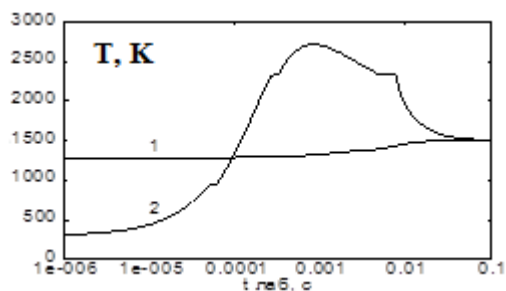


Рис. 4.133. Зависимость температуры газа (кривая 1) и частиц (кривая 2) от лабораторного времени ($m_{Al} / m_{Air} = 0.03$).

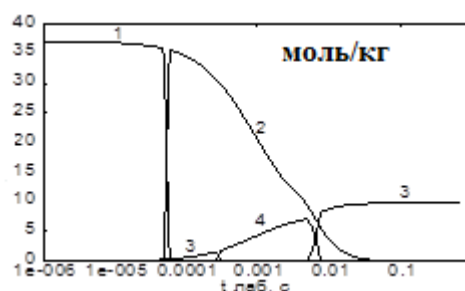


Рис. 4.134. Зависимость мольно-массовых концентраций твердого (кривая 1) и жидкого (кривая 2) Al и твердого (кривая 3) и жидкого (кривая 4) Al_2O_3 внутри частицы от лабораторного времени.

Рассматривалась горючая смесь, состоящая из воздуха ($0.21 O_2 + 0.79 N_2$) и твердых частиц алюминия, продукты сгорания включали 14 компонент [108]: 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, термодинамические свойства которых заимствовались из [121]. Рассчитывалась равновесная адиабата (решалась система уравнений (4.86)-(4.88). Начальному состоянию горючей смеси отвечает точка с координатами (1,1) (рис. 4.135). Детонационную волну, распространяющуюся со скоростью D , на фазовой плоскости $p - V$ можно представить как совокупность ударной волны, множество состояний за ней в зависимости от D задается ударной адиабатой (кривая 1, рис. 4.135) и примыкающей к ней волны горения (отрезок прямой Релея, кривая 3), окончание которого соответствует точке на равновесной детонационной адиабате (кривая 2).

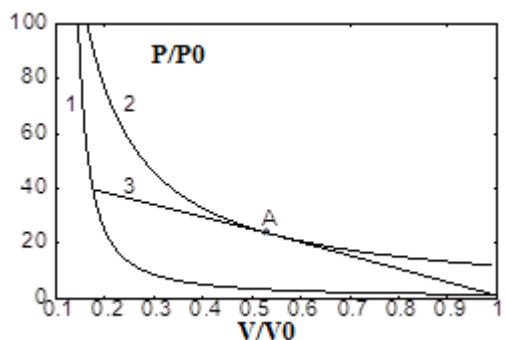


Рис. 4.135. P – V диаграмма сгорания смеси частиц алюминия с воздухом в детонационной волне ($p_0 = 101325$ Па, $T_0 = 298.15$ К, $m_{Al} / m_{Air} = 0.2$). 1 – ударная адиабата, 2 – равновесная детонационная адиабата, 3 – прямая Релея).

Как уже отмечалось, существует минимальная скорость распространения детонации – скорость детонации Чепмена-Жуге (точка минимума на графике D , кривая 1, рис. 4.136), ей соответствует точка A (рис. 4.135) – точка касания прямой Релея детонационной адиабаты. Ветвь кривой 2 (рис. 4.135) левее точки Чепмена – Жуге соответствует пересжатой детонации. Система (4.86)-(4.88) при значениях скорости детонации меньше скорости Чепмена-Жуге решений не имеет. Из рис. 4.137 видно, что в равновесной детонационной волне в заметных концентрациях содержится мелкодисперсная окись алюминия $Al_2O_3(ж)$ (кривая 5).

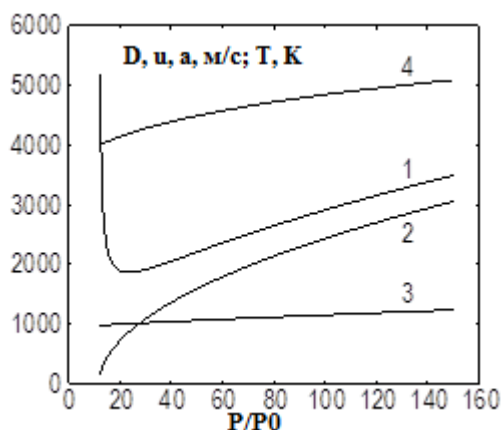


Рис. 4.136. Изменение скорости детонации (1), скорости (2), скорости звука (3) и температуры (4) продуктов сгорания вдоль равновесной детонационной адиабаты.

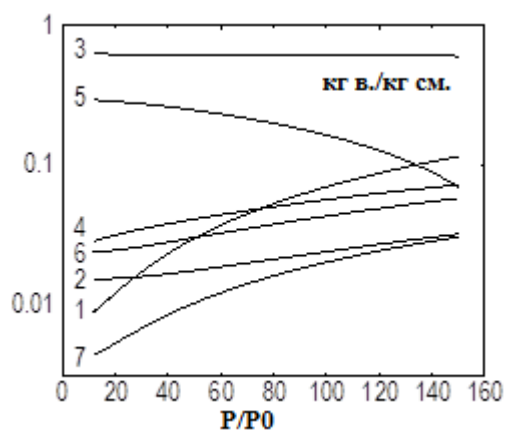


Рис. 4.137. Изменение массовых долей компонент (1 - Al_2O , 2 - O_2 , 3 - N_2 , 4 - NO , 5 - $Al_2O_3(ж)$, 6 - O) вдоль равновесной детонационной адиабаты.

На рис. 4.138 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, приведенными в [247]. Графики параметров (рис. 4.138а) имеют максимум при m_{Al}/m_{Air} , близком к стехиометрическому. В рассмотренном диапазоне m_{Al}/m_{Air} в равновесном составе в газовой фазе (рис. 4.138б) могут присутствовать мелкодисперсные алюминий, нитрат алюминия и окись алюминия. Точка минимума на графике температуры (рис. 4.138а, кривая 2) при $m_{Al}/m_{Air} \sim 0.65$ связана с появлением в продуктах сгорания жидкого нитрата алюминия (рис. 4.138б).

Исследовалось влияние на параметры детонации Чепмена-Жуге скоростной и температурной неравновесности газовой и дисперсной фаз. Рассчитанная минимальная

скорость детонации (рис. 4.138а, кривая 1 – маркер “◇”) и температура (кривая 3 – маркер “□”) отличаются от равновесной (кривые 1, 3 – сплошные линии) менее чем 0.5%. Давление (кривая 2, маркер “+”) в области $m_{Al}/m_{Air} > 0.5$ отличается более существенно, это связано с неполным испарением частиц.

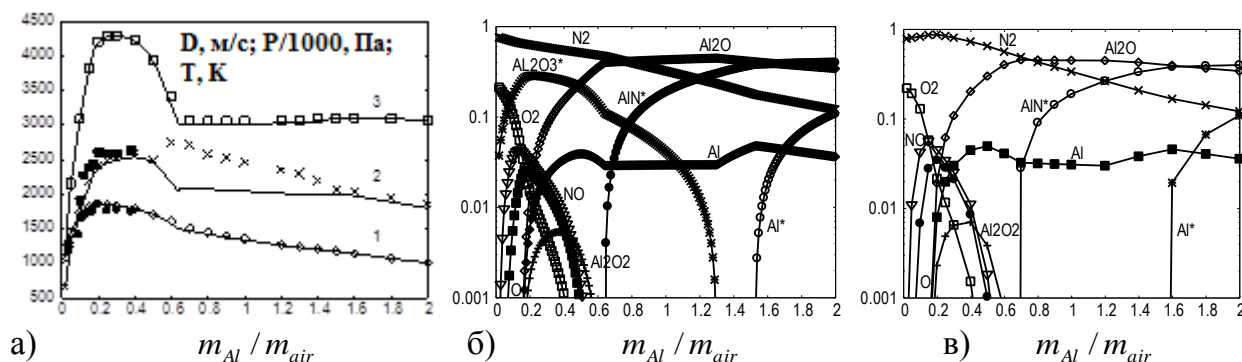


Рис.4.138. Зависимость параметров ДВ Чепмена-Жуге от отношения расходов частиц алюминия и воздуха. а) 1 – скорость ДВ Чепмена-Жуге, 2 – давление/1000, 3 – температура (простые маркеры – двухфазный расчет, жирные маркеры – эксперимент [247]); б), в) Массовые концентрации компонент (б – равновесный расчет, в – двухфазный).

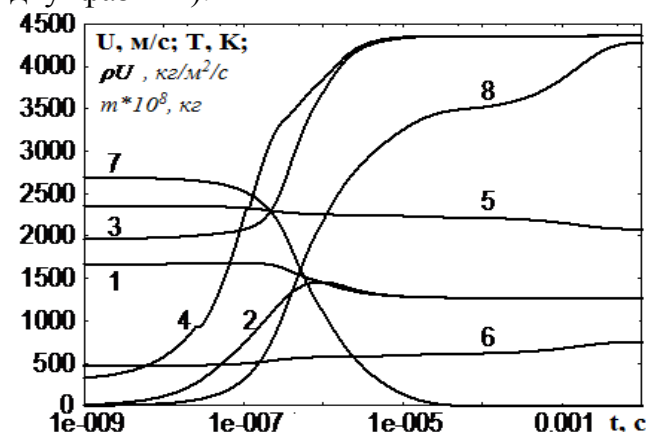


Рис. 4.139. Зависимость параметров течения в детонационной волне от лабораторного времени ($D=2000$ м/с, $m_{Al}/m_{Air}=0.2$). 1, 3, 5 – скорость, температура, расход продуктов сгорания; 2, 4, 6 – скорость, температура, расход частиц; 7 – масса $\cdot 10^8$ Al в частице, 8 – масса $\cdot 10^8$ Al₂O₃ в частице.

На рис. 4.139 приведены зависимости параметров продуктов сгорания в пересеченной детонационной волне при соотношении “алюминий – воздух”, близком к стехиометрическому, от лабораторного времени (время, отсчитываемое от момента прохождения ударной волны через точку пространства, где расположен наблюдатель). Расчет проводился до достижения состояния термодинамического равновесия. Скоростное и температурное равновесие (кривые 1-4, наступало примерно через 10 мкс. Расход частиц в процессе расчета увеличивался, а газа уменьшался (кривые 5-6). Алюминий (кривая 7), содержащийся в частице через 30 мкс полностью израсходовался, при этом количество окисла (кривая 8) 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 (рис. 4.138б) присутствует жидкий оксид алюминия, а в двухфазном (рис. 4.138в) - нет, так как он входит в состав частицы.

Моделирование детонации и дефлаграции частиц магния в воздухе [75, 84, 110, 111, 129, 188, 191, 212, 213, 243, 245]. Температура воздуха, приводящая к воспламенению газозвеси частиц магния в воздухе, может быть ниже температуры плавления магния [213], поэтому в работе предполагается, что в химических реакциях с кислородом участвует как “жидкий”, так и “твердый” магний. В процессе окисления частица становится многокомпонентной и состоит из магния (Mg) и оксида магния (MgO). В процессе теплого взаимодействия с воздухом частица нагревается и ее температура может достигать температур плавления и испарения магния ($T_m^{Mg}=923$ К, $T_b^{Mg}=1363$ К) и оксида магния ($T_m^{MgO}=3100$ К, $T_b^{MgO}=3600$ К).

Для описания поверхностных реакций используется кинетический механизм, включающий реакции испарения (конденсации) R1: $Mg^c \Leftrightarrow Mg$, R2: $MgO^c \Leftrightarrow MgO$ и реакции окисления магния R3: $2Mg^c + O_2 \Leftrightarrow 2MgO^c$. Стехиометрическое соотношение: $(m_{Mg}/m_{Air})_{CT}=0.354$. Скорости реакций R1-R2 в первом приближении можно найти из соотношений (4.91). Для нахождения скорости реакции R3 можно использовать диффузионную (4.91) и кинетическую (4.92) [1, 212] модели. Считается, что скорость притока кислорода к частице магния прямо пропорциональна объемной концентрации кислорода и площади поверхности капли, занятой магнием. Значение приведенной энергии активации $E = 12535$ К заимствовано из [1]. Значение константы $K = 59$ подбиралось из условия совпадения рассчитанной предельной температуры воспламенения одиночных сферических частиц магния (15-50 мкм) с экспериментальными данными, приведенными в [212]. Отличие не превысило 0.5% (рис. 4.125). В формуле (4.92) - $d_s^0 = 1$ мкм, $n = 2$, $m = 0$.

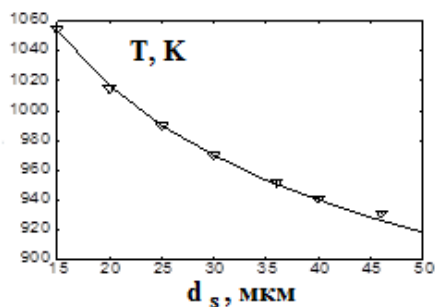


Рис. 4.140. Сравнение расчетных (сплошная кривая) и экспериментальных данных (маркер), приведенных в [1] предельных температур воспламенения сферических частиц магния разного размера ($p_0=101325$ Па, $T_0 = 293$ К).

Кинетическая модель (4.92) позволяет достаточно точно определить параметры воспламенения частиц магния, однако дает сильно завышенное значение температуры

горения [1]. Диффузионная модель (4.91), наоборот, не позволяет корректно определять предельную температуру воспламенения, но дает достоверную температуру сгорания частиц при высоких температурах газа [213]. В настоящей работе предлагается в качестве скорости притока кислорода к частице выбирать минимальную из рассчитанных по кинетической и диффузионной моделям “кинетически-диффузионная” модель. На рис. 4.141, 4.142 приведены результаты расчета испарения капель магния в воздухе для случая пересжатой детонационной волны в смеси с избытком воздуха. На рис. 4.141 сравниваются чисто диффузионная модель (кривые 1, 2) и кинетически-диффузионная модель (кривые 3, 4). Диффузионная модель приводит к существенно более быстрому воспламенению частиц, чем кинетически-диффузионная. При этом кривые изменения температуры близки, конечное равновесное состояние одинаковое. Из рис. 4.141 видно, что вначале более горячий воздух нагревает частицы и инициирует поверхностную экзотермическую реакцию образования оксида магния (R3), протекание которой приводит к нагреву частиц до температуры 3200 К, существенно превышающей температуру воздуха. При этом происходит плавление магния при температуре 923 К (рис. 4.141, 4.142), образование твердого, а при достижении температуры плавления (3100 К) жидкого оксида магния. Далее, так как массовая доля капель небольшая и магний полностью расходуется в процессе поверхностной реакции окисления (рис. 4.142, кривые 1, 2), происходит остывание капель и выравнивание температур газа и частиц (рис. 4.141). При этом оксид магния кристаллизуется (рис. 4.141, 4.142), к моменту времени $t = 0.1 \text{ мс}$ капля полностью состоит из твердого оксида магния MgO.

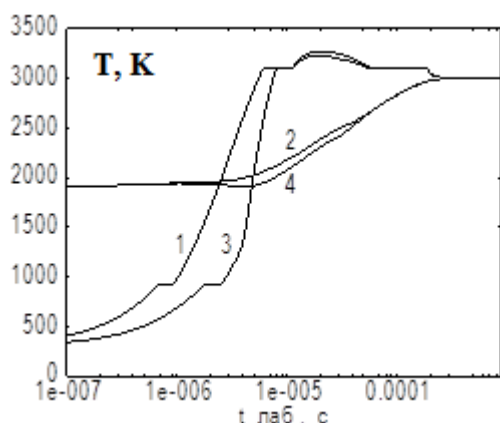


Рис. 4.141. Зависимость температуры частиц (кривые 1, 3) и газа (кривые 2, 4) от лабораторного времени ($D = 1950 \text{ м/с}$, $m_{Mg} / m_{Air} = 0.075$, $d_s^0 = 10 \text{ мкм}$).

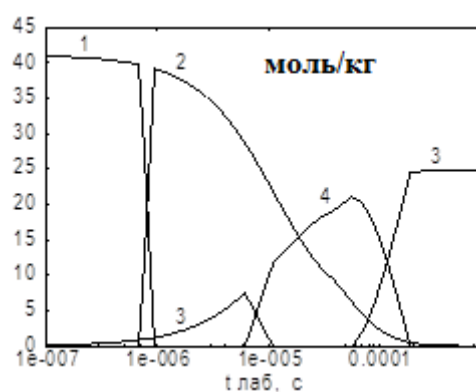


Рис. 4.142. Зависимость мольно-массовых концентраций твердого (кривая 1) и жидкого (кривая 2) Mg и твердого (кривая 3) и жидкого (кривая 4) MgO внутри частицы от лабораторного времени.

Для тестирования модели расчетным путем были воспроизведены три режима нагрева частиц магния [212] без воспламенения частиц, с воспламенением и погасанием, с воспламенением [212]. На рис. 4.143 приведены различные режимы нагрева частицы магния высокотемпературным потоком воздуха, соответствующие результатам исследований, приведенным в [212]. Первый режим (кривая 1) соответствует нагреву частицы без воспламенения до температуры воздуха. Второй режим (кривые 2) соответствует воспламенению с погасанием, при этом температура частицы достигает температуры плавления магния, частица плавится (горизонтальный участок на кривой), затем нагрев продолжается. Температура частицы на 200 К превышает температуру воздуха, но энергии химических реакций недостаточно для воспламенения, и частица остывает. Третий режим (кривые 3, 4) соответствует воспламенению частицы. Температура частицы магния достигает и даже превосходит температуру плавления окисной пленки магния. По окончании горения температуры частицы и воздуха становятся одинаковыми. В рассмотренном варианте смена режимов горения частицы происходит при температурах воздуха 850 К и 1016 К.

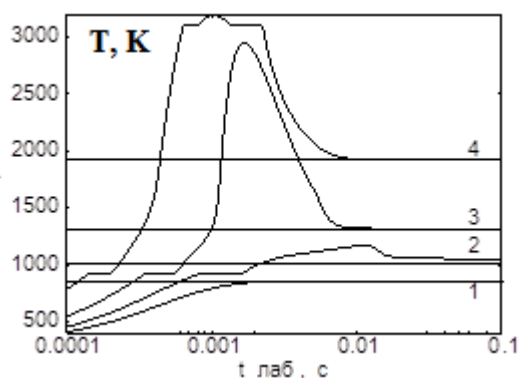


Рис. 4. 143. Различные режимы воспламенения одиночной сферической частицы магния [86,212]. 1 - $T_0 = 850$ К, 2 - $T_0 = 1016$ К, 3 - $T_0 = 1300$ К, 4 - $T_0 = 1920$ К ($p_0 = 101325$ Па, $d_s^0 = 20$ мкм, $T_{s0} = 298.15$ К).

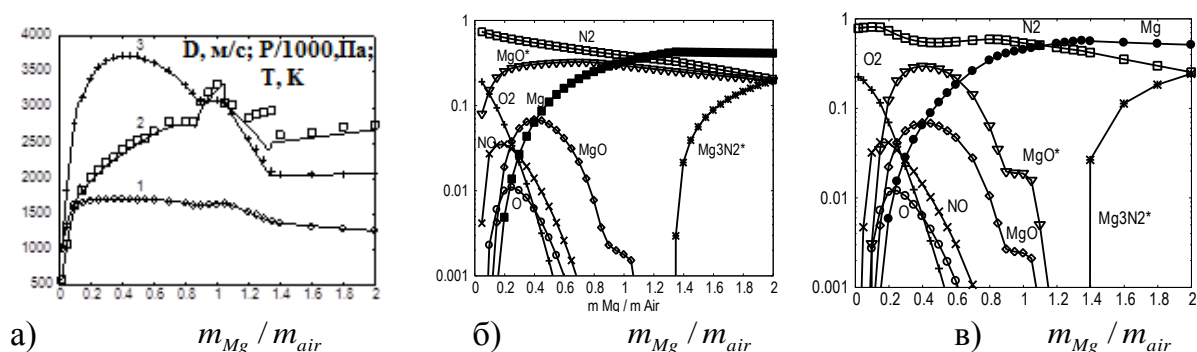


Рис.4.144. Зависимость параметров ДВ Чепмена-Жуге от отношения расходов частиц магния и воздуха. а) 1 – скорость ДВ Чепмена-Жуге, 2 – давление/1000, 3 – температура (маркеры – двухфазный расчет); б), в) Массовые концентрации компонент (б – равновесный расчет, в – двухфазный). MgO^* , $Mg_3N_2^*$ - в жидком состоянии.

Изучалась горючая смесь, состоящая из воздуха ($0.21 O_2 + 0.79 N_2$) 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, термодинамические свойства которых заимствовались из [121]. На рис. 4.144 приведены результаты расчетов параметров равновесной детонации Чепмена-Жуге для рассматриваемой смеси при нормальных условиях ($p_0 = 101325 \text{ Па}$, $T_0 = 298.15 \text{ К}$). Пиковые значения скорости детонации и температуры при сгорании частиц магния ниже, чем у алюминия (рис. 4.138). При этом при большом массовом содержании металла скорость детонации выше в смеси магния с воздухом. В равновесных продуктах сгорания магния (рис. 4.144б) присутствуют в виде мелких частиц оксид магния, а при $m_{Mg}/m_{Air} > 1.35$ нитрид магния, в неравновесных расчетах (рис. 4.144в) при $m_{Mg}/m_{Air} > 1.1$ мелкодисперсный оксид магния отсутствует.

Исследовалось влияние на параметры детонации Чепмена-Жуге скоростной и температурной неравновесности газовой и дисперсной фаз. Рассматривались частицы магния с начальным диаметром 1 мкм.

U , м/с;
 T , К;
 ρU , кг/м²/с
 $m \cdot 10^8$, кг

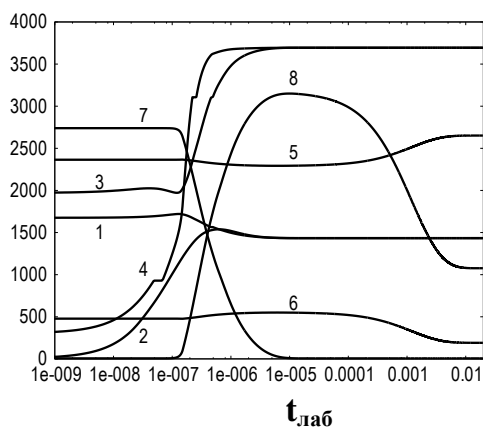


Рис. 4.145. Зависимость параметров течения в детонационной волне от лабораторного времени ($D=2000$ м/с, $m_{Mg}/m_{Air}=0.2$). 1, 3, 5 – скорость, температура, расход продуктов сгорания; 2, 4, 6 – скорость, температура, расход частиц; 7 – масса $\cdot 10^8$ Mg в частице, 8 – масса $\cdot 10^8$ MgO в частице.

На рис. 4.145 приведены графики изменения параметров продуктов сгорания в пересжатой детонационной волне при соотношении “магний – воздух”, близком к стехиометрическому. Скоростное и температурное равновесие (кривые 1-4), наступало примерно через 6 мкс. На графике температуры содержатся полочки, соответствующие температурам плавления магния и оксида магния. Магний, содержащийся в частице (кривая 7), через 10 мкс полностью израсходовался, при этом количество оксида магния в частице (кривая 8) выросло, а затем уменьшилось из-за испарения. В газовой фазе при $m_{Mg}/m_{Air} < 1.1$ в двухфазном расчете (рис. 4.144 в) присутствует мелкодисперсный оксид магния.

Помимо детонации было рассмотрено течение в волне дефлаграции. На рис. 4.146 приведены результаты расчета параметров равновесной волны горения для смесей, состоящих из частиц магния и воздуха, при повышенной температуре, и скоростном

равновесии фаз в начальный момент времени. Максимальная скорость воздуха (кривая 1), при которой существовало решение, изменялась от 245 м/с при $m_{Mg} / m_{Air} = 0.05$, до 80 м/с при $m_{Mg} / m_{Air} = 2$, давление по сравнению с начальным уменьшалось примерно в 2 раза (кривая 3), график температуры содержал пологий максимум при $m_{Mg} / m_{Air} = 0.2 - 0.8$, точка излома на графиках соответствует началу образования в продуктах сгорания нитрида магния (рис. 4.147).

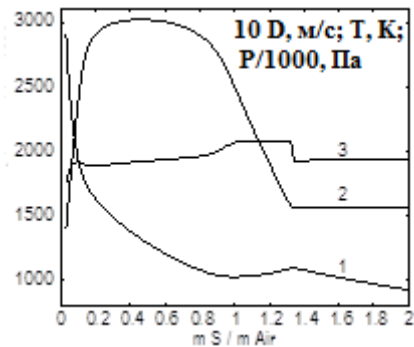


Рис. 4.146. Зависимость максимальной скорости горения (1), температуры (2), давления (3) от отношения массы частиц Mg к массе воздуха ($p_0 = 101325$ Па, $T_0 = 1000$ К).

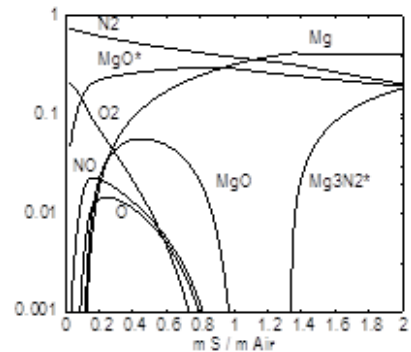
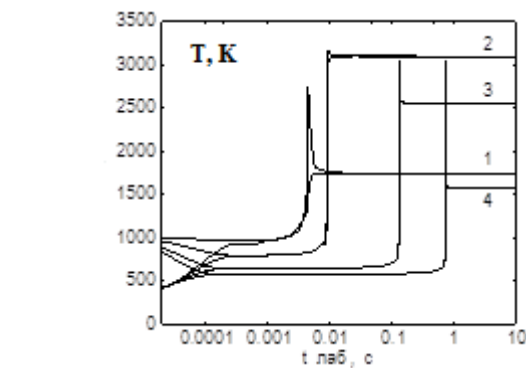
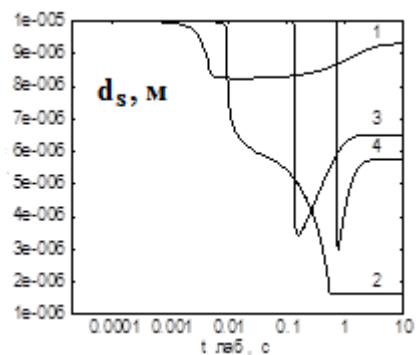


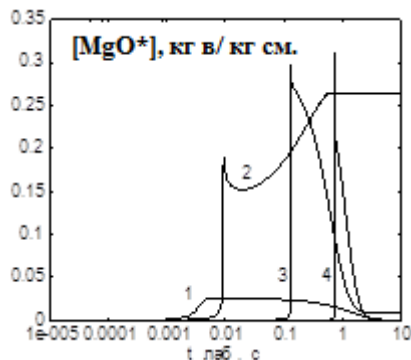
Рис. 4.147. Зависимость массовых долей компонент от отношения массы магния к массе воздуха (MgO^* , $Mg_3N_2^*$ - в жидком состоянии).



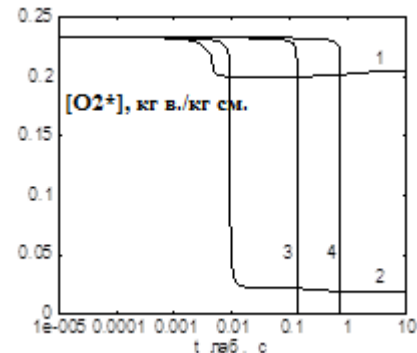
а)



б)



в)



г)

Рис. 4.148. Зависимость температуры (а), диаметра частиц (б), массовой доли мелкодисперсного окисла (в), концентрации кислорода (г) в волне горения от лабораторного времени. $m_{Mg} / m_{Air} = \{ 0.05 - \text{кривая 1}, 0.40 - 2, 1.0 - 3, 1.5 - 4 \}$.

Также было проведено численное моделирование течения в стационарной волне горения при заданных в начальном сечении равенстве скоростей газа и частиц и температуре воздуха - $T_0 = 1000$ К при различных массовых содержаниях частиц магния в воздухе (рис. 4.148). Необходимо отметить, что начальная температура воздуха сильно влияет на время задержки воспламенения и очень слабо - на конечное равновесное состояние. Графики функций параметров течения содержат более резкие максимумы (рис. 4.148а – 4.148д), чем при моделировании детонации. В целом качественное поведение процесса не меняется. При моделировании волн детонации и горения суммарные концентрации оксида магния в частицах и мелкодисперсном окисле при переходе системы в равновесное состояние соответствуют концентрации MgO^* , полученным при расчете равновесной адиабаты.

Моделирование детонации и дефлаграции частиц бора в воздухе [75, 91, 111, 113, 123, 125, 126, 147, 213, 220, 256]. 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 [256]. 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 . Для описания поверхностных реакций используется кинетический механизм, включающий: реакции испарения (конденсации) R1: $B^C \Leftrightarrow B$, R2: $B_2O_3^C \Leftrightarrow B_2O_3$ и реакции окисления бора R3: $4B^C + 3O_2 \Leftrightarrow 2B_2O_3^C$. Скорости реакций R1-R2 в первом приближении можно найти из соотношений (4.91'). Для нахождения скорости реакции R3 можно использовать диффузионную (4.91') и кинетическую (4.92') модели. Считается, что скорость притока кислорода к частице бора прямо пропорциональна объемной концентрации кислорода, площади поверхности капли, занятой бором. Также в экспериментальных работах отмечается, что скорость

воспламенения возрастает при увеличении размера частицы. Для описания процесса воспламенения частицы предлагается использовать кинетическую модель, константы K , n , m , E при этом подбираются из условия совпадения с экспериментальными данными рассчитанных минимальных температур воздуха, необходимых для самовоспламенения частиц.

$$\bullet^{R3} m_{O_2} = -2\pi d \frac{m_B \rho_S}{\rho_B m_S} \delta_{mi}^0 \bar{D}_i \bar{p} \ln \left(\frac{1 - \gamma_{O_2} \mu_{O_2}}{1 - \gamma_{O_2}^S \mu_{O_2}} \right), \quad (4.94')$$

$$\bullet^{R3} m_{O_2} = -\pi d^2 \frac{m_B \rho_S}{\rho_B m_S} \delta_{mi}^0 K \left(\frac{T_S}{T_m^B} \right)^m \left(\frac{d_S}{d_S^0} \right)^n \rho \exp(-E/T_S) (\gamma_{O_2} - \gamma_{O_2}^S). \quad (4.95')$$

В расчетах $E = 13002$ К, $n=1$, $m=2$, $d_S^0 = 100$ мкм, $K = 198$. Равновесная концентрация $\gamma_{O_2}^S$ находится из условия термодинамического равновесия для реакции R3. 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. Расчетным путем получено, что температура самовоспламенения обратно пропорциональна диаметру частицы и прямо пропорциональна давлению воздуха (рис. 4.149). Характерная зависимость температуры частицы бора от времени представлена на рис. 4.150. В начале частица медленно нагревается до температуры газа, затем в результате экзотермической реакции окисления бора (R3) температура частицы начинает превышать температуру газа, если затем следует резкий скачек температуры (кривые 1, 3, 5), то воспламенение происходит, если нет (кривые 2, 4, 6) – то считается, что воспламенение не происходит.

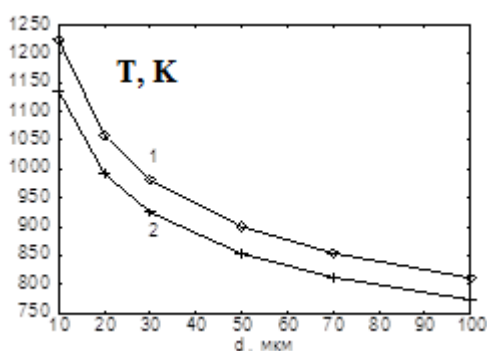


Рис. 4.149. Зависимость минимальной температуры самовоспламенения частицы бора от начального диаметра (1 – 101325 Па, 2 – 202650 Па).

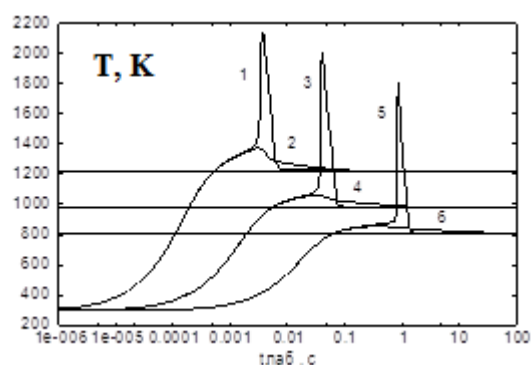


Рис. 4.150. Зависимость температуры одиночной частицы бора различного диаметра от времени при различных температурах воздуха ($p_0 = 101325$ Па, $d_S = 10$ мкм : 1-1222 К, 2 – 1221 К -; $d_S = 30$ мкм : 3-980 К, 4 – 979 К, $d_S = 100$ мкм : 5-810 К, 2 – 809 К).

Особенностью воспламенения бора является двухэтапность процесса. Частица вначале прогревается до температуры газа, затем наступает этап медленного горения частицы с температурой, ненамного превышающей температуру газа, и затем следует этап догорания с резким повышением температуры частиц (кривая 5, рис. 4.149). Необходимо отметить, что в рассмотренных вариантах температура частиц ниже температуры плавления бора. Данный факт требует дополнительного анализа и возможно некоторой корректировки модели.

Рассчитывались параметры детонации Чепмена – Жуге по газофазной равновесной и по двухфазной моделям (рис. 4.151). Параметры детонации близки при $m_B / m_{air} < 0.5$. Диапазон отношений масс бора к массе воздуха, при котором существует высокоскоростная детонация, существенно уже, чем в случае с алюминием и магнием. В состав продуктов сгорания, рассчитанных по однофазной модели (рис. 4.151), 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 газофазный. В двухфазном расчете в равновесном составе присутствует только конденсированный нитрид бора при $m_B / m_{air} > 0.3$.

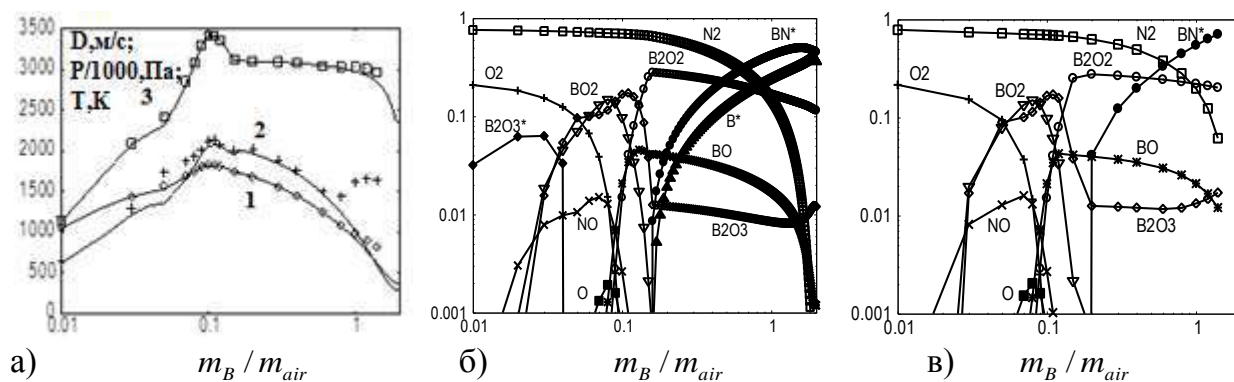


Рис.4.151. Зависимость параметров ДВ Чепмена-Жуге от отношения расходов частиц бора и воздуха. а) 1 – скорость ДВ Чепмена-Жуге, 2 – давление/1000, 3 – температура (маркеры – двухфазный расчет); б), в) Массовые концентрации компонент (б) – равновесный расчет, в) – двухфазный)

На рис. 4.152 приведены 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 (кривые 1-4), наступало примерно через 30 мкс, на графике температуры частиц (кривая 4) имеется полочка, соответствующая температуре плавления бора. Расход частиц в процессе расчета сначала увеличивался из-за реакции окисления бора и образования

оксида бора (кривые 7, 8), а затем уменьшился до нуля, так как весь бор перешел в оксид бора, который испарился (кривая 8). В газовой фазе при этом твердая фаза отсутствует.

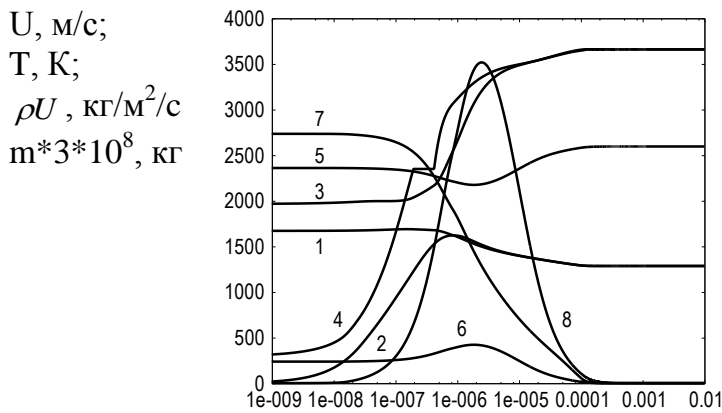


Рис. 4.152. Зависимость параметров течения в детонационной волне от лабораторного времени ($D=2000$ м/с, $m_B/m_{air}=0.1$). 1, 3, 5 – скорость, температура, расход продуктов сгорания; 2, 4, 6 – скорость, температура, расход частиц; 7 – масса $\cdot 3 \cdot 10^8$ В в частице, 8 – масса $\cdot 3 \cdot 10^8$ B_2O_3 в частице.

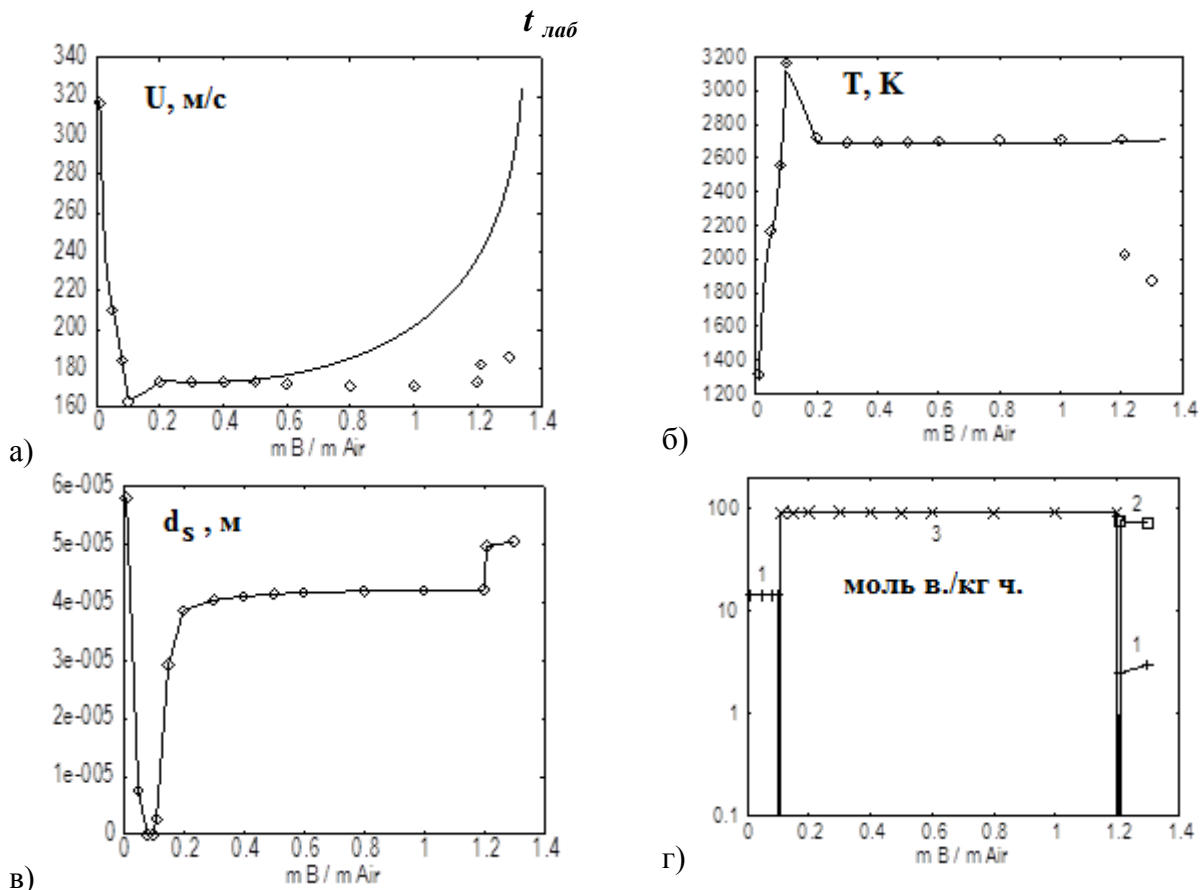


Рис. 4.153. Зависимость параметров частицы за стационарной волной горения от отношения массы бора к массе воздуха ($p_0 = 101325$ Па, $T_0 = 1000$ К).

а) Максимальная скорость газа при которой существует стационарная волна горения. б) Температура. в) Диаметр частицы; г) Состав частицы, 1– B_2O_3 (ж), 2–В(тв), 3 – В (ж) (сплошная линия – идеальный расчет, маркеры – двухфазный).

Была проведена серия расчетов с целью определения максимальной скорости воздуха, при которой существует стационарная волна дефлаграции в двухфазной горючей смеси частиц бора с воздухом. Начальная температура воздуха составляла 1000

К, диаметр частиц рассматривался в диапазоне 10-100 мкм, отношение масс частиц и воздуха (m_B/m_{air}) варьировалось от 0.01 до 1.3. Состав продуктов сгорания считался равновесным, при этом в нем учитывались конденсированные компоненты. Рассчитанная максимальная скорость потока совпадает с идеальным значением вплоть до $m_B/m_{air}=0.5$ (рис.4.153а) и в рассмотренном диапазоне не зависит от диаметра частиц. Температура в волне (рис.4.153б) горения близка к идеальной при $0.01 < m_B/m_{air} < 1$. Частицы полностью испаряются только в узкой зоне при соотношении $m_B/m_{air} < 1$. Частицы полностью испаряются только в узкой зоне при соотношении m_B/m_{air} , близком к стехиометрии (рис. 4.153в), при этом при избытке окислителя частица состоит из оксида бора, при избытке горючего – из бора, при $m_B/m_{air} > 1/2$ – состав частицы двухкомпонентный и включает “твердый” бор и “жидкий” оксид бора (рис. 4.153г).

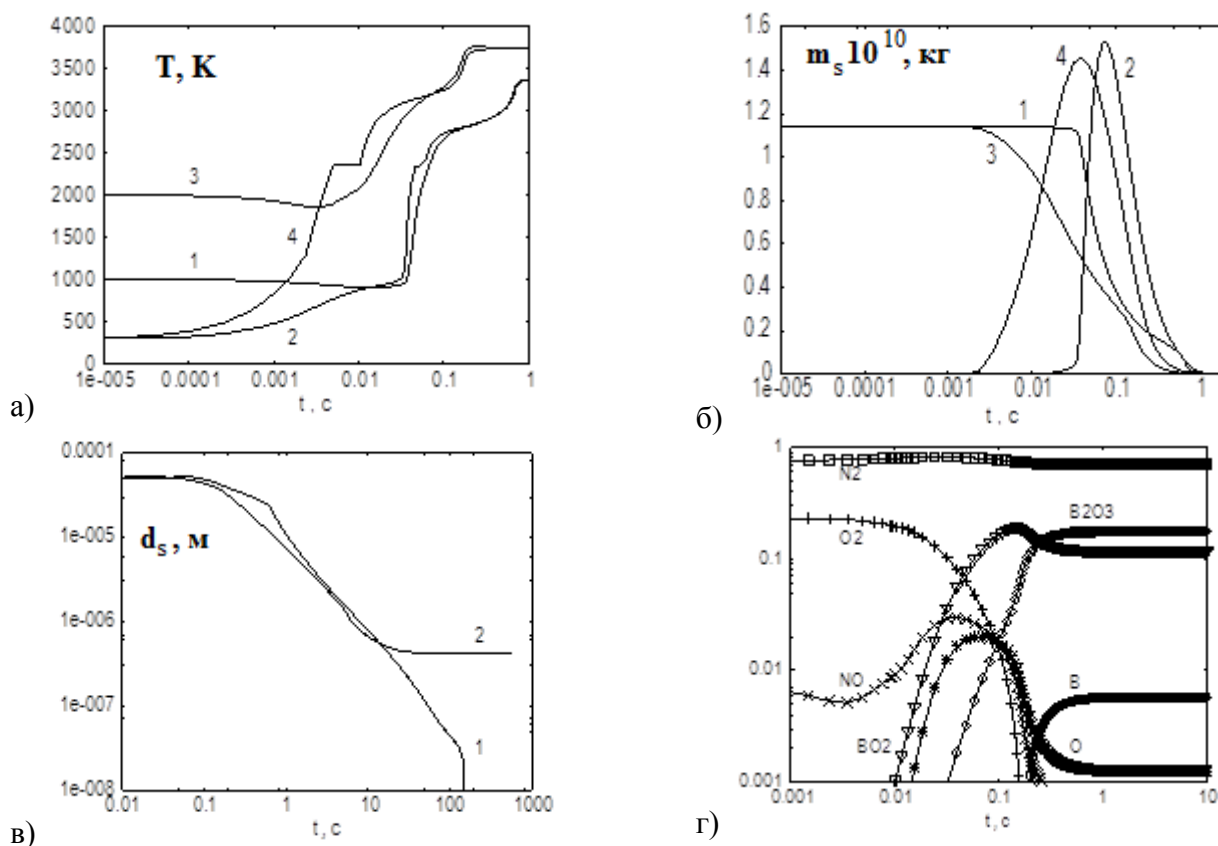


Рис. 4.154. Зависимость параметров газа и частиц ($m_B/m_{air}=0.1$) от собственного времени. а) Температура: (1, 3) - газа, (2,4) – частиц; б) Масса вещества в капле. (1,3) – В, (2, 4) – B_2O_3 (1,2 – начальная температура газа $T_H=1000 K$, 3, 4 – $2000 K$). в) Диаметр частиц 1– $T_H=1000 K$, 2– $T_H=2000 K$. г) Массовые доли компонентов ($T_H=2000 K$).

Исследовалось изменение параметров, характеризующих частицы бора в стационарной волне горения (рис. 4.154), в зависимости от начальной температуры воздуха. В начале, частица медленно нагревается до температуры газа (рис. 4.154а), затем происходит ускорение процесса с активным образованием оксида бора (рис.

4.154б), далее - замедление процесса нагрева, связанное с конкурированием процессов окисления бора и испарением оксида бора (рис. 4.154аб). При начальной температуре 1000 К частица испаряется полностью (рис. 4.154в). При начальной температуре 2000 К наблюдается двухфазное равновесие (рис. 4.154в), однако диаметр частицы составляет ~ 0.1 мкм. Основными компонентами продуктов сгорания на момент окончания процесса являются N₂, VO₂, B₂O₃, B (рис. 4.154г).

Исследовалась зависимость протекания процессов в волне горения от соотношения бора и воздуха $m_B / m_{air} = 0.08-0.2$ (рис. 4.155). Максимальная температура достигается при $m_B / m_{air} = 0.1$ и превосходит 3100 К (рис. 4.155а), давление в волне горения падает почти в 2 раза, при этом имеется локальный рост давления в начале процесса горения (рис. 4.155б), частицы полностью испаряются только при $m_B / m_{air} = 0.1$ (рис. 4.155в), при $m_B / m_{air} = 0.08$ в составе продуктов сгорания присутствует мелкодисперсный оксид бора (рис. 4.155г).

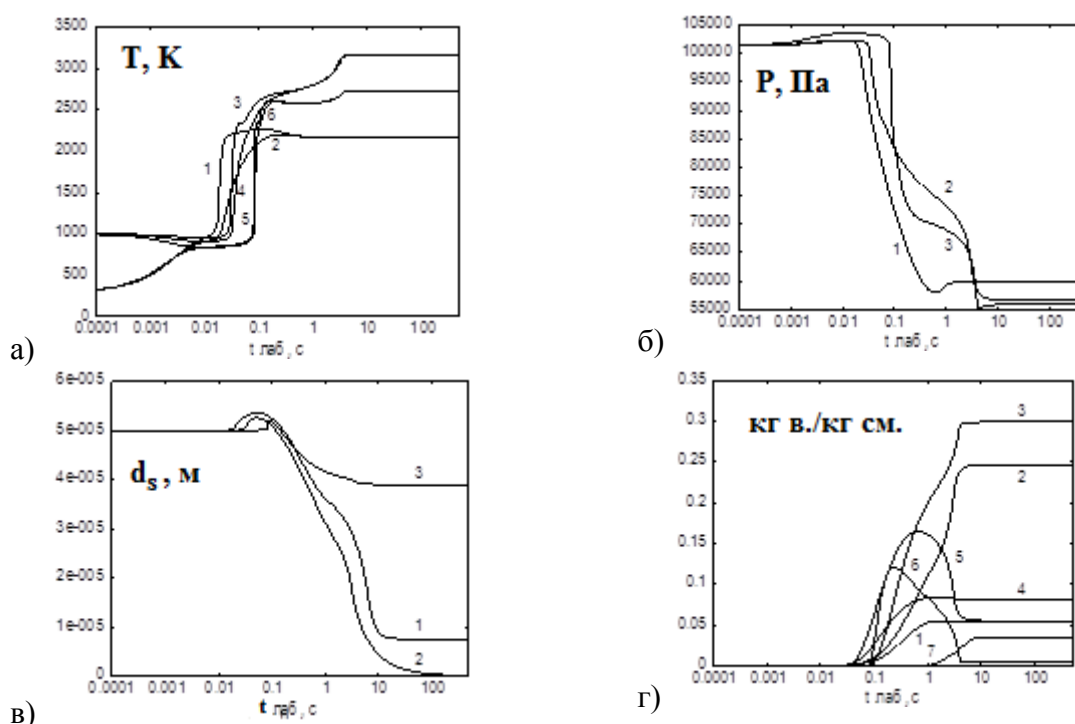


Рис. 4.155. Зависимость параметров процесса от лабораторного времени в волне горения. а) Температура частиц ($d_s^0=50\text{мкм}$) и газа (1,3,5 – температура частиц, 2,4,6 – температура газа, 1,2 - $m_B / m_{air}=0.08$, 3,4 – 0.1, 5,6 – 0.2.; б) Давление продуктов сгорания 1 - $m_B / m_{air}=0.08$, 2 – 0.1, 3 – 0.2; в) Диаметр частицы 1 - $m_B / m_{air}=0.08$, 2 – 0.1, 3 – 0.2; г) Массовые концентрации. 1, 2, 3 – B₂O₃; 4,5,6 – VO₂; 7 – B₂O₃*. 1,4,7 - $m_B / m_{air}=0.08$, 2,5 – 0.1, 3,6 – 0.2.

Также были проведены исследования моделирования с помощью построенной модели динамики изменения состава капли при различных соотношениях бора и воздуха

(рис. 4.156) на больших временах протекания процесса (до достижения термодинамического равновесия). Необходимо отметить, что полученные результаты сильно зависят от веществ, учитываемых в составе продуктов сгорания. Расширение списка веществ (включение дополнительных соединений бора с кислородом) может внести существенные коррективы в полученные результаты. Уменьшение концентрации оксида бора в продуктах сгорания может привести в ряде случаев к полному испарению частиц. Расчеты показывают, что практически во всех вариантах частица полностью не испаряется. При соотношениях $m_B/m_{air}=0.01-0.08$ в конце волны горения частица состоит из жидкого оксида бора (рис. 4.156аб), при $m_B/m_{air}=0.1-1.1$ оксид бора полностью испаряется, и частица состоит из жидкого бора (рис. 4.156вгд), при $m_B/m_{air}=1.3$ бор в составе частицы кристаллизуется (рис. 4.156е).

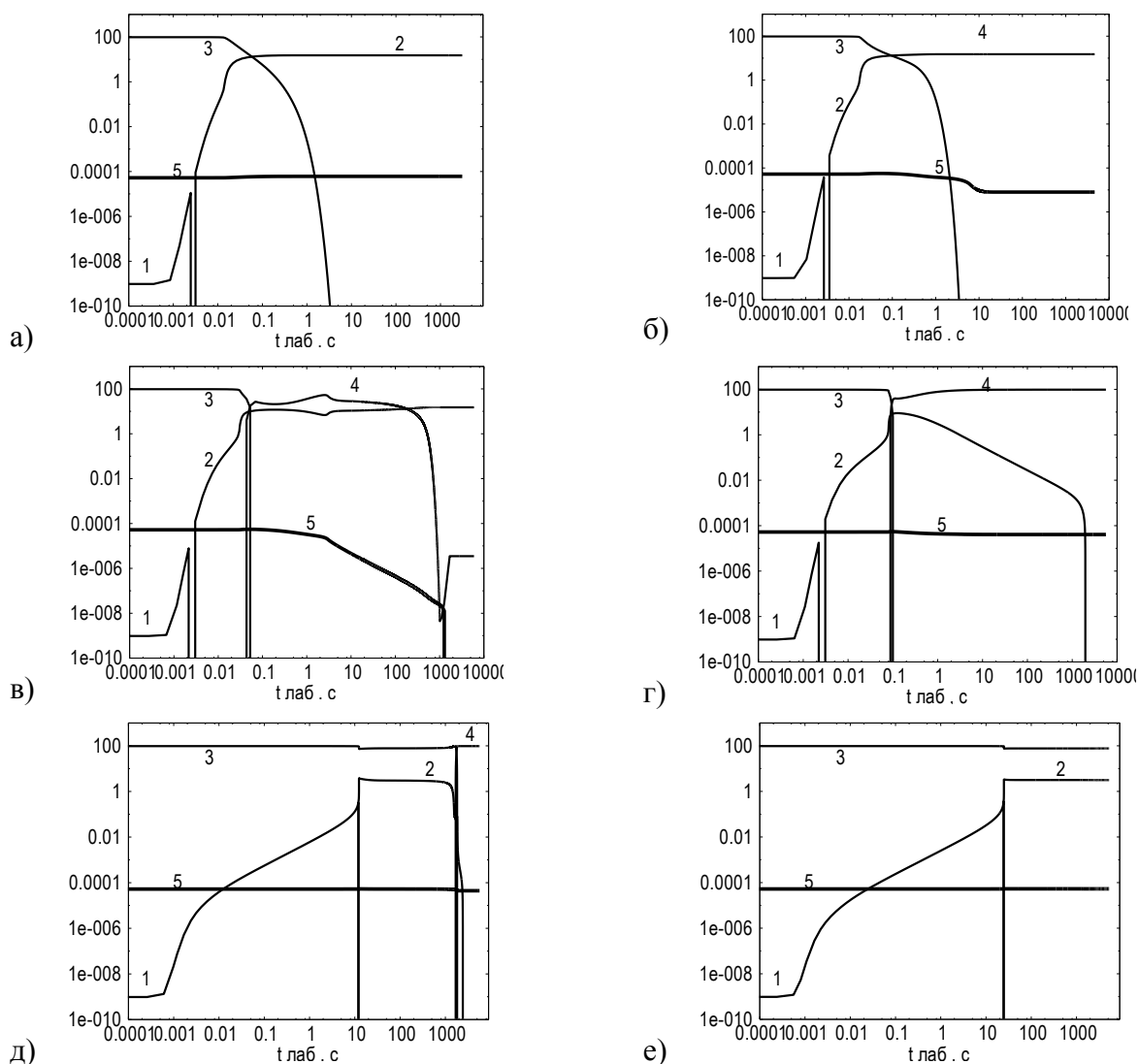


Рис. 4.156. Изменение состава капли от лабораторного времени 1 – В₂О₃ (гв), 2 – В₂О₃ (ж), 3 – В (гв), 4 – В (ж), 5 – диаметр капли. а) $m_B/m_{air}=0.01$; б) $m_B/m_{air}=0.05$; в) $m_B/m_{air}=0.1$; г) $m_B/m_{air}=0.2$; д) $m_B/m_{air}=1.1$; е) $m_B/m_{air}=1.3$.

Особенности структуры волны детонации при избытке частиц металла

При численном исследовании детонации смесей алюминия с воздухом и бора с воздухом (Таблица 4.10) 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. Данные, относящиеся к частичному равновесию, в таблицах отмечены цифрой 1, к полному – цифрой 2.

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, и как следствие, образованием Al_2O в потоке, а также с конденсацией нитрида алюминия (AlN). Для смеси “бор+воздух” (Таблица 4.10) 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.

Таблица 4.10. Частичное и полное равновесие смесей алюминия и бора с воздухом.

m_{Al} / m_{Air}	0.6	0.8	1.2	1.6	2.0	m_B / m_{Air}	0.3	0.5	1.8	1.0	1.4	
$d_s, \text{ мкм}$	1	0.66	0.63	0.59	0.82	0.9	1	0.86	1.0	1.0	1.0	1.0
	2	0.63	0.47	0.37	0.04	0.008	2	0.64	0.73	0.77	0.78	0.8
$T, \text{ К}$	1	3375	3225	3245	3245	3245	1	2675	2355	2314	2175	1845
	2	3425	3057	3050	3105	3071	2	3090	3060	3036	3035	2961
$P, \text{ МПа}$	1	2.80	2.59	2.66	2.73	2.56	1	2.60	2.43	1.50	1.47	1.27
	2	2.74	2.46	2.35	2.1	1.86	2	1.9	1.66	1.44	1.62	1.64
AlN^*	1	0	0.1	0.14	0.23	0.34	1	0	0	0	0	0
	2	0	0.09	0.26	0.37	0.39	2	0.12	0.27	0.45	0.54	0.7
Al^*	1	0	0.06	0.27	0.25	0.23	1	0	0	0	0	0
	2	0	0	0	0.02	0.11	2	0.27	0.25	0.23	0.22	0.2
Al_2O	1	0.35	0.25	0.13	0.08	0.04						
	2	0.40	0.45	0.44	0.39	0.34						

Необходимо отметить, что детонация горючих смесей частиц металлов в воздухе является чрезвычайно сложным многомерным процессом, который может быть адекватно описан только с использованием средств многомерного моделирования [171, 172, 191], элементом которого являются приведенные в работе физико-математическая модель и вычислительные алгоритмы.

Предлагаемая физико-математическая модель апробирована в широком диапазоне отношений начальных массовых расходов частиц алюминия, магния и бора в воздухе. Расчетным путем получена тонкая структура стационарной детонационной волны, включающая нагрев, плавление, испарение, воспламенение и изменение состава частиц; воспламенение и соответствующее изменение состава газофазных продуктов сгорания; образование мелкодисперсных частиц алюминия, магния и бора, а также их оксидов и нитридов. Исследовано влияние массового расхода частиц металлов на минимальную скорость стационарной детонации. Показано, что параметры стационарной детонационной волны асимптотически стремятся к равновесным значениям – точке на равновесной детонационной адиабате. При этом при избытке алюминия и бора в воздухе может реализоваться состояние частичного равновесия, параметры в котором заметно отличаются от соответствующих параметров при полном равновесии. В целом показано, что разработанная модель является физически непротиворечивой и внутренне согласованной, позволяющей получать результаты, качественно совпадающие (в ряде случаев и количественно) с экспериментальными данными.

Выводы

В четвертой главе работы в автомоделной и неавтомоделной постановках численно решена задача о распаде произвольного разрыва в детонирующем газе, для случая, когда продукты сгорания представляют собой смесь совершенных газов при учете равновесного и неравновесного протекания химических реакций. Решена задача о стационарной детонационной волне в канале переменного сечения со сверхзвуковым потоком на входе и выходе, в случае, когда горючая смесь и продукты сгорания представляют собой смесь совершенных газов. Течение до детонационной волны считается “замороженным”, а за детонационной волной “равновесным”. В одномерной нестационарной постановке с использованием оригинального сеточно-характеристического метода численно исследована задача распада произвольного разрыва в многокомпонентных газовых и многофазных горючих смесях. Получена детальная картина течения образования и распространения ударных и детонационных волн. Исследована структура стационарных детонационных волн в газовых, газокапельных и металлогазовых горючих смесях.

ГЛАВА 5. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЙ С ГОМОГЕННОЙ КОНДЕНСАЦИЕЙ

Введение. Классическая теория конденсации.

В последние годы проводятся интенсивные исследования неравновесной конденсации. Интерес к явлениям конденсации (кластеризации) связан с тем, что эти явления имеют фундаментальное значение в физике атмосферы, астрономии, аэродинамике, атомной физике и материаловедении [109, 205, 209, 225, 233, 235, 250]. Разнообразны практические и технические приложения результатов исследований конденсации. 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 [205, 209, 225, 233, 235, 250]. Также интерес к исследованию неравновесной кластеризации связан с созданием новых технологических процессов таких, как получение нанопорошков, кластерное напыление, создание лазерных сред, разделение изотопов и др. В задачах современной технологии получения металлических и полупроводниковых нанопленок необходимо уметь предсказывать протекание конденсации таких веществ как *Al, Pb, Cu, Ag, Au, Cd, Pb, Te* и др. Расширение списка изучаемых веществ и диапазонов изменения параметров, характеризующих процесс неравновесной гомогенной конденсации, способствовало появлению новых, более сложных моделей этого процесса. Для описания неравновесного гомогенного кластерообразования широко применяется классическая модель конденсации [109, 205, 209, 225, 233, 235, 250], в которой выводятся уравнения для описания изменения функции распределения кластеров по размерам. Во многих работах для описания функций распределения используются моментные методы [109, 117, 205, 225, 233, 235], которые не требуют вычисления значений самой функции распределения, что существенно уменьшает количество вычислений по сравнению с методами, которые рассчитывают функцию распределения. Однако при описании процесса конденсации благородных газов и паров металлов использование системы уравнений для моментов функции распределения может приводить к качественному несовпадению экспериментальных и расчетных данных по величине среднего размера кластера [56]. Поэтому в настоящей работе развивается подход, связанный с расчетом функции распределения кластеров по размерам, так называемая квазихимическая модель

неравновесной конденсации [55, 56]. В этом случае для корректного описания процесса кластерообразования необходимо решать системы, включающие 1000 - 10000000 обыкновенных дифференциальных уравнений [40, 42, 55, 56, 301]. Увеличение числа решаемых уравнений предъявляет повышенные требования к используемым при математическом моделировании численным методам, вычислительным алгоритмам и разностным сеткам. Отметим, что при моделировании течений без учета протекания релаксационных процессов выбор независимых переменных слабо влияет на быстродействие метода, а в основном обусловлен простотой задания граничных условий и условием сгущения сетки в областях больших градиентов параметров. При моделировании протекания релаксационных процессов быстродействие очень сильно зависит от того, совпадают ли координатные линии с линиями тока (или траекториями в нестационарном случае) газа. Это объясняется тем, что при моделировании релаксационных процессов число кинетических параметров значительно превосходит число газодинамических. При несовпадении линии тока с разностной сеткой большая часть вычислительных ресурсов тратится на интерполяцию кинетических параметров на линию тока или процедуры контроля точности, выполнения законов сохранения в случае использования методов расщепления. Необходимость этого обусловлена тем, что вдоль линии тока (или траектории) релаксационные процессы описываются обыкновенными дифференциальными уравнениями. Поэтому при выборе независимых переменных следует (по возможности) отдавать предпочтение таким, в которых линии тока и координатные линии совпадают.

Математическое моделирование процесса образования нанокластеров в потоках газа позволяет более глубоко изучить процесс кластерообразования в экспериментальных установках, а также оптимизировать промышленные технологические установки. Так для изучения неравновесной кластеризации широко используются [109, 205, 209, 225, 233, 235] ударные трубы, в которых в результате мгновенного удаления мембраны, разделяющей камеры с высоким и низким давлениями, образуется веер волн разрежения, в котором пары переохлаждаются и начинают конденсироваться. В технологических установках для получения ультрадисперсных порошков и тонких пленок возникает задача о расширении паров в сферической вакуумной камере. Интерес представляет как начальная стадия процесса - неограниченное расширение в вакуум, так и изменение параметров потока в результате

столкновения расширяющегося газа со стенками камеры. В технологических установках для нанесения тонких пленок, для получения кластерного пучка применяется генератор кластеров, состоящий из тиглей и сопла. Для развития этой технологии необходимо уметь предсказывать свойства кластеров в выходном сечении сопла (средний размер кластеров, функцию распределения кластеров по размерам, их скорость, температуру и т.д.) и их зависимость от параметров пара в тиглях. Кластеризация может иметь место в том случае, когда парциальное давление одного из компонентов смеси в процессе расширения становится больше его давления насыщения. Вообще говоря, при неограниченном расширении в вакуум должна последовательно происходить конденсация всех компонентов смеси [209, 225, 233, 250].

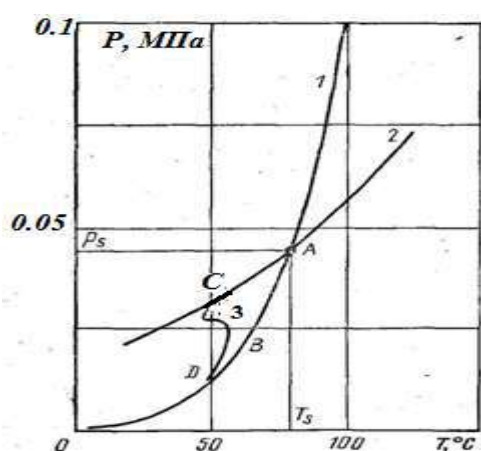


Рис. 5.1 p — T -диаграмма для паров воды:
 1 — кривая насыщения $p_{\infty} = p_{\infty}(T)$; 2 — адиабата Пуассона (замороженное течение); 3 — неравновесное течение .

На рис. 5.1 представлена типичная P — T -диаграмма для паров [109, 205, 209, 225, 233, 235, 250],. Если после достижения точки насыщения A (точки росы) дальнейшее расширение происходит термодинамически равновесно, то давление и температура смеси связаны между собой уравнением Клапейрона — Клаузиуса, и процесс расширения соответствующего компонента смеси будет уже происходить не по адиабате Пуассона AC , а по кривой AB (рис. 5.1), при этом газовая фаза этого компонента будет конденсироваться. Однако, как показывают многочисленные экспериментальные данные, кластеризация в сечении, соответствующем точке A , на некотором участке вниз по потоку от него отсутствует, а процесс протекает вдоль некоторой кривой ACD , вдоль которой конденсация происходит неравновесно. Неравновесные параметры течения являются промежуточными между параметрами равновесного расширения и соответствующей первоначальному расширению адиабате Пуассона. При равновесном процессе расширения выделяется теплота конденсации; давление, температура и импульс в этом случае больше, чем при неравновесном течении

В равновесных и замороженных течениях с конденсацией энтропия смеси остается постоянной и равной энтропии в начальном состоянии. Однако по отдельности энтропия газовой и жидкой фаз в равновесном течении изменяется. Изменение состояния пара вдоль AC сопровождается более интенсивным снижением температуры, чем при расширении по кривой насыщения. Таким образом, задержка кластеризации в процессе расширения сопровождается более интенсивным снижением температуры пара, которая оказывается ниже температуры насыщения при данном давлении. Задержка кластеризации в высокоскоростных потоках связана с тем, что в газе очень мало или вовсе отсутствуют центры кластеризации.

Состояние переохлажденного газа не является устойчивым, так как малые возмущения могут перевести его в состояние насыщения, которое является абсолютно устойчивым [250]. Состояние перенасыщения может быть снято либо за счет гетерогенной кластеризации на посторонних частицах, либо за счет гомогенной кластеризации на образующихся зародышах конденсирующегося компонента. В случае гетерогенной кластеризации кластеризация основного компонента может происходить на ядрах, образованных из посторонних примесей. Если примесь, находящаяся в незначительных количествах, обладает более высокой температурой и давлением насыщения, чем основной компонент, то, хотя ее кластеризация не изменяет существенно термодинамических параметров смеси, ядра кластеризации, которые при этом образуются, могут стать центрами кластеризации для основного компонента. В связи с этим кластеризация конденсирующегося компонента наступит при очень незначительном перенасыщении.

Многочисленные исследования процесса конденсации показывают, что с уменьшением начального давления, а значит и температуры насыщения, переохлаждение увеличивается, поскольку из-за низкого давления насыщения уменьшается число столкновений между молекулами в единицу времени, в единице объема и, следовательно, число ядер кластеризации посторонних компонентов. Поэтому при низких температурах и давлениях насыщения кластеризация паров может происходить гомогенно. Гомогенная кластеризация [109, 117,205, 209, 225, 233, 235,250], может иметь место в аэродинамических соплах, соплах и струях ракетных двигателей, в молекулярных пучках, в технологических установках для получения нанопорошков и нанопленок и т. д. Результаты исследований неравновесной

конденсации, выполненных при непосредственном участии автора, изложены в 20 печатных работах, в том числе [40-43, 45, 47, 53, 61, 63, 68, 73, 81, 101, 314].

5.1. Термодинамические свойства кластеров. Расчет равновесных функций распределения кластеров по размерам.

Пусть нам известны выражения для потенциалов Гиббса для жидкой и газовой фаз [121]. Рассмотрим случай, когда газовая фаза представляет собой смесь совершенных газов и состоит из инертного газа и конденсирующегося. Рассмотрим модель равновесной конденсации. Условие равновесия газовой и жидкой фаз представляет из себя равенство химических потенциалов газовой и жидких фаз

$$G_1(p, T, \gamma_1, \gamma_A) = G_L(p, T). \quad (5.1)$$

Значение давления, найденное из данного уравнения, называется давлением насыщения при заданной температуре T . В случае совершенного газа и отсутствии зависимости потенциала Гиббса жидкости от давления

$$p_H = p_0 \exp\left(-\ln \frac{\gamma_1}{\gamma_1 + \gamma_A} + \frac{G_L(T) - G_0(T)}{RT}\right), \quad (5.2)$$

также может быть найдена плотность на кривой насыщения

$$\rho_H = \frac{p_0}{RT} \exp\left(-\ln \gamma_1 + \frac{G_L(T) - G_0(T)}{RT}\right). \quad (5.3)$$

В случае, если давление в смеси превышает давление насыщения, но меньше давления в критической точке, то образуется жидкая фаза. При заданных давлении и температуре

получаем $\frac{\gamma_1}{\gamma_1 + \gamma_A} = \exp\left(-\ln \frac{p}{p_0} + \frac{G_L(T) - G_0(T)}{RT}\right)$,

$$\gamma_1 = \frac{\gamma_A}{\exp\left(\ln \frac{p}{p_0} - \frac{G_L(T) - G_0(T)}{RT}\right) - 1}, \quad \gamma_{1L} = \gamma_1^0 - \gamma_1, \quad (5.4)$$

или, при заданных плотности и температуре:

$$\gamma_1 = \exp\left(-\ln \frac{\rho RT}{p_0} + \frac{G_L(T) - G_0(T)}{RT}\right), \quad \gamma_{1L} = \gamma_1^0 - \gamma_1. \quad (5.5)$$

Рассмотрим случай, когда известны плотность и внутренняя энергия, в литературе называемый адиабатическим реактором постоянного объема. Предлагается использовать следующий алгоритм. Из условия сохранения внутренней энергии (U_0) и известных значениях концентраций γ_1^0, γ_A находим температуру, решив нелинейное уравнение при заданной $\gamma_1 \in [0, \gamma_1^0]$:

$$U_1(T) + \gamma_A U_A(T) / \gamma_1^0 + (1 - \gamma_1 / \gamma_1^0) U_L(T) = U_0 / \gamma_1^0, \quad (5.6)$$

Подбирая методом половинного деления γ_1 так, чтобы ρ_H , вычисленное по формуле (5.3) равнялось заданному значению плотности ρ , $\gamma_{1L} = \gamma_1^0 - \gamma_1$. В качестве начального приближения считаем, что $\gamma_1 = \gamma_1^0$. Если $\rho \leq \rho_H$, то расчет окончен и $\gamma_{1L} = 0$.

Рассмотрим случай, когда известны давление и энтальпия - адиабатический реактор постоянного давления. Предлагается использовать следующий алгоритм. Из условия сохранения энтальпии (H_0) и известных значениях концентраций γ_1^0, γ_A находим температуру, решив нелинейное уравнение при заданной $\gamma_1 \in [0, \gamma_1^0]$

$$H_1(T) + \gamma_A H_A(T) / \gamma_1^0 + (1 - \gamma_1 / \gamma_1^0) H_L(T) = H_0 / \gamma_1^0, \quad (5.7)$$

Подбирая методом половинного деления γ_1 так, чтобы p_H , вычисленное по формуле (5.2), равнялось заданному значению давления p , $\gamma_{1L} = \gamma_1^0 - \gamma_1$. В качестве начального приближения считаем, что $\gamma_1 = \gamma_1^0$, если $p \leq p_H$, то расчет окончен и $\gamma_{1L} = 0$.

Рассмотренная равновесная модель позволяет приближенно рассчитывать долю жидкой фазы в потоке, при этом не учитываются размеры образующихся капель.

Рассмотрим состояние термодинамического равновесия между газообразной и жидкой фазой, состоящей из капель, включающих заданное число молекул при известном количестве молекул конденсирующейся γ_0 и инертной фазы γ_A в килограмме смеси. В настоящей работе рассматривается смесь, состоящая из смеси совершенных газов, термодинамические свойства которой могут быть описаны удельным потенциалом Гиббса G [40, 55, 56, 121]:

$$G(p, T, \gamma) = \gamma_A (G_A(p, T) + RT \ln x_A) + \sum_{i=1}^{\infty} \gamma_i (G_i(p, T) + RT \ln x_i), \quad (5.8)$$

$$x_i = \gamma_i m_{\Sigma}, \quad x_A = \gamma_A m_{\Sigma}, \quad m_{\Sigma} = (\gamma_A + \sum_{i=1}^{\infty} \gamma_i)^{-1}, \quad (5.9)$$

$$\gamma_A = \sum_{i=1}^N \tilde{\gamma}_i, \quad G_A(p, T) = \sum_{i=1}^N \tilde{\gamma}_i \tilde{G}_i(p, T) / \gamma_A. \quad (5.10)$$

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 – число неконденсирующихся компонент в смеси, $\tilde{\gamma}_i$ – мольно-массовые концентрации неконденсирующихся компонент в смеси. Части

молярных потенциалов Гиббса, не зависящие от концентраций для i -меров $G_i(p, T)$ ($i=1, 2, 3, \dots$) и неконденсирующихся молекул $G_A(p, T)$, определяются по формулам

$$G_j(p, T) = RT \ln(p/p_0) + G_j^\circ(T), \quad j=A, 1, 2, \dots, \quad (5.11)$$

где p_0 - стандартное давление ($p_0=101325$ Па), $G_j^\circ(T)$ - стандартные молярные потенциалы Гиббса, заданные в стандартной системе начал отсчета термодинамических величин аналогично описанному в главе 1, [121].

Термодинамические свойства кластеров рассчитывались в рамках жидкокапельной модели в ее стандартной форме. В частности, для того чтобы записать $G_i^0(T)$ для кластеров, т. е. при $i=2, 3, \dots$ в стандартной системе начал отсчета энтальпий, можно использовать выражения [109, 209]

$$G_i^0(T) = iG_1^0(T) + \Delta G_i^0(T),$$

где $\Delta G_i^0(T)$ – работа образования кластеров из мономеров при температуре T . Последняя записывается без учета вклада поступательного и вращательного движения кластера как целого в пересчете на моль кластеров в виде

$$\Delta G_i^0(T) = i(G_L^0(T) - G_1^0(T)) + 4\pi r^2 N_A \sigma_i(T), \quad (5.12)$$

здесь r – радиус капли, состоящей из i молекул, $\sigma_i(T)$ – поверхностное натяжение i -мера. Кластер, содержащий i молекул газа с молекулярной массой m_1 , занимает объем

$$V_i = \frac{im_1}{N_A \rho_L(T)} = \frac{4}{3} \pi r^3, \text{ следовательно,}$$

$$r = \left(\frac{3}{4\pi} \frac{im_1}{N_A \rho_L(T)} \right)^{\frac{1}{3}}, \quad (5.13)$$

$$\Delta G_i^0(T) = i(G_L^0(T) - G_1^0(T)) + B_i(T) i^{\frac{2}{3}}, \quad B_i(T) = \sigma_i(T) (36\pi)^{\frac{1}{3}} N_A^{\frac{1}{3}} (m_1 / \rho_L(T))^{\frac{2}{3}}, \quad i=2, 3, \dots$$

где $G_L^0(T)$ – стандартный молярный потенциал жидкой фазы, $\sigma_i(T)$ – поверхностное натяжение i -мера, $\rho_L(T)$ – плотность жидкости. Причем $G_L(T)$, $G_1^0(T)$, $G_A^0(T)$ во всех последующих расчетах рассчитывались по формулам (5.2), (5.3), а энтальпии образования и приведенные потенциалы брались из справочников, в которых используется одна и та же система начал отсчета термодинамических величин.

По известному потенциалу Гиббса смеси $G(p, T, \gamma)$ определяются все остальные термодинамические параметры. Запишем условия равновесия между газовой и жидкой

Мольная доля инертного газа может быть записана:

$$x_A = \frac{\gamma_A}{\gamma_0} \sum_{i=1}^{\infty} i x_i \quad . \quad (5.20)$$

Таким образом, кривая насыщения может быть найдена из условия нормировки:

$$\sum_{i=1}^{\infty} x_i + x_A = 1$$

После подстановки в него выражений для мольных долей:

$$F(p, T) = \sum_{i=1}^{\infty} \left(1 + \frac{\gamma_A}{\gamma_0} i \right) \exp \left(\frac{i G_L(p, T) - G_i(p, T)}{RT} \right) - 1 = 0 \quad (5.21)$$

Нелинейное уравнение (5.21) представляет собой связь между давлением и температурой на кривой насыщения соответственно, при известной температуре из (5.21) может быть найдено давление насыщения p_H (аналогично при известном давлении можно найти температуру на кривой насыщения T_H). Данное уравнение применимо для случая, когда потенциал Гиббса жидкой фазы зависит от температуры и давления.

Необходимо отметить, что в (5.21) индекс i пробегает значения от 1 до бесконечности. При численных вычислениях бесконечные суммы заменяются на конечные [40, 42, 55, 56, 301], 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 $n_M = 10^{14}$. В случае использования функции растяжения $n(i)$ вышеприведенные формулы приобретают следующий вид:

$$F(p, T) = \sum_{i=1}^{i_M} n'_i \left(1 + \frac{\gamma_A}{\gamma_0} n_i \right) \exp \left(\frac{n_i G_L(p, T) - G_i(p, T)}{RT} \right) - 1 = 0 \quad (5.21')$$

$$G(p, T, \gamma) = \gamma_A (G_A(p, T) + RT \ln x_A) + \sum_{i=1}^{i_M} n'_i \gamma_i (G_i(p, T) + RT \ln x_i) \quad (5.8')$$

$$m_{\Sigma} = \left(\gamma_A + \sum_{i=1}^{i_M} n'_i \gamma_i \right)^{-1} \quad (5.9')$$

Закон сохранения конденсирующегося компонента: $\sum_{i=1}^{i_M} n'_i \gamma_i = \gamma_0$. Частным случаем рассматриваемого отображения является случай тождественного отображения: $n_M = i_M$ и $\frac{dn(i)}{di} = 1$. Далее в данной главе по умолчанию принимается, что если используются суммы с бесконечным верхним пределом, то i обозначает размер кластера, а если у сумм предел конечный, то i обозначает номер кластера размером n_i .

Для решения (5.21) в работе используется метод Ньютона, начальное приближение давления (p_H^0) рассчитывается из равенства химических потенциалов мономеров и жидкой фазы:

$$\frac{p_H^0}{p_0} = \exp\left(\frac{G_L^0(T) - G_1^0(T)}{RT}\right) . \quad (5.22)$$

В основном в работе рассматривается случай, когда потенциал Гиббса жидкой фазы не зависит от давления, а молярный потенциал Гиббса i -мера может быть записан как функция плотности смеси, температуры и мольно-массовой концентрации i -мера.

$$G_i(\rho, T, \gamma_i) = RT \ln(\rho RT \gamma_i / p_0) + G_i^0(T) . \quad (5.23)$$

Соответственно плотность на кривой насыщения может быть найдена из уравнения

$$F(\rho, T) = \sum_{i=1}^{\infty} i \exp\left(\frac{iG_L(T) - RT \ln(\rho RT / p_0) - G_i^0(T)}{RT}\right) - \gamma^0 = 0 , \quad (5.24)$$

а концентрации: $\gamma_i = \exp\left(\frac{iG_L(T) - RT \ln(\rho RT / p_0) - G_i^0(T)}{RT}\right) . \quad (5.25)$

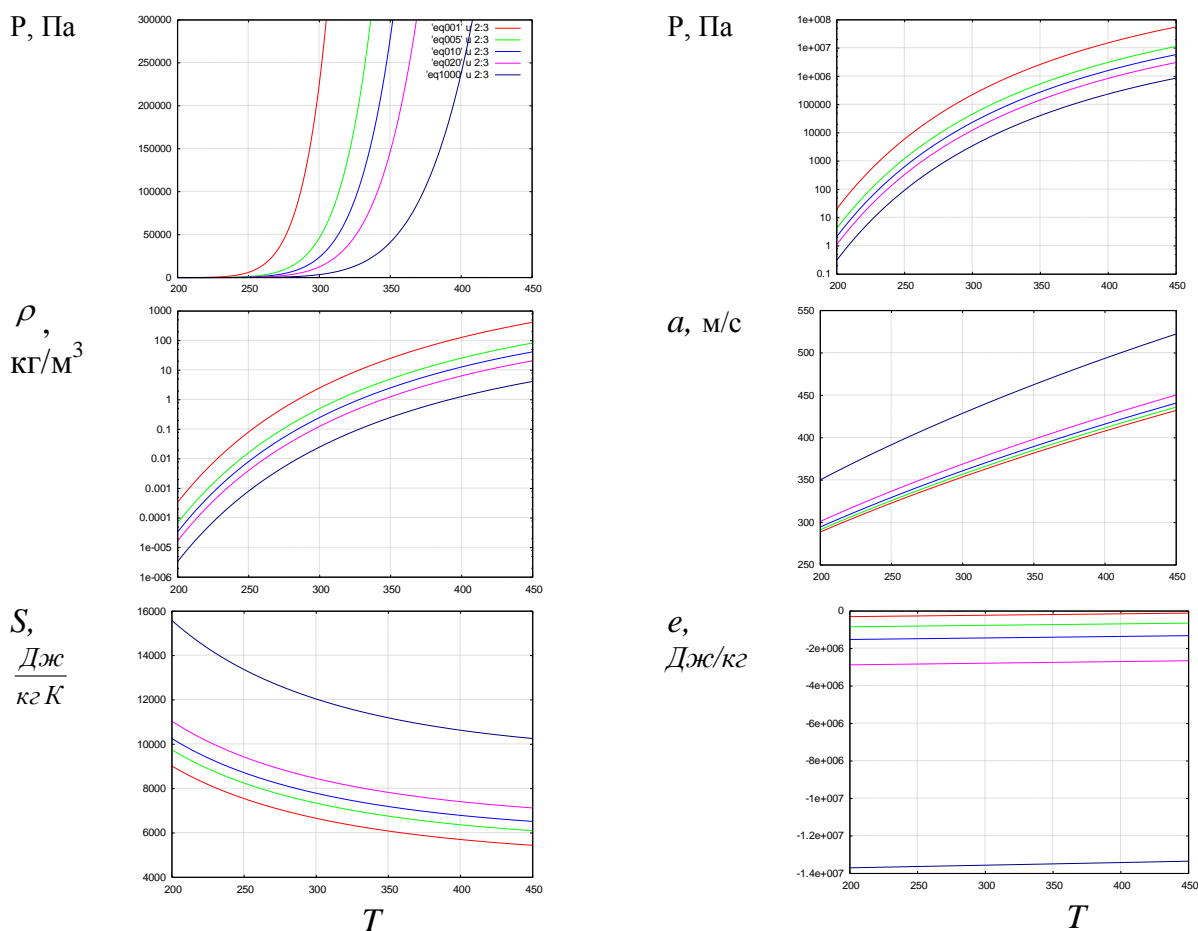


Рис. 5.2. Зависимость параметров на кривой насыщения от температуры при различных массовых долях воды в азоте (1, 5, 10, 20, 100 %).

На рис. 5.2. приводятся результаты расчета кривой насыщения в смеси, состоящей из паров воды и азота. Термодинамические свойства воды и азота заимствовались из

[121], плотность и поверхностное натяжение воды задавались в диапазоне температур $T \in [273.15; 373.15]$ $\rho_{H_2O} = 1110 - 0.4T$ кг/м³, $\sigma_{H_2O} = 0.128 - 1.9 \cdot 10^{-4}T$ н/м². При выходе за границы диапазона значения плотности и поверхностного натяжения не менялись и считались равными соответствующим значениям на границе. Из графиков, в частности, видно, что давление насыщенных паров, а также диапазон параметров термодинамических величин, при которых возможно протекание конденсации воды в смеси с азотом, сильно зависит от массовой доли воды.

Для практики часто представляет интерес задача нахождения равновесной функции распределения при заданных двух термодинамических параметрах, например P и T . В случае, если мы находимся справа от кривой насыщения, то рассматриваемая задача заведомо имеет решение, при этом число мономеров в функции распределения должно быть на много порядков больше числа димеров, тримеров и т. д. В стабильной области химический потенциал мономеров меньше, чем химический потенциал жидкой фазы.

$$G_1(p, T) + RT \ln x_1 < G_L(p, T) \quad (5.26)$$

В состоянии равновесия для кластера любого размера i выполняется равенство

$$G_i(p, T) + RT \ln x_i = i(G_1(p_H, T) + RT \ln x_1) \quad (5.27)$$

Следовательно, мольная доля i -мера может быть выражена через мольную концентрацию мономера

$$x_i = \exp \left(i \ln x_1 + \frac{iG_1(p, T) - G_i(p, T)}{RT} \right) \quad (5.28)$$

С использованием (5.27)-(5.28) концентрация мономеров может быть найдена из нелинейного уравнения:

$$F(\ln x_1) = \sum_{i=1}^{\infty} \left(1 + \frac{\gamma_A}{\gamma_0} i \right) \exp \left(i \ln x_1 + \frac{iG_1(p, T) - G_i(p, T)}{RT} \right) - 1 = 0 \quad (5.29)$$

Вместо уравнения (5.29) для расчета функции распределения может быть использовано уравнение, искомой величиной в котором является пересыщение - S , равное отношению давления в среде к давлению насыщения при заданной температуре. Запишем уравнение равновесия между жидкостью и мономерами

$$G_L = G_1^0(T) + RT \ln \frac{P_H}{P_0} + RT \ln x_1 \quad (5.30)$$

Добавим к левой и правой части $RT \ln \frac{P}{P_0}$, после преобразования получим

$$G_L(P,T) + RT \ln S = G_1(P,T) + RT \ln x_1, \text{ где } S = \frac{P}{P_H}, \quad (5.31)$$

тогда нелинейное уравнение для определения пересыщения, аналогичное (5.29), примет следующий вид:

$$F(\ln S) = \sum_{i=1}^{\infty} \left(1 + \frac{\gamma_A}{\gamma_0} i \right) \exp \left(i \ln S + \frac{iG_L(p,T) - G_i(p,T)}{RT} \right) - 1 = 0, \quad (5.32)$$

В качестве начального приближения значения пересыщения можно считать $S=1$.

Необходимо отметить, что из нелинейных уравнений (5.29, 5.32) может быть найдена функция распределения кластеров по размерам и в окрестности кривой насыщения слева (в метастабильной области).

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.5.3). 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 .

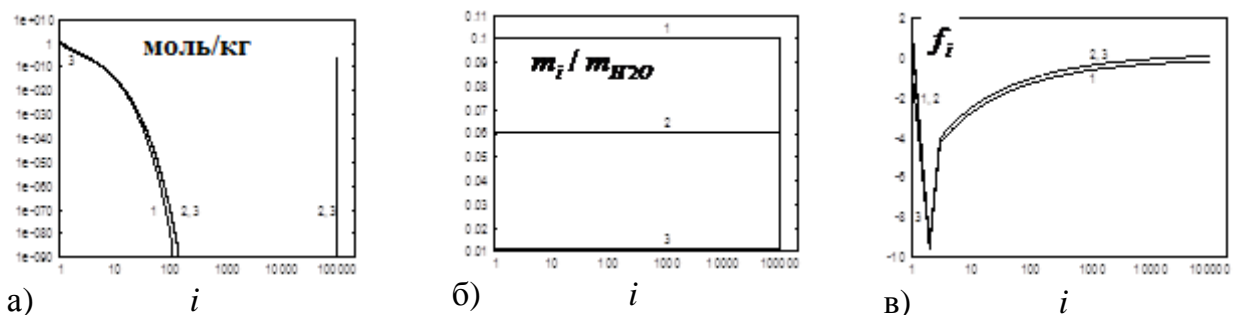


Рис. 5.3. Функция распределения кластеров воды по размерам - γ_i (А), массовая доля кластеров, содержащихся в размерах от 1 до i (Б) и относительная функция распределения кластеров воды по размерам - f_i (В) при различных давлениях 1 – 10000 Па, 2 – 20000 Па, 3 – 100000 Па m_i / m_{H_2O} .

В данных расчетах остаточное пересыщение равно 1.204 и практически не зависит от давления, т.е. давление мономеров на кривой насыщения составляет 1571.6 Па, а при

заданных давления и температуре 1891.64 Па для $P=20000$ Па и 1891.68 Па при $P=100000$ Па. Если ввести функцию растяжения, например

$$n_i = \begin{cases} i, & i \leq i_1 \\ i_1 + (i - i_1) \left(1 + \frac{n_M - i_M}{(i_M - i_1)^3} (i - i_1)^2 \right), & i > i_1 \end{cases}, \quad (5.33)$$

то можно построить зависимость пересыщения S , являющегося решением (5.29) от n_M (рис. 5.4а). Очевидно, что 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 (рис. 5.4а), тогда остаточное пересыщение менее чем 1.01. Необходимо отметить, что если целью математического моделирования является расчет равновесной функции распределения кластеров воды по размерам, то достаточно учесть всего 11 размеров кластера. Для этого необходимо в формуле (5.33) задать $i_M=11$, $n_M=10^{10}$, $i_1=6$. На рисунке 5.4б приводятся зависимости массовой доли мономеров (кривая 1) и массовой доли кластера максимального размера (кривая 2), которую можно ассоциировать с массовой долей жидкой фазы. Кривые 1 и 2 получены при $i_M=10^5$, $i_1=5 \cdot 10^4$, маркерами обозначены соответствующие им величины, полученные при $i_M=11$, $i_1=6$. Видно, что при $n_M \geq 10^7$ рассчитанные массовые доли близки (остаточное пересыщение тоже совпадает). Отличие массовой доли кластера максимального размера при $n_M \leq 10^7$ связано с тем, что при расчете функции распределения с $i_M=10^5$ массовые концентрации $g_i \geq 10^{-10}$ при $i \geq 99660$ и массе жидкой фазы соответствует сумма концентрации при $99660 \leq i \leq 10000$.

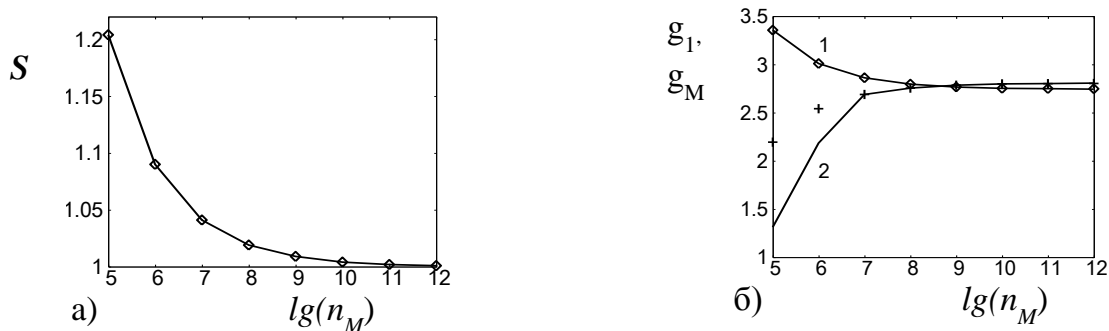


Рис. 5.4. Зависимости остаточного пересыщения и массовых концентраций от логарифма максимального числа молекул в кластере ($P = 20000$ Па).

Рассмотрим случай заданных плотности и температуры. Пусть химический потенциал жидкой фазы не зависит от давления, тогда аналогично (5.31) можно записать $G_L(T) + RT \ln S = RT \ln(\rho RT \gamma_1 / p_0) + G_1^0(T)$.

В состоянии равновесия $RT \ln(\rho RT \gamma_i / p_0) + G_i^0(T) = i(RT \ln(\rho RT \gamma_1 / p_0) + G_1^0(T))$,

Тогда из условия нормировки получим нелинейное уравнение для определения $\ln S$:

$$F(\ln S) = \sum_{i=1}^{\infty} i \exp\left(i \ln S + \frac{iG_L(T) - G_i^0(T) - RT \ln(\rho RT / p_0)}{RT}\right) - \gamma^0 = 0, \quad (5.34)$$

Соответственно равновесные мольно-массовые концентрации находятся из:

$$\gamma_i = \exp\left(i \ln S + \frac{iG_L(T) - G_i^0(T) - RT \ln(\rho RT / p_0)}{RT}\right). \quad (5.35)$$

В случае заданных плотности и внутренней энергии смеси в начале из (5.24) находим температуру на кривой насыщения и соответствующую ей внутреннюю энергию смеси. Далее считая, что внутренняя энергия смеси в состоянии термодинамического равновесия является возрастающей функцией температуры.

$$U(\rho, T, \vec{\gamma}) = \sum_{i=1}^{\infty} \gamma_i U_i(\rho, T) + \gamma_A U_A(\rho, T), \quad \left(\frac{\partial U(\rho, T, \vec{\gamma})}{\partial T}\right)_{\rho, \vec{\gamma}} > 0 \quad (5.36)$$

Если внутренняя энергия смеси при известной температуре меньше заданной, то искомая точка лежит справа от кривой насыщения, если больше – то слева. Соответственно искомое решение может быть найдено методом половинного деления, на каждом шаге которого решается нелинейное уравнение (5.35).

В случае заданных давления и энтальпии смеси в начале из (5.21) находим температуру на кривой насыщения и соответствующую ей энтальпию смеси. Далее считая, что внутренняя энергия смеси в состоянии термодинамического равновесия является возрастающей функцией температуры,

$$H(p, T, \vec{\gamma}) = \sum_{i=1}^{\infty} \gamma_i H_i(p, T) + \gamma_A H_A(p, T), \quad \left(\frac{\partial H(p, T, \vec{\gamma})}{\partial T}\right)_{p, \vec{\gamma}} > 0 \quad (5.37)$$

Если энтальпия смеси при известной температуре меньше заданной, то искомая точка лежит справа от кривой насыщения, если больше – то слева. Соответственно искомое решение может быть найдено методом половинного деления, на каждом шаге которого решается нелинейное уравнение (5.32).

Аналогично решается задача о расчете равновесной функции распределения, если известны температура и энтропии смеси $S(p, T, \bar{\gamma})$ (в работе энтропия и пересыщение обозначены одной буквой S), только вместо (5.37) используется условие:

$$S(p, T, \bar{\gamma}) = \sum_{i=1}^{\infty} \gamma_i S_i(p, T, \bar{\gamma}) + \gamma_A S_A(p, T, \bar{\gamma}), \left(\frac{\partial S(p, T, \bar{\gamma})}{\partial T} \right)_{p, \bar{\gamma}} > 0. \quad (5.38)$$

При описании гомогенной конденсации важное значение имеет понятие критического размера кластера. Как уже отмечалось, выражение для работы образования кластеров из мономеров при температуре T имеет вид [10, 11]

$$\Delta G_i(p, T) = iG_L(p, T) + 4\pi r^2 N_A \sigma_i(T) - iG_1(p, T). \quad (5.39)$$

Выразим число молекул в кластере через радиус:

$$i = \frac{4}{3} \pi r^3 \frac{N_A \rho_L(T)}{m_1}. \quad (5.40)$$

Продифференцируем по r , считая, что поверхностное натяжение не зависит от r , и приравняем производную к нулю.

$$\frac{\partial \Delta G_i^0(r, p, T)}{\partial r} = \left(\frac{4}{3} \pi r^3 \frac{N_A \rho_L(T)}{m_1} (G_L(p, T) - G_1^0(p, T)) + 4\pi r^2 N_A \sigma(T) \right)_r =$$

$$4\pi r^2 \frac{N_A \rho_L(T)}{m_1} (G_L(p, T) - G_1(p, T)) + 8\pi r N_A \sigma(T) = 0$$

Выразим критический радиус:

$$r^* = \frac{2m_1 \sigma(T)}{\rho_L(T)(G_1(p, T) - G_L(p, T))} \quad (5.41)$$

При $p = p_H$ критический радиус равен бесконечности, соответственно, если использовать выражение для пересыщения (5.31), то: $r^* = \frac{2m_1 \sigma(T)}{RT \rho_L(T) \ln S}$

Данная формула называется формулой Томсона. Соответственно, число молекул в кластере критического размера

$$i^* = \frac{32}{3} N_A \left(\frac{m_1}{\rho_L(T)} \right)^2 \left(\frac{\sigma(T)}{RT \ln S} \right)^3. \quad (5.42)$$

Найдем вторую производную по r :

$$\frac{\partial^2 \Delta G_i^0(r, p, T)}{\partial r^2} = 8\pi r \frac{N_A \rho_L(T)}{m_1} (G_L(p, T) - G_1(p, T)) + 8\pi N_A \sigma(T)$$

Подставим выражение для критического радиуса $\left. \frac{\partial^2 \Delta G_i^0(r, p, T)}{\partial r^2} \right|_{r=r^*} = -8\pi N_A \sigma(T) < 0$

Таким образом, работа образования кластера критического размера максимальна. В классической теории конденсации делается вывод, что кластеры размером больше критического растут, а меньше критического распадаются.

Пар, будучи насыщенным для крупных капель и перенасыщенным для плоской поверхности, является ненасыщенным для мелких капель [109, 205, 209, 225, 233, 235, 250]. Этот эффект сильно возрастает с уменьшением размеров капель. Так например для сравнительно крупных водяных капель (размером в микрон) давление насыщения лишь на 0,1% больше давления над плоской поверхностью, а при радиусе капли 6×10^{-1} мк давление насыщения такой капли в шесть раз превосходит давление насыщения над плоской поверхностью. Отношение $p_v / p_\infty = s$ называется перенасыщением, где p_v и p_∞ берутся при одинаковой температуре. Величина $\Delta T = T_\infty - T$ называется переохлаждением, где T_∞ — температура насыщения при заданном p_v . Часто под переохлаждением понимают и величину $\Delta T = T_s - T_k$, где T_s — температура в точке росы, а T_∞ — температура в точке Вильсона.

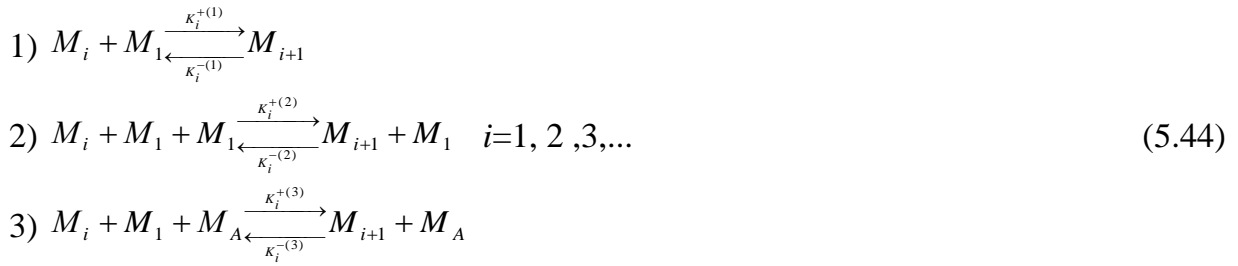
Для расчета равновесных функций распределения кластеров по размерам при заданных двух термодинамических параметрах были разработаны вычислительные алгоритмы и программа для ЭВМ [61].

5.2. Квазихимическая модель гомогенной конденсации.

В настоящей работе рассматривается смесь, состоящая из смеси совершенных газов и конденсирующейся компоненты, описываемая в рамках модели совершенных газов. Термодинамические свойства такой смеси могут быть описаны удельным потенциалом Гиббса G [40, 42, 55, 301]

$$G(p, T, \gamma) = \gamma_A (G_A(p, T) + RT \ln x_A) + \sum_{i=1}^{\infty} \gamma_i (G_i(p, T) + RT \ln x_i). \quad (5.43)$$

Процесс кластеризации описывается следующей кинетической моделью. Предполагаем, 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 [40, 42, 55, 109, 205, 209, 301]



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 кинетическим механизмом изменение концентраций во времени описывается системой обыкновенных дифференциальных уравнений γ_i

$$\begin{aligned}
\rho \frac{d\gamma_i}{dt} &= (K_{i-1}^{+(1)} + K_{i-1}^{+(2)} \rho\gamma_1 + K_{i-1}^{+(3)} \rho\gamma_A) \rho\gamma_1 \rho\gamma_{i-1} \\
&- (K_i^{+(1)} + K_i^{+(2)} \rho\gamma_1 + K_i^{+(3)} \rho\gamma_A) \rho\gamma_1 \rho\gamma_i - (K_{i-1}^{-(1)} + K_{i-1}^{-(2)} \rho\gamma_1 + K_{i-1}^{-(3)} \rho\gamma_A) \rho\gamma_i \\
&+ (K_i^{-(1)} + K_i^{-(2)} \rho\gamma_1 + K_i^{-(3)} \rho\gamma_A) \rho\gamma_{i+1}; \quad i = 2, 3, \dots \\
\gamma_1 &= \gamma^0 - \sum_{i=2}^{\infty} i\gamma_i
\end{aligned} \tag{5.45}$$

По аналогии с химической кинетикой можно получить связь между константами скоростей прямой и обратной реакции. Из условия равновесия реакций 1-3 следует

$$(K_i^{-(1)} + K_i^{-(2)} \rho\gamma_1 + K_i^{-(3)} \rho\gamma_A) = (K_i^{+(1)} + K_i^{+(2)} \rho\gamma_1 + K_i^{+(3)} \rho\gamma_A) \rho\gamma_1 \frac{\rho\gamma_i}{\rho\gamma_{i+1}}$$

Из условий термодинамического равновесия следует равенство химических потенциалов $G_i(p, T) + RT \ln x_i + G_1(p, T) + RT \ln x_1 = G_{i+1}(p, T) + RT \ln x_{i+1}$

$$\text{Следует, что: } \frac{x_i}{x_{i+1}} = \frac{\rho\gamma_i}{\rho\gamma_{i+1}} = \exp\left(\frac{G_{i+1}(p, T) - G_i(p, T) - G_1(p, T) - RT \ln(\gamma_1 m_\Sigma)}{RT}\right)$$

$$\text{Или, если ввести величину: } \varepsilon_i = \exp\left(i \ln x_1 - \frac{G_i(p, T) - iG_1(p, T)}{RT}\right), \text{ то } \frac{\rho\gamma_i}{\rho\gamma_{i+1}} = \frac{\varepsilon_i}{\varepsilon_{i+1}}.$$

Обозначим через $v_{\Sigma i} = (K_i^{+(1)} + K_i^{+(2)} \rho\gamma_1 + K_i^{+(3)} \rho\gamma_A) \rho\gamma_1$, получим

$$\frac{d\gamma_i}{dt} = v_{\Sigma i-1} \gamma_{i-1} - v_{\Sigma i} \gamma_i - v_{\Sigma i-1} \frac{\varepsilon_{i-1}}{\varepsilon_i} \gamma_i + v_{\Sigma i} \frac{\varepsilon_i}{\varepsilon_{i+1}} \gamma_{i+1} = v_{\Sigma i-1} \varepsilon_{i-1} \left(\frac{\gamma_{i-1}}{\varepsilon_{i-1}} - \frac{\gamma_i}{\varepsilon_i}\right) - v_{\Sigma i} \varepsilon_i \left(\frac{\gamma_i}{\varepsilon_i} - \frac{\gamma_{i+1}}{\varepsilon_{i+1}}\right)$$

Окончательно получим

$$\frac{d\gamma_i}{dt} = I_{i-1} - I_i \quad i=2, 3, \dots \quad I_i = v_{\Sigma i} \varepsilon_i \left(\frac{\gamma_i}{\varepsilon_i} - \frac{\gamma_{i+1}}{\varepsilon_{i+1}}\right). \tag{5.46}$$

и уравнение материального баланса

$$A^K \sum_{i=1}^{\infty} i\gamma_i + \sum_{i=1}^N \tilde{A}_i^K \tilde{\gamma}_i = const = \gamma_K^0, \quad (5.47)$$

здесь γ_K^0 - число молей к-ого атома, входящего в состав молекулы конденсирующегося пара в системе, A^K - число к-ого атома в мономере конденсирующегося газа. В случае одной конденсирующейся компоненты данная система уравнений может быть сведена к одному уравнению:

$$\sum_{i=1}^{\infty} i\gamma_i + \sum_{i=1}^N \tilde{\gamma}_i \sum_{K=1}^{N_e} \tilde{A}_i^K / \sum_{K=1}^{N_e} A^K = const = \sum_{K=1}^{N_e} \gamma_K^0 / \sum_{K=1}^{N_e} A^K, \quad (5.48)$$

В случае фиксированных $\tilde{\gamma}_i$, рассматриваемая модель сводится к случаю конденсации в инертном газе

$$\sum_{i=1}^{\infty} i\gamma_i = const = \sum_{K=1}^{N_e} (\gamma_K^0 - \sum_{i=1}^N \tilde{A}_i^K \tilde{\gamma}_i) / \sum_{K=1}^{N_e} A^K. \quad (5.49)$$

В случае многокомпонентной реагирующей смеси данное условие при совместном решении уравнений химической кинетики и кинетики конденсации необходимо корректировать на каждой итерации.

Суммарные скорости присоединения мономеров могут быть записаны в виде

$\nu_{\Sigma i} = \sum_{i=1}^3 \nu_i^{(r)}$. Получим выражения для $K_i^{+(1)}$, $K_i^{+(2)}$, $K_i^{+(3)}$. В соответствии с жидкокапельной моделью [10] выражение для частоты присоединения мономера к i -меру имеет вид

$$\nu_i^{(1)} = \alpha_i^{(1)} 4\pi\rho\gamma_1\rho\gamma_i(r_1 + r_i)^2 \frac{1}{(1 + \delta_{i1})} \left(\frac{RT}{2\pi} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{im_1} \right) \right)^{\frac{1}{2}} N_A. \quad (5.50)$$

Здесь $r_i = \left(\frac{3m_1 i}{4\pi\rho_L N_A} \right)^{\frac{1}{3}}$, m_1 - молекулярный вес конденсирующегося газа. После алгебраических преобразований выражение для $K_i^{+(1)}$ примет вид:

$$K_i^{+(1)} = \alpha_i^{(1)} 4\pi \left(\frac{3m_1}{4\pi\rho_L N_A} \right)^{\frac{2}{3}} i^{\frac{2}{3}} (1 + i^{-\frac{1}{3}})^2 \frac{(1 + i^{-1})^{\frac{1}{2}}}{(1 + \delta_{i1})} \left(\frac{RT}{2\pi m_1} \right)^{\frac{1}{2}} N_A. \quad (5.51)$$

Рассмотрим вторую реакцию. В состоянии термодинамического равновесия

$K_i^{+(2)} (\rho\gamma_1)^2 \rho\gamma_i = K_i^{-(2)} \rho\gamma_1 \rho\gamma_{i+1}$. По аналогии с вышеописанным частота присоединения мономера к $i+1$ -меру может быть записана как

$$v_i^{(2)} = \alpha_i^{(1)} 4\pi\rho\gamma_1\rho\gamma_{i+1}(r_1 + r_{i+1})^2 \left(\frac{RT}{2\pi} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{(i+1)m_1} \right) \right)^{\frac{1}{2}} N_A$$

Соответственно выражение для константы скорости $K_i^{-{(2)}}$ имеет вид

$$K_i^{-{(2)}} = \alpha_i^{(2)} 4\pi \left(\frac{3m_1}{4\pi\rho_L N_A} \right)^{\frac{2}{3}} (1+i)^{\frac{2}{3}} (1+(i+1)^{-\frac{1}{3}})^2 \left(\frac{RT}{2\pi m_1} \frac{i+2}{i+1} \right)^{\frac{1}{2}} N_A, \text{ тогда}$$

$$K_i^{+(2)} = \alpha_i^{(2)} 4\pi \left(\frac{3m_1}{4\pi\rho_L N_A} \right)^{\frac{2}{3}} (1+i)^{\frac{2}{3}} (1+(i+1)^{-\frac{1}{3}})^2 \left(\frac{RT}{2\pi m_1} \frac{i+2}{i+1} \right)^{\frac{1}{2}} N_A \frac{\varepsilon_{i+1}}{\rho\gamma_1\varepsilon_i}. \quad (5.52)$$

Рассмотрим третью реакцию. В состоянии термодинамического равновесия $K_i^{+(3)}\rho\gamma_1\rho\gamma_A\rho\gamma_i = K_i^{-{(3)}}\rho\gamma_A\rho\gamma_{i+1}$. Частота взаимодействий молекул инертного газа с $i+1$ – мером может быть записана как

$$v_i^{(3)} = \alpha_i^{(3)} 4\pi\rho\gamma_A\rho\gamma_{i+1}(r_A + r_{i+1})^2 \left(\frac{RT}{2\pi} \left(\frac{1}{m_A} + \frac{1}{(i+1)m_1} \right) \right)^{\frac{1}{2}} N_A \quad \text{соответственно}$$

$$r_A = \left(\frac{3m_A}{4\pi\rho_{LA} N_A} \right)^{\frac{1}{3}}, \quad m_A - \text{молекулярный вес инертного газа, } \rho_{LA} - \text{плотность жидкости}$$

инертного вещества. Тогда

$$K_i^{+(3)} = \alpha_i^{(3)} 4\pi \left(\frac{3}{4\pi N_A} \right)^{\frac{2}{3}} \left(\left(\frac{m_A}{\rho_{LA}} \right)^{\frac{1}{3}} + \left(\frac{m_1(i+1)}{\rho_L} \right)^{\frac{1}{3}} \right)^2 \left(\frac{RT}{2\pi} \left(\frac{1}{m_A} + \frac{1}{(i+1)m_1} \right) \right)^{\frac{1}{2}} N_A \frac{\varepsilon_{i+1}}{\rho\gamma_1\varepsilon_i}. \quad (5.53)$$

Комплекс $\frac{\varepsilon_{i+1}}{\rho\gamma_1\varepsilon_i}$, входящий в выражения для $K_i^{+(2)}$, $K_i^{+(3)}$ может быть записан через

работу образования кластеров из мономеров (5.39).

$$\frac{\varepsilon_{i+1}}{\rho\gamma_1\varepsilon_i} = \frac{m_\Sigma}{\rho} \exp \left[\frac{\Delta G_i(p, T) - \Delta G_{i+1}(p, T)}{RT} \right] = \frac{RT}{p_0} \exp \left[\frac{\Delta G_i^0(T) - \Delta G_{i+1}^0(T)}{RT} \right]. \quad (5.54)$$

где $\Delta G_1^0(T) \equiv 0$ по определению, δ_{il} - символ Кронеккера, r_A - радиус молекулы инертного газа.

Как уже отмечалось, использование уравнений вида (5.46) бесконечной размерности в практических вычислениях невозможно. Поэтому используются системы конечной размерности N , полученные из системы (5.46) путем ее усечения. При этом в системе (5.46) отбрасываются уравнения для γ_i с $i > N$, а в сумме (5.49) – соответствующие слагаемые, и дополнительно предполагается, что $I_N = 0$. Однако

усечение, если N не достаточно велико, иногда приводит к некоторым аномалиям в поведении функции распределения. В случае, если используется функция растяжения, и i является счетчиком кластеров, размеру кластеров соответствует функция $n(i)$, введенная в разделе 5.1, то система уравнений, описывающих процесс гомогенной конденсации приобретает вид [40, 42, 55, 56, 301]

$$\frac{d\gamma_i}{dt} = \frac{1}{n_i} (I_{i-1} - I_i), \quad I_i = \frac{v_{\Sigma i} \varepsilon_i}{n_i} \left(\frac{\gamma_i}{\varepsilon_i} - \frac{\gamma_{i+1}}{\varepsilon_{i+1}} \right) \quad i=2,3,\dots,i_M. \quad (5.44')$$

Или, если более расписать правую часть

$$\frac{d\gamma_i}{dt} = \frac{1}{n_i} \left(\frac{v_{\Sigma i-1} \varepsilon_{i-1}}{n_{i-1}} \left(\frac{\gamma_{i-1}}{\varepsilon_{i-1}} - \frac{\gamma_i}{\varepsilon_i} \right) - \frac{v_{\Sigma i} \varepsilon_i}{n_i} \left(\frac{\gamma_i}{\varepsilon_i} - \frac{\gamma_{i+1}}{\varepsilon_{i+1}} \right) \right) \text{ или}$$

$$\frac{d\gamma_i}{dt} = \frac{v_{\Sigma i-1} \gamma_{i-1}}{n_{i-1} n_i} - \left(\frac{v_{\Sigma i-1} \varepsilon_{i-1}}{n_{i-1} \varepsilon_i} + \frac{v_{\Sigma i}}{n_i} \right) \frac{\gamma_i}{n_i} + \frac{v_{\Sigma i} \varepsilon_i \gamma_{i+1}}{n_i n_i \varepsilon_{i+1}}$$

$$\gamma_1 = \gamma^0 - \sum_{i=2}^{i_M} n_i n_i' \gamma_i.$$

Данная нелинейная система дифференциальных уравнений аппроксимируется по полуявной 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.

5.3. Численный метод для моделирования неравновесной функции распределения кластеров по размерам

В соответствии с разделами 5.1-5.2 система уравнений, описывающих процесс неравновесной гомогенной конденсации, может быть записана в виде

$$\frac{d\gamma_i}{dt} = \Phi_i(p, T, \vec{\gamma}), \quad i = 2, 3, \dots, N,$$

$$\sum_{i=1}^N n_i n_i' \gamma_i = \text{const} = \gamma_0, \quad \gamma_A = \text{const},$$

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

При численном моделировании в соответствии с работами [40, 42, 55, 301] вместо системы с бесконечной размерностью рассматривается система с конечной размерностью " N ". Величина N выбирается таким образом, чтобы увеличение N не оказывало заметного влияния на рассчитываемые характеристики. В расчетах, приведенных в настоящей главе, число N в зависимости от решаемой задачи,

изменялось от нескольких тысяч до нескольких миллионов. В дальнейшем, в настоящем разделе мы будем рассматривать системы с конечной размерностью.

Рассматриваемая система дифференциальных уравнений и замыкающие соотношения образуют замкнутую и термодинамически согласованную макрокинетическую модель образования кластеров. Характерной особенностью указанной системы является ее сильная «жесткость». При численном моделировании кластерообразования дифференциальные уравнения аппроксимировались конечно-разностными по неявной двухточечной схеме. По отношению к концентрациям кластеров ($j > 1$) соответствующая система неявных конечно-разностных уравнений за исключением первого уравнения является линейной и трехдиагональной. В то же время коэффициенты этой системы существенно нелинейны по концентрациям мономеров, давлению и температуре. Как правило при моделировании практических задач одновременно с концентрациями мономеров и кластеров требуется находить давление и температуру. Для этой цели необходимо использовать специально организованный итерационный процесс по нелинейностям, в рамках которого на каждой итерации необходимо находить концентрации мономеров и кластеров. Запишем разностную аппроксимацию системы обыкновенных дифференциальных уравнений на временном слое по полуявной разностной схеме [109]:

$$\gamma_i^{n+1} - \gamma_{i0}^n = sh\Phi_i^n + (1-s)h\Phi_i^{n+1}, \quad i = 2, 3, \dots, N.$$

В соответствии с квазихимической моделью конденсации [40, 42, 55, 301]

$\Phi_i^{n+1} = \tilde{a}_i \gamma_{i-1}^{n+1} - \tilde{b}_i \gamma_i^{n+1} + \tilde{c}_i \gamma_{i+1}^{n+1}$ система уравнений для определения γ_i^{n+1} может быть представлена в виде

$$(1-s)h\tilde{a}_i \gamma_{i-1}^{n+1} - (1+(1-s)h\tilde{b}_i)\gamma_i^{n+1} + (1-s)h\tilde{c}_i \gamma_{i+1}^{n+1} + \gamma_{i0}^n + sh\Phi_i^n = 0, \quad i=2,3,\dots,N,$$

$$\gamma_1^{n+1} = \gamma_0 - \sum_{i=2}^N n_i n_i' \gamma_i^{n+1}$$

Коэффициенты $\tilde{a}_i, \tilde{b}_i, \tilde{c}_i, \tilde{d}_i$ - коэффициенты, зависящие от давления, температуры, концентрации мономеров γ_1 и суммарной концентрации инертных компонент γ_A .

Поделим первое уравнение на γ_{i0}^n и слегка преобразуем:

$$(1-s)h\tilde{a}_i \frac{\gamma_{i-1,0}^n}{\gamma_{i0}^n} \frac{\gamma_{i-1}^{n+1}}{\gamma_{i-1,0}^n} - (1+(1-s)h\tilde{b}_i) \frac{\gamma_i^{n+1}}{\gamma_{i0}^n} + (1-s)h\tilde{c}_i \frac{\gamma_{i+1,0}^n}{\gamma_{i0}^n} \frac{\gamma_{i+1}^{n+1}}{\gamma_{i+1,0}^n} + 1 + sh\Phi_i^n / \gamma_{i0}^n = 0$$

Введем новые переменные: $g_i = \frac{\gamma_i^{n+1}}{\gamma_{i0}^n}$, $i=1,2,\dots,N$. Если заданы значения всех параметров в рассчитанный момент времени "n", давление, температура и концентрации мономеров в рассчитываемый момент времени "n+1", то концентрации кластеров находятся из системы линейных уравнений с трехдиагональной матрицей, которая может быть решена с использованием метода прогонки.

$$a_i g_{i-1} - b_i g_i + c_i g_{i+1} + d_i = 0, \quad i=2,3,\dots,N,$$

здесь $a_i = (1-s)h\tilde{a}_i \frac{\gamma_{i-1,0}^n}{\gamma_{i0}^n}$, $b_i = 1 + (1-s)h\tilde{b}_i$, $c_i = (1-s)h\tilde{c}_i \frac{\gamma_{i+1,0}^n}{\gamma_{i0}^n}$, $d_i = 1 + sh\Phi_i^n / \gamma_{i0}^n$, $i=2,3,\dots,N$, $c_N = 0$. Из физического смысла следует, что $a_i > 0$, $b_i > 0$, $c_i > 0$, также, что существует шаг интегрирования h , при котором $d_i > 0$ для любого i .

$$g_i = D_i g_{i-1} + E_i, \quad D_i = \frac{a_i}{b_i - c_i D_{i+1}}, \quad E_i = \frac{c_i E_{i+1} + d_i}{b_i - c_i D_{i+1}}, \quad D_{N+1} = 0, \quad C_{N+1} = 0.$$

Соответственно все g_i , $i=2,3,\dots,N$ можно считать функцией g_1 т.е.:

$$g_1 \gamma_{10}^n = \gamma_0 - \sum_{i=2}^N n_i n_i' \gamma_{i0}^n g_i, \quad g_1 = \frac{\gamma_0 - n_2 n_2' \gamma_{20}^n E_2 - \sum_{i=3}^N n_i n_i' \gamma_{i0}^n \sum_{k=3}^i E_{k-1} \prod_{m=3}^i D_m}{\gamma_{10}^n + n_2 n_2' \gamma_{20}^n D_2 + \sum_{i=3}^N n_i n_i' \gamma_{i0}^n \prod_{j=2}^i D_j}.$$

Полученное значение g_1 сравнивается с соответствующим значением, используемым при решении линейной системы методом прогонки, если разница составляет меньше наперед заданного малого положительного числа ε (в расчетах $\varepsilon \approx 10^{-5}$), то функция распределения считается рассчитанной, если нет, то решение линейной системы методом прогонки повторяется с новым значением концентрации мономеров.

Необходимо отметить, что при компьютерной реализации данного алгоритма для повышения точности вычислений используются переменные $\tilde{g}_i = \ln g_i$, $f_i: f_1 = \ln(\gamma_1)$,

$$f_i = \ln(\gamma_i / \gamma_{i-1}) = \ln(x_i / x_{i-1}), \quad i=2,3,\dots,N. \quad \text{Соответственно} \quad \gamma_i = e^{\sum_{j=1}^i f_j}, \quad f_1 = f_{10} + \tilde{g}_1,$$

$f_i = f_{i0} + \tilde{g}_i - \tilde{g}_{i-1}$, а также $\tilde{D}_i = \ln D_i$, $\tilde{E}_i = \ln E_i$. Выражения для вычисления \tilde{g}_i при этом принимают вид:

$$\ln g_i = \ln(D_i g_{i-1} + E_i) = \max(\tilde{D}_i + \tilde{g}_{i-1}, \tilde{E}_i) + \ln(\exp(\tilde{D}_i + \tilde{g}_{i-1} - \max(\tilde{D}_i + \tilde{g}_{i-1}, \tilde{E}_i)) + \exp(\tilde{E}_i - \max(\tilde{D}_i + \tilde{g}_{i-1}, \tilde{E}_i))),$$

Аналогично записываются логарифмы прогоночных коэффициентов через логарифмы входящих в них величин. При проведении вычислений в памяти ЭВМ хранятся только f_i и f_{i0} , остальные величины восстанавливаются по вышеприведенным формулам.

Как уже отмечалось выше, использование бесконечного числа обыкновенных дифференциальных уравнений в практических вычислениях невозможно. Поэтому используются системы конечной размерности N , полученные из исходной системы путем ее усечения. При этом в системе отбрасываются уравнения при $i > N$, а в используемых суммах – соответствующие слагаемые, и дополнительно предполагается, что кластеры, размером больше чем N , не образуются. Однако усечение системы, если N недостаточно велико, иногда приводит к некоторым аномалиям в поведении функции распределения [40, 42, 55, 301]. Альтернативным подходом является использование аппроксимации исходной системы подходящей конечномерной системой аналогичного вида с эффективными значениями ее коэффициентов. Последние находятся с помощью некоторого преобразования $i = n(j)$, переводящего бесконечный интервал $i=1,2,\dots$ в конечный $j=1,2,\dots,N,N+1$.

При использовании такой аппроксимирующей системы термодинамические параметры смеси находятся по формулам, в которых предполагается, что бесконечные суммы в формулах с участием некоторого термодинамического параметра A_i аппроксимируются следующим образом

$$\sum_{i=1}^{\infty} \gamma_i A_i \approx \sum_{j=1}^N n_j' \gamma_j A_j \quad .$$

Все параметры, зависящие от индекса j вычисляются по соответствующим формулам при $i=n(j)$.

5.4. Одномерные постановки задач расчета неравновесной функции распределения кластеров по размерам

Простейшей постановкой задачи для расчета функции распределения кластеров по размерам является случай, когда известно распределение параметров течения вдоль траектории частицы газа. Такое распределение может быть получено например как результат многомерного расчета. В этом случае решаются уравнения кинетики конденсации

$$\frac{d\gamma_i}{dt} = \Phi_i(p, T, \vec{\gamma}), \quad i = 2, 3, \dots, N, \quad \sum_{i=1}^N n_i n_i' \gamma_i = const = \gamma_0, \quad \gamma_A = const, \quad (5.55)$$

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

дополненная зависимостями: $p = p(t)$, $T = T(t)$.

Начальная функция распределения кластеров по размерам задается, как правило равновесной и рассчитывается по методике, описанной в разделе 5.2. Плотность находится из уравнения состояния $\rho = \frac{pm_\Sigma}{RT}$. Если заданы $\rho = \rho(t)$, $T = T(t)$, то из уравнения состояния находится давление. При расчетах многомерных полей современными консервативными методами расчетными величинами являются плотность и внутренняя энергия. В этом случае расчет процесса конденсации позволяет уточнить поле температуры. Считаются заданными $\rho = \rho(t)$, $e = e(t)$. Для нахождения температуры и давления в этом случае дополнительно используется калорическое уравнение состояния

$$e = \gamma_A E_A + \sum_{i=1}^N n_i' \gamma_i E_i(p, T).$$

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 среду с 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 рис. 5.5 приведены зависимости температуры, давления и суммы мольно-массовых концентраций от времени.

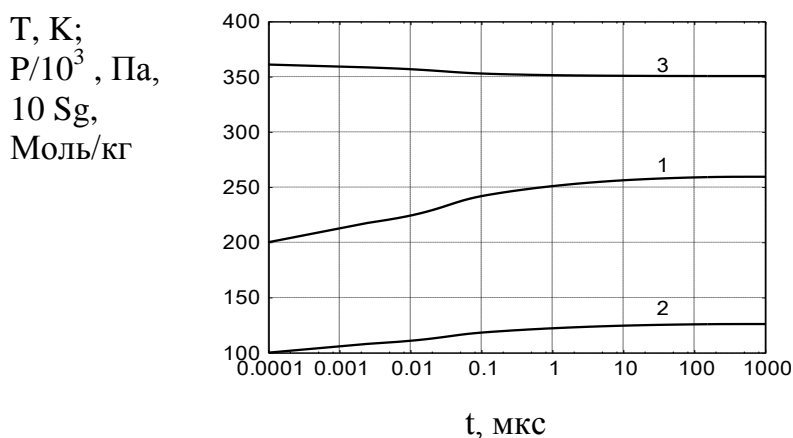


Рис. 5.5. Зависимость температуры (1), давления (2) и суммы мольно-массовых концентраций (3) от времени.

Температура за счет конденсации выросла на 60 К, давление увеличилось на 20%. На рис. 5.6 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 падает ниже 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.

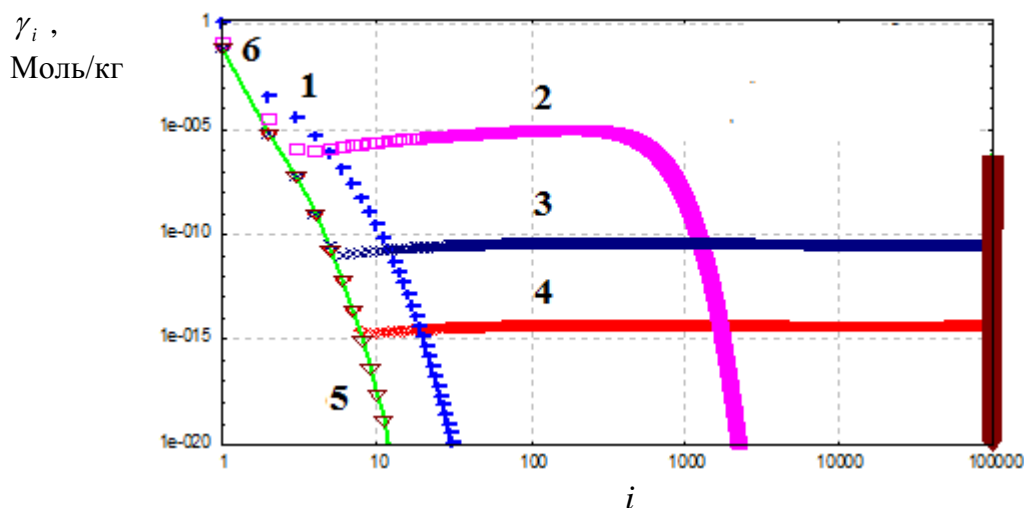


Рис. 5.6. Функция распределения кластеров по размерам в различные моменты времени (1 – $t=0$, 2 – 3 мкс, 3 – 450 мкс, 4 – 570 мкс, 5 – 1000 мкс), 6 (зеленая кривая) – равновесная функция распределения.

При моделировании неравновесной конденсации в сопле решается система дифференциально-алгебраических уравнений, аналогичная, приведенной в главе 2.

$$\frac{d}{dx} \rho u F = 0, \quad \frac{d}{dx} (\rho u^2 + p) F = p \frac{dF}{dx}, \quad \frac{d}{dx} \rho u \left(h + \frac{u^2}{2} \right) F = 0, \quad (5.56)$$

дополненная уравнениями кинетики конденсации:

$$\frac{d}{dx} \rho u F \gamma_i = F \Phi_i, \quad i = 2, 3, \dots, N, \quad \sum_{i=1}^N n_i n_i \gamma_i = \text{const} = \gamma_0, \quad \gamma_A = \text{const}.$$

И уравнениями состояния, которые могут быть определены из вида потенциала Гиббса рассматриваемой смеси (раздел 5.2)

$$G(p, T, \gamma) = \gamma_A (G_A^0(T) + RT \ln \frac{p x_A}{p_0}) + \gamma_1 (G_1^0(T) + RT \ln \frac{p x_1}{p_0}) + \sum_{i=2}^N n_i \gamma_i (n_i G_L^0(T) + B(T) n_i^{\frac{2}{3}} + RT \ln \frac{p x_i}{p_0}).$$

Термическое уравнение состояния:
$$\rho = \frac{p}{RT \left(\gamma_A + \sum_{i=1}^N n_i \gamma_i \right)}. \quad (5.57)$$

Калорическое уравнение состояния

$$h = \gamma_A H_A^0(T) + \gamma_1 H_1^0(T) + \sum_{i=2}^N n_i n_i \gamma_i H_L^0(T) + (B(T) - TB'(T)) \sum_{i=2}^N n_i^{\frac{2}{3}} n_i \gamma_i, \quad (5.58)$$

где $B(T) = (36\pi m_1^2 N_A)^{\frac{1}{3}} \sigma(T) (\rho_L(T))^{\frac{2}{3}}$, $B'(T) = B(T) \left(\frac{\sigma'(T)}{\sigma(T)} - \frac{2\rho_L'(T)}{3\rho_L(T)} \right)$.

В качестве начальных данных обычно используются значения давления, температуры, массовых долей конденсирующегося и инертного газа в тигле. По ним рассчитывается равновесная функция распределения конденсирующихся паров по размерам и полная энтальпия (по алгоритмам, приведенным в разделах 5.1 и 5.2).

Система (5.56) может быть решена методом, описанным в разделе 2.2.6 с прохождением особой точки в окрестности критического сечения. В работе при расчете процесса конденсации решается так называемая обратная задача. Для этого вначале с использованием предположения о замороженности функции распределения рассчитывается изэнтропическое течение с переходом через скорость звука в критическом сечении. Для этого используется алгоритм, описанный в разделе 2.1.7. Решается система нелинейных уравнений

$$\rho u F = Q_0, \quad S = S_0, \quad h + \frac{u^2}{2} = H_0.$$

В начальном сечении считаются известными энтропия и полная энтальпия

$$S|_{x=x_0} = S_0, \quad h + \frac{u^2}{2} \Big|_{x=x_0} = H_0.$$

Параметры S_0 , H_0 - равны соответствующим параметрам в тигле. Расход Q_0 определяется из условия равенства скорости течения газа, скорости звука, в минимальном сечении сопла: $u|_{x=x_*} = a|_{x=x_*}$.

Здесь:
$$a^2 = \frac{\rho h_T}{\rho h_T \rho_p + \rho_T (1 - \rho h_p)}, \quad \frac{1}{\rho} = (\gamma_A + \sum_{i=1}^N n_i \gamma_i) \frac{RT}{p}. \quad (5.59)$$

Считается, что распределение давления при неравновесном протекании процесса близко к рассчитанному. И интегрируется система (5.56) при известном распределении

давления $p(x)$. Это так называемая “обратная задача теории сопла”. То есть решается система, полученная из (5.56) путем эквивалентных преобразований

$$h + \frac{u^2}{2} = H_0, \quad dh - RT(\gamma_A + \sum_{i=1}^N n_i \gamma_i) d \ln(p(x)) = 0, \quad \frac{d}{dx} \gamma_i = \frac{1}{\rho} \Phi_i, \quad i = 2, 3, \dots, N.$$

Решение ведется до координаты x_l , в которой выполняется условие: $\frac{u}{a} \geq 1.01$. Площадь контура, соответствующая полученному решению, определяется из: $\rho u F = Q_0$. Далее от полученных в сечении x_l данных решается прямая задача теории сопла. Используемый подход позволяет получить приемлемое с практической точки зрения решение (5.56) с минимальными вычислительными затратами [109].

Рассмотрим результаты исследования процесса образования кластеров аргона в коническом сопле. Исследовалось влияние на процесс образования кластеров аргона начального давления над соплом и угла раствора конуса расширяющейся части сопла (β) [250]. На рис. 5.7 представлены результаты расчета процесса конденсации в сопле (рис. 5.7а) длиной 110 мм и диаметром критического сечения 0.75 мм при начальных давлении $p = 3 \cdot 10^5$ Па и температуре $T = 298,15$ К. Конденсация начиналась в сверхзвуковой части сопла (рис. 5.7в), увеличение β приводило к более раннему началу процесса, при этом средний размер кластеров, подсчитанный с учетом мономеров ($I_{m1} = \sum_{i=1}^{\infty} i \gamma_i / \sum_{i=1}^{\infty} \gamma_i$) возрастал (рис. 5.7 в), а без учета мономеров ($I_{m2} = (\sum_{i=1}^{\infty} i \gamma_i - \gamma_1) / (\sum_{i=1}^{\infty} \gamma_i - \gamma_1)$) убывал (рис. 5.7 г). Также несколько увеличивалось максимальное переохлаждение, при этом заметно уменьшалось минимальное достигаемое в сопле давление (рис. 5.7). Графики 1 в и 1 г строятся путем обработки соответствующих графиков функции распределения кластеров по размерам.

Необходимо отметить, что для описания бесконечной системы кластерообразования должна использоваться конечная система с числом рассматриваемых кластеров N , существенно превышающим средний размер кластеров, рассчитанный без учета мономеров (рис. 5.7г). Для исследования аргона расчеты с $N < 100000$ приводили к существенному ухудшению точности расчетов (кривые 2, 3, рис. 5.9), а также наблюдался нефизический эффект: два скачка конденсации (кривая 2, рис. 5.9).

На рис. 5.10 и 5.11 приведены функции распределения кластеров по размерам и число молей мономеров в кластерах в различных сечениях ($X_1=0.0119\text{м}$, $X_2=0.0140\text{м}$, $X_3=0.0149\text{м}$, $X_4=0.0163\text{м}$, $X_5=0.0355\text{м}$.) конического (с углом полураствора 10° градусов) сопла. Координаты сечений отсчитываются от начала сопла. Из рисунков следует, что начиная с некоторого расстояния ($X > X_2$) в функции распределения возникает экстремум, который по мере продвижения по соплу к срезу смещается вправо.

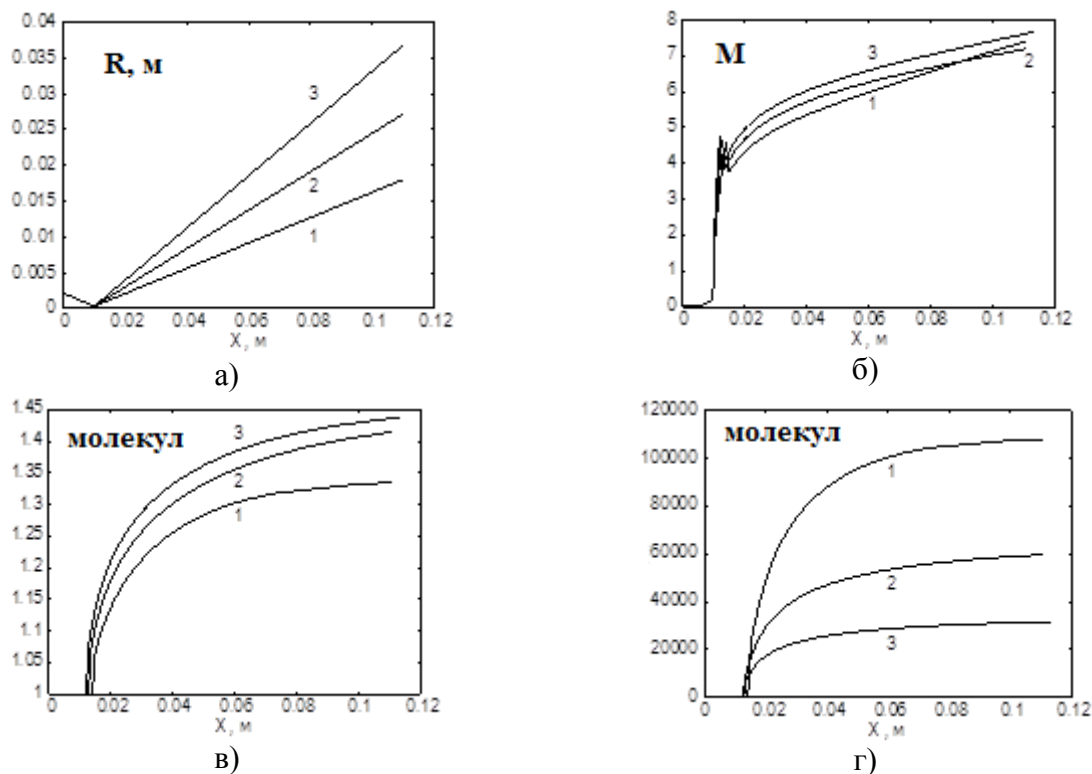


Рис. 5.7. Зависимость параметров от продольной координаты (а – радиус сопла, б – число Маха, среднего размера кластера с учетом (в) и без учета (г) мономеров; 1 - $\beta = 10^\circ$, 2 - $\beta = 15^\circ$, 3 - $\beta = 20^\circ$).

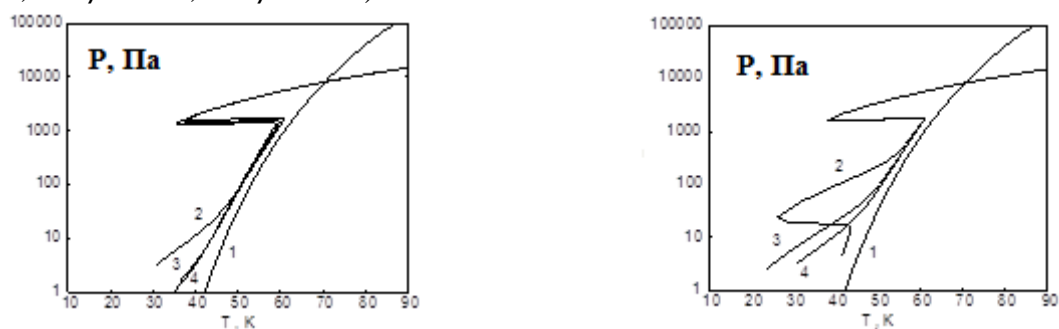


Рис. 5.8. P - T диаграмма процесса (1 – кривая насыщения, 2 - $\beta = 10^\circ$, 3 - $\beta = 15^\circ$, 4 - $\beta = 20^\circ$).
 Рис. 5.9. P - T диаграмма процесса при различной размерности системы ($\beta = 10^\circ$, 1 – кривая насыщения, 2 - $N=6 \cdot 10^4$, 3 - $N=10^5$, 4 - $N=1.2 \cdot 10^5$).

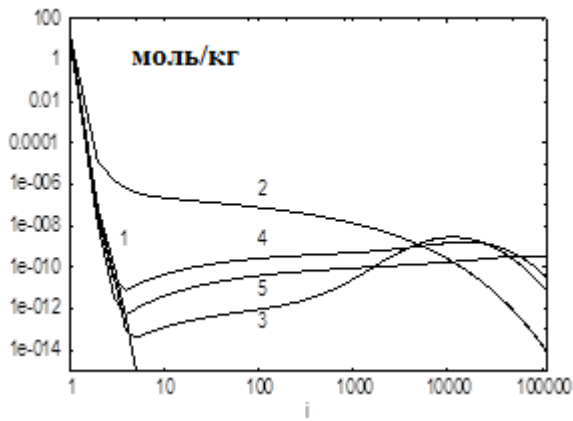


Рис. 5.10. Функция распределения кластеров по размерам

($\beta = 10^0, N = 1.2 \cdot 10^5$). 1 – 0.0119м, 2 – 0.0140м, 3 – 0.0149м, 4 – 0.0163м, 5 – 0.0355м)

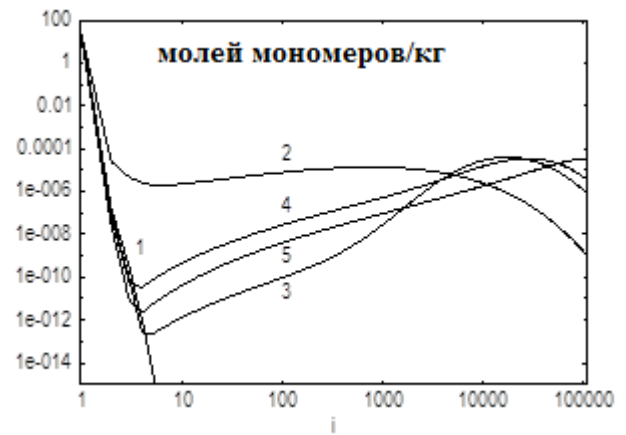


Рис. 5.11. Число молей мономеров в кластерах

Исследование конденсации паров меди в сопле

Ультрадисперсные медные порошки используются в электронной промышленности (производство токопроводящих покрытий и паст, паяльных паст); порошковой металлургии (изготовление изделий с высокой прочностью и пластичностью); лакокрасочной промышленности (производство смазочных материалов); химической промышленности (в качестве катализатора) и др. Последнее время возрос интерес к порошкам с диаметром частиц, составляющим 10-100 нм. Одним из способов получения таких порошков является гомогенная конденсация паров металлов. В разделе исследуется процесс образования наночастиц меди при течении смеси паров меди с аргоном в сопле [41, 55, 109]. Термодинамические свойства меди заимствовались из [121]. В частности, на рис. 5.12-5.15 представлены результаты расчета процесса конденсации в сопле длиной 60 мм и диаметром критического сечения 12 мм при заданных давлении ($P = 10^6 \text{ Па}$) и температуре ($T = 3000 \text{ К}$) в испарителе. Конденсация начиналась в сверхзвуковой части сопла (рис. 5.12, 5.13). Увеличение массовой доли меди (z) приводило к более раннему началу и более интенсивному протеканию процесса.

Необходимо отметить, что для корректного описания процесса конденсации при $z < 0.5$ было достаточно задать $N=10000$ (“преобразование” $\varphi(j)$ в данных расчетах не использовалось) при $z=0.1$ (кривая № 5, рис. 1, 2). Пришлось увеличить размерность системы до $N=50000$ (при меньшем числе N наблюдались не физические эффекты, например, два скачка конденсации).

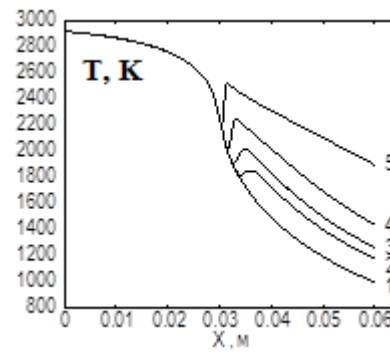
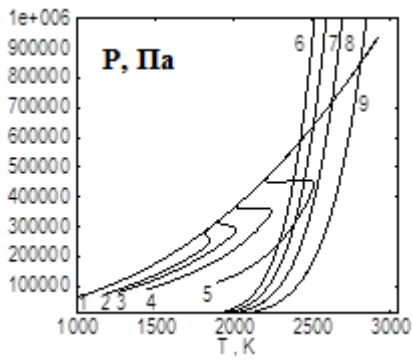


Рис. 5.12. Фазовые траектории процесса на плоскости P-T.

Рис. 5.13. Изменение температуры в сопле от продольной координаты

1 – конденсация отсутствует, 2 – $z = 0.02$, 3 – $z = 0.03$, 4 – $z = 0.05$, 5 – $z = 0.1$. 6-9 – соответствующие 2-5, кривые насыщения

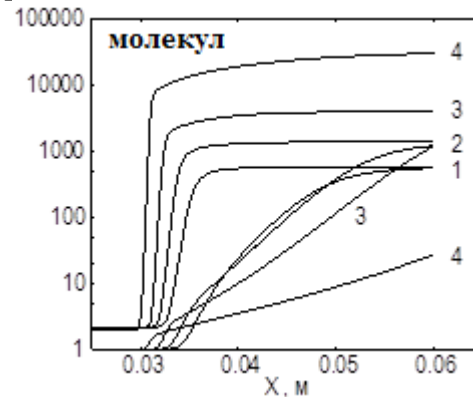
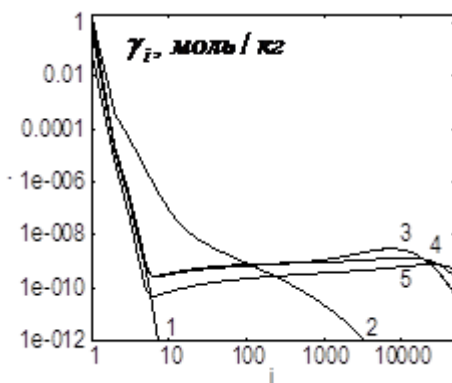


Рис. 5.14. Функция распределения кластеров по размерам ($z = 0.1$) при различных значениях продольной координаты (1 – 3.3 мм, 2 – 29.9, 3 – 32.7, 4 – 38.6, 5 – 60,0).

Рис. 5.15. Изменение среднего размера кластеров в зависимости от продольной координаты (1 – $z = 0.02$, 2 – $z = 0.03$, 3 – $z = 0.05$, 4 – $z = 0.1$).

На рис. 5.14 приведена динамика изменения функции распределения кластеров по размерам. Равновесная (кривая 1) в начале процесса, функция распределения, по мере заглубления в метастабильную область перестраивается. Образуются в заметных концентрациях кластеры больших размеров (кривые 2, 3). Наблюдается скачок конденсации, сопровождаемый ростом температуры (рис. 5.12, 5.13, кривые 5) и резким увеличением среднего размера кластеров, рассчитанного без учета мономеров (верхняя кривая 4, рис. 5.15). Кривые 4, 5 (рис. 5.14) соответствуют участку с монотонным падением температуры (рис. 5.12, 5.13). Наблюдается стабилизация среднего размера кластеров (верхняя кривая 4, рис. 5.15) и уменьшение числа мономеров (рост среднего размера, рассчитанного с учетом мономеров – нижняя кривая 4, рис. 5.15). Близкие значения среднего размера кластеров, рассчитанные с учетом и без учета мономеров, свидетельствуют о достижении предела допустимости использования рассматриваемой квазихимической модели конденсации. В рассматриваемом случае получены средние

размеры кластеров меди, равные при учете и без учета мономеров при $z = 0.02 - I_s = 560$ молекул, при $z = 0.03 - I_s = 1300$ молекул; и без учета мономеров при $z = 0.05 - 3000$ молекул, и при $z = 0.1 - 40000$ молекул (рис. 5.15).

Исследование процесса конденсации воды в соплах с большой степенью расширения

Гомогенная кластеризация воды имеет место в аэродинамических соплах, соплах и струях ракетных двигателей, в различных технологических установках [109, 205, 209, 225, 233, 235, 250]. Экспериментальному и теоретическому изучению процесса конденсации воды посвящено значительное количество работ, выполненных как более 30 лет назад, обзор которых приведен в [109], так и в настоящее время, обзор которых приведен в [117, 160]. В разделе исследуется конденсация паров воды в соплах с большой геометрической степенью расширения. Численно моделируется течение невязкого газа в осесимметричных соплах и струях в рамках квазиодномерного приближения. Математическая модель такого течения - это система одномерных уравнений Эйлера, записанная в дивергентной форме, дополненная уравнениями кинетики конденсации и термическим и калорическим уравнениями состояния многокомпонентного газа. В соответствии с квазихимической моделью конденсации считается, что конденсирующаяся фаза состоит из смеси кластеров, состоящих из произвольного числа молекул. Каждый компонент смеси моделируется в рамках модели совершенного газа [121]. Считается, что число мономеров существенно превосходит число кластеров больших размеров, и соответственно в процессе роста и разрушения кластеров основную роль играет реакция присоединения (отрыва) мономеров [40, 46, 56, 81, 301].

При исследовании процесса конденсации в соплах обычно считается, что в ресивере конденсирующийся газ находится в стабильном состоянии, и функция распределения кластеров по размерам близка к дельта- функции и может быть рассчитана из условий термодинамического равновесия. Для нахождения функции распределения кластеров в сопле в начале производится расчет с замороженной функцией распределения, затем при рассчитанной зависимости плотности от продольной координаты решается обратная задача теории сопла до числа Маха потока 1.01, далее решается прямая задача.

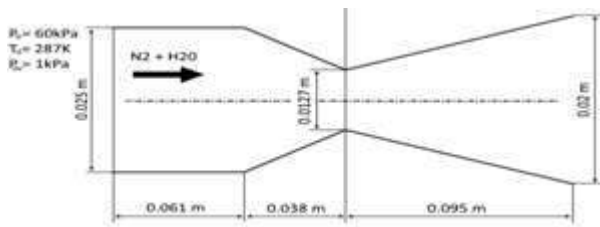


Рис. 5.16. Рассматриваемое сопло.

Моделируются условия эксперимента из работы [303]. Рассчитывается конденсация паров воды в азоте при течении в плоском сопле (рис. 5.16). 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). Вначале были проведены расчеты, целью которых было определение минимального числа учитываемых кластеров, обеспечивающих корректность проводимых вычислений. Результаты расчетов приводятся на рис. 5.17. На приведенных графиках максимальный размер учитываемых кластеров N равен 1000 – фиолетовая кривая; 2000 – синяя, 3000 – зеленая, 10000 – красная. Четко видна сходимость результатов расчетов. В дальнейшем расчеты проводились с $N = 10000$.

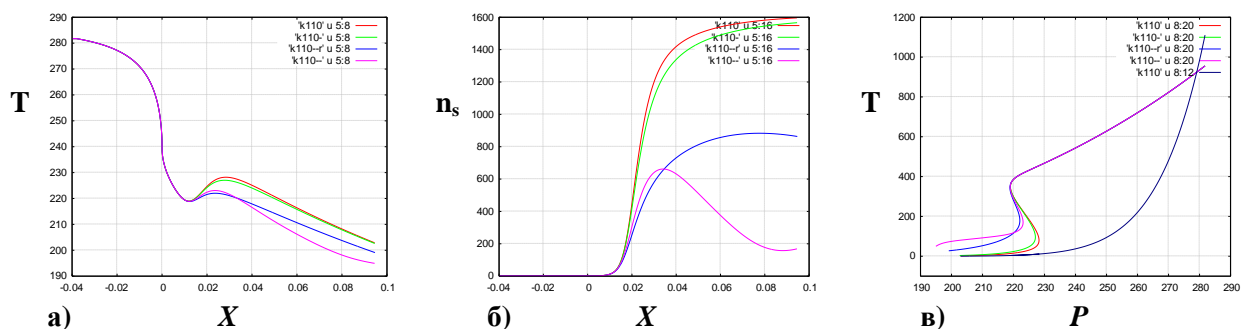


Рис. 5.17. Зависимость температуры (а) среднего размера кластеров (б) от продольной координаты. P-T диаграмма процесса (в).

На рис. 5.18а представлено сравнение распределения давления в сопле с экспериментальными данными [303]. На рис. 5.18б рассчитанная p-T диаграмма процесса. На рис. 5.18в динамика изменения функции распределения кластеров по размерам. На рис. 5.18г массовая доля воды, заключенная в кластерах размером от 1 – ого до i . Можно отметить, что процесс конденсации начал влиять на макропараметры смеси в одном сантиметре от критического сечения сопла (рис. 5.18а). В 18 миллиметрах от критики в мономерах содержится более 70 процентов массы, 30 % содержится в кластерах размером от 100 до 1000 молекул. При $X=32\text{мм}$ 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 (рис. 5.18в), 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.

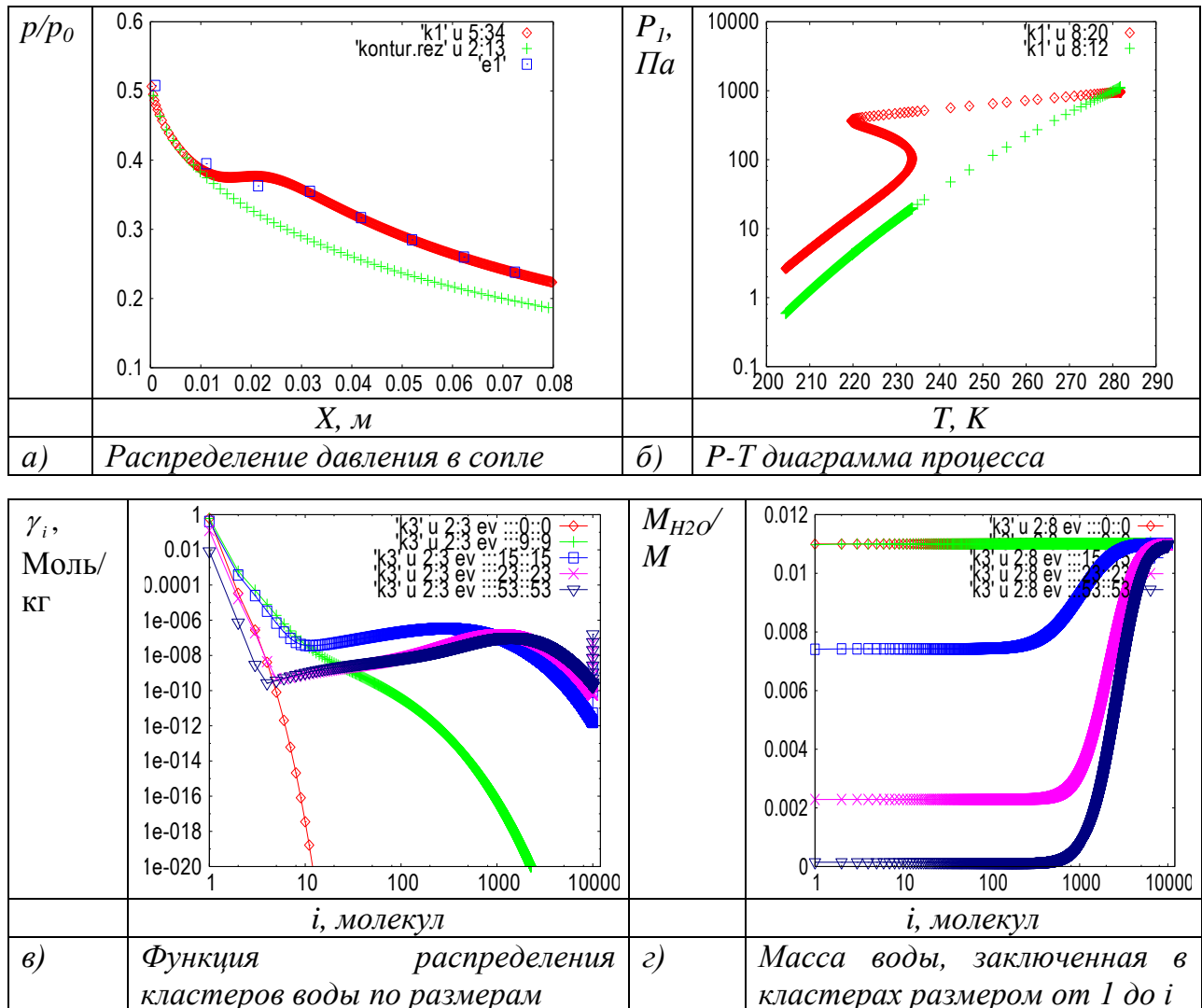


Рис. 5.18. Параметры процесса конденсации паров воды. Координаты, которым соответствуют графики функции распределения кластеров по размерам : 0 – -0.04 м, 9 – 0.0018, 15 – 0.018, 23 – 0.032, 53 – 0.09

5.5. Моделирование 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. Конденсация свинца исследовалась в большом числе работ, в частности, в [14, 56]. Для моделирования процесса образования кластеров свинца вначале 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. Контур сопла в безразмерном виде приведен на рисунке. Численное моделирование проводилось на разностной сетке размером 750x500 . На рис. 5.20-5.23 приведены изолинии параметров течения. Полученные газодинамические поля в сопле и струе тормозного ракетного двигателя служили исходными данными для численного моделирования течения конденсированной фазы, которое проводилось автором.

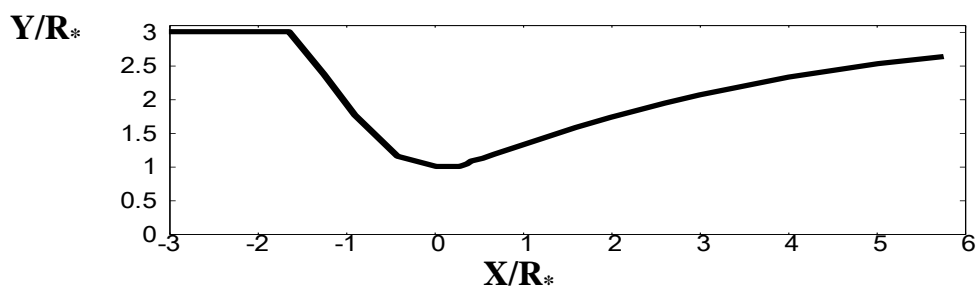


Рис. 5.19. Безразмерный контур сопла ($R_* = 0.019$ м)

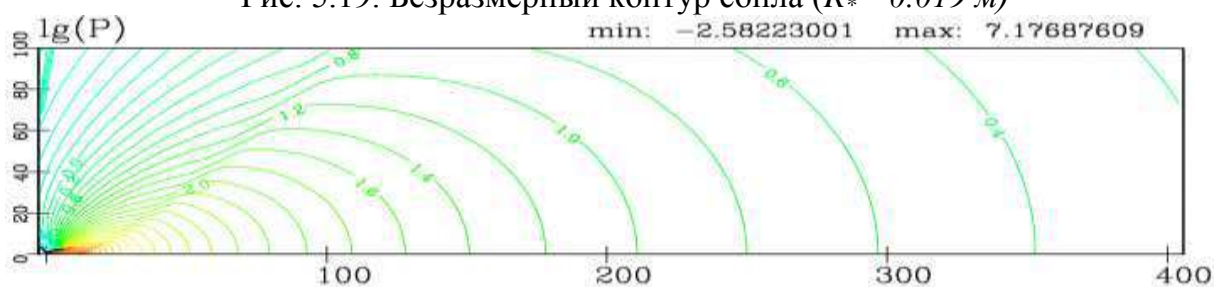


Рис. 5.20. Изолинии поля логарифма давления

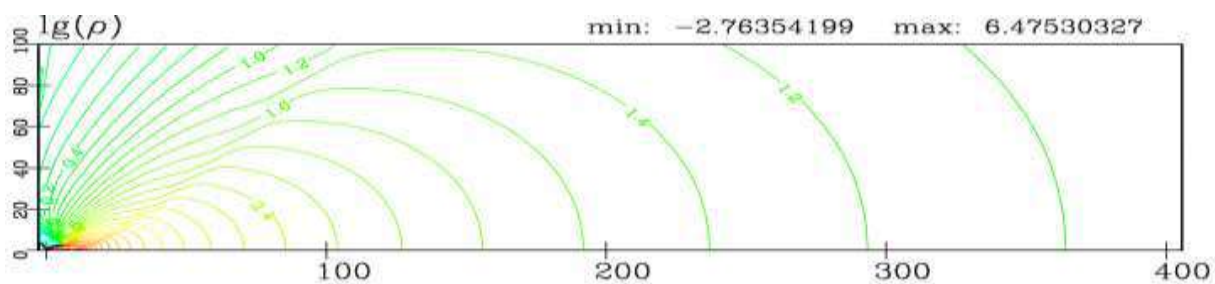


Рис. 5.21. Изолинии поля логарифма плотности

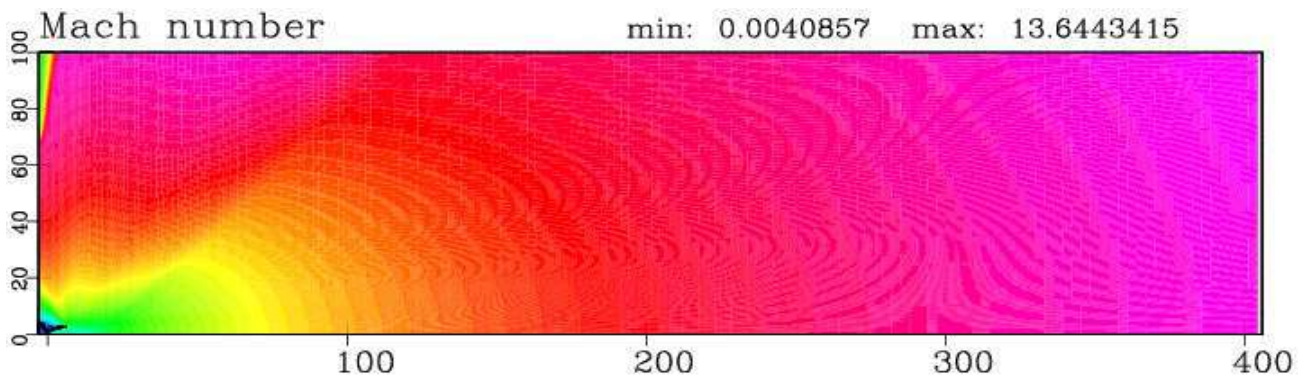


Рис. 5.22. Поле чисел Маха

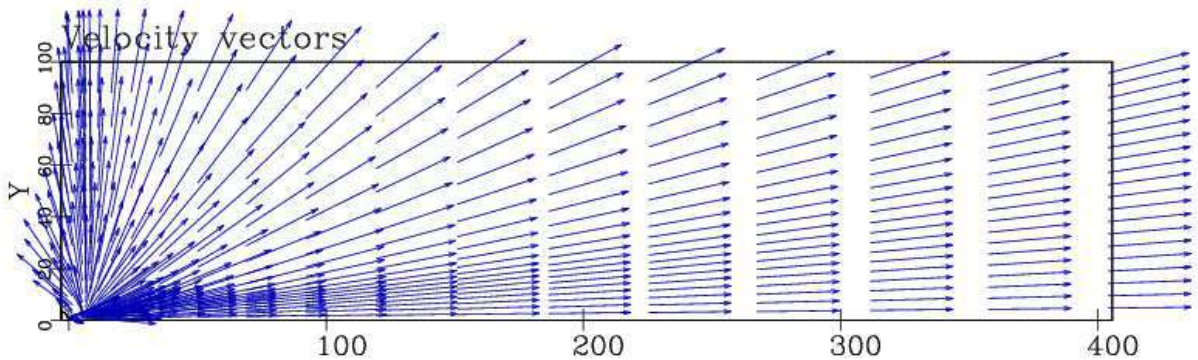


Рис. 5.23. Поле векторов скорости

Строились линии тока газа (рис. 5.24), вдоль которых рассчитывался процесс конденсации свинца. Был рассмотрен случай, когда массовая доля свинца в топливе, а, следовательно, и в потоке составляла 0.8 процента.

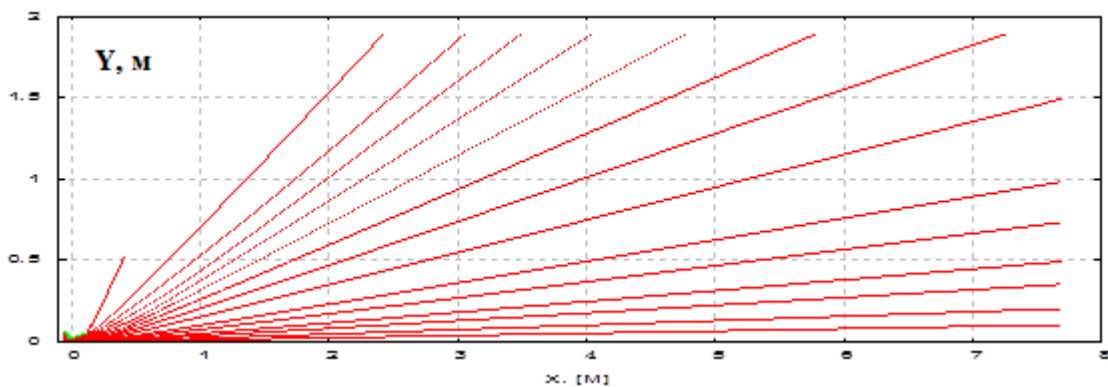


Рис. 5.24. Линии тока газа (дальнее поле)

Было проведено математическое моделирование процесса конденсации паров свинца в сопле и струе двигателя. Методика численного моделирования описана в разделах 5.1-5.4. Для численного моделирования были выбраны три характерные траектории газа: ось, средняя и периферийная (рис. 5.25). На рисунках 5.26 и 5.27 представлены зависимости температуры и плотности газа, от времени вдоль соответствующих траекторий.

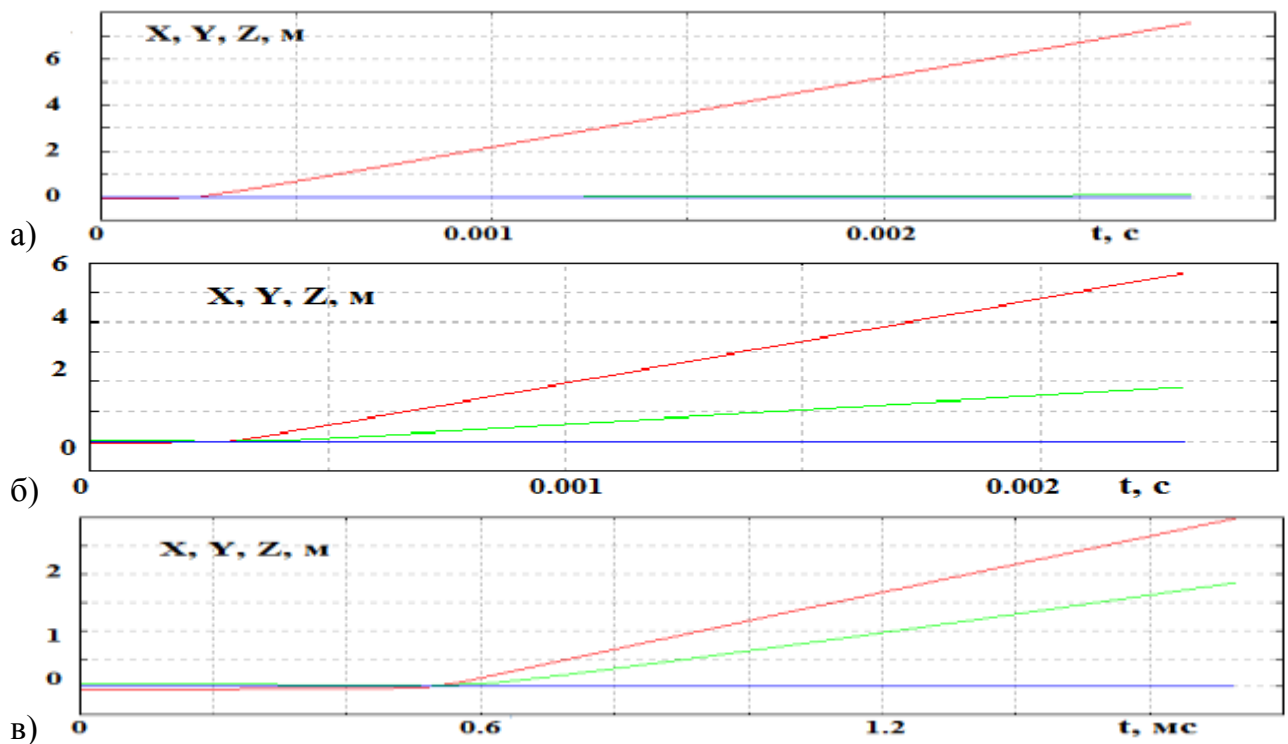


Рис.5.25. Зависимость координат от времени вдоль траектории

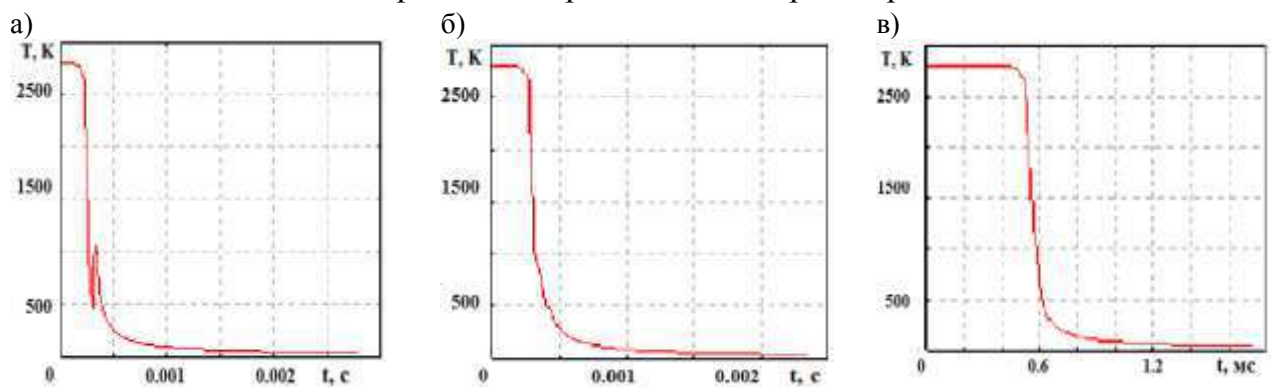


Рис. 5.26. Зависимость температуры вдоль траектории

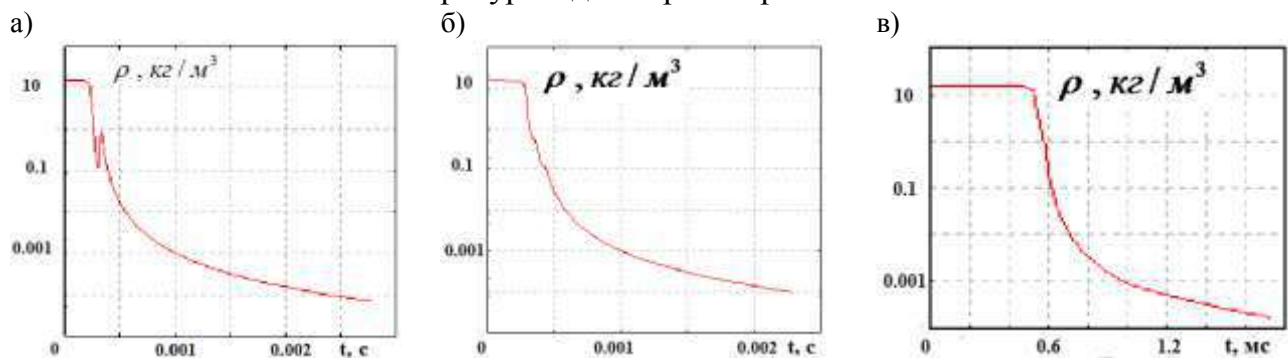


Рис. 5.27. Зависимость плотности вдоль траектории

На рис. 5.28 и 5.29 представлена мольно-массовая (число молей кластера) и массовая (число молей мономеров) функции распределения кластеров свинца по размерам. Красная кривая соответствует начальной функции распределения на входе в сопло, зеленая – срезу сопла, светло синяя - ~20 см от среза сопла, остальные – 80 см от среза сопла и далее.

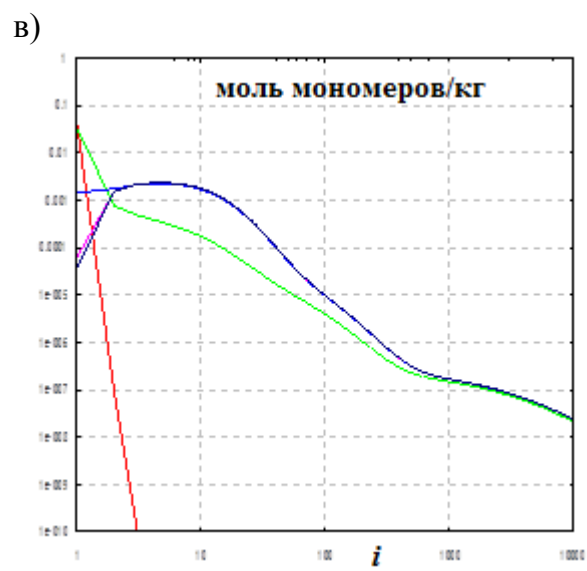
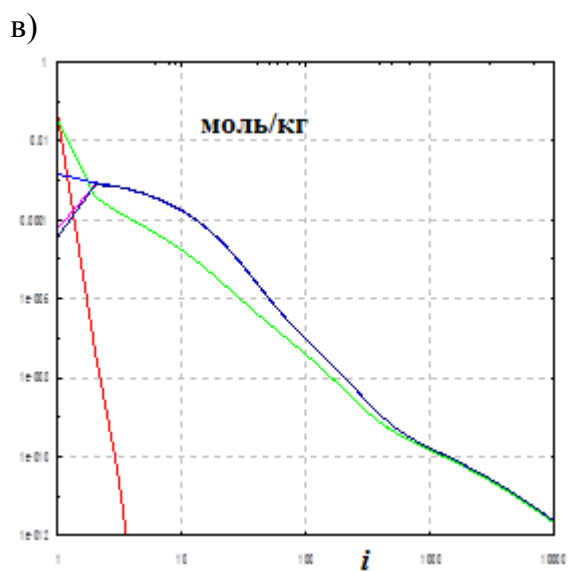
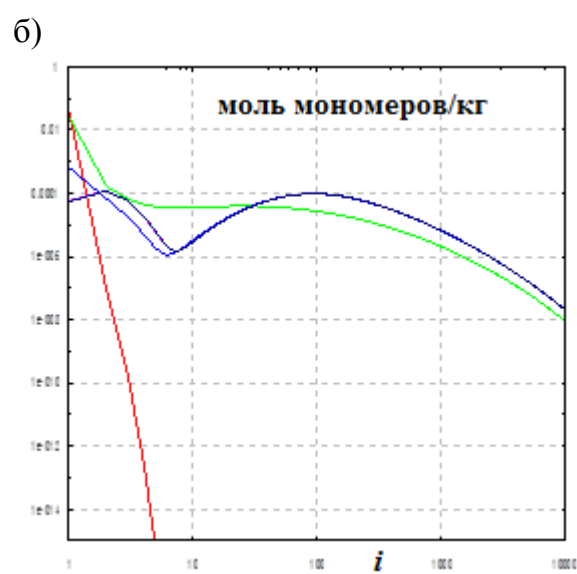
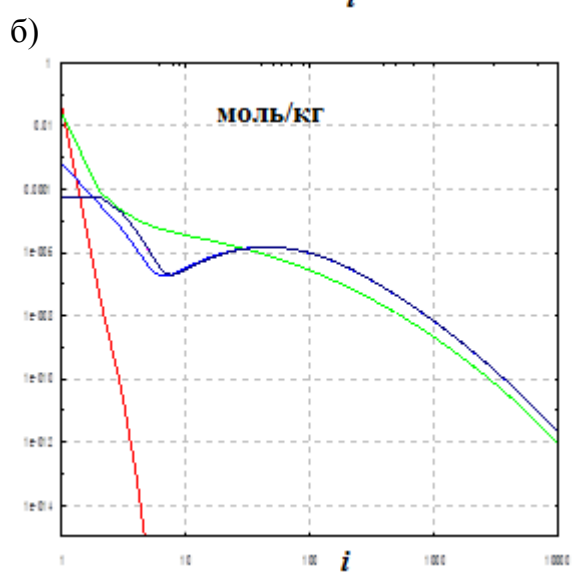
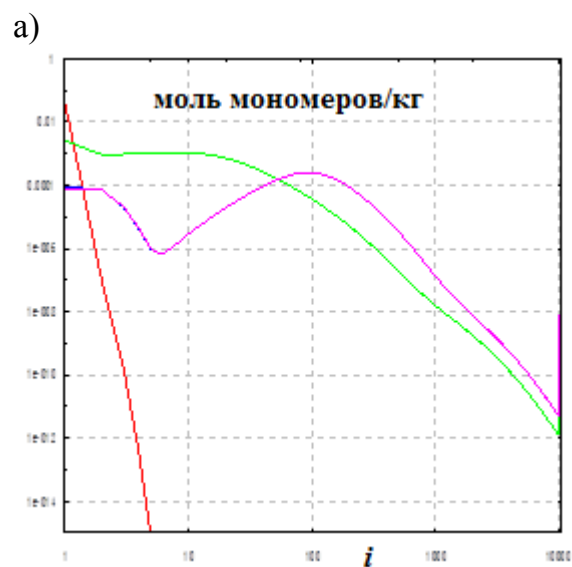
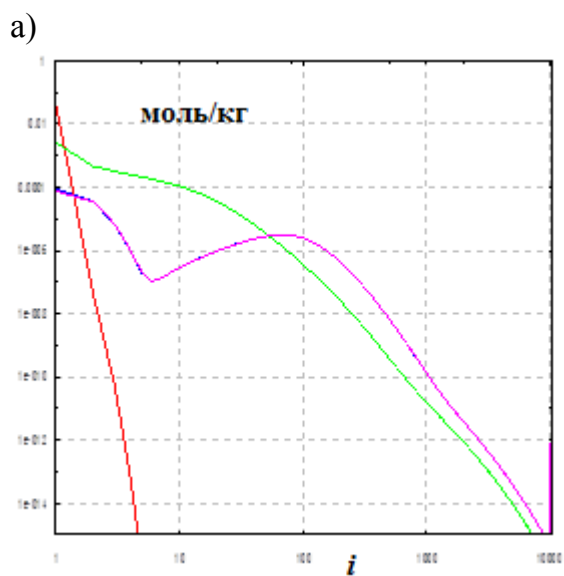
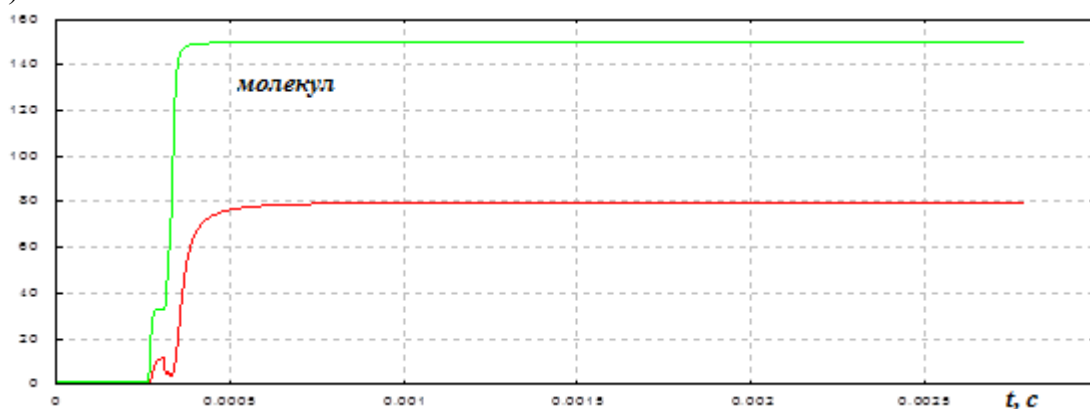


Рис. 5.28. Функция распределения кластеров по размерам

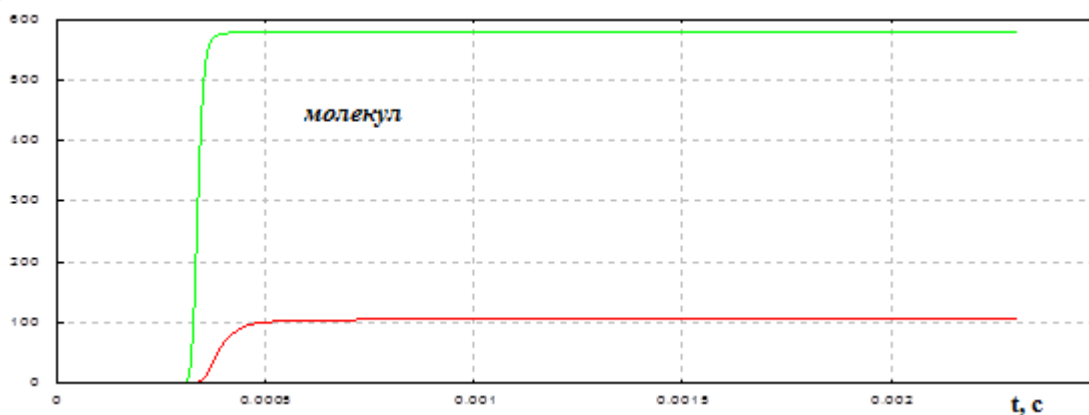
Рис. 5.29. Функция распределения числа мономеров в кластеров

На расстоянии более 1 метра от среза сопла функция распределения меняется крайне слабо, функция распределения замораживается, средний размер кластеров (рис. 5.29) остается неизменным и следовательно, образовавшиеся кластеры достигают поверхности летательного аппарата практически без изменения. Необходимо отметить, что проведенная серия расчетов находится на пределе допустимости применяемой модели конденсации. Используемую модель неравновесной конденсации можно считать справедливой, пока мольно-массовые концентрации мономеров существенно превосходят концентрации кластеров других размеров.

а)



б)



в)

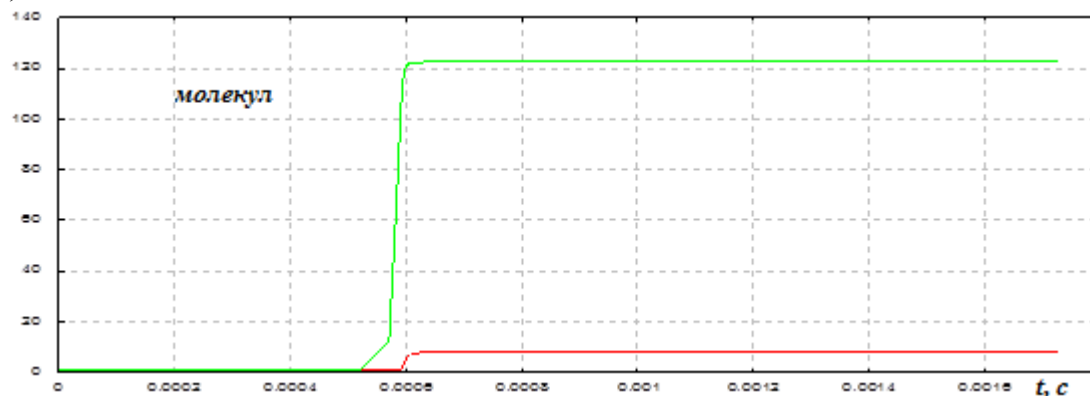


Рис. 5.30. Зависимость среднего размера кластеров от времени

Расчеты показывают, что средний размер кластеров является немонотонной функцией угла разлета. На оси струи средний размер кластеров составляет 80 молекул (без учета мономеров 150), в периферийной зоне струи 10 и 120 молекул, соответственно, в середине струи 100 и 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.

5.6. Особенности моделирования расширения конденсирующихся паров в вакуумную камеру

В данном разделе в квазиодномерной нестационарной постановке, допускающей наличие сферической, цилиндрической или плоской симметрии, численно моделировались нестационарные течения [40-43], которые за исключением симметрии во многом остальном аналогичны реальным течениям, имеющим место в экспериментах, описанных в [39]. В частности, рассматриваются течения, возникающие в процессе расширения облака газа высокого давления в фоновом газе низкого давления. Именно такой случай реализуется в вакуумных камерах некоторых экспериментальных установок [39], когда вследствие недостаточно глубокого откачивания камеры в ней остается некоторое количество газа. В соответствующих экспериментах облако газа высокого давления образовывалось либо в результате электрического взрыва фольги или тонкой проволоочки при пропускании через них сильного разрядного тока от батареи конденсаторов [39], либо в результате испарения исследуемого вещества при воздействии на него импульса излучения мощного лазера [39].

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.

При численном моделировании не учитывались эффекты вязкости, теплопроводности и диффузии. 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, приведенными в разделах 5.1-5.4. Для численного решения системы уравнений

используется сеточно-характеристический метод, описанный в главе 3, который позволяет проводить численное моделирование с явным выделением ударных волн, контактных разрывов и характеристик. При моделировании течения в вакуумной камере рассматривалась следующая модельная постановка задачи. Исследовалось течение, возникающее в трубе, закрытой с обоих концов. Часть объема трубы, прилегающая к левому концу, заполнялась парами серебра при давлении 5750 Па и температуре 2000 К. При расширении паров серебра с такими начальными параметрами возможно кластерообразование. Тонкие пленки из серебра обладают рядом уникальных свойств и находят широкое применение в различных приложениях, Как уже отмечалось выше, одним из способов получения осаждаемых на поверхность потоков кластеров паров металлов является процесс расширения в смеси, состоящей из паров серебра и благородного газа в веерах волн разрежения и струях. Современное состояние исследований в данной области приведено, например в [34]. В остальной части трубки находился разреженный воздух при давлении 100 Па и температуре 300 К. Рассматривалось течение, возникающее после распада данного разрыва. Газы считались совершенными с постоянными показателями адиабаты. Характерной особенностью рассматриваемого течения является наличие в нем сильных и слабых разрывов. Вправо распространяются сильные разрывы: ударная волна (линия D_1 , рис. 5.31a) по разреженному воздуху, контактный разрыв между воздухом и парами серебра (линия K_1 , рис.5.31a). Слабыми разрывами являются характеристики семейства C -, распространяющиеся по парам серебра, образующие веер волн разрежения (начальная характеристика веера обозначена C_{i1} , замыкающая - C_{e1} . После взаимодействия сильных разрывов друг с другом в рассматриваемом течении возникают новые сильные разрывы и веера волн разрежения (рис. 5.31б). Численное моделирование ведется маршевым сеточно-характеристическим методом по слоям $t=const$. Сеточными линиями являются траектории газа, ударных волн, контактных разрывов, а также левая и правая стенки, ограничивающие расчетную область. Построенная таким образом сетка является максимально адаптированной к картине течения (рис. 5.31a), траектории газа отсутствуют, чтобы не загромождать расчетную область). Темная зона справа при $t > 10^5$ с соответствует большому числу сильных и слабых разрывов, взаимодействующих между собой в окрестности правой стенки. Прямоугольный фрагмент этой области, ограниченный на рис. 5.31a штриховыми линиями, в увеличенном масштабе показан на

рис. 5.31б. Сплошными линиями представлены траектории ударных волн, пунктирной – контактные разрывы, тонкими сплошными – характеристики одного из вновь образованного и отслеживаемого в расчете веера волн разрежения. Из рис. 5.31б видно, что слой сжатого остаточного газа, заключенного между контактными разрывом K_1 и стенкой, является неким подобием резонатора для ударных волн, которые отражаются от его границ. Причем на стенке происходит полное отражение ударных волн, а на контактном разрыве имеет место их частичное преломление (например D_4 и D_7). Преломленные ударные волны D_4 и D_7 взаимодействуют друг с другом, сливаются и образуют головную отраженную волну D_8 . В точке слияния в результате распада разрыва образуется также контактный разрыв K_2 и отраженный веер волн разрежения C . Последующие преломленные ударные волны также догоняют головную отраженную ударную волну, сливаются с ней, образуя в точках слияния новые контактные разрывы и веера волн разрежения. С точки зрения упомянутых выше практических приложений, наиболее важным следствием рассматриваемого течения является значительное повышение температуры в слое сжатого остаточного газа. Соответствующий график представлен на рис. 5.32, отражает повышение температуры при взаимодействии ударных волн со стенкой и понижение температуры при взаимодействии со стенкой вееров волн разрежения. Из рисунка видно, что в рассматриваемом случае после нескольких отражений температура у стенки достигает 2700 К. Необходимо отметить, что в данном слое концентрация паров серебра мала, так как они попадают туда только за счет диффузии. Поэтому в сжатом слое создаются условия для интенсивного испарения кластеров (уменьшения размеров) перед выпадением на стенку.

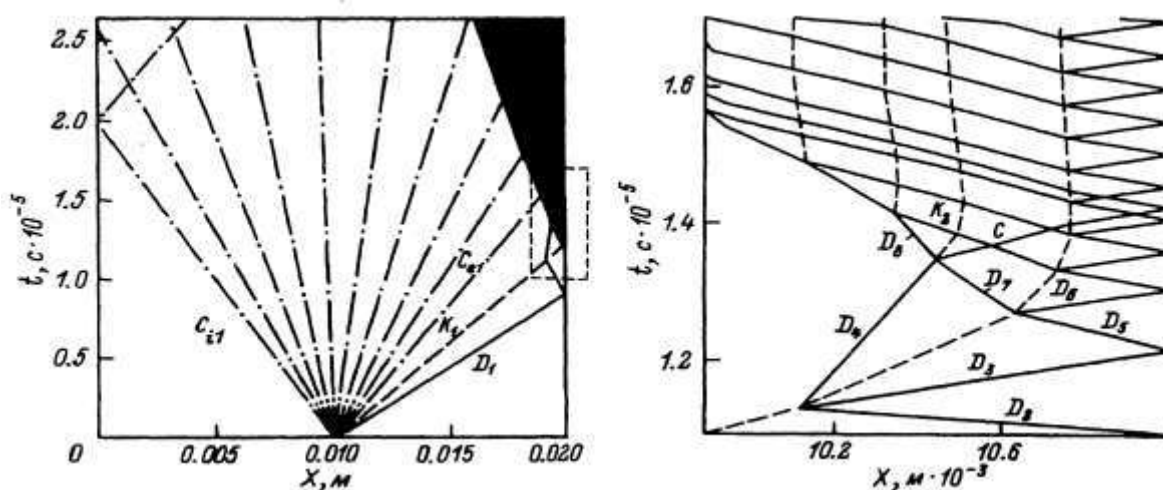


Рис. 5.31. Временная развертка течения (а), (б) – увеличенный фрагмент.

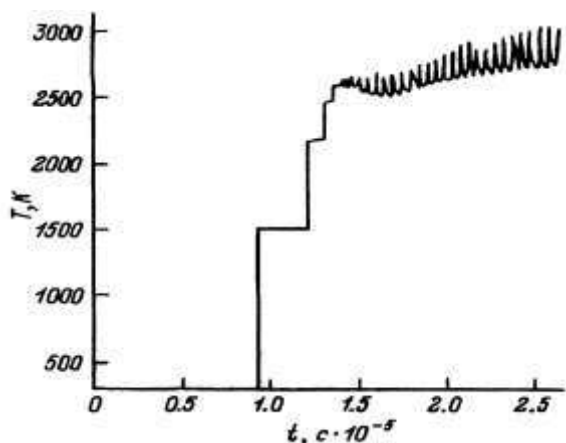
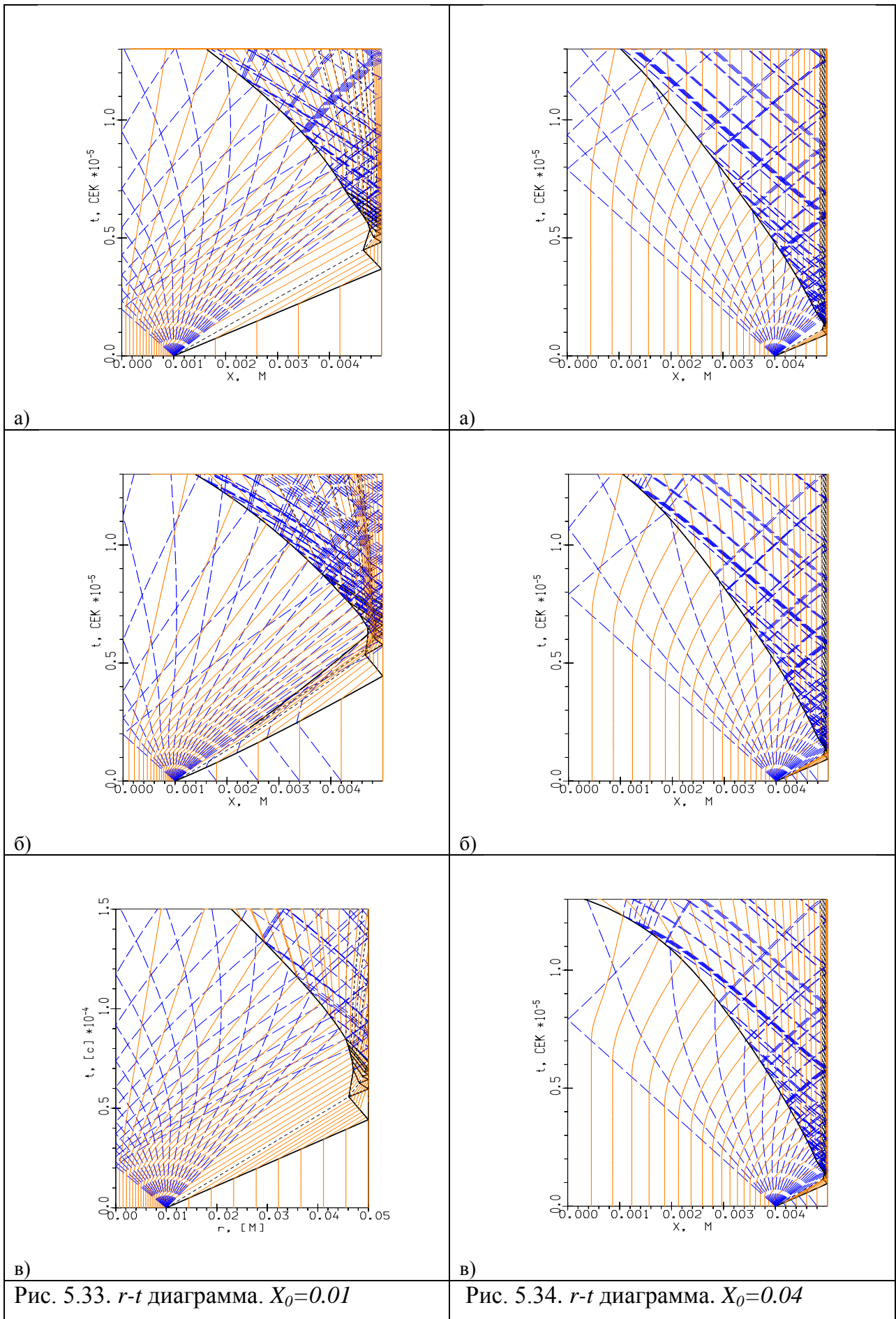


Рис. 5.32. Зависимость температуры на правой стенке от времени.

Необходимо отметить, что эффект повышения температуры будет существенно меньше в случае камер, имеющих цилиндрическую или сферическую симметрию, а также при уменьшении мишени или ее перфорации. Тем не менее, в любом случае проблема повышения температуры вблизи мишени существует, и данный факт необходимо учитывать при проектировании экспериментальных установок.

На модельной задаче исследуем влияние вида симметрии на процесс расширения. Рассмотрим расширение покоящегося в начальный момент времени облака паров серебра радиуса $r_0 = 10^{-3}$ [м] с начальными давлением $p_0 = 5270$ [Па] и температурой $T_0 = 2000$ [К] в вакуумную камеру размером $r_w = 5 \cdot 10^{-3}$ [м] с параметрами остаточного газа (пары серебра) $p_h = 10$ [Па] и $T_h = 300$ [К]. При $t = 0$ и при $r < r_0$ начальные условия задавались в виде $p(0,r) = p_0$, $u(0,r) = 0$, $T(0,r) = T_0$, $\gamma_i(0,r) = \gamma_{ie}(T_0)$, где индекс “e” означает, что концентрации кластеров соответствуют значениям на кривой равновесия при температуре T_0 . При $r > r_0$ задавались условия $p(0,r) = p_h$, $u(0,r) = 0$, $T(0,r) = T_h$. На границах рассматриваемой области (неподвижная непроницаемая стенка и ось симметрии) задаются стандартные условия равенства скорости нулю. На рис. 5.33 изображены временные развертки плоского (а), цилиндрического (б) и сферического (в) течений для случая $r_0/r_w = 4/5$. В данных расчетах поток считался "замороженным". Расчеты проводились на сетке, содержащей в начальный момент времени 44 узла (слева от контактного разрыва - 18 траекторий и 20 характеристик центрированного веера волн разрежения, справа - 4 траектории, ударная волна и контактный разрыв). В случае цилиндрической и сферической симметрии дополнительно использовались 4 характеристики второго семейства справа от контактного разрыва. На рисунках: черные линии - ударные волны, синие пунктирные - контактные разрывы, синие штрихпунктирные - характеристики, оранжевые - траектории газа.



На рис. 5.33 и рис. 5.34 представлены все использованные в расчетах сеточные линии. Относительная ошибка в законах сохранения массы и энергии составляла менее 1%. Во всех случаях реализуется головная ударная волна, бегущая по остаточному газу с низким давлением, контактный разрыв и веер волн разрежения. В дальнейшем при взаимодействии отраженной ударной волны с контактным разрывом происходит распад волны на проходящую и отраженную. Последняя в свою очередь отражается от стенки, взаимодействует с контактным разрывом и также распадается на проходящую и отраженную. В результате многократного повторения этого процесса образуется сложная волновая структура, содержащая большое количество ударных волн, распространяющихся от пристеночной зоны к левой границе. В отличие от плоского течения в цилиндрическом и сферическом случаях за контактным разрывом на граничной характеристике веера в результате пересечения характеристик одного семейства образуется "висячий" скачок, интенсивность которого больше в сферическом случае. Как хорошо видно на рис. 5.33, разработанный метод позволил получить даже мелкие детали структуры течения, которые неизбежно были бы "замазаны" при использовании методов сквозного счета. Из представленных на рис. 5.34 результатов для $r_0/r_w = 4/5$ видно, что в этом случае реализуется более простая структура течения. Однако количество линий сильных и слабых разрывов в потоке значительно и в данном случае.

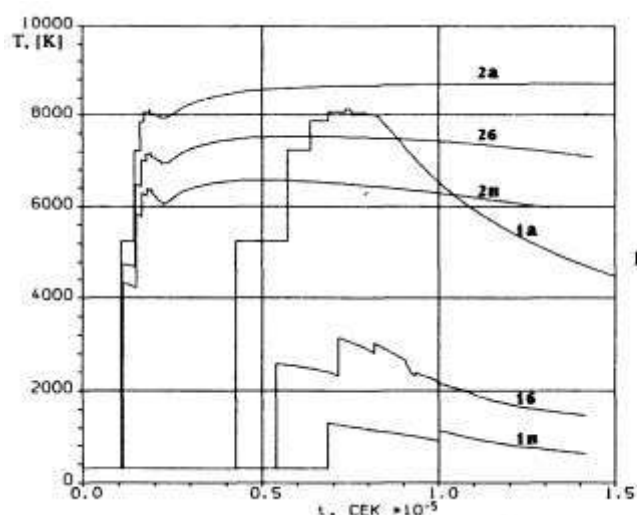


Рис. 5.35. Зависимость температуры стенки от времени при различных видах симметрии

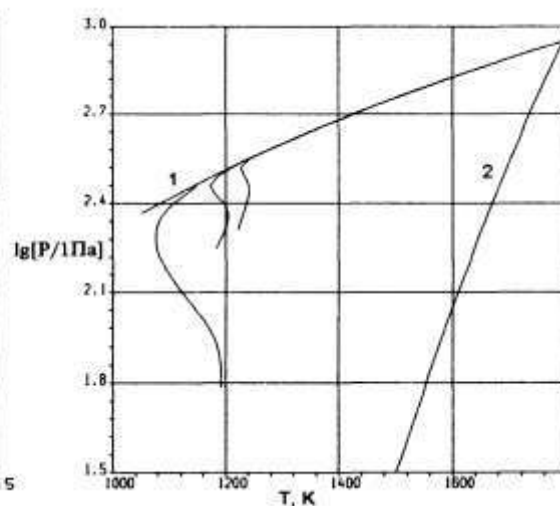


Рис. 5.36. P-T диаграмма для трех траекторий паров серебра

На рис. 5.35 представлены графики изменения температуры вдоль стенки вакуумной камеры от времени. Кривые 1а,1б,1в соответствуют рисунку 5.33, а кривые 2а, 2б, 2в – рисунку 5.34. Хорошо видно сильное увеличение температуры в пристеночном слое после прихода головной ударной волны. Если в случае 1 после некоторого увеличения температуры при взаимодействии вторичных ударных волн со стенкой наблюдается ее монотонное уменьшение, то в случае 2 на графике температуры имеется ярко выраженное "плато". Методические расчеты показали, что для обеспечения малых величин погрешности (контролировалось выполнение законов сохранения массы и энергии по слоям $t=const$) необходимо не только аккуратное выделение образующегося висячего скачка, но и распространяющегося из точки его зарождения контактного разрыва и граничных характеристик веера волн разрежения. Желательно также, чтобы используемая сетка отслеживала зону переменной энтропии, возникающую за головной ударной волной в цилиндрическом и сферическом случае ("энтропийный след"). Показанные на рис. 5.33б и 5.33в характеристики второго семейства, исходящие из точек на начальном слое, были добавлены для более точного определения точки зарождения висячего скачка.

Из-за сильного пересыщения разлетающихся паров в рассмотренном в выше течении может начаться процесс неравновесной гомогенной конденсации [109]. Данное течение изучалось с использованием квазихимической модели неравновесной гомогенной конденсации [40, 42, 55, 56, 81, 301], описанной в разделах 5.1-5.2, позволяющей рассчитывать функцию распределения кластеров по размерам. В отличие от предыдущих расчетов здесь учитывалась неидеальность паров. Рассматривалось расширение чистых паров серебра ($p_0=5270$ Па, $T_0=1792.43$ К), занимающих область размером 0.5 см, в вакуумную камеру размером 1 см, заполненную остаточными парами серебра с теми же параметрами, что и в предыдущих расчетах. Пары серебра в начальный момент времени находились в равновесном состоянии. На рис. 5.36 представлена p - T диаграмма процесса вдоль трех траекторий, проходящих слева от контактного разрыва. Хорошо видно, что наблюдается обычная для неравновесной гомогенной конденсации в расширяющихся потоках картина. 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 ("отход" кривых изменения параметров смеси вдоль траекторий от адиабаты 1 к кривой насыщения 2). На рисунке видно, что максимальное переохлаждение с удалением траектории от контактного разрыва уменьшается, что объясняется уменьшением скорости охлаждения пара [81, 109]. Полученная картина хорошо согласуется с имеющимися данными о протекании процесса неравновесной гомогенной конденсации при расширении газовых смесей.

В целом, на основании результатов тестирования вышеописанного алгоритма 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 ("замороженных", кинетических, равновесных). 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.

Изучим влияние проницаемости перфорированного экрана 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. Рассматривались течения с плоской, цилиндрической или сферической симметрией, которые описывались нестационарными квазиодномерными уравнениями Эйлера.

Поле параметров в начальный момент времени задавалось следующим образом. Предполагалось, что облако испаренного вещества занимает область пространства $0 < r < r_0$, где r - обобщенная координата, равная расстоянию от рассматриваемой точки до плоскости, оси или центра симметрии. Весь остальной объем камеры полагался заполненным фоновым газом. Скорость всюду принималась равной нулю, а температура и давление в облаке пара и в фоновом газе полагались однородными и равными соответственно T_0, P_0 и T_H, P_H . При этом дополнительно предполагалось, что $P_0 \gg P_H$, и оба газа полагались совершенными, а их теплоемкости - независимыми от температуры.

Влияние проницаемости перфорированного экрана на течение моделируется аналогично [112]. 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 совершенно не зависит от характера течения за экраном. Следовательно, последнее можно вообще не рассматривать. Что же касается поля течения перед экраном, т. е. при $0 < r < r_w$, где r_w - расстояние от экрана до плоскости, оси или центра симметрии, то его можно рассчитать, решая численно на данном интервале подходящую начально-краевую задачу для нестационарных квазиодномерных уравнений Эйлера. При этом в граничных точках данного интервала необходимо задавать граничные условия, учитывающие специфику рассматриваемой задачи.

В начале координат, т.е. при $r=0$, задавалось граничное условие симметрии $u=0$. На перфорированном экране, т.е. при $r=r_w$, вид граничного условия, корректно описывающего влияние экрана на течение перед ним, в рассматриваемом конкретном случае зависит от времени. До момента времени t_A , который соответствует приходу на экран головной ударной волны, по обе стороны от экрана находится неподвижный фоновый газ при одинаковых давлениях. Поэтому при $t_0 < t < t_A$ задавалось условие покоя $u_w=0$. Граничное условие на экране после отражения от него головной ударной волны и во все последующие моменты времени можно записать, используя допущения 1-3, в виде

$$\rho_w u_w = \rho^* a^* \varepsilon \mu, \quad (5.60)$$

где звездочкой помечены критические скорость звука и плотность газа, натекающего на экран; μ - коэффициент расхода; ε - отношение суммарной площади минимальных сечений каналов перфорации к общей площади всего экрана. Произведение $\varepsilon \mu = \eta$ называют проницаемостью перфорированного экрана. Для режимов запертого течения

через экран и при условии, что течение в каналах перфорации почти континуальное, проницаемость экрана η никак не зависит от таких параметров газа, как его скорость, давление, температура. В то же время она может зависеть от сорта газа, в частности, от его показателя изоэнтропы k . На практике проницаемость конкретного экрана для выбранного газа определяют экспериментально путем его продувки этим газом. Согласно определению η зависит не только от ε , но и от коэффициента расхода μ , значение которого на режимах запертого течения зависит, как известно, от показателя изоэнтропы k и от формы сужающейся части каналов перфорации. Однако отличием коэффициента расхода μ от единицы иногда пренебрегают и приближенно полагают $\eta \approx \varepsilon$ [112].

Физический смысл уравнения (5.60) заключается в равенстве массовых расходов газа, а именно втекающего в экран и протекающего через минимальные сечения каналов перфорации. Используя допущения 1-3 и известные газодинамические соотношения для изоэнтропических течений, можно свести данное уравнение к виду

$$M_w \left(\frac{k+1}{2+(k-1)M_w^2} \right)^{(k+1)/2(k-1)} = \eta. \quad (5.61)$$

Отсюда следует, что в рамках принятых допущений 1-3 значение числа Маха на экране M_w не может быть произвольным и должно удовлетворять уравнению (5.61). Его левая часть - это известная газодинамическая функция $q(M, k)$. При $\eta < 1$ это уравнение, как известно, имеет два корня - сверхзвуковой и дозвуковой. Для последнего введем обозначение $M_w = M_{sub}(\eta, k)$. Пусть также t_B - момент времени, когда внешняя граница расширяющегося облака достигает экрана. Тогда граничное условие на экране в зависимости от времени можно записать в следующем окончательном виде

$$\begin{aligned} M_w &= 0 && ; t_0 < t < t_A, \\ M_w &= M_{sub}(\eta, k_H); && t_A < t < t_B, \\ M_w &= M_{sub}(\eta, k_0); && t_B < t, \end{aligned} \quad (5.62)$$

где k_H и k_0 - показатели изоэнтропы соответственно фонового газа и пара. Граничное условие (5.62) совместно с характеристическими соотношениями, выполняющимися вдоль характеристик $r'_i = u$ и $r'_i = u + a$ (алгоритмы расчета граничных точек описаны в главе 3), позволяют находить все остальные параметры газа, втекающего в экран, и, следовательно, полностью доопределяют рассматриваемую начально-краевую задачу.

Так как начальное поле является разрывным, то соответствующая задача, как известно, имеет только так называемое обобщенное решение, принадлежащее классу разрывных функций. Для того, чтобы некоторое разрывное решение описывало реально наблюдаемые течения, необходимо дополнительно потребовать, чтобы скачки газодинамических параметров на сильных разрывах и скачки их производных на слабых разрывах удовлетворяли принципу неубывания энтропии и условиям кинематической и динамической совместности, из которых последние являются следствиями известных законов сохранения. Разрывные решения, удовлетворяющие указанным требованиям, называют физически допустимыми.

В данной работе для численного решения рассматриваемой задачи используется алгоритм, который позволяет получать численные решения, равномерно аппроксимирующие точные физически допустимые разрывные решения. Другими словами, погрешность получаемого численного решения имела одинаковый порядок малости во всем поле течения, включая разрывы. Это достигалось за счет использования нескольких приемов.

Во-первых, с целью корректного расчета всех областей течения, где градиенты газодинамических параметров велики, использовались несколько естественно адаптированных, подвижных разностных сеток, которые строились одновременно с расчетом поля течения. Одна из них являлась основной. Она использовалась всегда и строилась так, что ее узлы двигались вдоль траекторий газа. Остальные разностные сетки являлись дополнительными. Их начинали строить, когда возникала необходимость в их использовании.

Во-вторых, для отслеживания во времени точного положения всех сильных и слабых разрывов использовалась специальная дополнительная разностная сетка, узлы которой двигались со скоростями отслеживаемых разрывов. При этом скорости сильных разрывов и значения всех газодинамических параметров по обе стороны от них рассчитывались так, что условия динамической совместности и возрастания энтропии выполнялись автоматически.

В-третьих, в точках, где траектории двух сильных разрывов пересекались, и вместо двух исходных возникал один новый разрыв, который как правило не удовлетворял условиям динамической совместности, решалась известная задача о его распаде и находились окончательная конфигурация и параметры разрывного автомодельного

течения, возникающего после взаимодействия двух исходных разрывов. Для того, чтобы корректно рассчитывать последующее влияние такого распада на все остальное поле течения, добавлялись дополнительные подвижные узлы, отслеживающие все вновь возникающие сильные и слабые разрывы. Более того, в тех случаях, когда в соответствующем локально автомодельном течении, возникающем после распада, имелся веер волн разрежения с большим перепадом давления, начиная от точки распада, строилась также еще одна дополнительная разностная сетка, адаптированная к этому вееру, узлы которой двигались вдоль звуковых характеристик, образующих веер.

Конкретные детали используемого алгоритма более подробно описаны выше. Поэтому здесь достаточно только отметить, что он позволяет рассчитывать с высокой точностью детальную ударно-волновую картину течения, причем на разностных сетках, состоящих из значительно меньшего числа узлов, чем в случае использования методов "сквозного расчета". Кроме того, при его использовании не возникает никаких проблем, связанных с физической интерпретацией картины рассчитанного течения, в частности, с распознаванием ударных волн, контактных разрывов и разрывных характеристик и с нахождением их точных положений и скоростей.

Перфорированный экран, в отличие от стенки, является проницаемым для газа. Поэтому до него могут доходить не только ударные волны, но и контактные разрывы. В обоих случаях на экране в соответствующие моменты времени возникают как правило разрывы газодинамических параметров. Задача о распаде произвольного разрыва на перфорированном экране в достаточно общей постановке рассмотрена в работе [99]. В ней однако обсуждаются только наиболее принципиальные моменты построения решения, а окончательный вид расчетных формул не приводится. В рассматриваемом частном случае, т.е. в рамках допущений 1-3, полное решение данной задачи удалось получить в замкнутом виде.

В последующих формулах индексом "S" обозначены параметры течения за ударной волной или контактным разрывом в тот момент времени, когда они достигли экрана, а индексом "W" - на экране сразу же после распада соответствующего разрыва. Пусть также M_w равен дозвуковому корню уравнения (5.61), найденному при значениях проницаемости η и показателя изоэнтропы k , свойственных газу, находящемуся за пришедшим на экран сильным разрывом, т.е. газу, натекающему на экран.

Полное решение задачи о распаде произвольного сильного разрыва на экране, удовлетворяющем допущениям 1-3, зависит от двух параметров, а именно: от M_w , числа Маха набегающего потока M_s , из которых первый согласно принятым допущениям заведомо меньше единицы, а второй может быть произвольным. В зависимости от конкретных значений M_w и M_s , полное решение данной задачи допускает пять подслучаев, которые далее обозначаются парой цифр, разделенных точкой и заключенных в круглые скобки.

т.1.1. Если M_w удовлетворяет неравенству

$$1 > M_w > \sqrt{\frac{(k-1)}{2k}}, \quad (5.63)$$

то в зависимости от числа Маха набегающего потока M_s после распада разрыва могут реализоваться три различных типа течения, которые далее обозначены как (т.1.1), (т.1.2), (т.1.3).

Первый из них - (т.1.1). Он реализуется, если наряду с (5.63) выполнено условие $M_s < M_w$. В этом случае навстречу набегающему потоку распространяется веер волн разрежения, а параметры течения непосредственно перед экраном находятся по следующим формулам :

$$\frac{a_w}{a_s} = \frac{(k-1)M_s + 2}{(k-1)M_w + 2}; \quad \frac{\rho_w}{\rho_s} = \left(\frac{a_w}{a_s}\right)^{\frac{2}{k-1}}; \quad \frac{p_w}{p_s} = \left(\frac{a_w}{a_s}\right)^{\frac{2k}{k-1}}. \quad (5.64)$$

Второй тип течения - (т.1.2). Он реализуется в результате распада разрыва, если наряду с (5.57) выполнено условие

$$M_w < M_s < M_{sw}; \quad M_{sw} = \sqrt{1 + \frac{k-1}{2} M_w^2} / \sqrt{k M_w^2 - \frac{k-1}{2}}. \quad (5.65)$$

В этом случае навстречу набегающему потоку распространяется ударная волна, число Маха которой по отношению к газу - $M_{RS} > 1$ находится путем решения нелинейного уравнения вида

$$M_w = \left[M_s - \frac{2}{k+1} \frac{M_{RS}^2 - 1}{M_{RS}} \right] / \sqrt{1 + \frac{2(k-1)}{k+1} \frac{M_{RS}^2 - 1}{M_{RS}^2} \left(1 + \frac{k}{k+1} (M_{RS}^2 - 1) \right)}. \quad (5.66)$$

При этом скорость отраженной ударной волны относительно экрана D_{RS} и все остальные параметры течения непосредственно перед экраном выражаются через параметры набегающего потока и найденное значение M_{RS} по формулам :

$$\begin{aligned}
D_{RS} &= a_S (M_S - M_{RS}) ; \\
u_W &= u_S - 2a_S (M_{RS}^2 - 1) / (k + 1) M_{RS} ; \\
\frac{p_W}{p_S} &= 1 + \frac{2k}{k + 1} (M_{RS}^2 - 1) ; \\
\frac{\rho_W}{\rho_S} &= \frac{M_{RS}^2 (k + 1)}{(k - 1) M_{RS}^2 + 2} .
\end{aligned}
\tag{5.67}$$

Можно показать, что выполнение условия (5.65) гарантирует отрицательность значения D_{RS} , найденного по формуле (5.67). Однако по мере приближения M_S к M_{SW} соответствующее значение D_{RS} стремится к нулю, так что в предельном случае, когда M_S в точности равен M_{SW} , перед экраном образуется ударная волна, которая в момент образования неподвижна относительно экрана.

Третий возможный тип течения - (т.1.3). Он реализуется в результате распада разрыва на экране, если наряду с (5.63) выполнено условие $M_S > M_{SW}$. В этом случае одной ударной волны, даже неподвижной относительно экрана, уже недостаточно для того, чтобы затормозить натекающий газ должным образом, т.е. до M_W . Поэтому в данном случае возникают две ударные волны, одна из которых неподвижна относительно экрана, а другая распространяется навстречу натекающему газу. Параметры течения между двумя указанными ударными волнами удобно обозначить индексом "SW". Тогда алгоритм, позволяющий последовательно находить сначала их, а затем и параметры течения непосредственно перед экраном, можно записать в следующем компактном виде.

Сначала, решая численно уравнение, аналогичное (5.66), но в котором вместо M_W фигурирует M_{SW} , находим M_{RS} - число Маха ударной волны, движущейся навстречу натекающему газу. Затем, используя найденное значение M_{RS} и известные значения параметров набегающего потока, по формулам, аналогичным (5.67), но в которых индекс "W" заменен на "WS", находим параметры течения между двумя ударными волнами. После этого по формулам, аналогичным (5.67), но в которых M_{RS} заменен на M_{SW} , а индекс "S" - на "WS", находим параметры течения непосредственно перед экраном.

2. Если $M_W < 1$ не удовлетворяет неравенству (5.63), то в зависимости от конкретного значения M_S после распада разрыва могут реализовываться только два типа течения, а именно (т.2.1) и (т.2.2). Тип (т.2.1) реализуется при $M_S < M_W$, а тип

(т.2.2) - при $M_w < M_s < \infty$. Оба эти типа полностью аналогичны (т.1.1) и (т.1.2), включая расчетные формулы (5.65) или (5.66), (5.67) соответственно.

Можно показать, что в предельном случае при $\eta \rightarrow 0$ приведенное выше решение непрерывно переходит в известное решение задачи об отражении ударной волны от непроницаемой стенки.

Построенное полное решение задачи о распаде произвольного разрыва на перфорированном экране, удовлетворяющее допущениям 1-3, применялось в качестве неотъемлемой составной части используемого сеточно-характеристического алгоритма.

Главной целью экспериментов является обычно получение максимального количества кластеров, выпавших на стенку или подложку. Однако, как уже говорилось выше, отраженные ударные волны, распространяющиеся навстречу набегающему потоку, приводят к тому, что условия для образования в нем кластеров становятся как правило менее благоприятными, а появление сжатого слоя фонового газа препятствует их выпадению на стенку. Поэтому с точки зрения достижения практических целей наибольший интерес представляют количественные данные о влиянии проницаемости экрана на интенсивность отраженных ударных волн и на параметры течения непосредственно перед экраном.

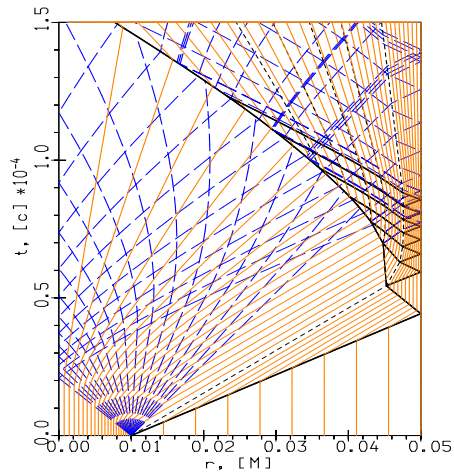
Результаты расчетов, которые иллюстрируют это влияние в случае течения, имеющего плоскую симметрию, приведены ниже на рис. 5.37, 5.38. В представленной серии расчетов варьировалась только проницаемость, а прочие исходные данные задавались одинаковыми и соответствовали типичным условиям проведения экспериментов 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 $T_H = 300 \text{ К}$, что соответствует случаю, когда последние остаются в камере из-за недостаточно глубокой ее откачки после предыдущего эксперимента.

На рис. 5.37 проиллюстрировано влияние проницаемости экрана на общую картину течения перед ним. Ее получали путем построения на плоскости независимых переменных r, t траекторий газа, траекторий сильных и слабых разрывов, а также звуковых характеристик вееров волн разрежения, выделяемых с помощью дополнительных сеток. Соответствующая картина течения в случае непроницаемой стенки, т.е. при $\eta = 0$, изображена на рис. 5.37а, а в случае перфорированного экрана

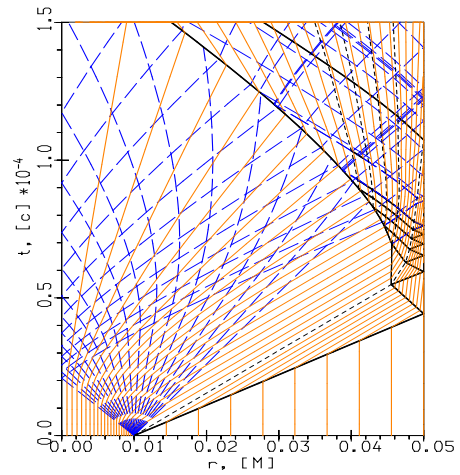
при $\eta = 0.1$ - рис. 5.37б, $\eta = 0.3$ - рис. 5.37в, $\eta = 0.6$ - рис. 5.37в и $\eta = 0.8$ - рис. 1д. Из рис. 5.37 видно, что во всех трех случаях реализуются качественно похожие картины течения. С другой стороны видны также и значительные количественные отличия, которые связаны с истечением сжатого фонового газа через перфорированный экран. В частности, в двух последних случаях толщина слоя сжатого фонового газа монотонно уменьшается, и в итоге он полностью исчезает. Начиная с этого момента времени t_B , на экран натекает уже непосредственно расширяющийся пар. Поэтому образовавшиеся в нем кластеры могут теперь уже беспрепятственно выпадать на экран, если только они не испарились ранее, т. е. после повышений температуры и давления, которые вызваны прохождением по расширяющемуся облаку ударных волн, отраженных от экрана.

В связи с последним обстоятельством, полезно рассмотреть графики, которые иллюстрируют влияние проницаемости на характер поведения во времени температуры газа, втекающего в экран. Соответствующие графики представлены на рис. 5.38, для четырех значений проницаемости 0; 0,1; 0,3; 0,8 и пронумерованы в порядке ее возрастания. Последние три графика относятся к случаю проницаемого экрана. Они качественно отличаются от первого, относящегося к случаю непроницаемой стенки, тем, что у них имеется скачкообразное понижение температуры. Оно происходит тогда, когда весь фоновый газ, содержащийся между внешней границей расширяющегося облака и экраном, уже протек через экран и через него начинает протекать расширяющийся пар. В принципе, его температура и давление должны зависеть от проницаемости экрана, так как до этого они могли повышаться в отраженных ударных волнах, которые распространяются навстречу потоку пара. А их интенсивности, в свою очередь, зависят от проницаемости экрана.

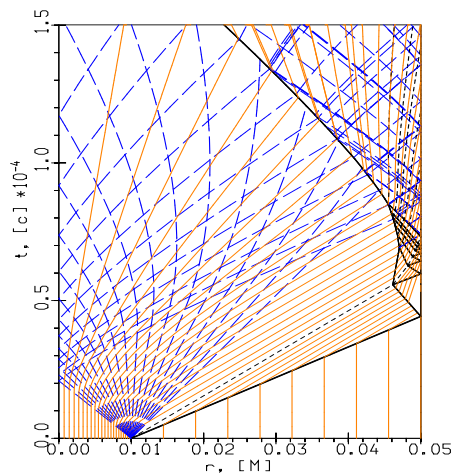
На расстоянии более 1 метра от среза сопла функция распределения меняется крайне слабо, функция распределения замораживается, средний размер кластеров (рис. 5.29) остается неизменным и следовательно, образовавшиеся кластеры достигают поверхности летательного аппарата практически без изменения. Необходимо отметить, что проведенная серия расчетов находится на пределе допустимости применяемой модели конденсации. Используемую модель неравновесной конденсации можно считать справедливой, пока мольно-массовые концентрации мономеров существенно превосходят концентрации кластеров других размеров.



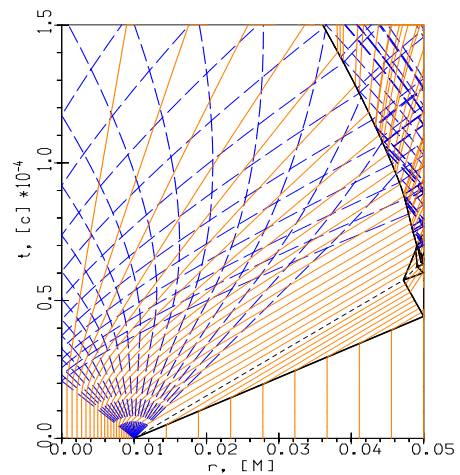
а) $\eta = 0$



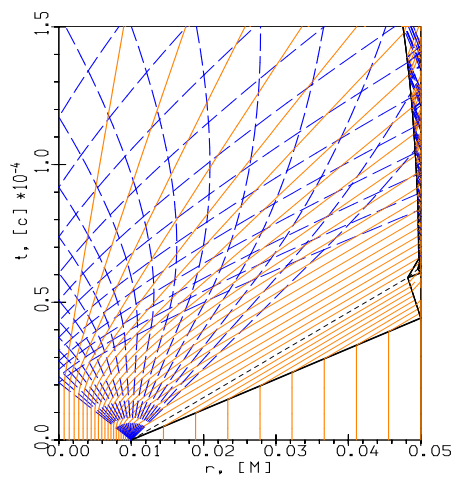
б) $\eta = 0.1$



в) $\eta = 0.3$



г) $\eta = 0.6$



д) $\eta = 0.8$

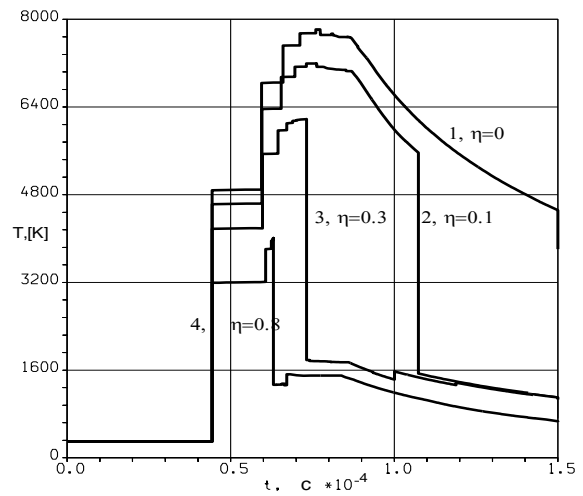


Рис. 5.37. Временная развертка процесса

Рис.5.38. Температура на стенке

Необходимо отметить, что приведенные выше формулы для расчета точки на пористой стенке достаточно легко обобщаются на случай многокомпонентного газа с теплоемкостями, зависящими от температуры. Для обобщения используется свойство энтропии, которая сохраняется в частице газа при отсутствии ударных волн и возрастает скачком на ударных волнах.

Выводы

В пятой главе работы 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. Описаны особенности истечения конденсирующегося пара в вакуумную камеру.

ГЛАВА 6. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МНОГОМЕРНЫХ РЕАГИРУЮЩИХ ТЕЧЕНИЙ

Введение

В предыдущих главах были разработаны физико-математические модели и вычислительные алгоритмы для моделирования химических и фазовых превращений в элементарных реакторах, которые используются как элементы при создании методов моделирования многомерных течений многофазных сред. В данной главе приводятся задачи численного моделирования, в которых автор работы участвовал как разработчик алгоритмов и программ численного моделирования равновесных и неравновесных химических превращений, численного моделирования движения и тепломассообмена частиц с несущим газом, а также в подготовке и задании начальных данных для многомерного моделирования. Многомерные коды - это как правило плод работы больших коллективов. Перечислю разработчиков многомерных программных кодов, с которыми непосредственно сотрудничал автор. Это Иванов Игорь Эдуардович, Крюков Игорь Анатольевич и Хохлов Антон Владимирович. В данной главе приводятся совместно решенные задачи и некоторые особенности разработанных алгоритмов применительно к многомерному моделированию.

6.1. Численное моделирование детонации в двумерной нестационарной постановке

Введение

В данном разделе 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. Участие автора в данных работах заключается в написании вычислительных алгоритмов и программ, реализующих термическое и калорическое уравнения состояния и связанные с ними вычисления термодинамических величин, решающих уравнения химической кинетики, обеспечивающих подготовку термодинамических и кинетических данных для задач численного моделирования. Постановка задач, анализ результатов, а также решение проблем связанных с обеспечением алгоритмического и программного сопровождения блоков связи "газовая динамика" – "химия" проводились коллективом авторов совместно. Результаты исследований опубликованы в [64 – 68].

6.1.1. Численное моделирование инициирования детонации в фокусирующем канале

Численно исследуется течение, возникающее при движении ударной волны по осесимметричному каналу со сферической заглушкой (рис. 6.1), заполненному стехиометрической смесью водорода с кислородом при пониженном давлении и нормальной температуре. Изучалась возможность самовоспламенения горючей смеси в результате фокусировки отраженных от сферической заглушки ударных волн [65].

В качестве математической модели рассматриваемого течения использовалась система уравнений Эйлера для химически реагирующей смеси газов, которые для двухмерного, нестационарного сжимаемого течения невязких, калорически совершенных газов записывается в следующем виде

$$q_t + f(q)_x + g(q)_y = S, \quad (6.1)$$

$$q = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ E \end{bmatrix}, f(q) = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ (E + p)u \end{bmatrix}, g(q) = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ (E + p)v \end{bmatrix}, \quad (6.2)$$

где ρ, p, E - плотность, давление и полная энергия в единице объема соответственно, u, v - декартовы компоненты вектора скорости, S – вектор источниковых членов,

$$S = -\frac{\rho}{y} \begin{bmatrix} v \\ uv \\ v^2 \\ vh \end{bmatrix}; E = \rho(e + 0.5(u^2 + v^2)), h = e + p/\rho \quad (6.3)$$

Система уравнений (6.1)-(6.3) дополнялась уравнениями химической кинетики, записанными вдоль траекторий частиц газа:

$$\frac{d\gamma_i}{dt} = \frac{W_i}{\rho}, \quad i=1,2,\dots,N, \quad (6.4)$$

а также калорическим и термическим уравнениями состояния для смеси совершенных газов:

$$e = \sum_{i=1}^N \gamma_i E_i^0(T), \quad p = \rho RT \sum_{i=1}^N \gamma_i \quad (6.5)$$

Здесь γ_i, W_i - соответственно мольно-массовые концентрации химических компонент газовой смеси, объемные скорости газофазных химических превращений; e - внутренняя энергия единицы массы смеси; h – энтальпия смеси газов.

Для решения системы уравнений в частных производных (6.1)-(6.5) использовался оригинальный метод [65], который являлся комбинацией метода Годунова и метода характеристик. Система уравнений (6.1)-(6.3) решалась вариантом метода Годунова, опубликованного в [142-145, 264], в результате решения находились $\rho, \rho u, \rho v, E$. 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 вариантом метода Пирумова [149], описанным в главе 2, при фиксированных на каждой итерации $\rho, \rho u, \rho v, E$. Значения газодинамических величин и концентрации химических компонент в точке пересечения траекторией частицы газа рассчитанного слоя находились с помощью интерполяции, обеспечивающей сохранение элементного состава. Температура и давление в расчетной точке находились из (6.5), скорость звука и показатель адиабаты рассчитывались из термодинамических соотношении

$$a^2 = \frac{1}{\rho^2} \frac{\rho^2 \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_p - p \left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_p}{\left(\frac{\partial \rho}{\partial p}\right)_T \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_p - \left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_p \left(\frac{\partial e}{\partial p}\right)_T}, \quad \kappa = \frac{\rho a^2}{p}.$$

Число итераций в методе Пирумова использовалось как дополнительный ограничитель на шаг интегрирования уравнений газовой динамики. Стандартным условием на шаг интегрирования при численном решении задач газовой динамики является условие Куранта, которое гласит, что область зависимости решения в конечноразностной задаче должна быть больше чем в дифференциальной. Однако, когда происходят экзотермические химические реакции, которые могут приводить к очень быстрому изменению не только концентраций химических компонент, но и температуры и давления смеси, шаг интегрирования необходимо ограничивать величиной изменения вышеперечисленных величин на шаге интегрирования. Критерием такого изменения и является число итераций в методе Пирумова.

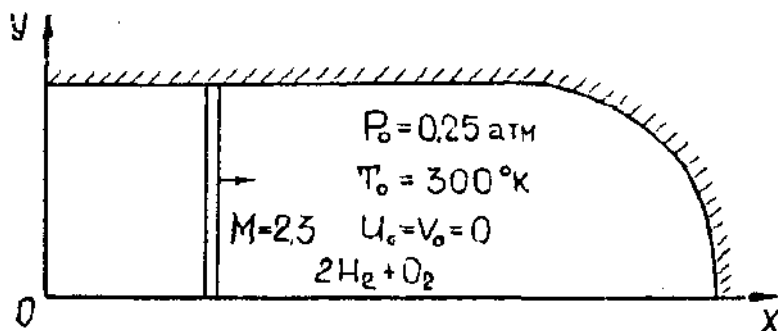


Рис. 6.1. Постановка задачи.

Для моделирования химических превращений в горючей смеси использовался кинетический механизм, включающий 8 обратимых стадий [127].

На рисунках 6.2-6.4 представлены распределения параметров течения в моменты времени, предшествующий воспламенению, собственно воспламенение, и движения сформировавшейся детонационной волны из сферической заглушки в канал. За отраженной от стенки ударной волной происходит повышение температуры горючей смеси до температуры самовоспламенения, локализованное у оси канала (рис. 6.2-6.4а). В результате происходит самовоспламенение горючей смеси, сопровождающееся резким ростом температуры (до 3500 К) и выгоранием водорода (рис. 6.2-6.4б) у оси канала, при этом распределения параметров вдоль сферической заглушки практически не меняются (рис. 6.2-6.4аб). В результате формируется детонационная волна, которая распространяется из сферической заглушки в канал навстречу втекающему потоку (рис. 6.2-6.4в). Необходимо отметить, что пиковые значения давления и температуры на сферической заглушке превосходят параметры на оси. Это связано с тем, что волна детонации у сферической заглушки распространяется по заторможенному потоку, образованному при движении первичной ударной волны из канала в сферическую заглушку.

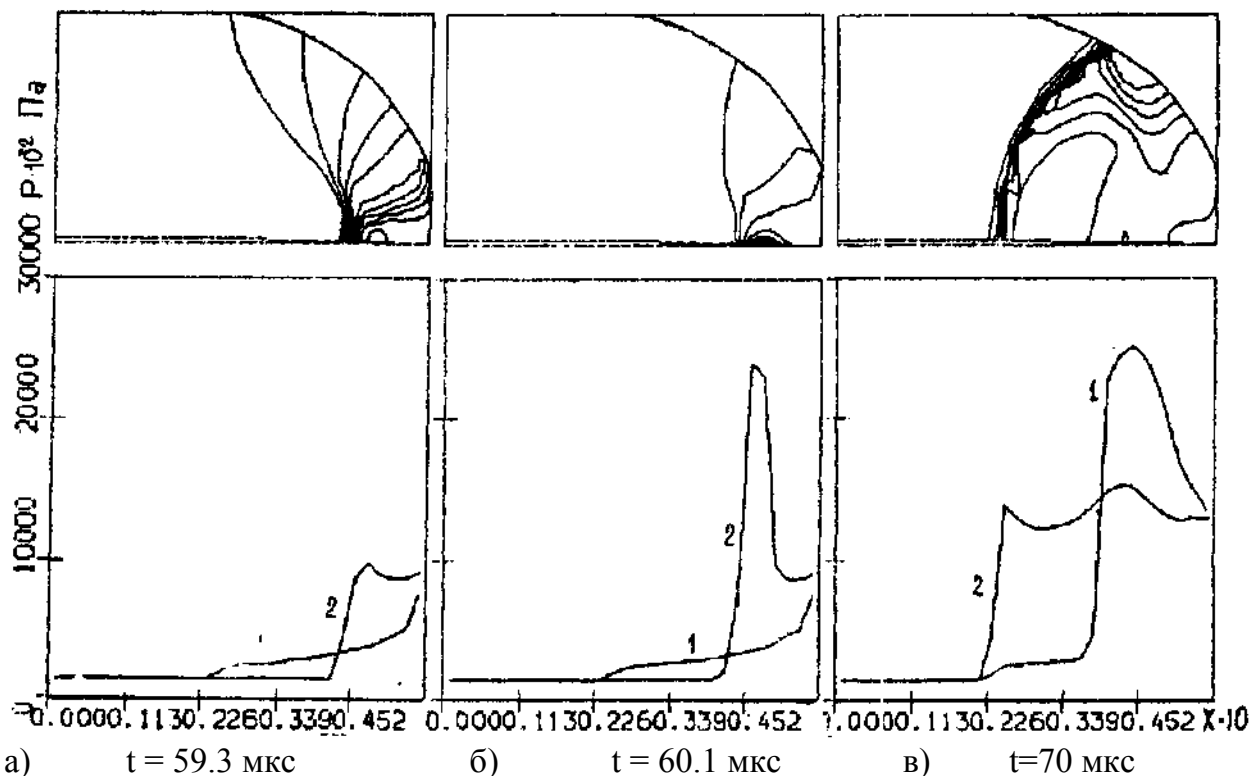


Рис. 6.2. Изолинии и распределение давления вдоль стенки и оси в различные моменты времени.

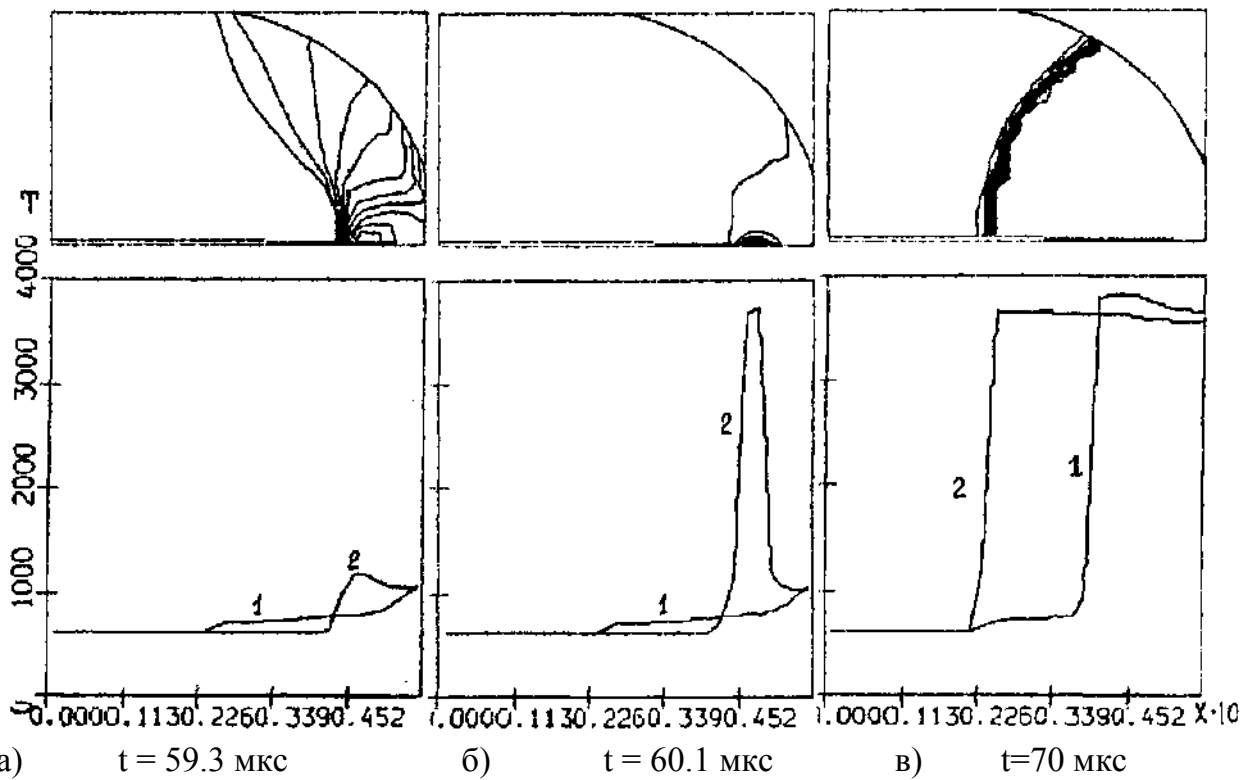


Рис. 6.3. Изолинии и распределение температуры вдоль стенки и оси в различные моменты времени.

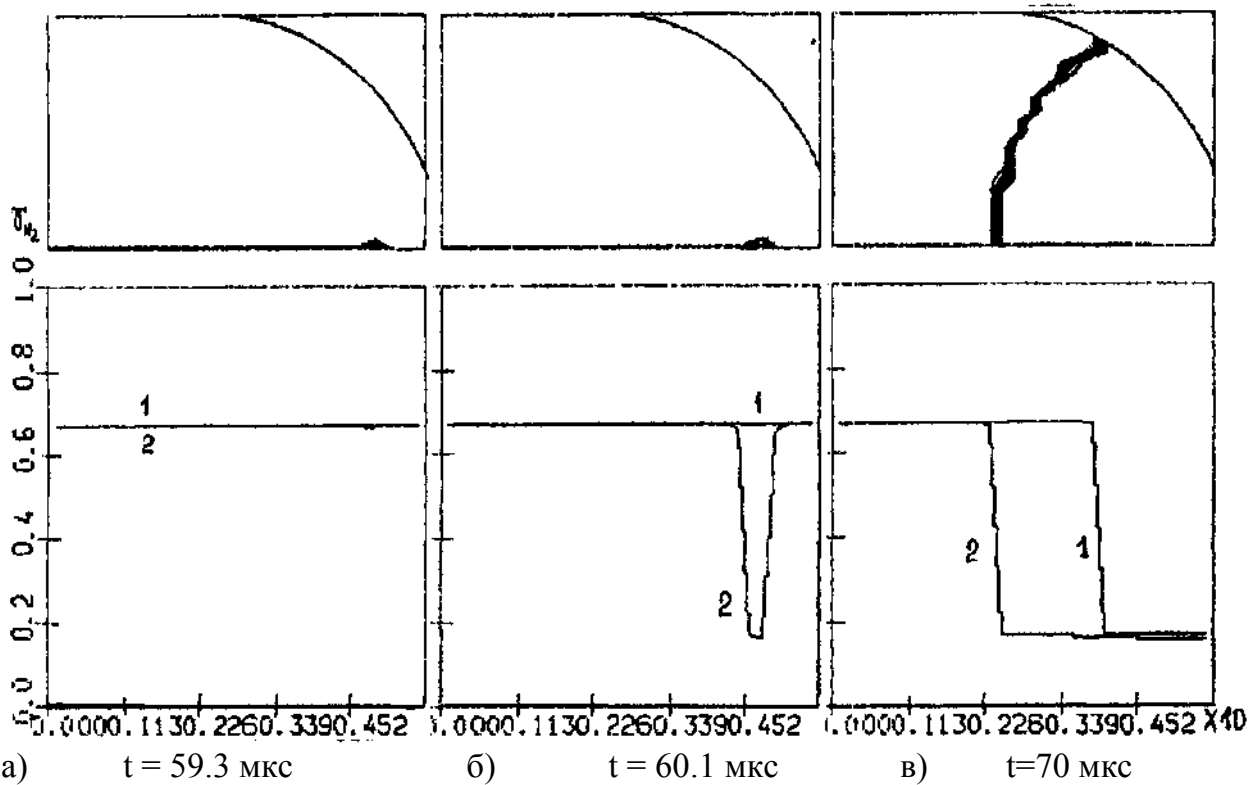


Рис. 6.4. Изолинии и распределение мольной доли водорода вдоль стенки и оси в различные моменты времени.

Результаты расчетов показали, что использование специально профилированных каналов может приводить к образованию детонационных волн без предварительного

воспламенения горючей смеси, при использовании стандартных данных о термодинамических свойствах химических компонент, входящих в состав продуктов сгорания и константах скоростей химических реакций, входящих в многостадийные кинетические механизмы.

Вышеописанный метод решения двумерных нестационарных уравнений газовой динамики для многокомпонентного реагирующего газа успешно применялся на протяжении ряда лет пока на смену ему не пришел метод расщепления, который позволил не интерполировать газодинамические величины на рассчитанном слое. В частности, с его использованием рассчитывались течения в газодинамическом воспламенителе и модельном детонационном двигателе.

6.1.2. Моделирование течения горючей газовой смеси в газодинамическом воспламенителе

Приводятся результаты численного моделирования процессов, протекающих в газодинамических воспламенителях - устройствах, используемых как высокотемпературные источники тепловой энергии [64]. Простейший газодинамический воспламенитель представляет собой соосно расположенные осесимметричное сопло с истекающей из него струей и резонансную трубку. Резонансная трубка - закрытая с одного конца полость, направленная открытым концом навстречу потоку газа в струе. В струе на нерасчетном режиме истечения создается поток газа с неравномерным по радиусу профилем полного давления на входе в резонансную полость (рис.6.5).

В результате взаимодействия такого потока с полостью при некоторых условиях возникает пульсационный режим течения, при котором вдоль оси полости распространяется система ударных волн. В этом случае вблизи конца трубки возможен циклический разогрев малоподвижного слоя газа за счет диссипации энергии в проходящих и отраженных от торца ударных волнах. Нестационарные процессы, протекающие при взаимодействии струи нереагирующего газа с осесимметричным резонатором, численно исследовались в [143]. В том случае, когда в качестве рабочего тела используются смеси газов, в которых протекают экзотермические реакции, при достижении некоторой пороговой температуры происходит воспламенение горючей смеси с последующим формированием фронта горения и возникновением детонации [64]. Воспламенение горючей смеси газов за ударными волнами, отраженными от плоских и вогнутых поверхностей, численно моделировалось в [65]. В разделе

приводятся результаты исследований пульсационного режима течения в газоструйном резонаторе Гартмана с низкочастотными колебаниями параметров, характеризуемого наличием двух ярко выраженных стадий течения: стадии втекания газа струи в резонансную полость и стадии опорожнения полости (так называемый помпажный режим).

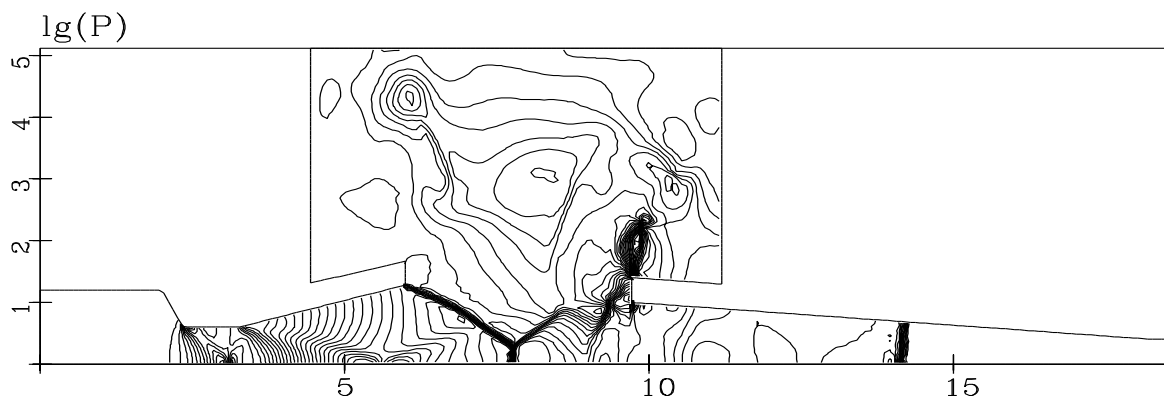
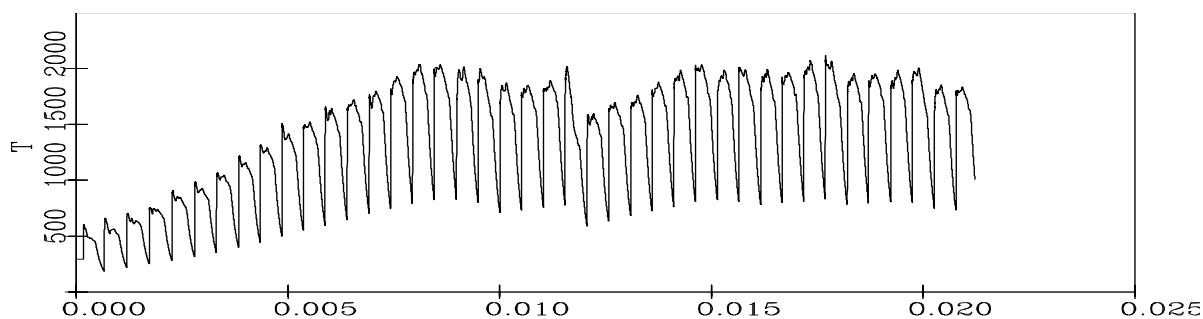


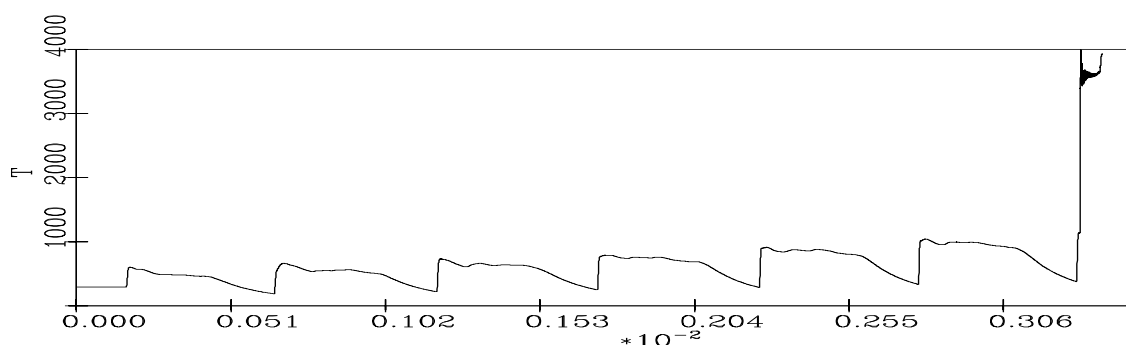
Рис. 6.5. Изолинии давления в системе сопло-резонатор

Были проведены расчеты течения реагирующего газа в системе “сопло – резонатор” [64] (рис. 6.5). Радиус среза сопла равен 0.005 м, расстояние между срезом сопла и входом в резонатор 0.017 м, резонатор представляет собой трубку, состоящую из конической и цилиндрической части длинами 0.00955 м и 0.007 м. Диаметр входного отверстия резонатора - 0.008 м, цилиндра - 0.006 м, толщина стенок - 0.002 м. Газовая среда представляет собой смесь водорода и кислорода при нормальных условиях. Струя имеет тот же состав, что и газ в резонаторе, и истекает из сопла с числом Маха $M=1.5$ и нерасчетностью 2.4. Для моделирования газофазного горения водорода в кислороде использовался детальный кинетический механизм [265], состоящий из 19 обратимых реакций и включающий 9 химических компонент. Для решения дифференциальных уравнений химической кинетики используется оригинальный двухточечный алгоритм (модификация метода Пирумова [149]), не требующий обращения матриц и обеспечивающий выполнение законов сохранения элементного состава. На рис. 6.6-6.8 приведены результаты расчета течения реагирующего газа в системе “сопло - струя - резонатор Гартмана” (рис.6.5). Расчет начинался с “запуска сопла”, в результате которого формируется ударная волна, движущаяся вдоль оси в сторону открытого конца резонатора и далее по резонатору до глухого торца. Отраженная от торца ударная волна распространяется в сторону открытого конца и выходит из полости резонатора, образуя волну разрежения. Периодическое движение ударных волн и волн разрежения по тракту резонатора определяет колебательный режим течения в системе “сопло-резонатор

Гартмана”, сопровождаемый при некоторых условиях нагревом малоподвижного слоя газа вблизи торца. На рис. 6.6 изображены показания числового датчика температуры, расположенного в середине торца резонатора для случаев отсутствия и неравновесного протекания химических реакций [143].



а) течение без учета химических превращений t, c



б) неравновесное течение t, c

Рис. 6.6 Зависимость температуры газа от времени на торце резонатора

В предположении отсутствия химических реакций состав смеси остается неизменным и средняя по периоду температура в резонаторе быстро растет, достигая величин больших 1700 К, после чего происходит “срыв нагрева” [143], и средняя температура стабилизируется (рис. 6.6а). В случае, когда в газовой смеси протекают химические реакции, при разогреве газа за фронтом отраженной от торца резонатора ударной волны до температуры воспламенения водородо-кислородной смеси происходит воспламенение этой смеси (рис. 6.6б), и температура у торца резонатора достигает 3800 К. Подъем температуры соответствует моменту времени $t=0.0032$ с после начала процесса истечения из сопла, что позволит значительно ускорить процесс воспламенения газа, находящегося за стенками воспламенителя. Воспламенение газа у торца воспламенителя приводит к формированию сферического фронта горения, распространяющегося к открытому концу воспламенителя. За небольшое время фронт горения догоняет фронт отраженной ударной волны, выпрямляется, и формируется структура плоской детонационной волны, распространяющейся вдоль трубки резонатора к выходному сечению [64]. Момент выхода детонационной волны из

резонансной трубки показан на рис. 6.7, где изображены изолинии поля температур, поле векторов скорости течения и распределения температуры и мольно-массовой концентрации молекул воды вдоль оси.

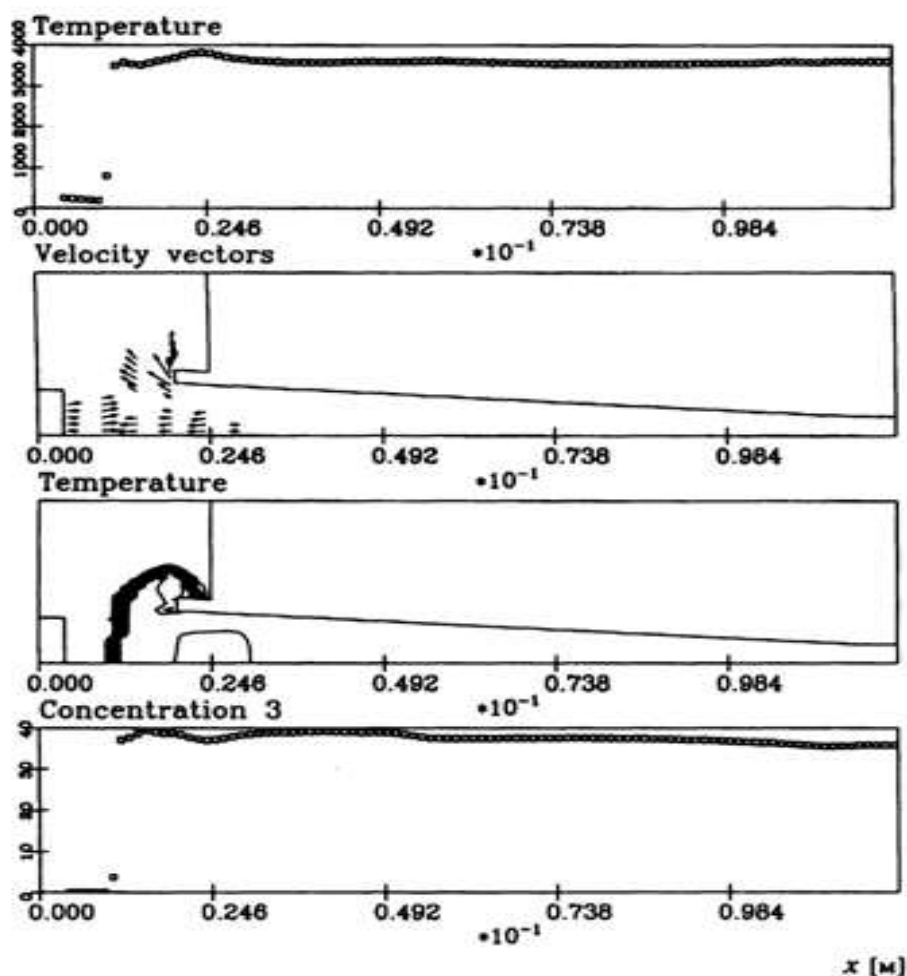


Рис. 6.7. Параметры течения на выходе из резонаторной трубки.

После того, как детонационная волна выходит из расчетной области, устанавливается близкий к стационарному режим течения, в котором воспламенение горючей смеси происходит в непосредственной близости от среза сопла. В случае использования численного механизма включения-выключения струи по перепаду давления между срезом сопла и окружающим пространством можно получить циклический процесс, состоящий из нескольких этапов:

- втекания горючей смеси в полость резонатора;
- разогрев в пульсационном режиме смеси внутри резонатора до температуры воспламенения;
- воспламенение и распространение детонационной волны по резонатору, сопровождаемое резким повышением температуры и давления за фронтом;
- "отключение" струи в момент достижения фронтом детонационной волны среза сопла;

- вытекание продуктов сгорания из расчетной области через верхнюю границу, опорожнение полости резонатора, сопровождаемое снижением давления и температуры среды до нормальных;
- запуск ('включение") струи и повторение цикла.

Расчет одного цикла работы модельного детонационного двигателя.

С использованием описанной выше методики численного моделирования была решена задача о расчете цикла работы модельного детонационного двигателя. В качестве модельного детонационного двигателя была рассмотрена осесимметричная конструкция, состоящая из цилиндрической части с плоским глухим торцом и диффузорной расширяющейся конической части.

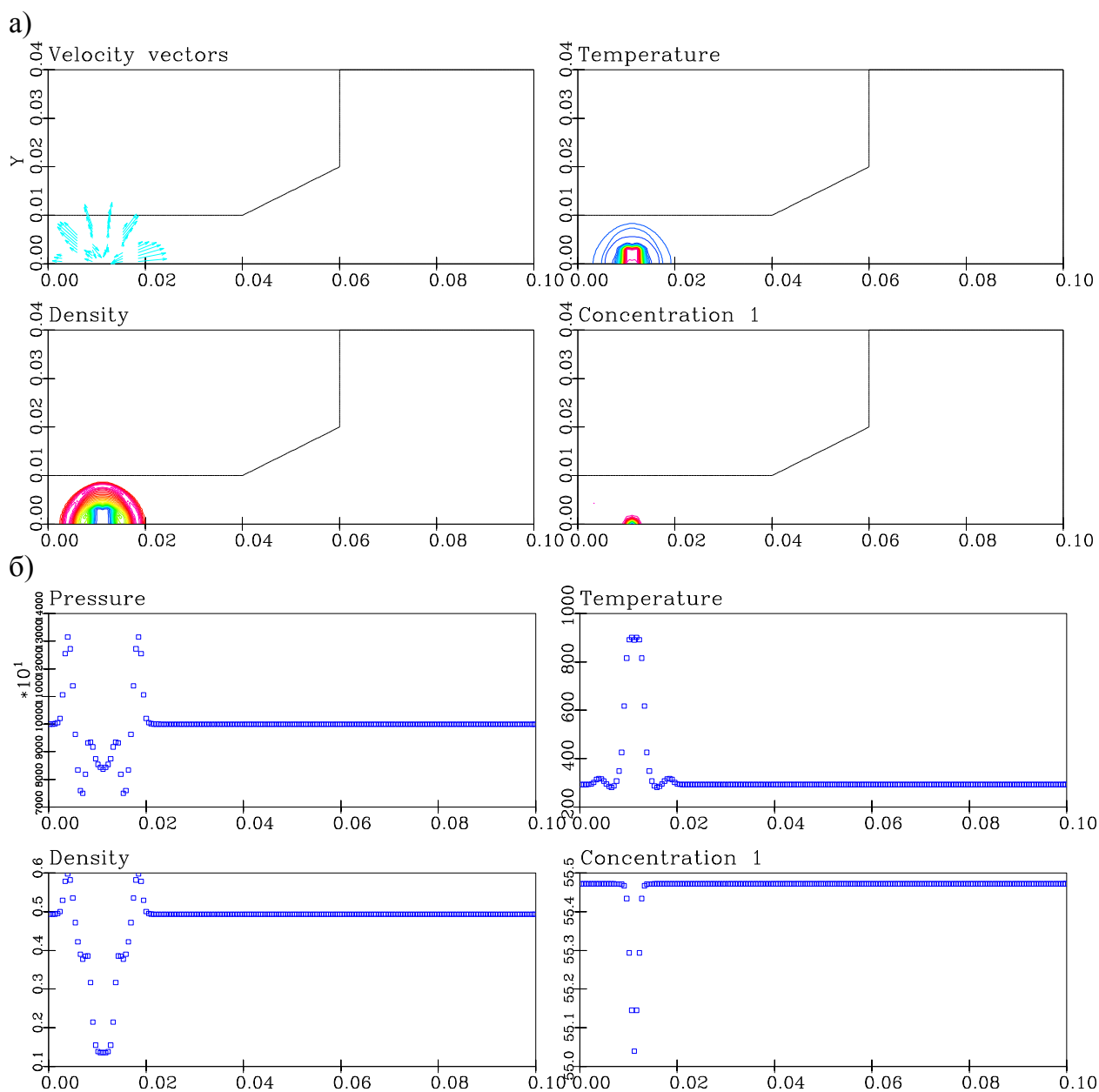
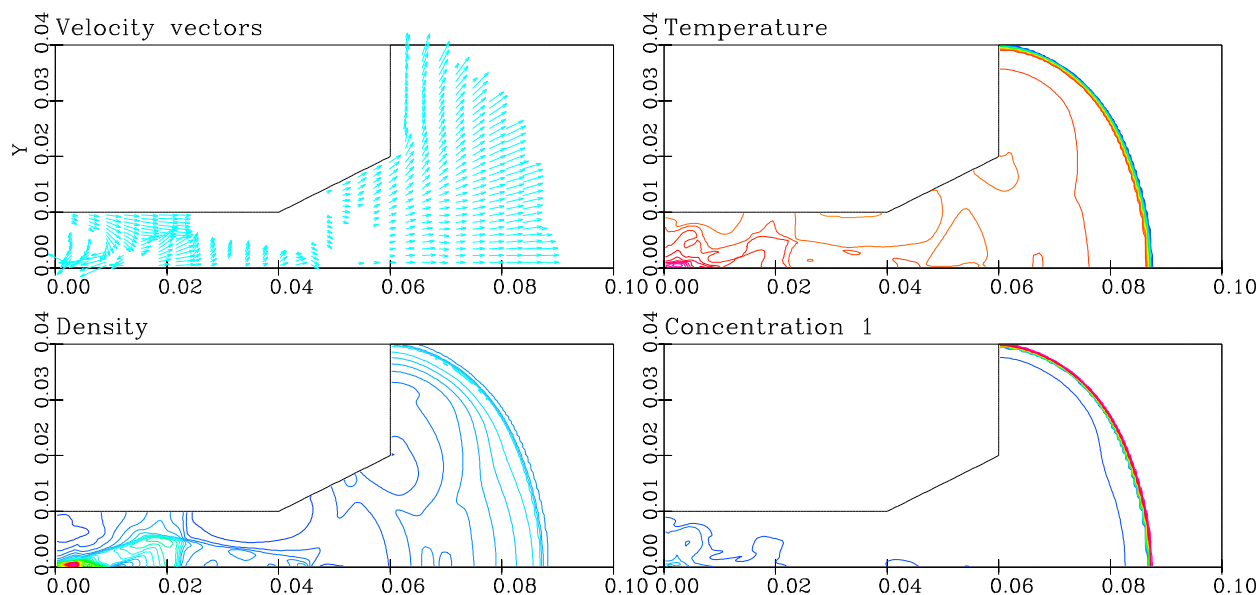


Рис. 6.8. Изолинии (а) и распределения параметров течения на оси (б) в момент воспламенения горючей смеси.

Размеры двигателя следующие: диаметр цилиндрической части $d=0.025\text{м}$, длина цилиндрической части $l=0.04\text{м}$, длина конической части $l=0.02\text{м}$, диаметр выходного отверстия $D=0.04\text{м}$. Полость двигателя заполнена стехиометрической смесью кислорода и водорода при нормальных условиях ($P_a = 101325\text{ Па}$, $T=293\text{ К}$). Поджиг смеси осуществлялся путем задания энерговклада в область размером $0.0025\text{ м} \times 0.0025\text{ м}$, расположенную на оси симметрии. Координата левой кромки области $X=0.01\text{ м}$. Удельная величина энерговклада на единицу объема задавалась таким образом, что бы уровень температур в зоне энерговклада был достаточен для воспламенения смеси.

а)



б)

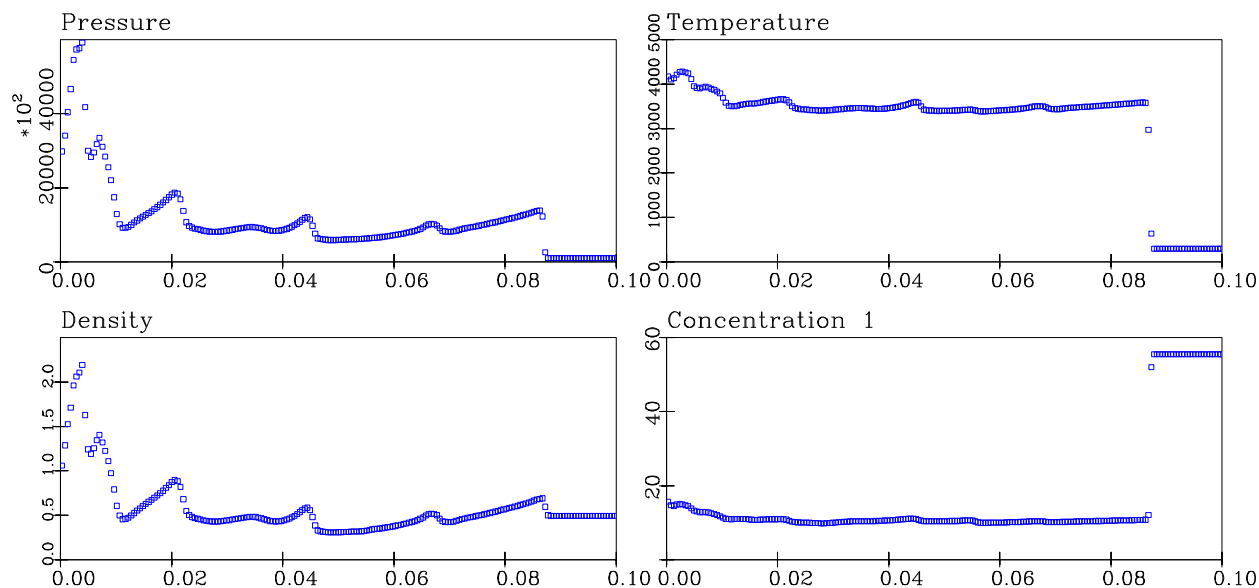


Рис. 6.9. Изолинии (а) и распределения параметров течения на оси (б) в момент выхода детонации из канала.

На рис. 6.8, 6.9 приведены результаты расчета одного этапа цикла работы пульсационного детонационного двигателя, связанного со сгоранием горючей смеси в полости двигателя и окружающем пространстве, движением детонационной волны по тракту двигателя и истечением продуктов сгорания в атмосферу. На рис. 6.8 представлен момент воспламенения горючей смеси. Видно, что фронт воспламенения отстает от образовавшейся в результате энерговклада ударной волны. Подъему температуры у оси соответствует уменьшение концентрации водорода.

На рис. 6.9. показан момент выхода детонационной волны из канала. Температура продуктов сгорания во всей расчетной области превышает 3500 К. Периодическая структура на распределениях давления и плотности на оси соответствует ячеистой детонации, продольный размер ячейки составляет около 20 мм. Необходимо отметить, что в области энерговклада у торца установки сохраняется область повышенных давления и температуры, связанная с взаимодействием ударных волн со стенками канала.

6.1.3. Моделирование процессов распространения и дифракции ударно-волновых структур в водородо-воздушной газовой среде

В начале 2000-х большой интерес вызывали вопросы, связанные с изучением взаимодействия волн горения и детонации с препятствиями, имеющими незамкнутые полости. Распространению ударных и детонационных волн в реагирующей среде в неограниченном пространстве посвящена обширная научная литература, однако дифракция взрывных криволинейных ударных волн на препятствиях со сложной геометрией была изучена недостаточно полно. В разделе приводятся результаты численных исследований процессов, протекающих при взаимодействии взрывных ударных и детонационных волн, распространяющихся по стехиометрической водородо-воздушной смеси, с полузамкнутой конической областью [67].

Инициатором данных исследований являлась Набоко И.М., которая проводила с коллегами экспериментальные исследования на установке “СФЕРА” в ИТЭС ОИВТ РАН г. Москва [189]. Процесс инициировался взрывом небольших порций твердого взрывчатого вещества. Варьировались энергия взрыва (вес взрывчатого вещества) 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. По результатам серии экспериментов был сделан вывод о том, что исследуемый процесс имеет вероятностный характер. Небольшие изменения значений исходных параметров приводят к заметным различиям в развитии процесса.

Физическая модель. Расчетная область показана на рис. 6.10. Точка взрыва совпадает с началом координат точкой o . Препятствие представляет собой слегка усеченный конус с углом полураствора 27.7° и высотой 0.543 м , ось которого совпадает с осью Ox . Конус открытым большим основанием повернут в сторону точки взрыва, так что внутренняя поверхность конуса и верхнее основание образуют полузамкнутую полость. Расстояние от точки взрыва до входа в полость - 0.57 м . В шести точках $P_1, P_2, P_3, P_4, P_5, P_6$ на внутренней поверхности конуса располагаются числовые датчики давления [67].

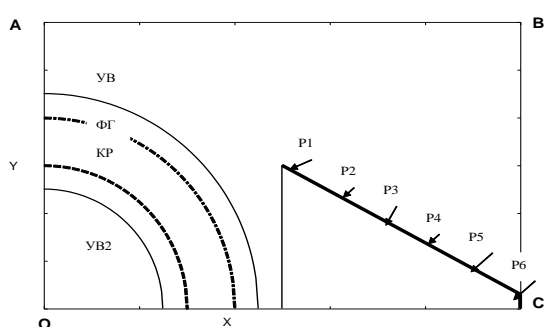


Рис.6.10 Схема расчетной области.

В расчетах используется модель невязкой нетеплопроводной среды, представляющая собой реагирующую смесь совершенных газов. Расчет проводился в два этапа. На первом рассчитывается задача о сферическом взрыве в однородной реагирующей

среде. Применяется алгоритм и программа для расчета одномерных нестационарных химически реагирующих течений сеточно-характеристическим методом с выделением и отслеживанием всех разрывов в области течения [60, 300], разработанный автором и описанный 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 (моделировались в равновесном приближении по методике, описанной в главе 2 с использованием уравнения состояния Бекера-Кистяковского-Вильямса), приходится фиксированное количество расчетных точек, а при расчете остальной части расчетной области применяется процедура добавления с течением времени новых расчетных узлов. Одномерный нестационарный расчет проводится до момента достижения взрывной ударной волны входного сечения конической полости. После этого параметры сферически симметричного течения, полученные в одномерном нестационарном расчете переносятся 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 (рис. 6.10 область OABC). Таким образом, возмущенная взрывом область до взаимодействия с препятствием является кругом с центром в начале координат и радиусом, равным расстоянию от точки взрыва до ударной волны (УВ). Во всей расчетной области проводится расчет двумерного осесимметричного нестационарного течения, что с учетом распределения начальных данных позволяет моделировать сферически симметричные взрывные течения.

Газодинамическая модель. В качестве математической модели для описания рассматриваемого течения принята система уравнений Эйлера для химически реагирующей смеси газов, которые для двухмерного, нестационарного сжимаемого течения невязких, калорически совершенных газов записывается в следующем виде

$$q_t + f(q)_x + g(q)_y = S, \quad (6.6)$$

$$q = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ E \\ \rho \gamma_i \\ \rho \varphi_k \end{bmatrix}, f(q) = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ (E + p)u \\ \rho u \gamma_i \\ \rho u \varphi_k \end{bmatrix}, g(q) = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ (E + p)v \\ \rho v \gamma_i \\ \rho v \varphi_k \end{bmatrix}, i = 1, \dots, N, \quad (6.7)$$

где ρ, p, E - плотность, давление и полная энергия в единице объема соответственно, u, v - декартовы компоненты вектора скорости, S – вектор источниковых членов,

$$S = -\frac{\rho}{y} \begin{bmatrix} v \\ uv \\ v^2 \\ vh \\ v\gamma_i \\ v\varphi_k \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ W_i \\ 0 \end{bmatrix}; \quad E = \rho(e + 0.5(u^2 + v^2)) \quad (6.8)$$

Здесь φ_k - функции уровня для отслеживания контактных поверхностей.

Для решения уравнений Эйлера использовался вариант метода Годунова, развиваемый в работах [64, 65, 142, 143], модифицированный И.Э.Ивановым и И.А.Крюковым на случай наличия в поле течения контактных разрывов [259, 285], разделяющих смеси газов с существенно различающимися свойствами [66, 144]. При численном моделировании выделяются и отслеживаются две контактные поверхности: одна - отделяет газообразные продукты сгорания твердого взрывчатого вещества от продуктов сгорания водородо-воздушной среды (разрыв термодинамических

параметров газовой среды), другая - совпадает с фронтом горения и разделяет области непрореагировавшей окружающей среды от области высокотемпературных продуктов сгорания. Координаты, характеризующие начальное положение контактных разрывов в двумерной области, определяются из одномерного расчета сферически симметричного взрыва, который проводится с выделением основных газодинамических особенностей.

Используемые модели термодинамики и химической кинетики подробно описаны в главе 1. Термодинамические свойства реагирующего газа описываются с помощью модели многокомпонентного совершенного газа. Для моделирования газозафазного горения водородо-воздушной смеси использовался детальный кинетический механизм [265], состоящий из 19 обратимых реакций и включающий 9 химических компонент, приведенных в таблице.

Таблица 6.1.

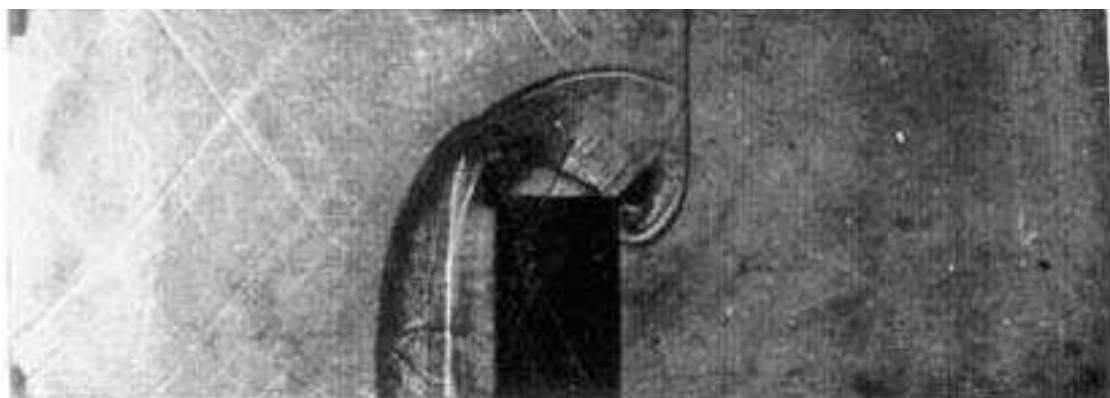
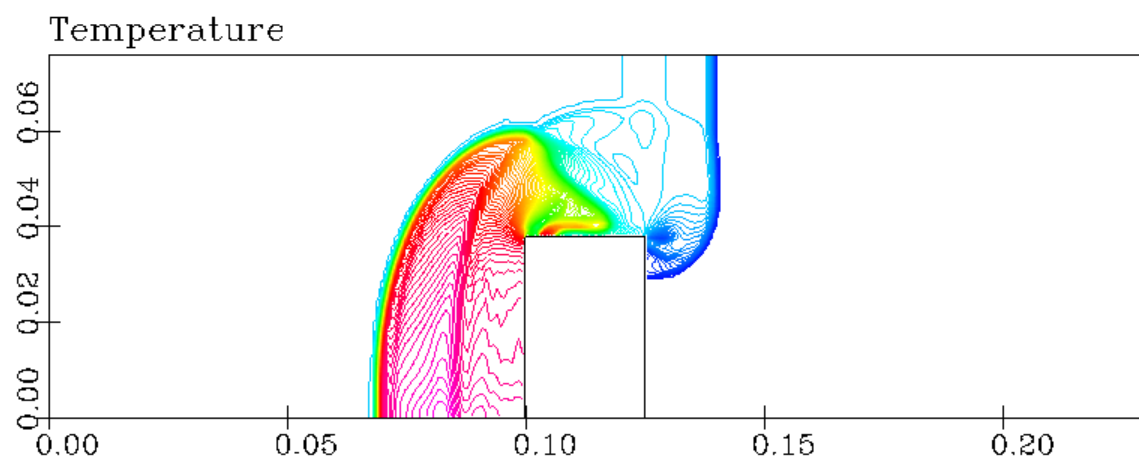
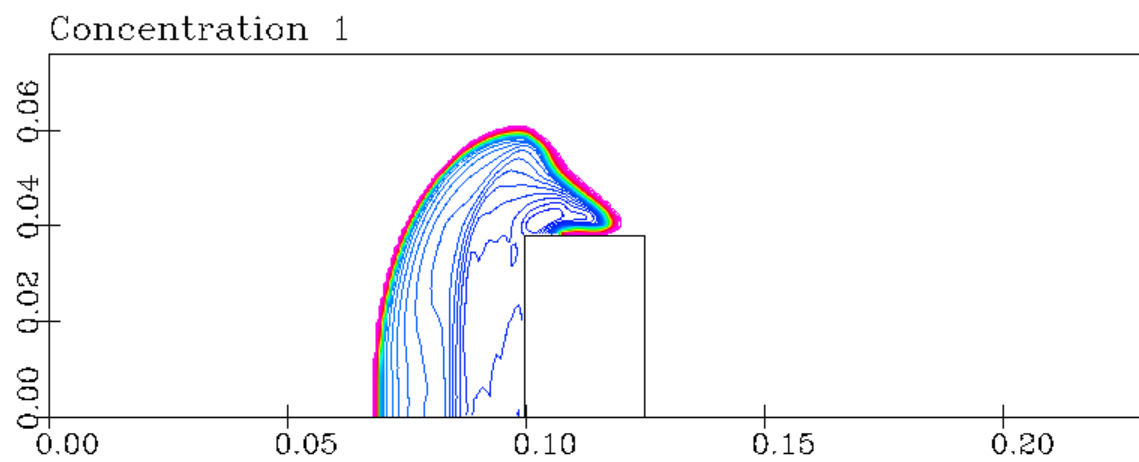
	$A^{(r)}$ (см-сек-моль)	$n^{(r)}$	$E^{(r)}$ (кал/моль)
$H+O_2 \rightleftharpoons O+OH$	2.46×10^{14}	0.00	15470
$O+H_2 \rightleftharpoons H+OH$	1.50×10^7	2.00	7547
$OH+H_2 \rightleftharpoons H+H_2O$	6.30×10^6	2.00	2961
$O+H_2O \rightleftharpoons OH+OH$	3.98×10^9	1.32	16751
$H_2+M \rightleftharpoons H+H+M$	2.90×10^{18}	-1.00	104330
$O+O+M \rightleftharpoons O_2+M$	6.17×10^{15}	-0.5	0.0
$O+H+M \rightleftharpoons OH+M$	4.20×10^{16}	0.00	-2780
$H+OH+M \rightleftharpoons H_2O+M$	2.25×10^{22}	-2.00	0.0
$H+O_2+M \rightleftharpoons HO_2+M$	6.41×10^{18}	-1.00	0.0
$HO_2+H \rightleftharpoons H_2+O_2$	6.63×10^{13}	0.00	2126
$HO_2+H \rightleftharpoons OH+OH$	1.69×10^{14}	0.00	874
$HO_2+O \rightleftharpoons OH+O_2$	6.30×10^{13}	0.00	693
$HO_2+OH \rightleftharpoons H_2O+O_2$	1.45×10^{16}	-1.00	0.0
$HO_2+HO_2 \rightleftharpoons H_2O_2+O_2$	2.00×10^{12}	0.00	0.0
$H_2O_2+M \rightleftharpoons OH+OH+M$	3.19×10^{17}	0.00	47100
$H_2O_2+H \rightleftharpoons H_2O+OH$	2.20×10^{15}	0.00	11727
$H_2O_2+H \rightleftharpoons H_2+HO_2$	4.82×10^{13}	0.00	7948
$H_2O_2+O \rightleftharpoons OH+HO_2$	9.54×10^6	2.00	3970
$H_2O_2+OH \rightleftharpoons H_2O+HO_2$	7.00×10^{12}	0.00	1430

Численный метод. В соответствии с идеологией метода расщепления по физическим процессам система уравнений (6.6)-(6.8) разделялась на две подсистемы, каждая из которых решалась с помощью своего численного метода, реализуемого своим программным модулем. Первая подсистема описывает протекание газодинамических процессов конвективного переноса и распространения волн и состоит из первых четырех уравнений системы (6.6)-(6.8), выражающих законы сохранения массы, количества движения и энергии, и конвективной части пятого и последующих уравнений, описывающих изменение концентраций химических компонентов. Вторая

подсистема описывает протекание химических процессов и состоит из той части системы (6.6)-(6.8), где устанавливается связь между изменением по времени концентраций компонент за счет химических превращений. Данный подход несколько отличается от используемого в работе [67], где во второй подсистеме описывались и конвективный перенос отдельных химических компонентов, и сами химические процессы. Используемый в данной работе подход позволяет исключить двумерную интерполяцию параметров по рассчитанному временному слою параметров.

Для численной аппроксимации конвективной (газодинамической) подсистемы уравнений использовалась явная квазимонотонная численная схема повышенного порядка точности, являющаяся модификацией схемы С.К.Годунова. Используется кусочно-линейное распределение параметров на расчетном слое и существенно двумерные процедуры "восстановления" данных в расчетных ячейках [142]. Восстановлению подлежат все параметры течения, включая концентрации. По параметрам, восстановленным на боковых гранях расчетных ячеек, с использованием термодинамических соотношений для многокомпонентного газа определяются скорости звука слева и справа от центра грани. Потоки через грани контрольного объема рассчитываются путем решения задачи Римана с помощью варианта метода расщепления векторов потоков, предложенного Ван-Лиром и модифицированного для случая многокомпонентной среды. Численный метод, вычислительные алгоритмы и комплекс программ для решения уравнений Эйлера разработаны И.Э.Ивановым и И.А.Крюковым. В качестве граничных условий на стенках канала задавались условия непротекания, на срезе сопла - условия входного сверхзвукового потока, на искусственных границах, через которые газ вытекает из расчетной области - условия отсутствия отражения возмущений. Для решения дифференциальных уравнений химической кинетики используется оригинальный двухточечный алгоритм, не требующий обращения матриц и обеспечивающий выполнение законов сохранения элементарного химического состава. Взаимодействие расчетных модулей организовано следующим образом: сначала выполняется этап расчета газодинамической подсистемы, в результате которого определяются консервативные переменные системы $\rho, \rho u, \rho v, E, \rho \gamma_i$, затем на химическом этапе при заданных ρ и E решаются уравнения химической кинетики и рассчитываются новые значения концентраций компонент, после чего цикл повторяется.

Тестовые численные эксперименты для химически реагирующих течений. Было проведено математическое моделирование физических экспериментов в ударных трубах по исследованию дифракции плоской ударной волны на прямоугольном препятствии в реагирующей газовой среде [298]. Ударная труба имеет поперечное сечение 38 мм x 76 мм. Расчетная область была размером 300 мм.



Thomas, Ward, Williams, Barbey // Shock Waves 2002

Рис. 6.11 Детонация при дифракции ударной волны на препятствии в канале

Препятствие представляет собой прямоугольный блок высотой, равной половине высоты канала, то есть 38 мм, и шириной, равной ширине канала. В качестве горючей смеси использовалась смесь кислород-водород-аргон (азот) $2H_2 + O_2 + X\%Ar$, с X в диапазоне 70-90% для аргона и 70% для азота. Для описания химических превращений в газовой фазе использовался детальный кинетический механизм, включающий 19 реакций для 10 компонент (таблица 6.1).

Начальное давление в ударной трубе 5.3 КПа. Число Маха на падающей ударной волне принималось равным 2.5. На рис. 6.11 представлены результаты расчетов дифракции ударной волны на препятствии в реагирующей среде (70%Ar). На верхнем рисунке изображены изолинии поля концентраций паров воды, на нижнем поля температуры. Из анализа результатов на рис. 6.11 следует, что на передней грани за фронтом отраженной ударной волны препятствия происходит воспламенение смеси газов, после чего фронт горения, распространяясь влево от препятствия, догоняет фронт отраженной ударной волны и взаимодействует с ним с образованием детонационной волны, распространяющейся с гораздо большей скоростью, чем ударная волна. Таким образом, ударно-волновая структура при дифракции плоской ударной волны на прямоугольном препятствии состоит из проходящей ударной волны, отраженной ударной волны, фронта горения и фронта детонационной волны.

Численные эксперименты по исследованию дифракции ударно-волновых структур, образующихся при взрыве, на препятствиях в водородо-воздушной среде. Путем вариации энергии взрыва численно в одномерном нестационарном приближении получены различные режимы течения, в том числе режим, при котором происходит “развал” детонации. В этом случае взрывная ударная волна “отрывается” от фронта горения и движется на некотором расстоянии впереди него.

На рис. 6.12 – 6.15 показано распределение начальных параметров течения, полученных переинтерполяцией на двумерную сетку результатов одномерного расчета нестационарного сферически-симметричного взрывного течения в реагирующей среде. Ударно-волновая структура данного течения в некоторый момент времени t_0 состоит из головной ударной волны (УВ рис.6.10), которая имеет координату $x=0.01$ на оси, вторичной, отраженной от центра координат ударной волны (УВ2) $x=-0.36$ (рис. 6.10 и рис.6.11), контактного разрыва, отделяющего газообразные продукты сгорания твердого взрывчатого вещества от продуктов сгорания водородо-воздушной среды (КР рис. 6.10)

$x=-0.33$ рис.6.12 и фронта горения, разделяющего область высокотемпературных продуктов сгорания от области непрореагировавшей водородовоздушной смеси (ФГ рис.6.10) $x=-0.15$ рис.6.12. Необходимо отметить, что в рассматриваемом варианте течения наблюдался развал детонации, фронт головной ударной волны "убежал" от фронта горения, температура за головной ударной волной упала ниже температуры самовоспламенения водородо-воздушной горючей смеси. Картина течения, наблюдаемая в экспериментальной установке, сильно зависит от положения точки отрыва ударной волны от фронта горения, что может приводить к разбросу экспериментальных данных.

Параметры течения, полученные в результате нестационарного расчета в двумерной области OABC (рис. 6.10) до момента времени $t_0 + 0.00302c.$, представлены на рис. 6.16 – 6.21. В результате дифракции ударной волны на внутренней поверхности конуса вблизи вершины конуса происходит фокусировка отраженных ударных волн, сильное повышение давления и температуры, приводящее к воспламенению горючей смеси и формированию фронта горения.

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 догонит отраженную волну и сформируется структура детонационной волны, которая движется с высокой скоростью навстречу потоку газа, втекающему в полость. На рис. 6.16, 6.17 фронт детонационной волны расположен внутри конуса ($x=0.2$), за этим фронтом находится область высокой температуры (3000К) и давления рис. 6.16-6.19, при этом фронт горения начального взрыва за счет образования зоны разрежения вблизи точки взрыва сместился влево до $x=-0.2$.

На рис. 6.20, 6.21 изображены изолинии поля level-Set функций, полученные по изложенной выше методике. Сравнение формы отслеживаемых контактных поверхностей, приведенных на рис. 6.20, 6.21, и тех же поверхностей, но визуализируемых по изолиниям поля температур, которое рассчитывается по схеме сквозного счета, показывает их полную идентичность.

Зависимость давления от времени в точках P1,P2,P3,P4,P5,P6 контура (рис.6.10) приведены на рис. 6.22а, где каждая кривая имеет два явно выраженных максимума. Первый пик давления связан с прохождением через соответствующий датчик взрывной

ударной волны, второй - с движением фронта детонационной волны из вершины конуса в сторону центра взрыва. На рис. 6.22б отдельно показана временная зависимость давления в вершине конуса (точка Р6 на рис. 6.10). Необходимо отметить, что аномально высокое давление почти 350 атм, фиксируемое в расчетах в вершине конуса, укладывается в диапазон величин давления, наблюдаемых в экспериментах [189]. В экспериментах на 6 датчике фиксировались давления от 300 до 1000 атмосфер в зависимости от энергии инициирования. На основании проведенных расчетов может быть дано следующее объяснение такому большому разбросу экспериментальных данных. Взрыв твердого взрывчатого вещества в водородо-кислородной смеси инициирует в ней формирование пересжатой детонационной волны, причем степень "пересжатия" пропорциональна величине подводимой энергии. Пересжатая детонационная волна при наличии условий близким к сферической симметрии, ослабевает и стремится выйти на режим Чепмена-Жуге с сопутствующими последствиями, такими как неустойчивый режим распространениями со скоростями ~ на 10% меньшими и большими чем скорость Чепмена-Жуге, или может происходить срыв детонации, ситуация, когда ударная волна убегает от фронта горения (такая картина течения наблюдается в приведенном расчете и описана в [189]). Срыв детонации может происходить на различных расстояниях от места взрыва. После срыва детонации интенсивность головной ударной волны до входа в коническую полость падает. Достижимое в центре конуса давление прямо пропорционально интенсивности падающей ударной волны. Таким образом, определяющим параметром рассматриваемого процесса является место отрыва (если отрыв имел место) падающей ударной волны от фронта горения, чем оно ближе к конической полости, тем выше давление реализуемое на датчике 6. Необходимо отметить, что максимальное давление может реализовываться не на шестом, а на пятом датчике, в случае фокусировки отраженных волн на расстоянии от дна конуса. А также то, что внутри конуса интенсивность падающей ударной волны может увеличиваться, и могут возникнуть условия повторного воспламенения горючей смеси с повышением давления, которое является следствием процессов как воспламенения, так и отражения падающей ударной волны от вершины конуса.

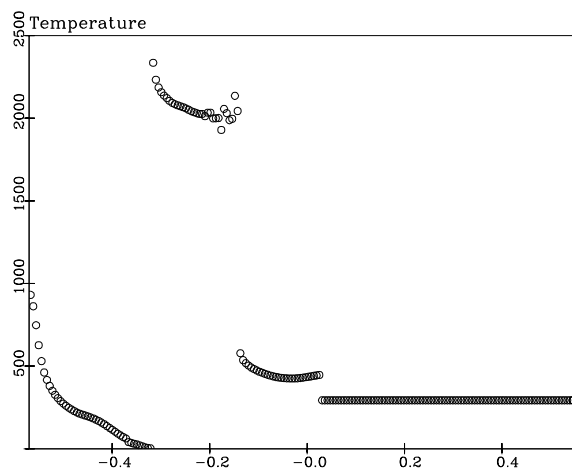


Рис.6.12. Распределение плотности вдоль оси.

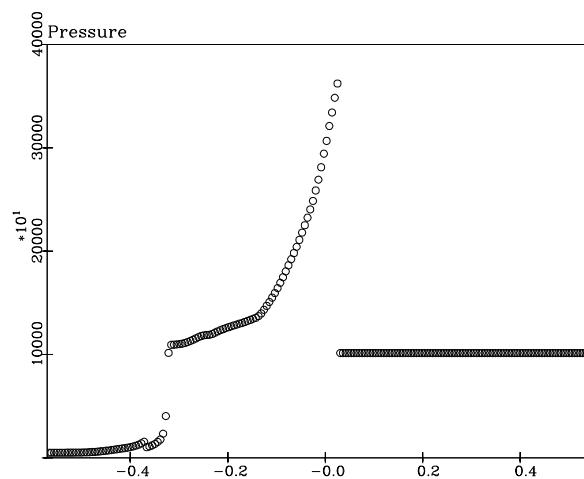


Рис.6.13 Распределение давления вдоль оси.

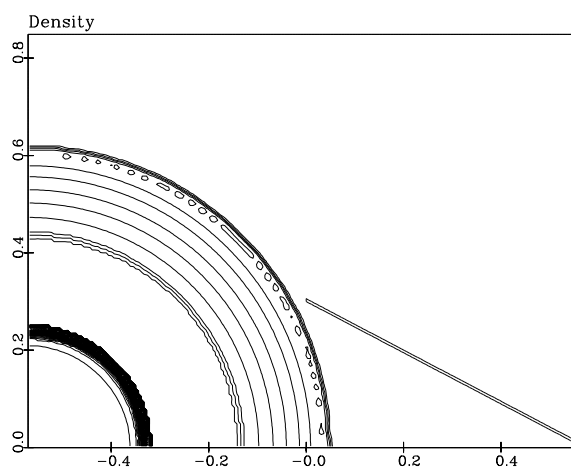


Рис. 6.14 Изолинии плотности в начальном поле параметров при t_0 .

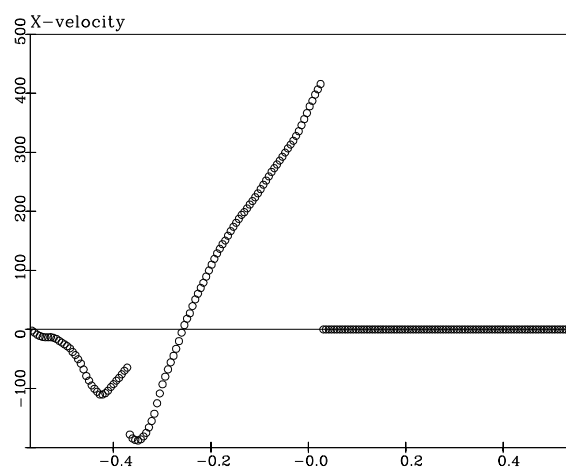


Рис.6.15 Распределение скорости на оси

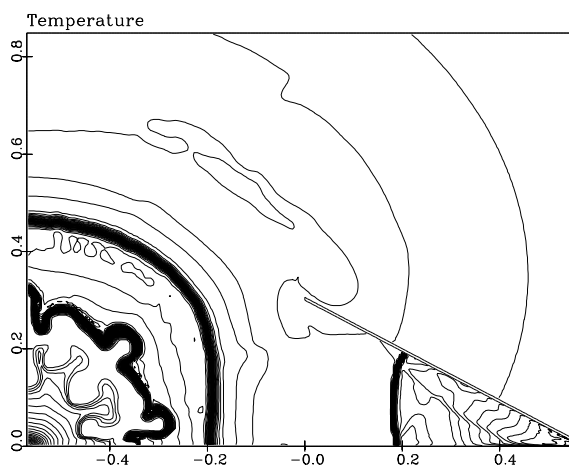


Рис. 6.16 Изолинии поля температуры.

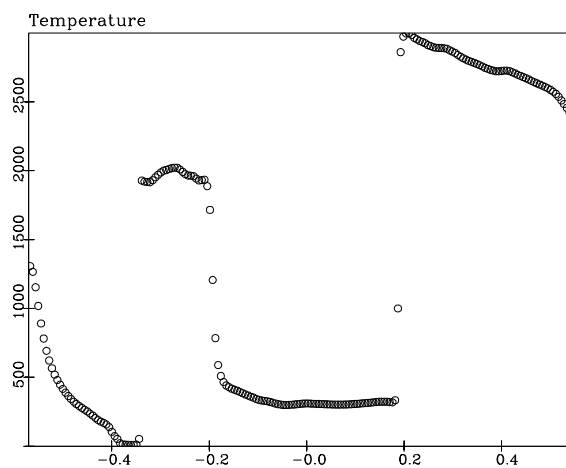


Рис. 6.17 Распределение температуры на оси x

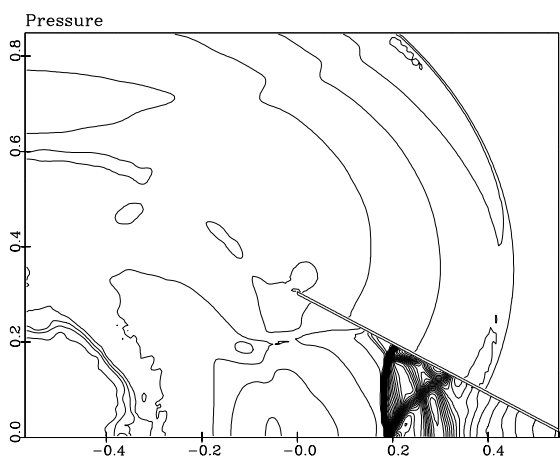


Рис. 6.18 Изолинии давления в момент

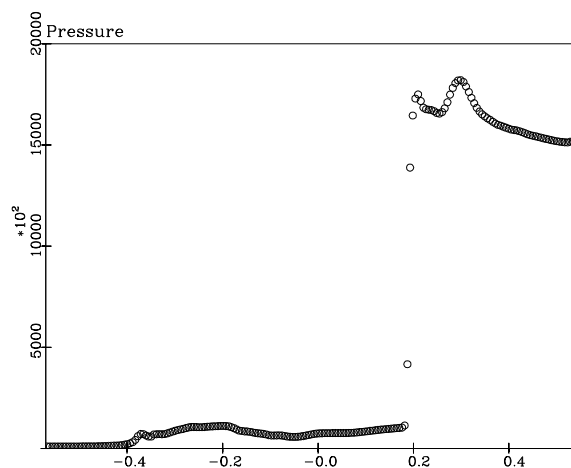


Рис. 6.19 Распределение давления на оси x

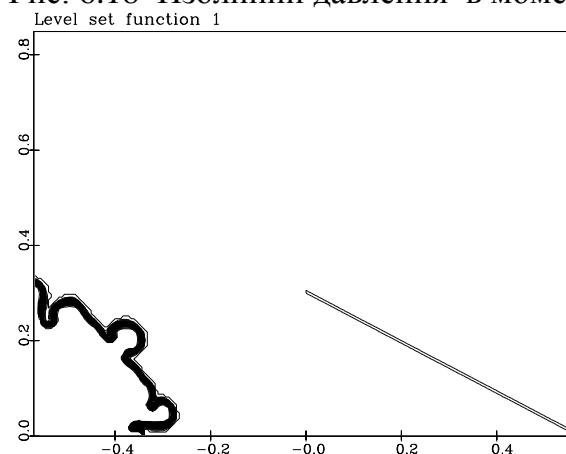


Рис. 6.20 Изолинии первой level-set ф-ии.

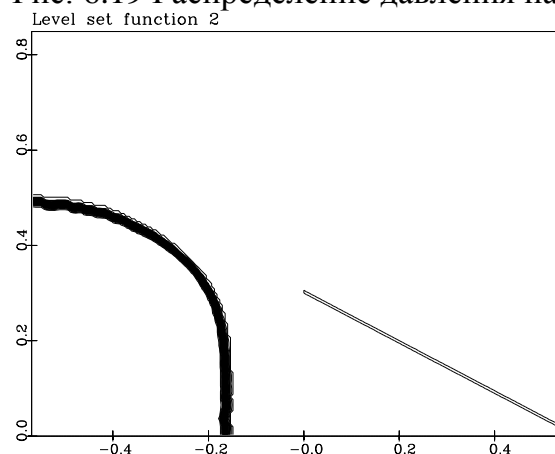
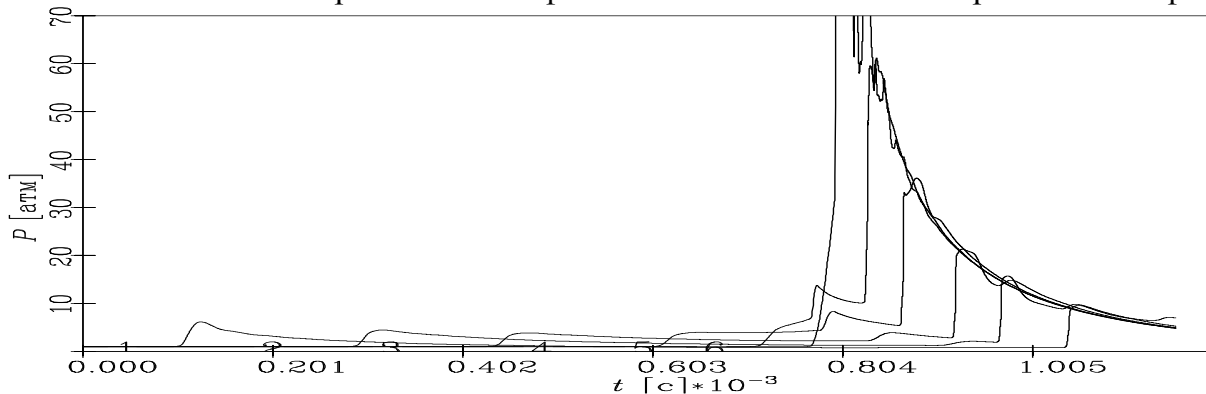
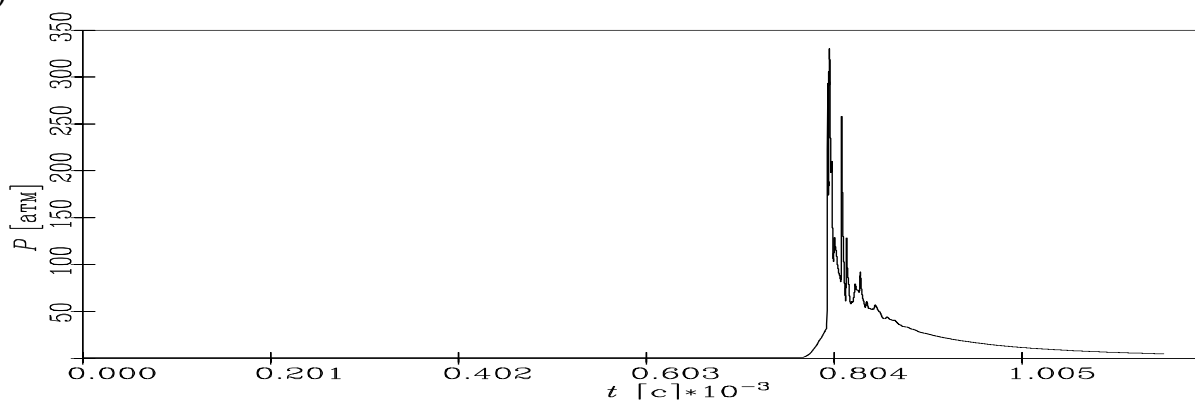


Рис. 6.21 Изолинии второй level-set ф-ии.



а)



б)

Рис.6.22 Показания числовых датчиков давления по времени в точках P1,P2,P3,P4,P5 контура (а), зависимость давления от времени в вершине конуса P6 (б)

6.2. Определение параметров конденсированных частиц в зоне космического аппарата с целью оценки параметров возможного загрязнения его элементов

В данном разделе приведены результаты исследований, выполненные автором совместно с Волковым В.А., Ивановым И.Э., Крюковым И.А., Муслаевым А.В., Стрельцовым В.Ю, под руководством У.Г.Пирумова. В отраслевых институтах существовали апробированные методики расчета струй и их воздействий, в том числе и двухфазных, на элементы конструкции летательных аппаратов. Однако данные методики не учитывали возможность гомогенного образования кластеров металлов в струях тормозных двигателей. Поэтому основной задачей исследования было моделирование гомогенной конденсации свинца, получение функции распределения кластеров по размерам и ее моментов (средний размер кластеров), которые использовались в качестве исходных данных для оценки загрязняющего воздействия. Коллективом авторов был выполнен полный цикл исследований, включающий также построение расчетных сеток, подготовку термодинамических и теплофизических данных, моделирование многофазного течения в двумерной нестационарной постановке. Результаты численного моделирования продемонстрировали удовлетворительное совпадение с расчетами по отраслевым методикам. При непосредственном участии автора были разработаны вычислительные алгоритмы и компьютерные программы расчета термодинамических и теплофизических свойств веществ, моделирования равновесных и неравновесных химических превращений, фазовых переходов, сопротивления и тепломассообмена частиц дисперсной фазы. Все алгоритмы и программы носят универсальный характер, ориентированы на произвольные виды веществ и смесей, включающих газообразные, жидкие и твердые компоненты. Результаты исследований, приведенные в данном разделе, вошли в отчеты по хоздоговорным и госбюджетным научно-исследовательским и опытно-конструкторским работам, докладывались на тематических конференциях, опубликованы в статьях, монографиях и учебных пособиях [45, 53, 68, 301].

Отделение космических аппаратов от третьей ступени ракеты-носителя производится путем запуска твердотопливных тормозных двигателей, струи которых могут достигать полезной нагрузки космического аппарата, в составе продуктов сгорания содержатся частицы конденсата. Частицы конденсата представляют собой как не сгоревшие частицы, входящие в состав топлива, так и частицы металлов, которые

образуются при истечении струй в разреженную среду в результате конденсации [109]. Важной задачей является определение величин потоков конденсированных частиц в окрестности космического аппарата с целью оценки параметров возможного загрязнения элементов космического аппарата.

Расчеты газодинамического поля течения и движения конденсированных частиц проводились для давления в камере сгорания двигателя $P_{кc} = 7.5 \text{ МПа}$ при работе на “полке” тяги РДТТ 15Д4 при внешней температуре 298 К. Расчет термодинамически равновесного течения продуктов сгорания в сопле РДТТ проводился по методикам, приведенным в Главе 2 для штатного состава топлива, при $d_{кр} = 50 \text{ мм}$. Результаты расчета представлены в таблице 6.2:

Таблица 6.2

Параметры в камере сгорания	
Давление, P_k , МПа	7.5
Температура, T_k , °К	2358.5
Параметры на срезе сопла	
Диаметр среза сопла РДТТ d_a , м	0.0945
Давление, P_a , Па	358080
Температура, T_a , °К	1323.8
Удельный объем, $\text{м}^3/\text{кг}$	1.2354
Удельная теплоемкость при постоянном давлении (замороженная), Дж/(кг·К)	1584.44
Показатель адиабаты, κ	1.2673
Коэффициент динамической вязкости, $\text{Н с}/\text{м}^2$	$4.71 \cdot 10^{-5}$
Средняя молекулярная масса, г/моль	23.859
Число Маха, M_a	2.587
Массовые доли компонентов на срезе сопла	
H - $3.818e^{-7}$, H_2 - 0.2023, H_2O - 0.1437, N_2 - 0.1170, NH_3 - $1.270e^{-5}$, CO - 0.3885, CO_2 - 0.1477, CH_4 - $1.44e^{-5}$, CH_2O - $1.344e^{-7}$, CH_2O_2 - $1.244e^{-7}$, HCN - $7.551e^{-7}$, k^*Pb - 0.0189, Pb - 0.001, Pb_2 - $8.830e^{-7}$, PbO - $8.8770e^{-8}$, PbH - $1.161e^{-6}$, k^*Co - 0.0022, k^*TiO_2 - 0.02	

При вышеуказанных параметрах расход газа через сопло РДТТ равен 11.3 кг/с. Процентное содержание свинца в составе топлива - 2.7%. Экспериментальные исследования показали, что в продуктах сгорания присутствуют частицы диаметром 0.8-1.2 мкм и 5-7 мкм, представляющие собой в основном смесь рутила (TiO_2), свинца (Pb) и окислов свинца (PbO).

Для моделирования несущей фазы в сопле и струе использовалась система двумерных нестационарных уравнений Навье-Стокса с соответствующими граничными условиями. Для численной аппроксимации конвективной (невязкой) части исходной системы уравнений использовалась явная квазимонотонная численная схема повышенного порядка точности, являющаяся модификацией схемы С.К.Годунова.

Используется кусочно-линейное распределение параметров на расчетном слое и существенно двумерные процедуры "восстановления" данных в расчетных ячейках [145]. В качестве граничных условий на стенках канала задавались условия непротекания, во входном сечении задавались условия сверхзвукового потока, в выходном условия отсутствия отражения. Метод решения уравнений Навье-Стокса, расчетная программа и поля газодинамических параметров разработаны и получены И.Э.Ивановым и И.А.Крюковым (рис. 6.23). В численном расчете начальные данные брались из таблицы 6.2.

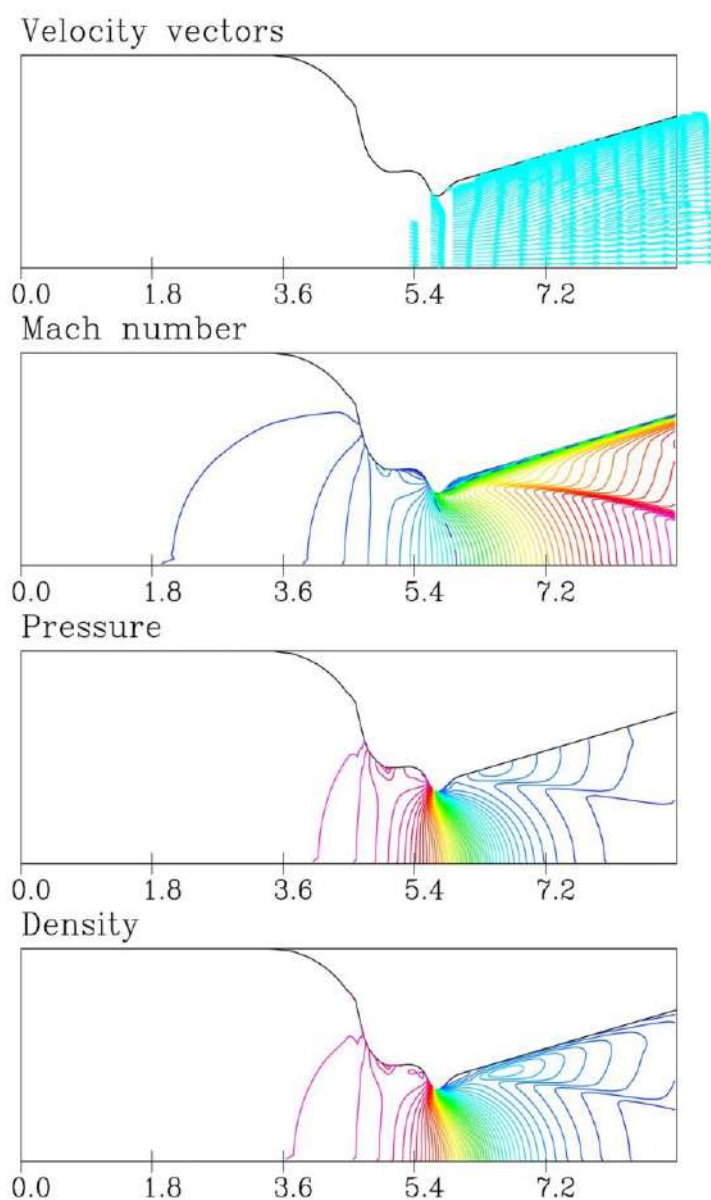


Рис.6.23. Изолинии параметров течения в сопле (продольная координата отнесена к радиусу критики).

Масштабирование параметров, приведенных на рис. 6.23 можно осуществить с использованием распределений представленных на рис. 6.24 и 6.25.

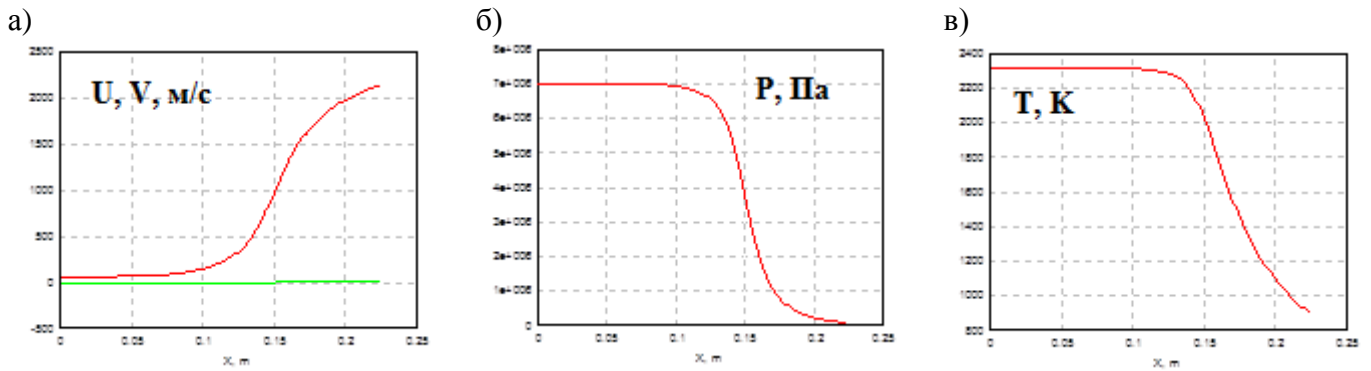


Рис. 6.24. Распределение компонент вектора скорости (а), давления (б), температуры (в) вдоль оси сопла

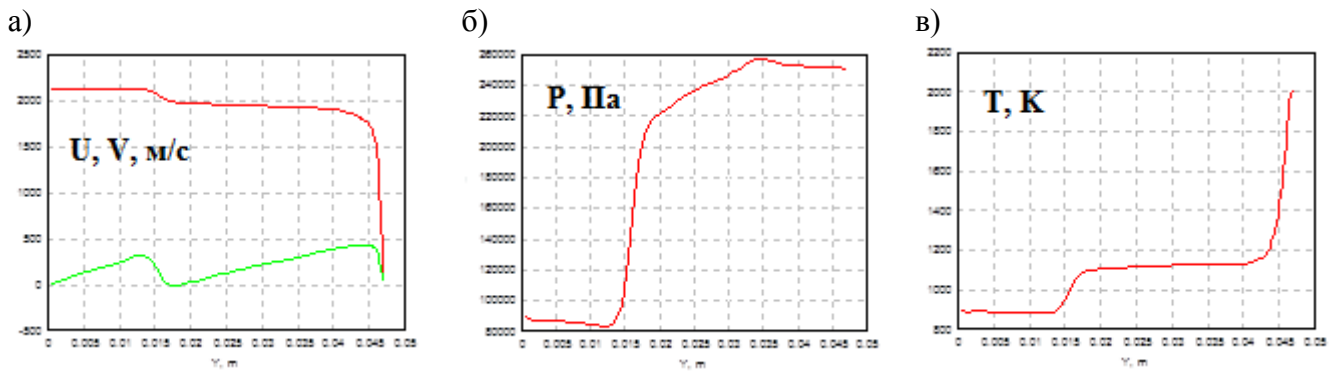


Рис. 6.25. Распределение компонент вектора скорости (а), давления (б), температуры (в) в выходном сечении сопла

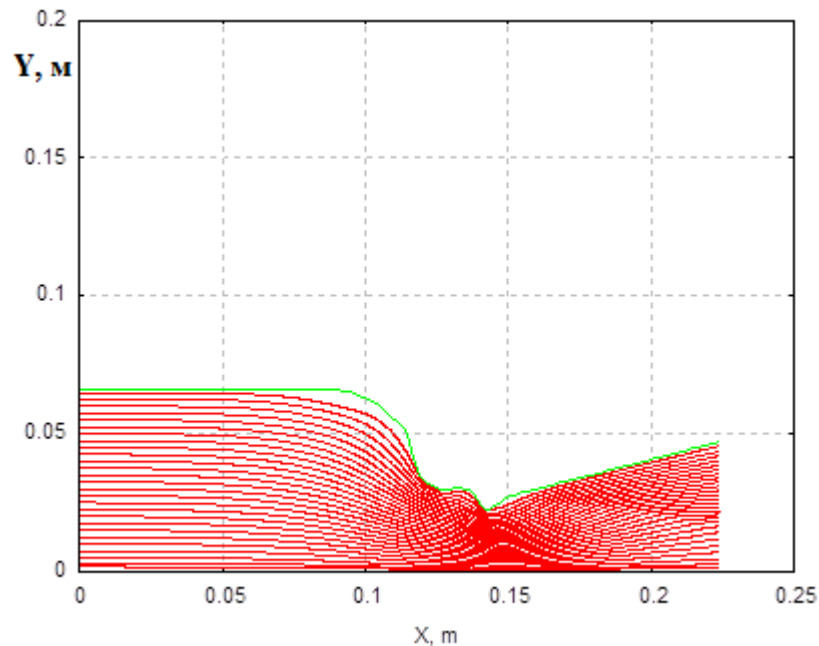


Рис. 6.26. Линии тока газа в сопле

Полученные параметры газодинамического поля течения продуктов сгорания в сопле двигателя (рис. 6.23-6.26) служили исходными данными при расчете полей параметров течения конденсированной фазы.

Математическое моделирование течений реагирующей двухфазной смеси проводилось в упрощенной постановке. Продукты сгорания моделировались равновесной смесью совершенных газов, термодинамические свойства газообразных,

жидких и твердых компонент заимствовались из [121]. Предполагалось, что частицы могут плавиться и испаряться и, что все частицы одинаковые, среднее расстояние между ними много больше их размеров, а химический состав вещества частиц с течением времени не изменяется. Обратное влияние поля частиц на газовое поле не учитывалось. Для описания поля частиц использовался Лагранжев подход, в рамках которого сопротивление и тепломассообмен частиц описывался следующей системой обыкновенных дифференциальных уравнений [60, 70, 233, 257]

$$\frac{d}{dt}X = u_l; \quad \frac{d}{dt}Y = v_l; \quad \frac{d}{dt}Z = w_l \quad (6.9)$$

$$\frac{d}{dt}u_l = \dot{u}_l; \quad \frac{d}{dt}v_l = \dot{v}_l; \quad \frac{d}{dt}w_l = \dot{w}_l \quad (6.10)$$

$$\frac{d}{dt}m_l = \dot{m}_l \quad (6.11)$$

$$\frac{d}{dt}e_l = \dot{e}_l \quad (6.12)$$

Здесь и далее в разделе приняты следующие обозначения: t - время, X, Y, Z - координаты, u_l, v_l, w_l - компоненты вектора скорости частиц, m_l - масса частиц, e_l - удельные внутренняя энергия вещества частиц, точкой сверху помечены скорости изменения соответствующих величин. При моделировании частиц дисперсной фазы использовались модели термодинамики, сопротивления, тепломассообмена и переносных свойств, подробно описанные в главе 1.

Рассчитывались параметры частиц TiO_2 четырех фракций: 10 мкм (рис. 6.27-6.28), 5 мкм (рис. 6.29-6.30), 1 мкм (рис. 6.31-6.32) и 0.1 мкм (рис. 6.33-6.34). На рисунках 6.27, 6.29, 6.31, 6.33 представлены траектории частиц соответствующих фракций в сопле. На рис. 6.28, 6.30, 6.32, 6.34 профили модуля скоростей, температуры частиц и газа в выходном сечении сопла соответственно.

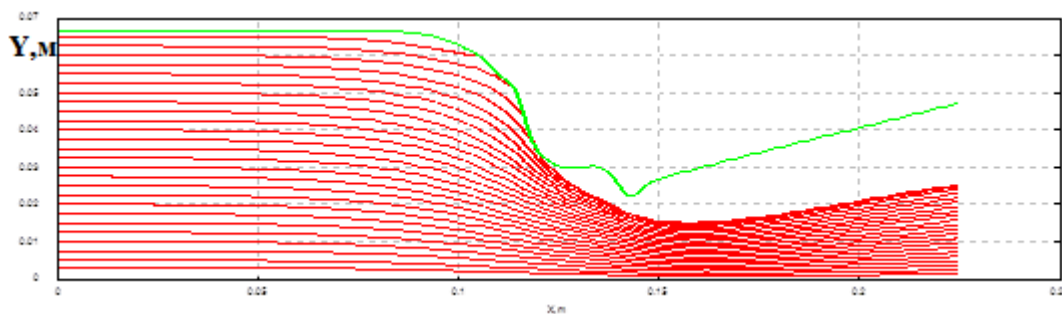


Рис. 6.27. Линии тока частиц 10 мкм TiO_2 .

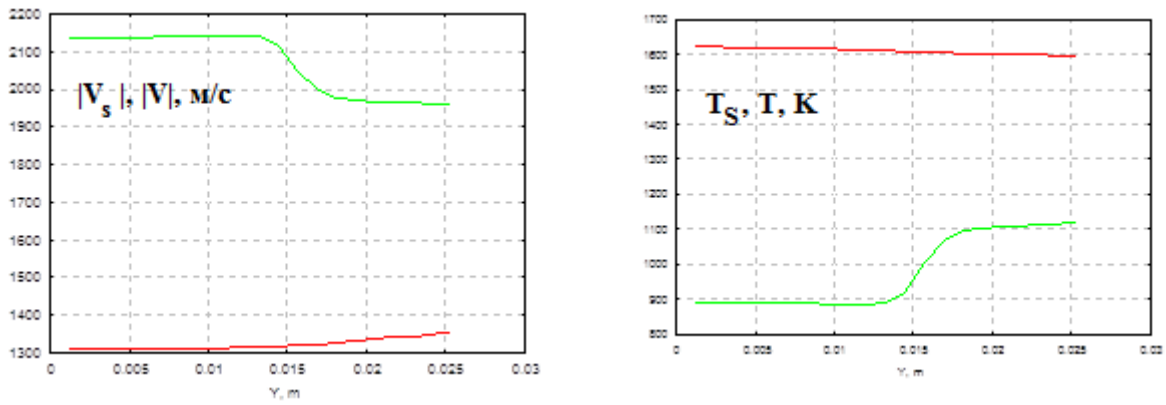


Рис. 6.28. . Распределение компонент вектора скорости (а) и температуры (б) в выходном сечении сопла.

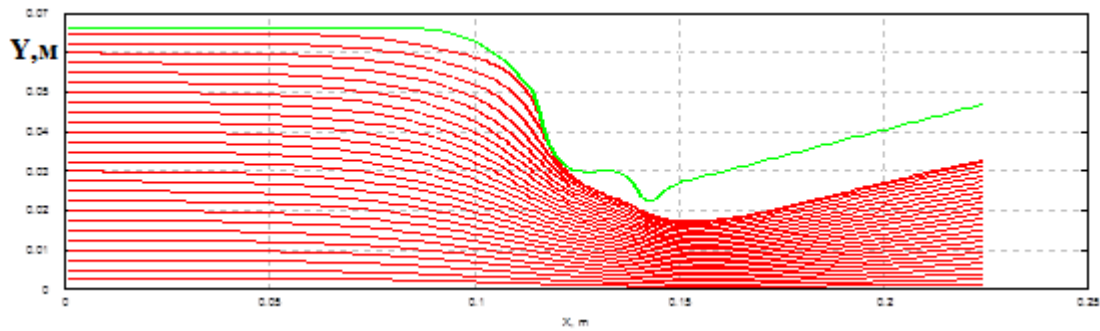


Рис. 6.29. Линии тока частиц 5 мкм TiO_2 .

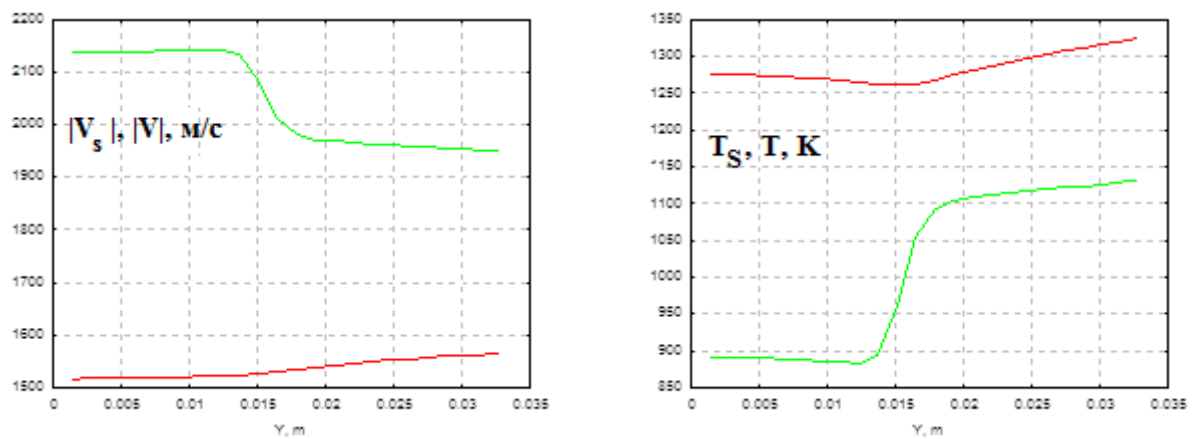


Рис. 6.30. . Распределение компонент вектора скорости (а) и температуры (б) в выходном сечении сопла.

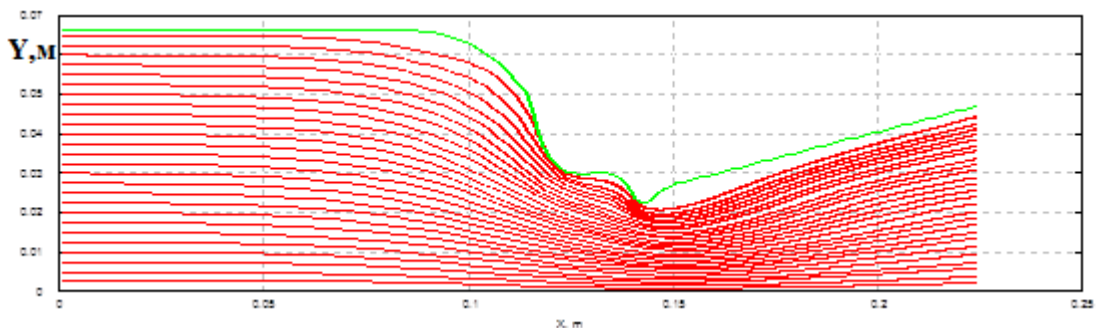
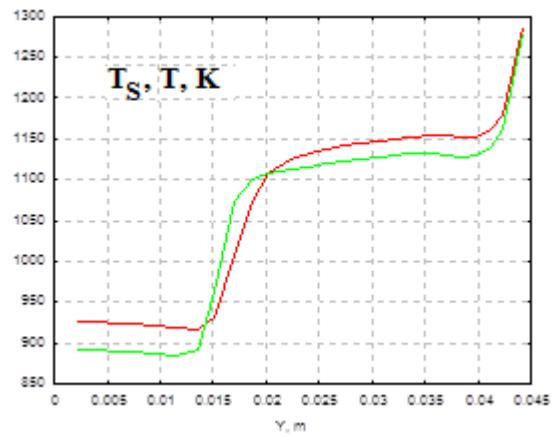
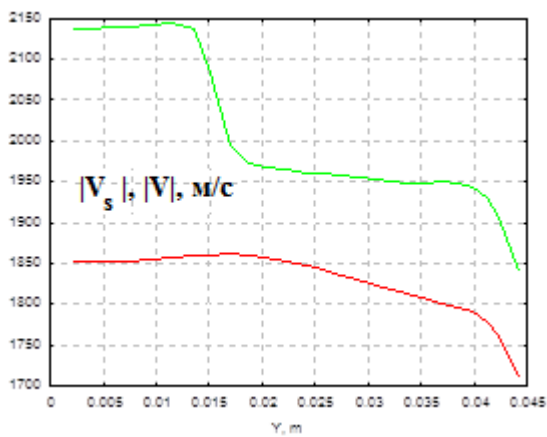


Рис. 6.31. Линии тока частиц 1 мкм TiO_2 .



а) б)
Рис. 6.32. . Распределение компонент вектора скорости (а) и температуры (б) в выходном сечении сопла.

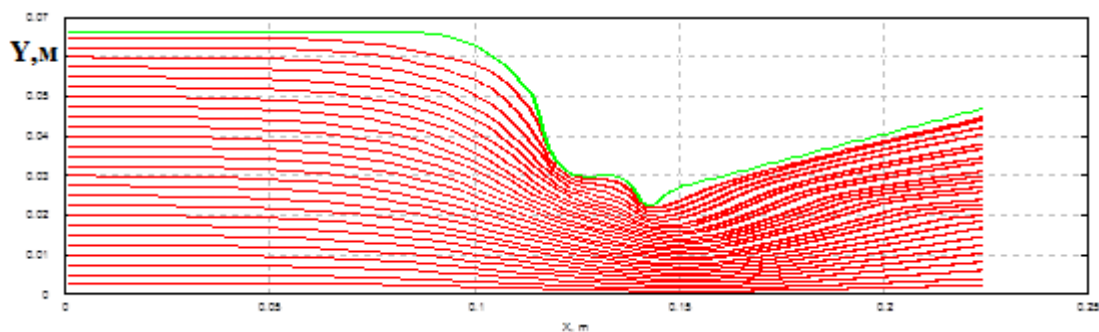
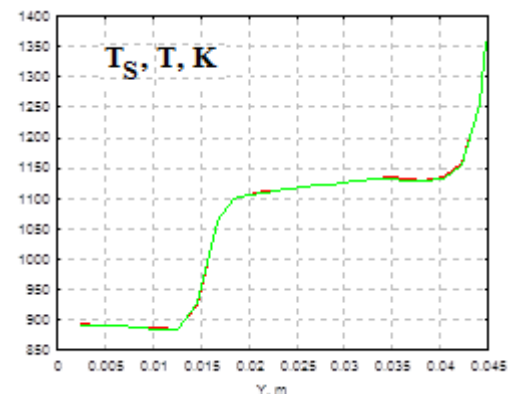
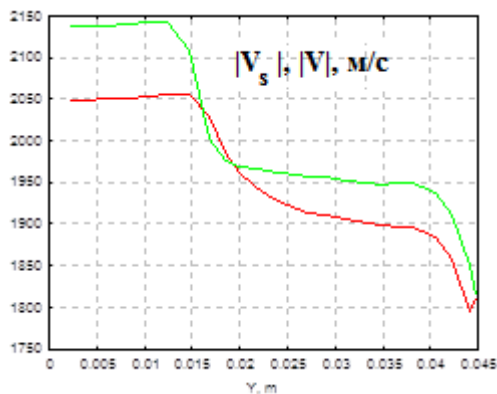


Рис. 6.33. Линии тока частиц 0.1 мкм TiO_2 .



а) б)
Рис. 6.34. . Распределение компонент вектора скорости (а) и температуры (б) в выходном сечении сопла.

Из рисунков видно, что 10 микронные частицы, занимают чуть более половины выходного сечения сопла, при этом наблюдается значительное отставание по скорости от газа (в среднем около 700 м/с) и “опережение” по температуре (600-700 К). Имеется заметная зона выпадения на стенки сопла (рис. 6.27). По мере уменьшения начального диаметра частиц зона заполнения частицами выходного сечения приближается к 100%, а параметры частиц приближаются к параметрам газа (рис. 6.29-6.34). Зона выпадения у частиц диаметром менее 5 мкм на стенки сопла практически отсутствует. Необходимо отметить, что испарение и конденсация частиц TiO_2 в сопле отсутствует.

Рассчитывались параметры частиц Pb двух фракций: 10 мкм (рис. 6.35-6.40), 6 мкм (рис. 6.41-6.46), при этом варьировалась концентрация паров свинца в газовой фазе 0.0001 (рис. 6.35-6.36, 6.41-6.42), 0.001 (рис. 6.37-6.38, 6.43-6.44), 0.01 (рис. 6.39-6.40, 6.45-6.46) соответственно. На рисунках 6.35, 6.37, 6.39, 6.41, 6.43, 6.45 представлены траектории частиц соответствующих фракций в сопле. На рис. 6.36, 6.38, 6.40, 6.42, 6.44, 6.46 приведены профили модуля скорости, температуры частиц и газа и диаметр частиц в выходном сечении сопла.

Из рисунков видно, что параметры частиц в выходном сечении сопла сильно зависят от концентрации паров свинца в газовой фазе. Так диаметр частиц меняется на 20% при изменении концентрации паров от 0.0001 до 0.01. Частицы с начальным диаметром менее 4 мкм практически не долетают до среза (полностью испаряются внутри сопла). На рисунках 6.41, 6.43, 6.45 некоторые траектории частиц обрываются, “точка обрыва” соответствует моменту полного испарения частицы.

Было проведено расчетно-теоретическое исследование, позволяющее приближенно оценить возможность конденсации паров свинца в сопле и струе двигателя. Продукты сгорания ракетного топлива содержат большое число компонент, находящихся как в газообразном (CO , CO_2 , H_2 , H_2O , N_2 и др.), так и в конденсированном состоянии (соединения свинца, титана и некоторые другие). Суммарное содержание свинца в продуктах сгорания составляет не более 2%.

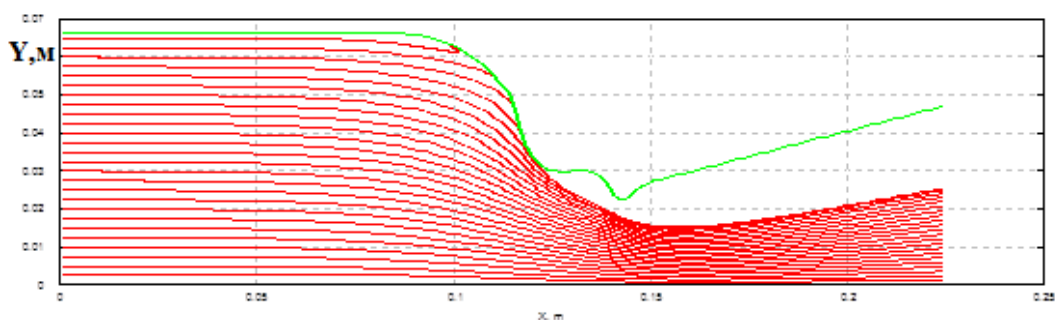


Рис. 6.35. Линии тока частиц 10 мкм Pb , $C_{Pb}=0.0001$.

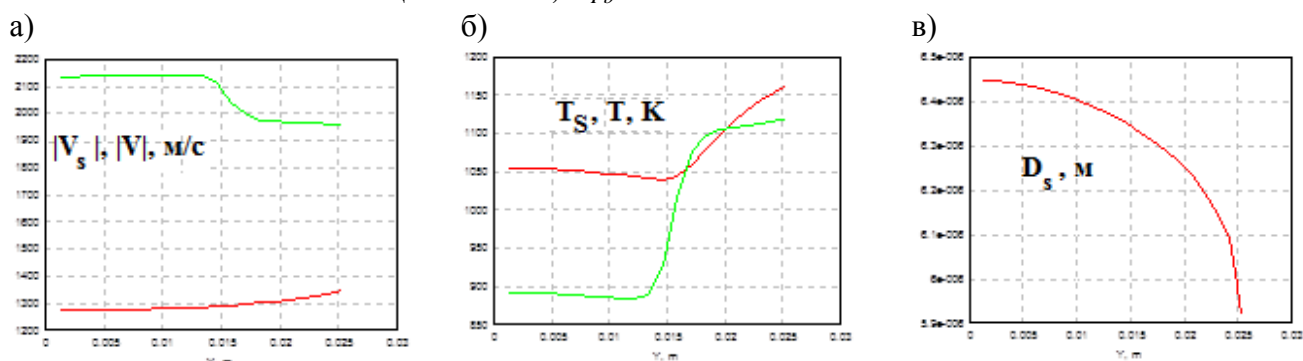


Рис. 6.36. Распределение компонент вектора скорости (а), температуры (б) и диаметра частиц Pb (в) в выходном сечении сопла.

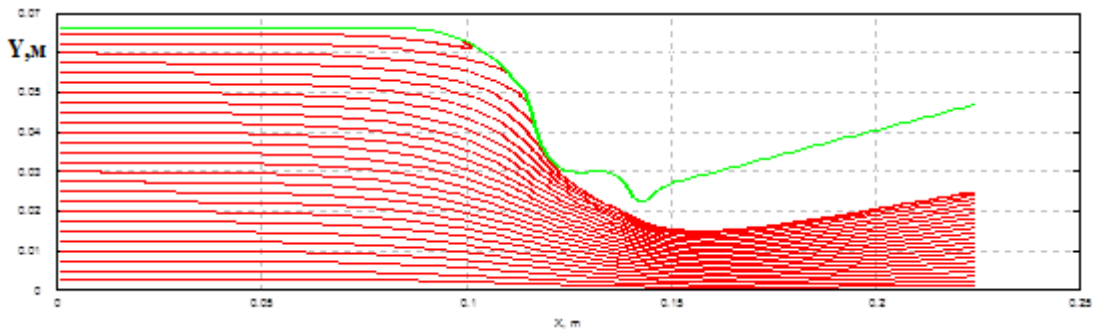


Рис. 6.37. Линии тока частиц 10 мкм Pb, $C_{pb}=0.001$.

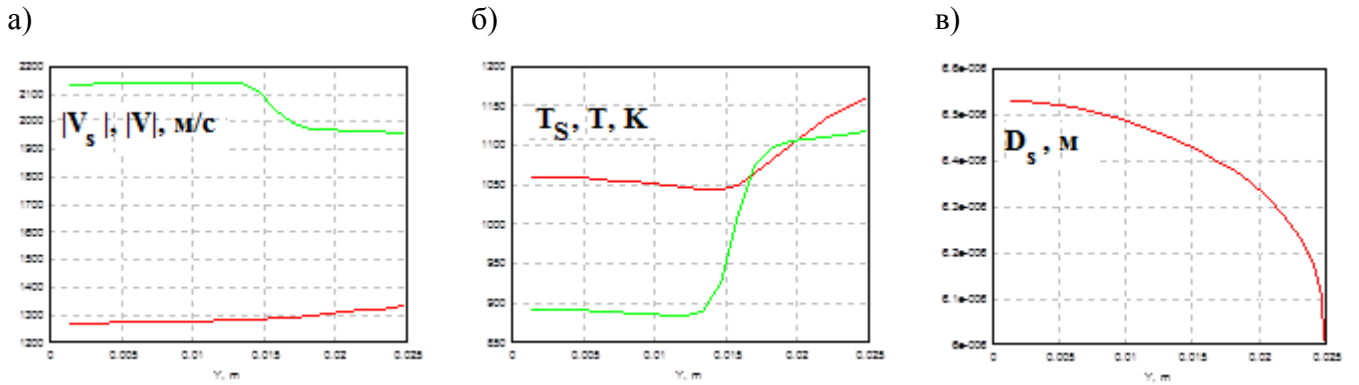


Рис. 6.38. . Распределение компонент вектора скорости (а), температуры (б) и диаметра частиц Pb (в) в выходном сечении сопла.

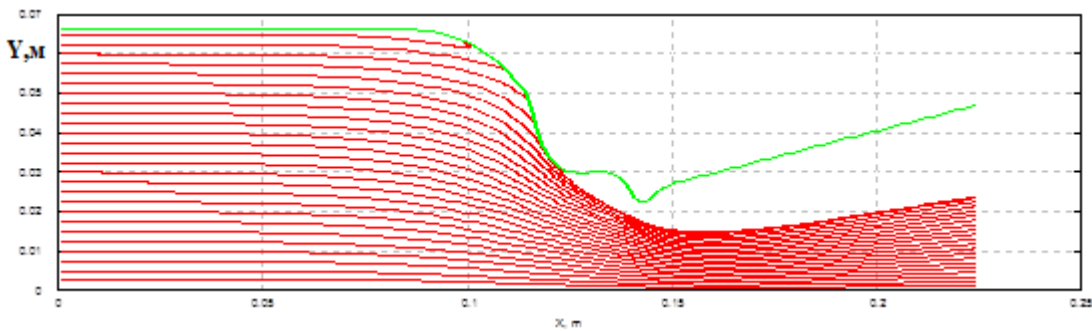


Рис. 6.39. Линии тока частиц 10 мкм Pb, $C_{pb}=0.01$.

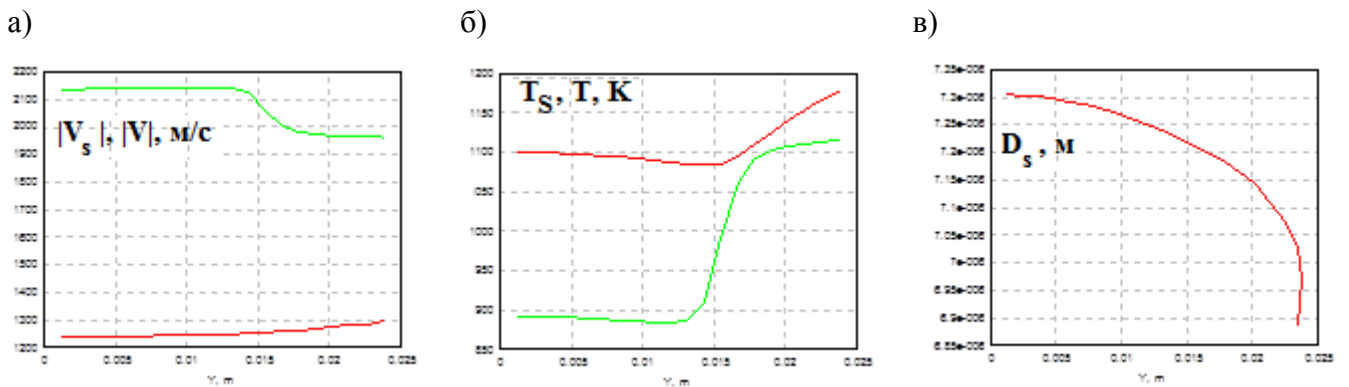


Рис. 6.40. . Распределение компонент вектора скорости (а), температуры (б) и диаметра частиц Pb (в) в выходном сечении сопла.

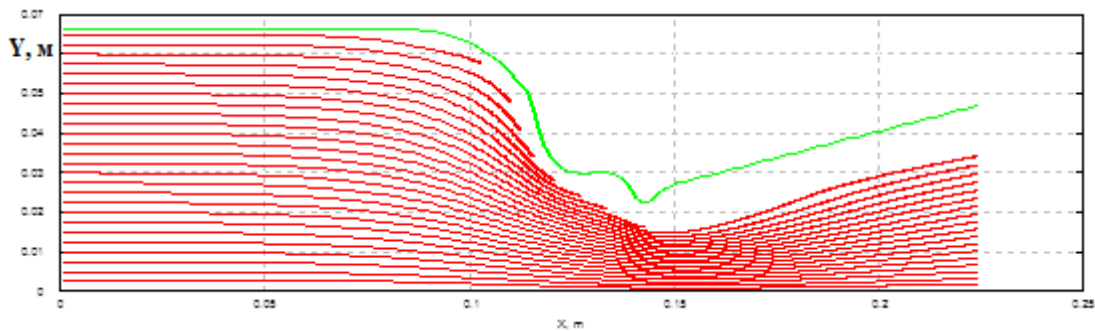


Рис. 6.41. Линии тока частиц 6 мкм Pb, $C_{pb}=0.0001$.

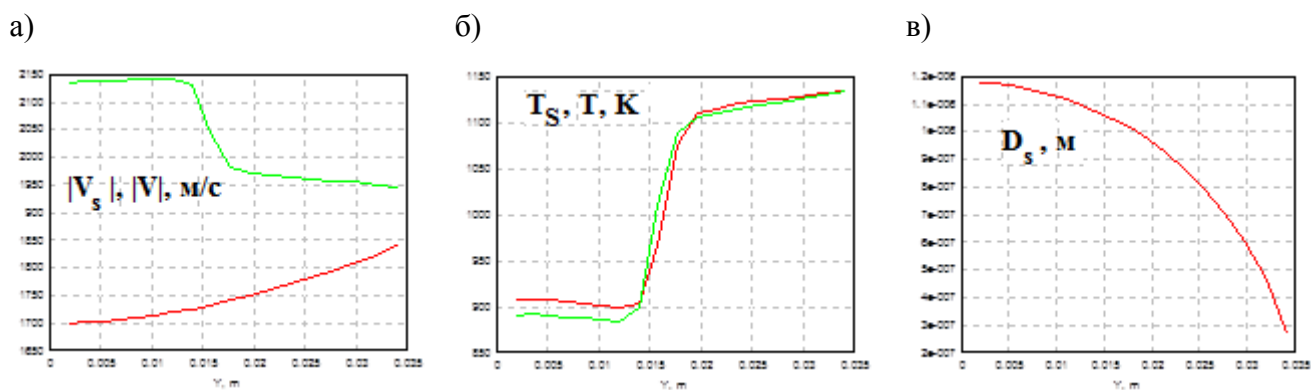


Рис. 6.42. Распределение компонент вектора скорости (а), температуры (б) и диаметра частиц Pb (в) в выходном сечении сопла.

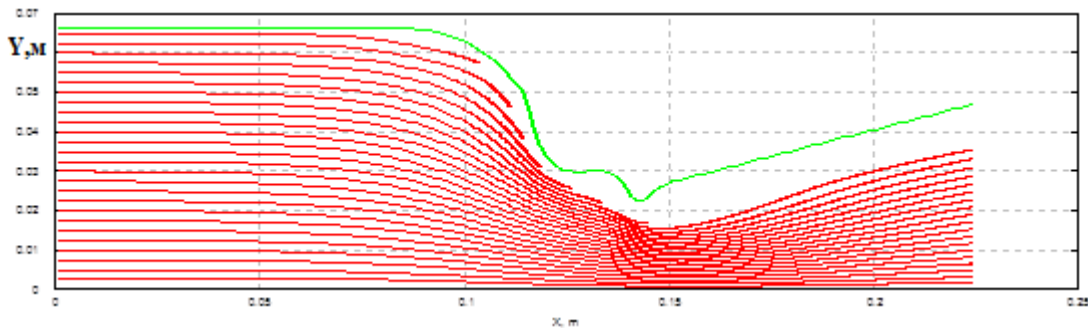


Рис. 6.43. Линии тока частиц 6 мкм Pb, $C_{pb}=0.001$.

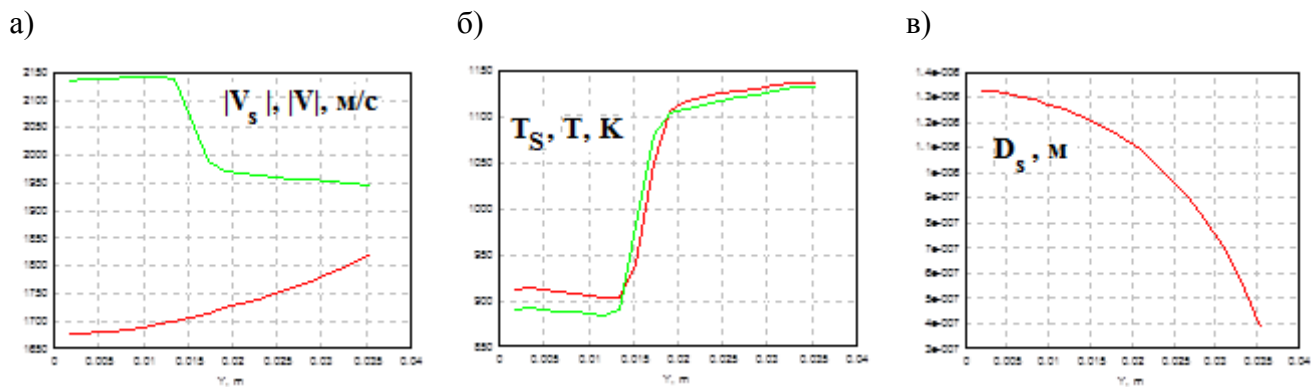


Рис. 6.44. Распределение компонент вектора скорости (а), температуры (б) и диаметра частиц Pb (в) в выходном сечении сопла.

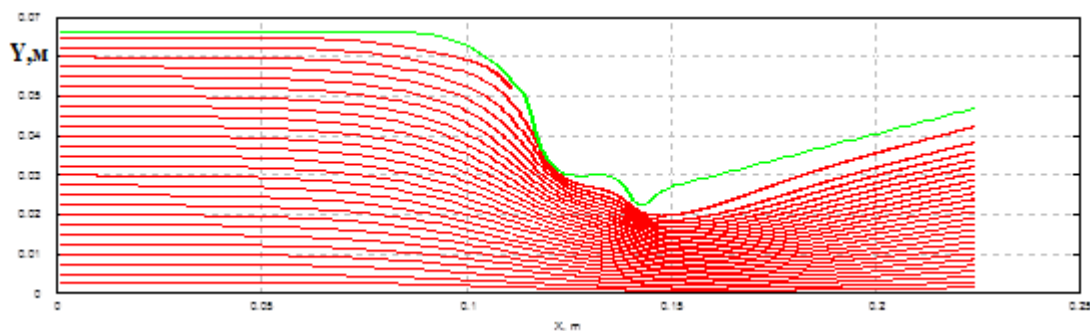


Рис. 6.45. Линии тока частиц 6 мкм Pb, $C_{Pb}=0.01$.

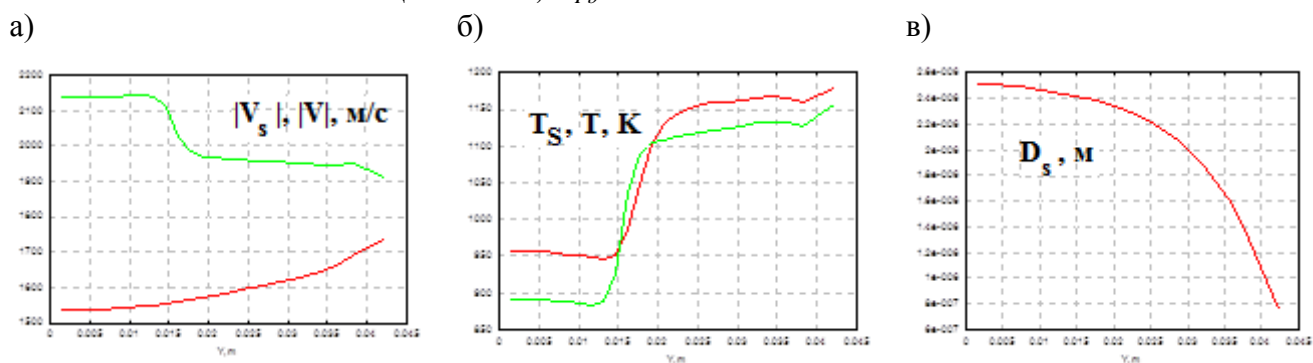


Рис. 6.46. Распределение компонент вектора скорости (а), температуры (б) и диаметра частиц Pb (в) в выходном сечении сопла.

При течении многокомпонентной газовой смеси в сопле и струе одновременно протекают разнообразные физико-химические процессы, такие как неравновесные химические реакции, испарение, конденсация, межфазное взаимодействие и т.д. Многофазное течение является многомерным, при этом в ряде областей существенны эффекты вязкости, теплопроводности и диффузии компонент. В настоящее время отсутствуют надежные методики расчета, позволяющие провести математическое моделирование с учетом всех вышеперечисленных особенностей течения, поэтому приходится “выделять” процесс, который нас наиболее интересует в настоящий момент, считая все остальные процессы “замороженными”.

Рассматривалась конденсация паров свинца в присутствии инертного газа, в качестве инертного газа была выбрана смесь газообразных продуктов сгорания соответствующая срезу сопла. Для расчета конденсации паров свинца используется развиваемая автором квазихимическая модель гомогенной конденсации и вычислительные алгоритмы расчета равновесных и неравновесных функций распределения кластеров по размерам, которые подробно описаны в главе 5.

При моделировании предполагалось, что паров свинца – 2%, соответственно угарного газа 98%. В камере сгорания задавались давление $P=80$ атм. и температура $T=2332$ К, при этом функция распределения для паров свинца бралась равновесной (рис.

6.47-6.48), после этого конденсация паров свинца рассчитывалась в сопле и струе вдоль линии тока с известными распределениями давления и температуры, полученными в расчете течения продуктов сгорания в двумерной постановке (рис. 6.49). Ось ординат (Y) отсчитывалась от плоскости симметрии ракеты носителя. В результате расчетов на срезе сопла получена неравновесная функция распределения паров свинца, представленная на рис. 6.47, кривая 2. На момент вылета продуктов сгорания количество кластеров в несколько сотен и более молекул невелико, а следовательно свинца в виде жидкости на срезе практически нет, что существенно отличается от результатов равновесного расчета.

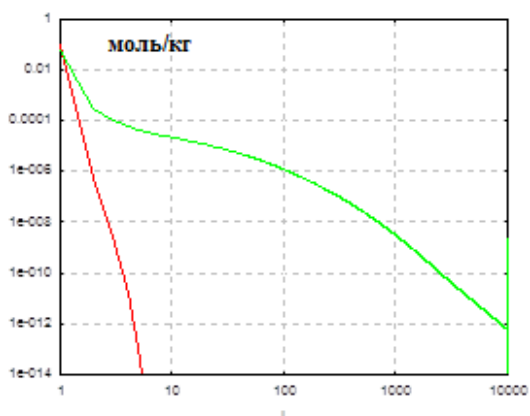


Рис. 6.47 Функция распределения по размерам паров свинца в камере сгорания (кривая 1), на срезе сопла (кривая 2).

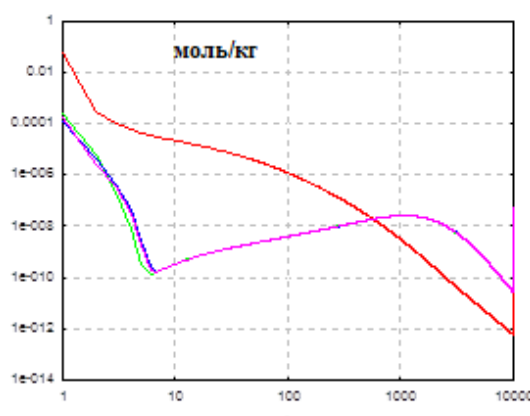
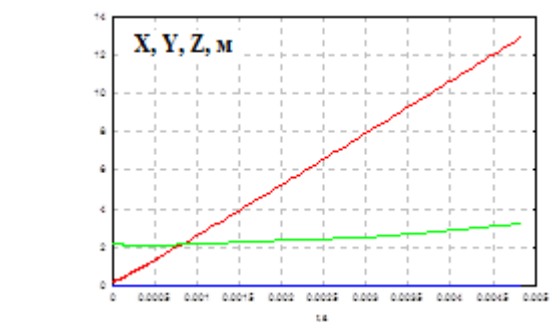
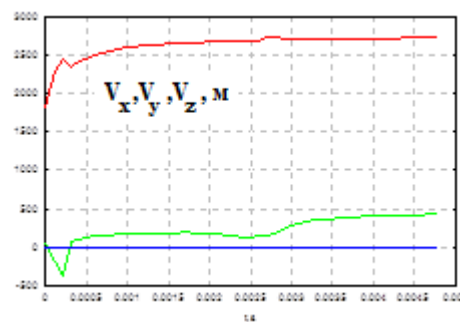


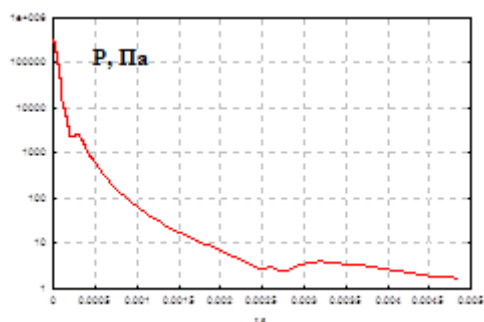
Рис. 6.48 Функция распределения по размерам кластеров свинца в различные моменты времени.



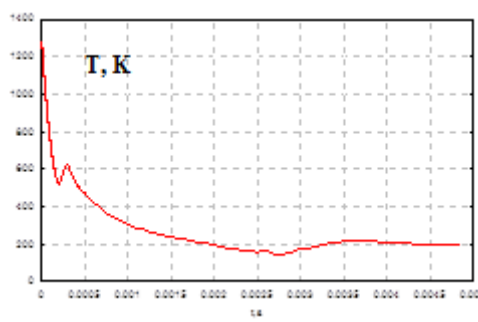
а)



б)



в)



г)

Рис. 6.49. Зависимость координат (а), компонент вектора скорости (б), давления (в) и температуры (г) вдоль траектории газа от собственного времени.

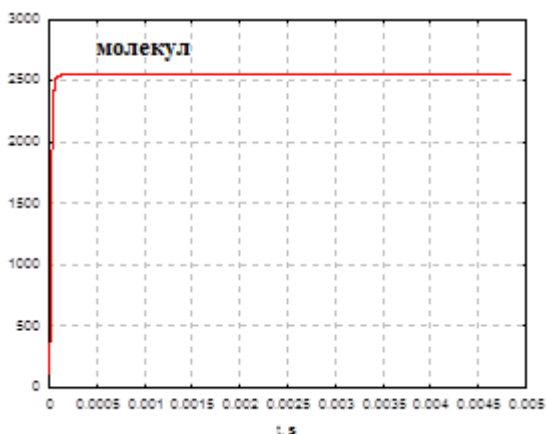


Рис. 6.51. Зависимость среднемассового размера кластера от времени.

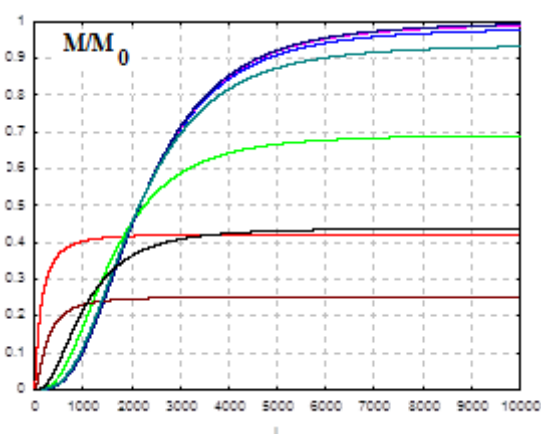
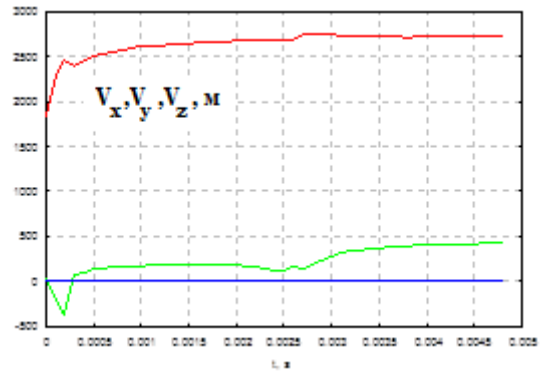
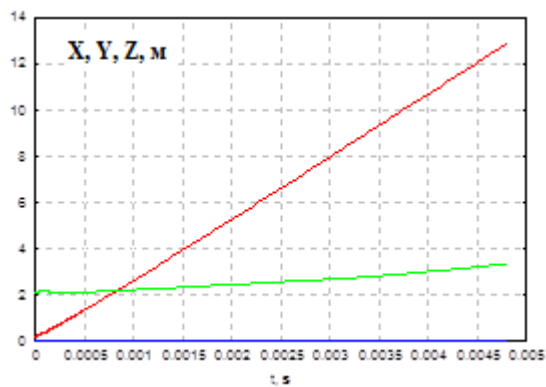


Рис. 6.50. Отношение массы свинца, заключенной в кластерах размером от 2 до i , к начальной массе паров свинца в различные моменты времени

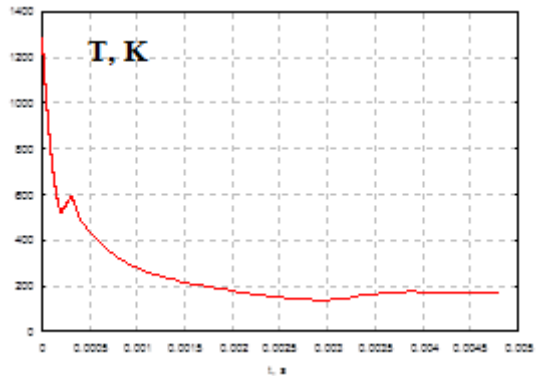
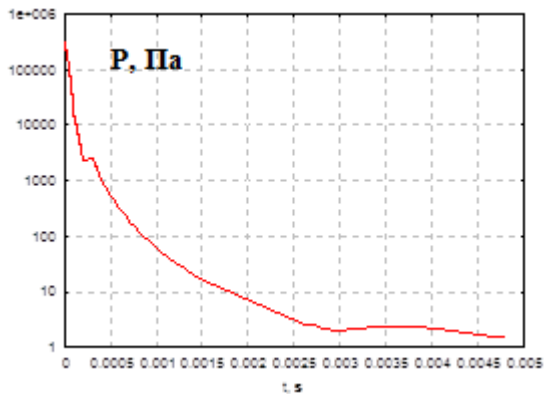
Для моделирования процесса конденсации в струе использовались данные вдоль струйки тока, полученные в результате расчета струи чистого газа. На рис. 6.49 приведены зависимости от времени координат, компонент вектора скорости, давления и температуры вдоль струйки тока. На рис. 6.48 приведены функции распределения 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 (рис. 6.50). Среднемассовый размер кластеров свинца составил 2500 молекул (рис. 6.51), 80% массы свинца заключено в кластерах размером от 1000 до 4500 молекул (рис. 6.48). Аналогичные зависимости для другой струйки тока приведены на рис. 6.52-6.55. Полученные результаты близки к вышеописанным.

На основе проведенных расчетов можно сделать вывод, что 98 % пара свинца (мономеров) в струйках тока проходящих вблизи исследуемой поверхности КА, перейдет в кластеры включающие 2 и более молекулы, при этом, 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).



а)

б)



в)

г)

Рис. 6.52. Зависимость координат (а), компонент вектора скорости (б), давления (в) и температуры (г) вдоль траектории газа от собственного времени.

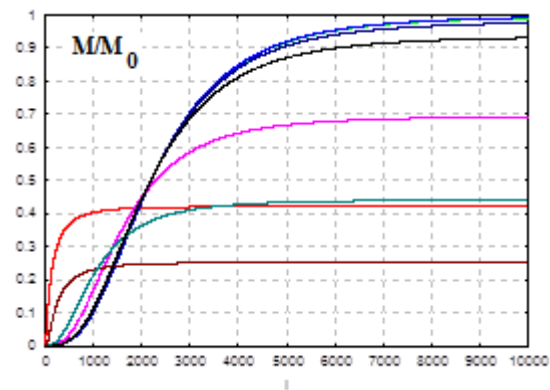
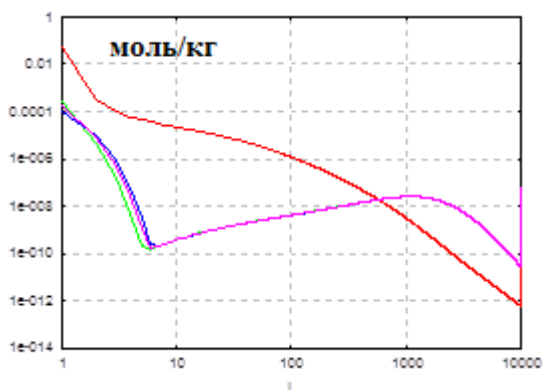


Рис. 6.53. Функция распределения по размерам кластеров свинца в различные моменты времени.

Рис. 6.54. Отношение массы свинца, заключенной в кластерах размером от 2 до i , к начальной массе паров свинца в различные моменты времени

Рис. 6.55. Зависимость среднемассового размера кластера от времени.



6.3. Численное моделирование трехмерных течений реагирующих сред

В данном разделе приводятся результаты исследований автора, выполненных совместно с В.А.Волковым и А.В.Хохловым, членами большого коллектива разработчиков вычислительных алгоритмов и программ решения трехмерных нестационарных задач физической газовой динамики, руководителем которого и автором изначального кода решения трехмерных уравнений Навье-Стокса являлся В.Н.Гаврилюк [266, 282]. Участие автора в данных работах заключается в написании физико-математических моделей, вычислительных алгоритмов и программ, реализующих термическое и калорическое уравнения состояния и связанные с ними вычисления термодинамических величин; решающих уравнения химической кинетики; моделирующих сопротивление и тепломассообмен капель углеводородного горючего с несущим газом; решающих задачи расчета термодинамического равновесия; а также осуществляющих подготовку термодинамических и кинетических данных для задач численного моделирования. Постановка задач, анализ результатов, а также решение проблем, связанных с обеспечением алгоритмического и программного взаимодействия блоков связи «газовая динамика» – «химия» проводились коллективом авторов совместно. Результаты исследований опубликованы в [44, 51, 52, 54, 57, 77, 158, 159].

6.3.1. Численное моделирование газочапельных реагирующих потоков в камерах сгорания двигательных установок

Рассматриваются вопросы численного моделирования трехмерных турбулентных реагирующих газочапельных потоков, наблюдаемых в камерах сгорания двигательных установок [52]. 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, трехмерные уравнения теплопроводности для твердого тела, дополненные подмоделями термодинамических и теплофизических свойств, газочапельных химических превращений, межфазного сопротивления и тепломассообмена. Обсуждаются вопросы использования таких моделей в рамках пакета прикладных программ, приводятся примеры решения тестовых и практических задач [52].

Математическая модель для описания стационарных и нестационарных турбулентных реагирующих газочапельных смесей основывается на методе решения системы осредненных по Фавру уравнений Навье-Стокса, уравнений $K-E$ модели турбулентности, уравнения переноса полной энтальпии и уравнений переноса реагирующих компонент [52]. Для расчета стационарных течений используется метод установления по времени. Система уравнений имеет следующий вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = S_m, \quad (6.13)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} (\tau_{ij} + \tau_{ij}^R) + S_i, \quad i = 1, 2, 3, \quad (6.14)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho H}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i H}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[-u_j (\tau_{ij} + \tau_{ij}^R) - \left(\frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \left(\frac{\partial H}{\partial x_i} - \frac{\partial u^2}{2 \partial x_i} \right) \right] = \\ = \frac{\partial p}{\partial t} - \tau_{ij}^R \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \rho \varepsilon + S_H, \quad H = h + \frac{|u|^2}{2}, \end{aligned} \quad (6.15)$$

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t} + \frac{\partial \rho k u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right) + \tau_{ij}^R \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \rho \varepsilon, \quad (6.16)$$

$$\frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial \rho \varepsilon u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right) + f_1 C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \tau_{ij}^R \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - f_2 C_{\varepsilon 2} \frac{\rho \varepsilon^2}{k}, \quad (6.17)$$

$$\frac{\partial \rho y_m}{\partial t} + \frac{\partial \rho y_m u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial y_m}{\partial x_i} + S_{y,m}, \quad m = 1, 2, \dots, N_c, \quad (6.18)$$

где $\tau_{ij} = \mu s_{ij}$, $\tau_{ij}^R = \mu_t s_{ij} - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij}$, $s_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k}$, $S_m = \sum_m S_{m,m}$ - источник массы при фазовых превращениях, $S_i = \rho g_i + S_{di}$ - действие массовых сил и источник импульса при взаимодействии фаз, $S_H = \rho g_i u_i + Q + S_{dh}$ - работа сил тяжести, источники тепла и источник, связанный с фазовыми превращениями, $S_{y,m} = S_{m,m} + W_m$ - источник компонента за счет фазовых и химических превращений, $C_\mu, C_{\varepsilon 1}, C_{\varepsilon 2}$ - константы модели турбулентности, f_μ, f_1, f_2 - функции модели ламинарно-турбулентного перехода, g - ускорение массовых сил, H - полная энтальпия единицы массы, k - кинетическая энергия турбулентности, p - давление, Pr - число Прандтля, Pr_t - турбулентное число Прандтля, $\sigma_k, \sigma_\varepsilon$ - константы модели турбулентности, t - время, u_i - компоненты вектора скорости, x_i - декартовы координаты, ε - диссипация кинетической энергии турбулентности, μ - коэффициент динамической вязкости, μ_t - коэффициент турбулентной вязкости, ρ - плотность, τ - тензор сдвиговых напряжений, τ^R - тензор

напряжений Рейнольдса, y_m - массовая доля m -ой компоненты. Отметим особенности системы (6.13)-(6.18) и методики её решения.

1. Для вычисления плотности используется уравнение состояния $\rho = F(P, H, y)$, вид которого определяется моделью термодинамики.

2. Используемый метод разрабатывался для турбулентных течений, предполагается, что число Льюиса $Le = \rho C_p D / \lambda$ равно единице, в этом случае с использованием закона Фика уравнение сохранения полной энергии преобразуется к виду (6.15).

3. Вычисление источниковых членов не должно приводить к нарушению законов сохранения вещества, импульса и энергии. Точность, с которой удовлетворяются эти законы, определяет общую точность расчета, а также влияет на устойчивость и сходимость метода в целом.

4. При построении консервативной модели, как уже отмечалось в предыдущих главах, удобно записывать уравнение сохранения энергии относительно термодинамической энтальпии, поскольку в этом случае в нем отсутствуют “химические” источники, все химические и термические процессы превращения энергии, не нарушают консервативность системы в целом и не приводят к физически неверным результатам.

Особенности метода численного решения системы (6.13)-(6.18) описаны в работах [44, 52, 268]. При решении задач сопряженного теплообмена используется уравнение теплопроводности и условие сопряжения, обеспечивающее равенство тепловых потоков со стороны газа и тела. Если тепловой поток или температура заданы, то для решения задачи теплообмена может быть применено условие Неймана или Дирихле. Для вычисления напряжений трения и коэффициента теплоотдачи интегрируются уравнения пограничного слоя с граничными условиями на стенке и его внешней границе. В отличие от традиционных пристеночных функций интегрирование уравнения пограничного слоя осуществляется численно в каждой рассматриваемой на поверхности точке. Такой подход снижает требования к густоте расчетной сетки вблизи поверхности и допускает стыковку при больших значениях y^+ . Для замыкания системы (6.13)-(6.18) используются модели термодинамики, химической кинетики и переносных свойств, описанные в главе 1.

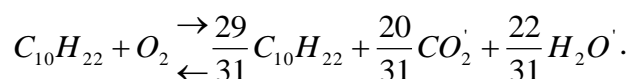
Параметры одиночных капель [86, 308] в газовом потоке находятся из системы уравнений

$$\frac{dx_{li}}{dt} = u_{li}; \quad \frac{du_{li}}{dt} = \dot{u}_{li} = \frac{u_{li} - u_i}{\tau_v}; \quad \frac{dm_l}{dt} = \dot{m}_l; \quad \frac{de_l}{dt} = \dot{e}_l. \quad (6.19)$$

Здесь m_l , e_l - масса и внутренняя энергия капли, x_{li} , u_{li} - координата и скорость капли в i -ом направлении

Для вычисления τ_v , \dot{m}_l , \dot{e}_l используется полуэмпирическая модель квазистационарного испарения одиночной капли, обтекаемой многокомпонентным газом в континуальном режиме, описанная в главе 1.

Для моделирования процесса сгорания паров керосина использовалась брутто-реакция: $C_{10}H_{22} + 15.5 O_2 \xrightarrow{\leftarrow} 10 CO_2 + 11 H_2O'$. За основу для определения константы скорости брутто реакции взяты данные из [248]. Продукты сгорания CO_2 и H_2O' являются “псевдовеществами”, имеющими ту же матрицу состава, что и углекислый газ и вода, но несколько отличные термодинамические свойства. Необходимо отметить, что в справочных данных [248] данная реакция считается необратимой и ее скорость зависит от объемных концентраций $C_{10}H_{22}$ и O_2 в первой степени. Автором предложена форма записи реакций [90], позволяющая считать ее обратимой, и модификация константы скорости [248] практически не влияющую на задержку воспламенения. Модифицированная реакция записывается следующим образом:



Константа "А", входящая в формулу Аррениуса, которая приведена в [248], модифицируется, в расчетах используется $A' = 15.5 A$. Термодинамические свойства продуктов сгорания подбирались из условия максимального совпадения теплоты сгорания, вычисленной по брутто-реакции и определенной в результате расчетов равновесного состава продуктов сгорания для бедных горючих смесей керосина с воздухом с учетом большого числа компонент.

Известно, что в камерах сгорания двигателей концентрации большинства компонент, входящих в состав продуктов сгорания, близки к их равновесным значениям [292]. Это связано с достаточно высоким уровнем температур ($T > 1300$ К), исключение составляют продукты окисления азота (NO_x) и углерода (CO), концентрации которых в ряде случаев изменяются существенно неравновесно. Поэтому при проведении оценочных расчетов вредных выбросов в настоящей работе считается, что все

химические реакции, в которых NO_x и CO не участвуют, протекают равновесно, а те в которых участвуют – неравновесно.

При моделировании процесса образования токсичных компонент поле газодинамических параметров считается известным, т.е. известны распределения компонент вектора скорости, поля плотности, температуры, коэффициента избытка окислителя и т.д. При этом скорости элементарных реакций выражаются через осредненные концентрации и температуру, т. е. влияние на них турбулентных пульсаций не учитывается. Для определения концентраций компонент, входящих в состав продуктов сгорания, автором предложено решать нелинейную систему дифференциальных и алгебраических уравнений.

$$\frac{d\delta_i \gamma_i}{dt} = \frac{1}{\rho} W_i(\rho, T, \gamma_1, \dots, \gamma_n), \quad i=1, \dots, n \quad - \text{уравнения для определения «неравновесных»}$$

концентраций, $\delta_i = 0$ - для «равновесных» компонент и 1 – для «неравновесных».

«Равновесные» концентрации в каждой рассчитываемой точке определяются из решения задачи об определении равновесного состава при заданных значениях давления (P), энтальпии (h), атомарного состава (γ_k^0) и концентраций «неравновесных» компонент, решение которой описано в главе 2. Для описания неравновесного образования NO_x и CO использовался кинетический механизм, включающий 36 обратимых стадий и 32 компоненты, при этом считалось, что “неравновесно” образуются NO , NO_2 , CO . Набор реакций с участием CO был взят из кинетического механизма, предложенного в [302], а кинетика образования окислов азота из работ [260], [297].

Как уже было сказано ранее, важнейшим критерием правильности стыковки моделей считается то, как выполняются законы сохранения. Для обеспечения их выполнения необходимы специальные вычислительные приёмы. Например, для того чтобы обеспечить правильный учет обмена импульсом, энергией и массой между газовой и капельной фазами, процедура стыковки производится следующим образом. Используя конечно-объёмный подход можно точно проинтегрировать изменение массы, импульса и энергии в каждом элементарном объёме в связи с похождением капель. Для того чтобы связать количество топлива, подаваемого в виде капель, и количество Лагранжевых частиц, учитываемых в расчете, используется понятие счетной плотности. Легко подсчитать, сколько и каких капель пролетает через каждый объём за заданный

промежуток времени. Причем в стационарной постановке можно разделить траекторию частицы на отрезки, соответствующие пересечению границ контрольных объемов, и проинтегрировать например массу утраченную каплей на таком отрезке. Суммируя массу от всех частиц, прошедших данную ячейку с учетом счетной плотности, можно точно определить, сколько массы перешло в газ. В нестационарном случае необходимо периодически испускать ансамбль капель из стартовых точек и отслеживать, сколько ячеек пройдено за шаг по времени. Такая процедура обеспечивает строгое выполнение законов сохранения при взаимодействии фаз при условии, конечно, правильного вычисления источниковых членов в уравнениях сохранения (6.13)-(6.18).

$$S_{m,m} = -\sum_l n_l \dot{m}_l y_{ml}, \quad S_{di} = -\sum_l (n_l \dot{m}_l u_{l,i} + n_l m_l \dot{u}_{li}), \quad S_{dh} = -\sum_l n_l [\dot{m}_l (e_l + \frac{u_l^2}{2}) + m_l (\dot{e}_l + u_{li} \dot{u}_{li})], \quad (6.20)$$

где n_l - счетная плотность l -го класса капель, y_{ml} - массовая доля m -й компоненты в продуктах испарения капель. Равновесная модель не требует дополнительных усилий по обеспечению консервативности, поскольку все продукты могут быть вычислены локально из соотношения компонент. В случае же кинетически реагирующей системы возможны два подхода. Первый связан с непосредственным совместным решением уравнений переноса, имеющих в правой части члены, связанные с химическими реакциями. Такой подход приводит к ограничениям на временной шаг, поскольку нелинейность правой части может быть разрешена либо при малых шагах, либо при большом числе внутренних итераций линеаризованной системы. Этот способ связан со значительными затратами вычислительных ресурсов, и решение трехмерной задачи может быть проблематично. Приемлемой альтернативой упомянутому подходу является применение расщепления по физическим процессам, например [52, 295].

$$\frac{\partial \rho y_m}{\partial t} + \frac{\partial \rho y_m u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial y_m}{\partial x_i} + S_{y,m} + \rho \frac{\hat{y}_m - y_m}{\Delta t}, \quad (6.21)$$

$$\frac{\partial \rho \hat{y}_m}{\partial t} = W_m, \quad m = 1, 2, \dots, N_c. \quad (6.22)$$

При этом на одном шаге интегрирования уравнений переноса (6.21) может быть выполнено несколько шагов интегрирования уравнений химической кинетики (6.22), таким образом, ограничение на шаг ослабляется. Источниковый член в правой части уравнений переноса компонент (6.21) обеспечивает требуемое изменение концентрации. Необходимо отметить, что такой подход может приводить к чрезмерному размазыванию фронта пламени при больших временных шагах, поэтому требуемый шаг

интегрирования можно оценить, сопоставляя характерное время реакции и время уноса массы через границы контрольного объема.

Стабилизация пламени в предварительно перемешанной смеси

Для проверки модели проведем расчет стабилизации пламени за уголковым стабилизатором в предварительно перемешанной смеси бензина с воздухом, которая исследовалась экспериментально [230]. В эксперименте измерялись параметры турбулентности и профиля температуры, которые были использованы для проверки работоспособности модели в приложении к случаю предварительно перемешанной смеси. Экспериментальная установка представляет собой канал прямоугольной формы с размещенным внутри уголковым стабилизатором пламени. Расчет производился в трехмерной постановке, так как канал был достаточно узок, и нельзя было пренебречь влиянием боковых стенок. В расчете использовался упрощенный кинетический механизм, состоящий из одной брутто-реакции. При задании начальных и граничных условий использовались данные измерений турбулентности. Входной поток бензино-воздушной смеси имел температуру 412 К, скорость 150 м/с при атмосферном давлении и коэффициенте избытка окислителя $a=1.5$.

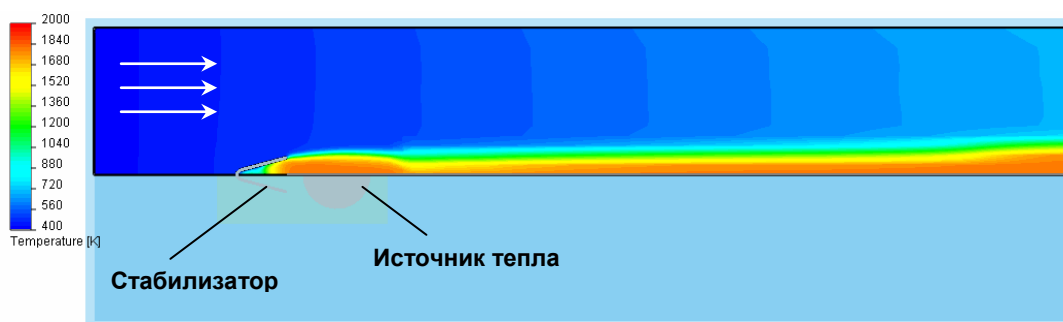


Рис 6.56 Схема расчета, совмещенная с распределением температуры в центральном сечении прямоугольного канала.

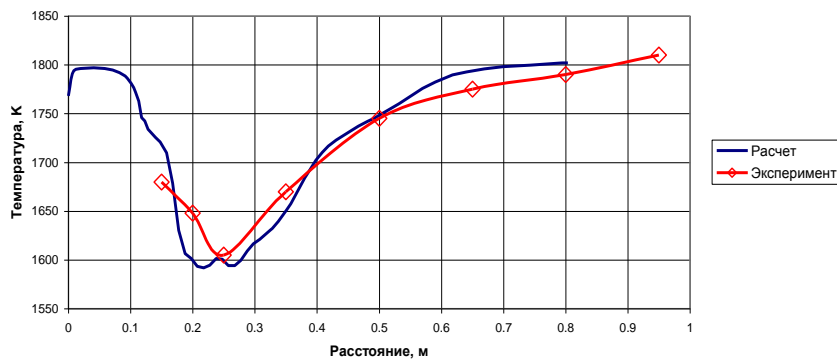


Рис. 6.57 Профиль температуры, построенный вдоль линии пересечения плоскостей симметрии прямоугольного канала.

Схема расчета показана на рис. 6.56. Моделирование производилось по нестационарной методике с осреднением поля температуры по времени. Сначала было получено стационарное решение для холодной смеси, а потом, используя его как начальное приближение, расчет продолжался до установления. Поджиг смеси производился временным включением источника тепла, расположенного в зоне обратных токов. Сравнение рассчитанного и измеренного профилей температуры (Рис. 6.57) показывает совпадение размера зоны обратных токов, положения и величины минимума и максимума температуры и даёт основание утверждать, что явление в целом моделируется верно.

Расчет камеры сгорания воздушно-реактивного двигателя

Расчет камеры сгорания ВРД проводился с целью определения тепловой нагрузки на стенки камеры и оценки величины вредных выбросов при работе [52]. По результатам расчетов были выработаны рекомендации по оптимизации рабочего процесса и архитектуры камеры сгорания для снижения вредных выбросов. Геометрия расчетной области соответствовала геометрии реальной камеры сгорания (Рис. 6.58). При постановке граничных условий для газовой и капельной фаз учитывали особенности ввода воздуха и жидкого горючего в конкретную камеру сгорания. В частности, учитывали все щели и отверстия в днище и в боковых стенках камеры, через которые в нее подавался воздух для завес охлаждения и для обеспечения полноты сгорания. Параметры течения в завихрителе фронтального устройства определялись в том же расчете. Для камеры в целом задавался расход воздуха и расход топлива. Спектр размеров капель, образующихся при распаде жидкой пелены, как и все остальные характеристики начального участка поля течения полидисперсной капельной фазы задавали с использованием экспериментальных данных. Поле течения каждой фракции рассчитывали на своей собственной Лагранжевой сетке, состоящей из траекторий капель, относящихся к данной фракции. Рассчитываемые траектории выбирали так, чтобы они равномерно и с требуемой густотой покрывали всю область распространения капель. В частности, в приведенном ниже примере параметры камеры на входе были следующие: температура воздуха $T_3=744\text{ K}$, давление $P_3=21.4 \times 10^5\text{ Па}$, расход воздуха 1.229 кг/с, расход керосина 0.0248 кг/с. Размер капель задавался в диапазоне от 1.2 до 68 мкм для набора из 20 фракций. При расчете траекторий капель использовалось 30 стартовых точек, расположенных в месте распада жидкой пелены, образуемой

инжектором центробежного типа с закрученным центральным потоком. Начальная скорость капель в опорных траекториях варьировалась по величине и направлению относительно оси форсунки. Взаимодействием между фракциями пренебрегали. Также не учитывалось влияние радиационного теплопереноса на нагрев капель. Расчетная сетка (Рис. 6.59) имела размерность 209542 ячеек.

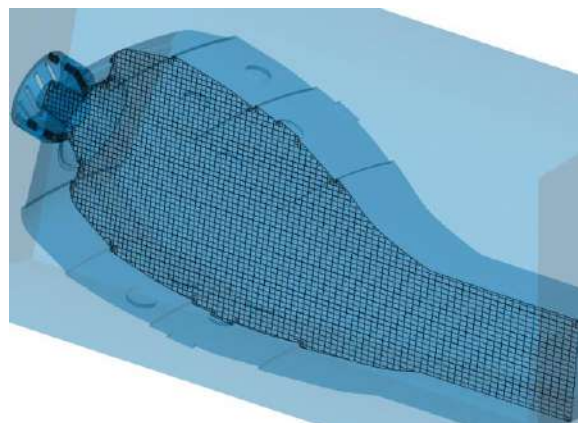
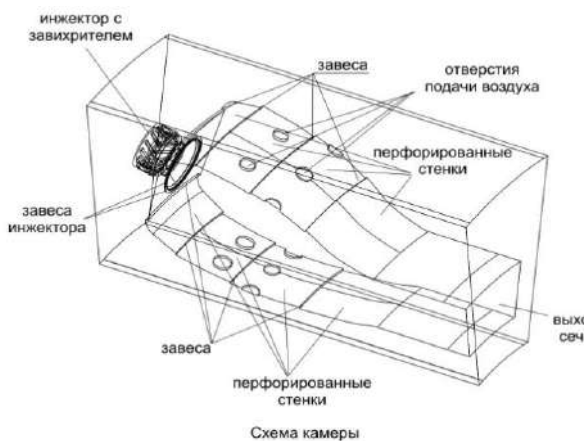


Рис. 6.58 Схема сектора камеры сгорания ВРД. Рис. 6.59 След сетки в осевом сечении.

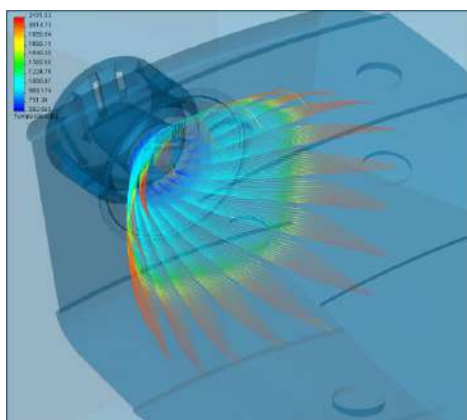


Рис. 6.60. След одного из наборов опорных траекторий.

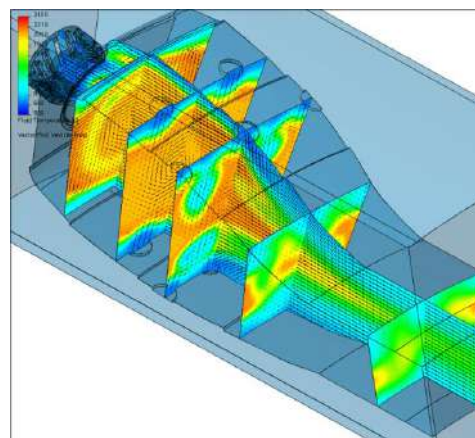


Рис. 6.61 Распределение температуры потока в некоторых сечениях.

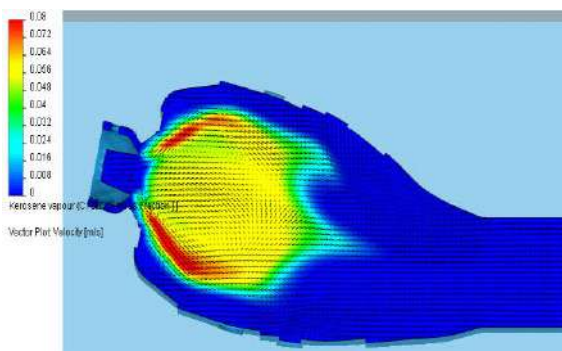


Рис. 6.62. Распределение газообразного керосина в центральном сечении.

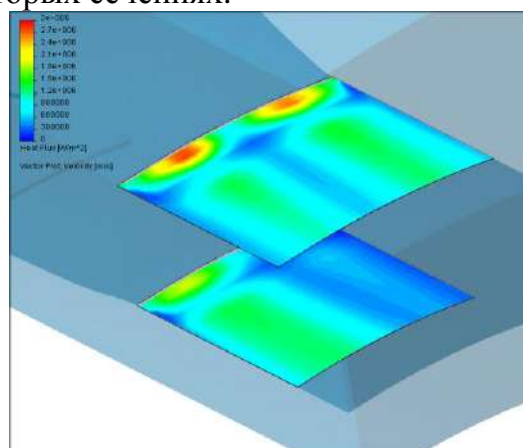
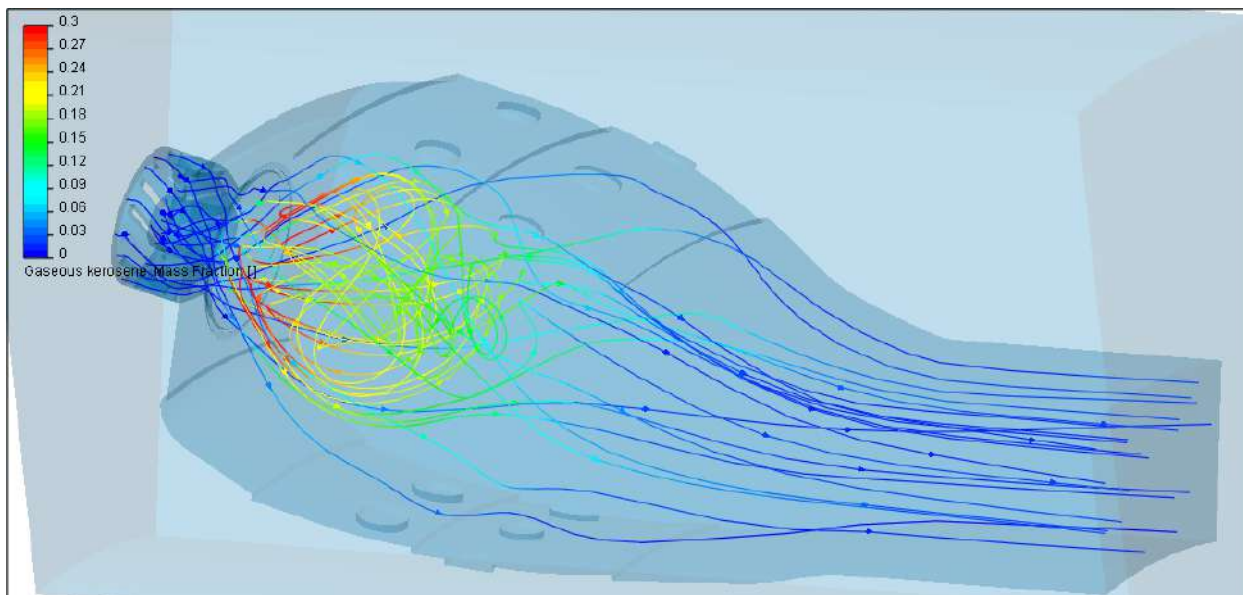


Рис. 6.63 Распределение тепловых потоков на стенках выходного канала.

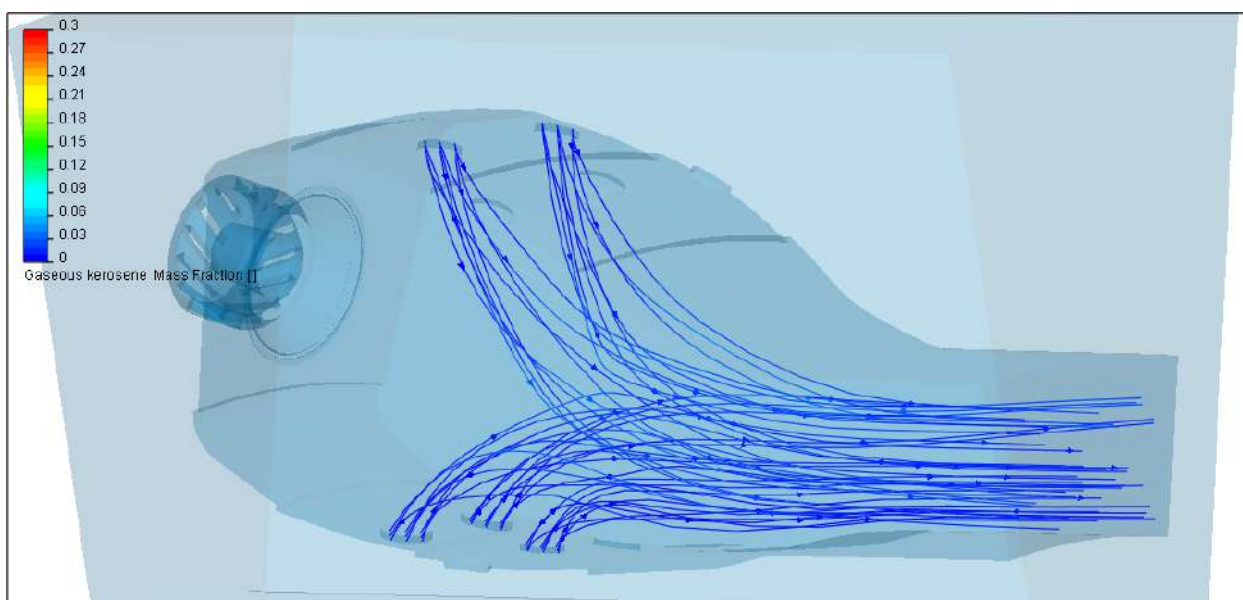
Серия рисунков 6.60÷6.63 иллюстрирует полученные результаты. На рис. 6.60 показан набор опорных траекторий испаряющихся капель керосина для 20 фракций, выпущенных с одной из скоростей. Конец траектории показывает место, где капля полностью испарилась. Соответствующее распределение концентрации газообразного керосина показано на рис. 6.62. Рассчитанное в кольцевой камере поле температуры показано на рис. 6.61, где, в частности, можно наблюдать проникновение струй чистого воздуха на стадии разбавления. На рис. 6.63 приведено рассчитанное тепловое воздействие на стенку камеры. В тех местах, где температура потока высока, видны пики, образующиеся за счет локального торможения в месте излома поверхности [52].

На рис. 6.64 представлены следы траекторий газа и концентрации паров керосина, исходящих из центробежной форсунки и дополнительных отверстий подачи воздуха в камеру сгорания. На рис. 6.65-6.68 на фоне векторного поля скорости приведены распределения концентраций паров керосина, температуры, концентраций NO и CO в различных продольных сечениях камеры. Из рисунков в частности видна существенная для целей исследования неравномерность распространения зон повышенной концентрации NO в камере.

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 данном расчете, хорошо согласуются с эмиссионными характеристиками аналогичных устройств [284]. В частности, рассчитанный индекс эмиссии окислов азота I_{NOx} для разных режимов работы находится в диапазоне от 14 до 30 г/кг_{топл.}.



a)



б)

Рис. 6.64. Следы траекторий газа и концентраций паров керосина, исходящих из центробежной форсунки (а) и дополнительных отверстий подачи воздуха (б) в камеру сгорания.

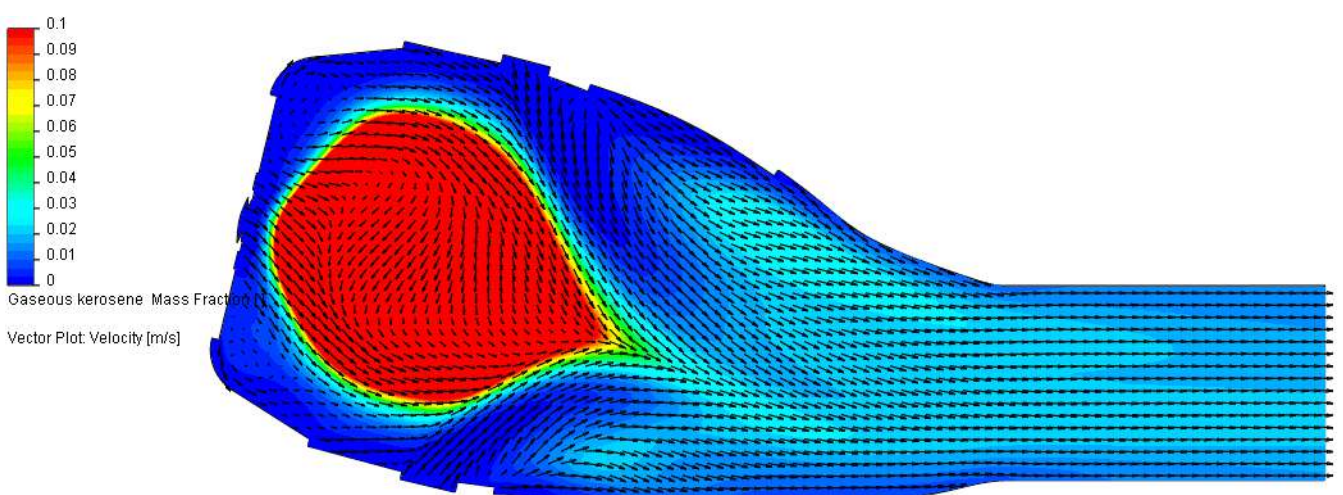
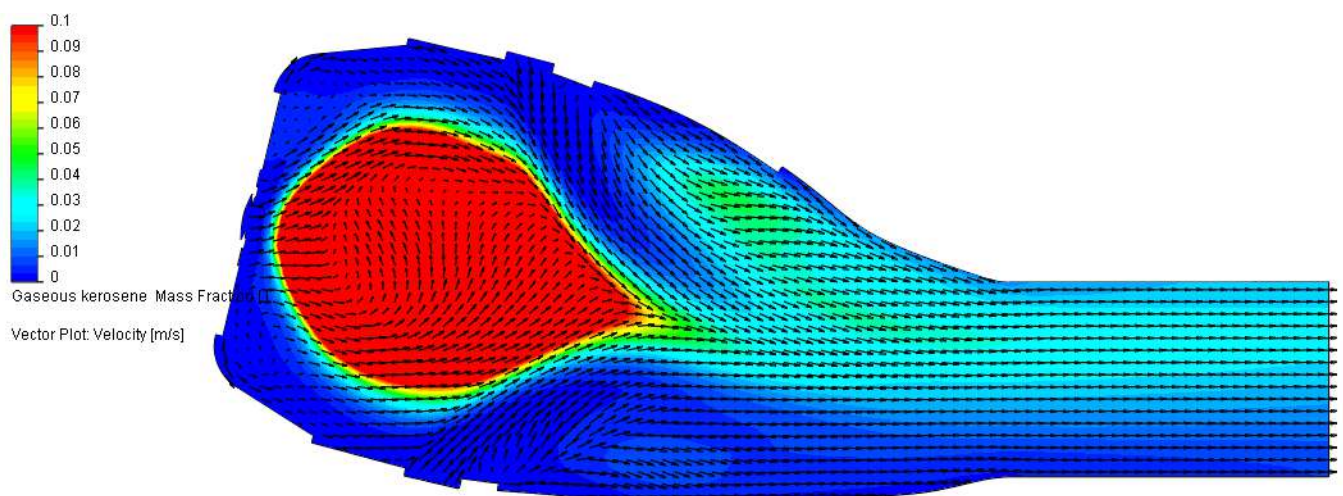
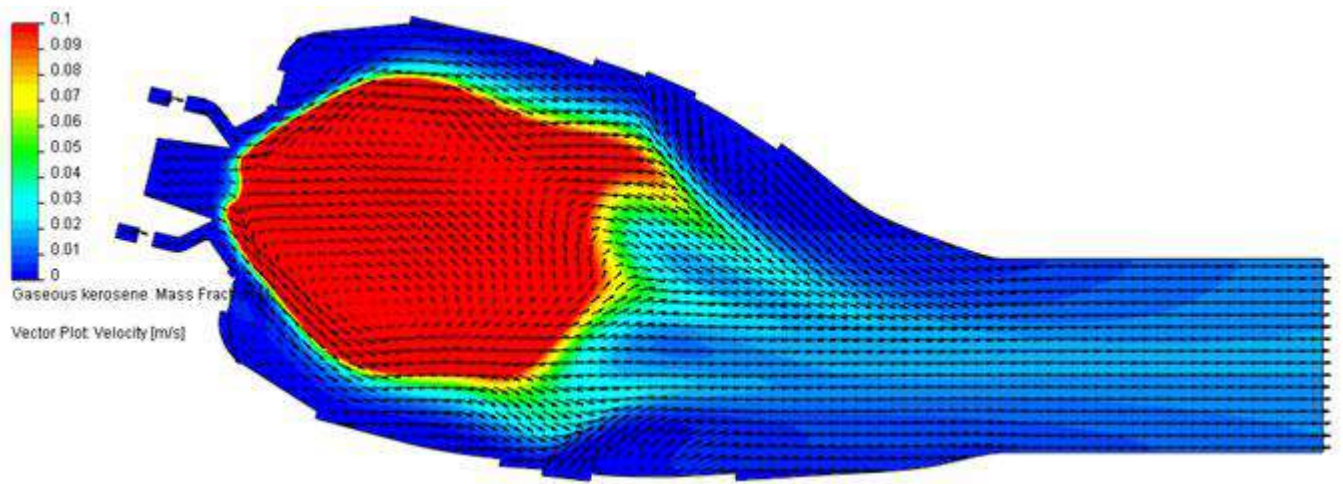


Рис. 6.65. Поле концентраций паров керосина в камере сгорания в различных сечениях (а) - центральное, (б, в), проходящие через центры сечений подачи воздуха.

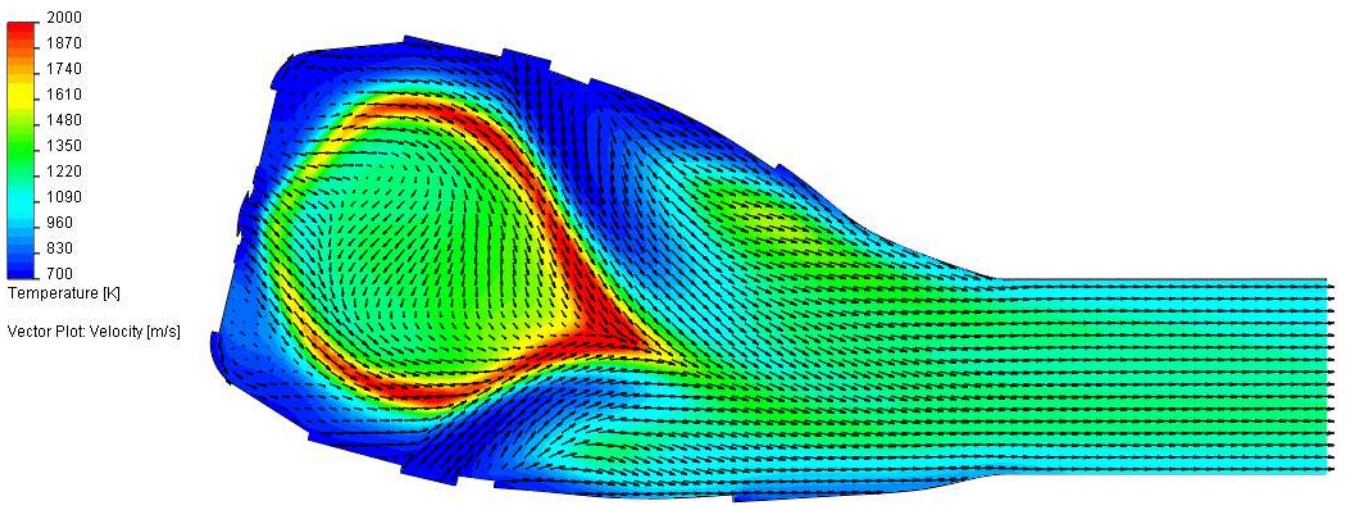
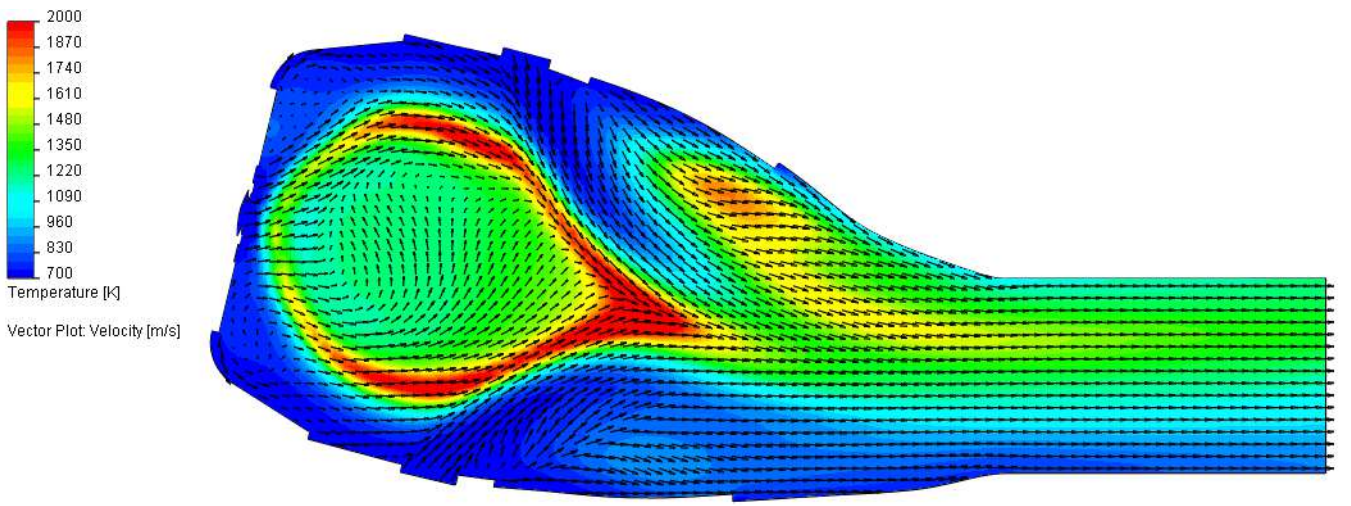
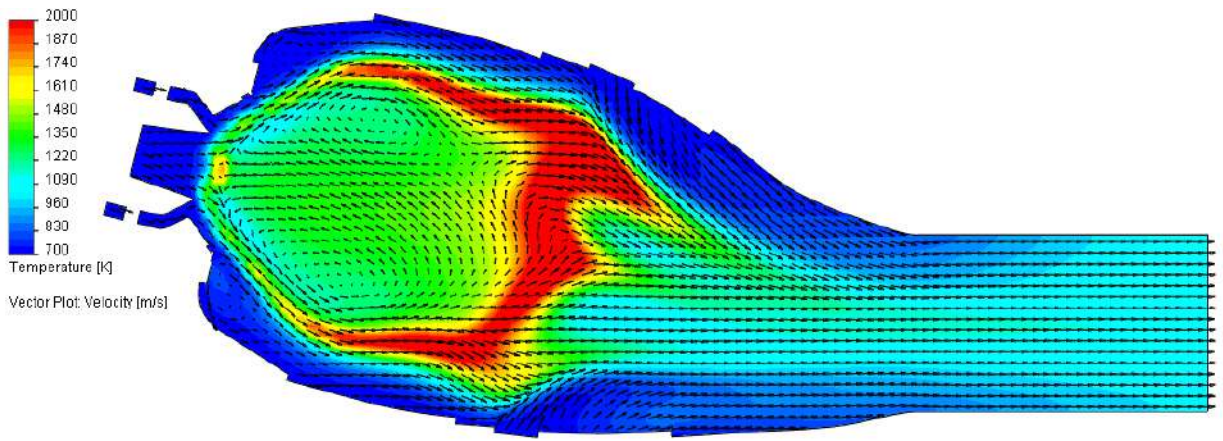


Рис. 6.66. Поле температуры продуктов сгорания в камере сгорания в сечениях (а) - центральное, (б, в), проходящие через центры сечений подачи воздуха.

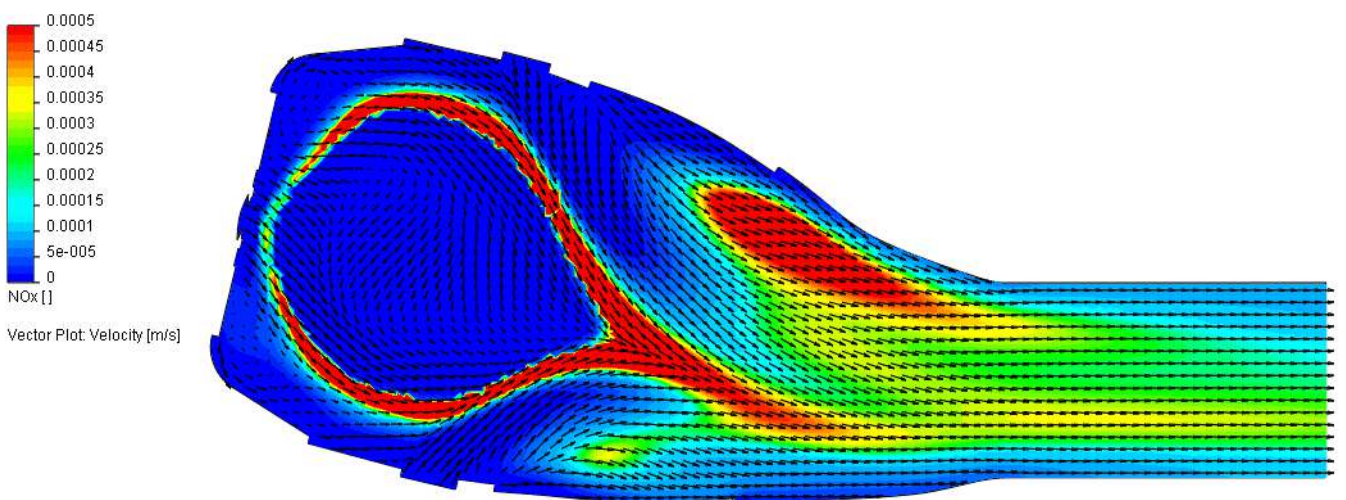
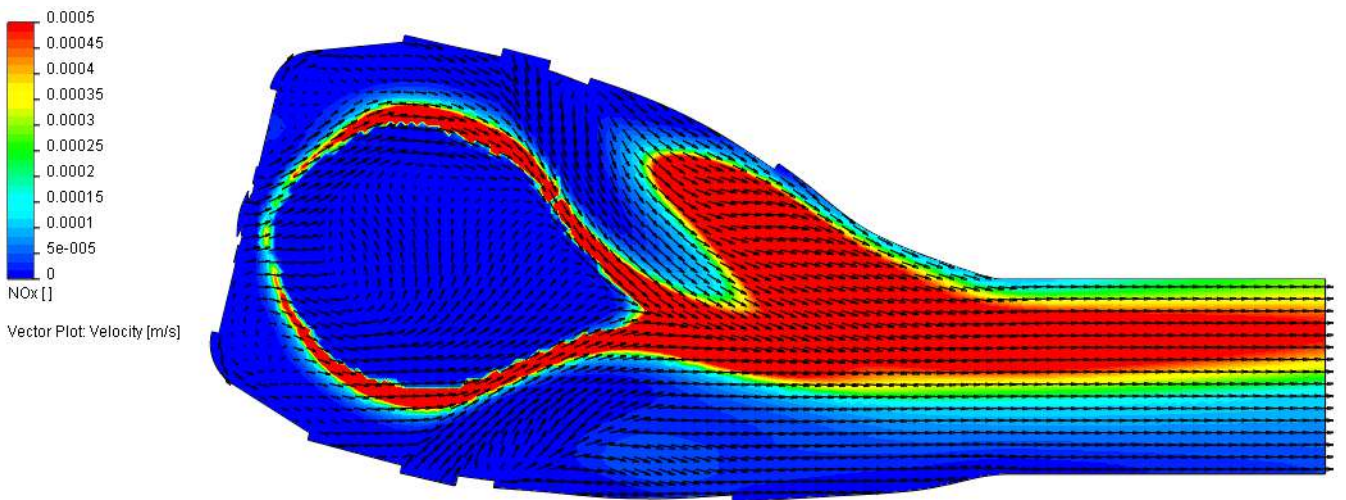
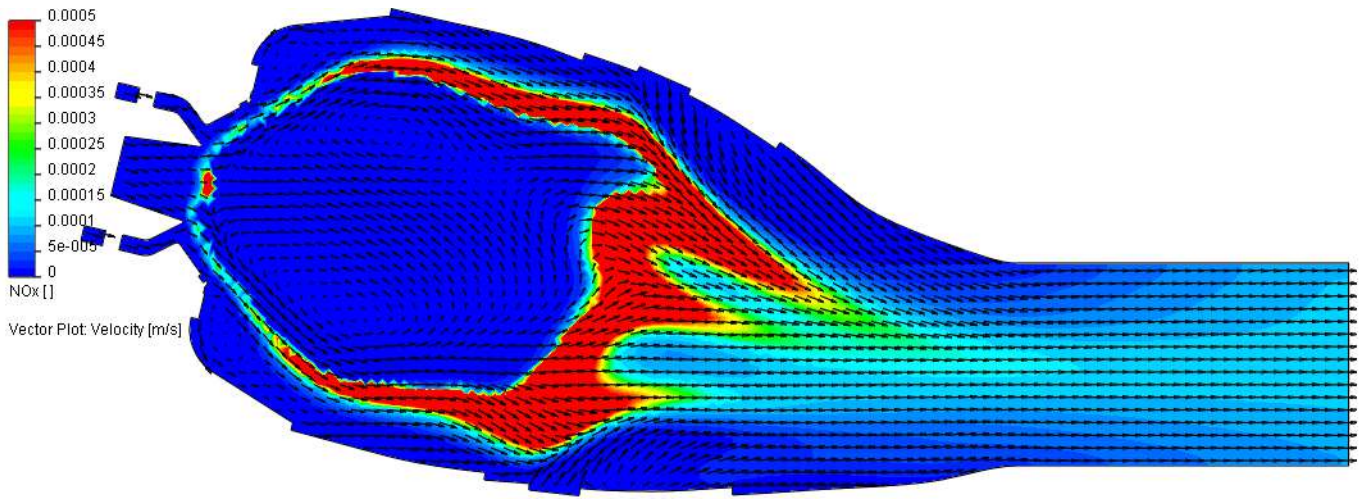


Рис. 6.67. Поле массовых долей NO_x в камере сгорания сечениях (а) - центральное, (б, в), проходящие через центры сечений подачи воздуха.

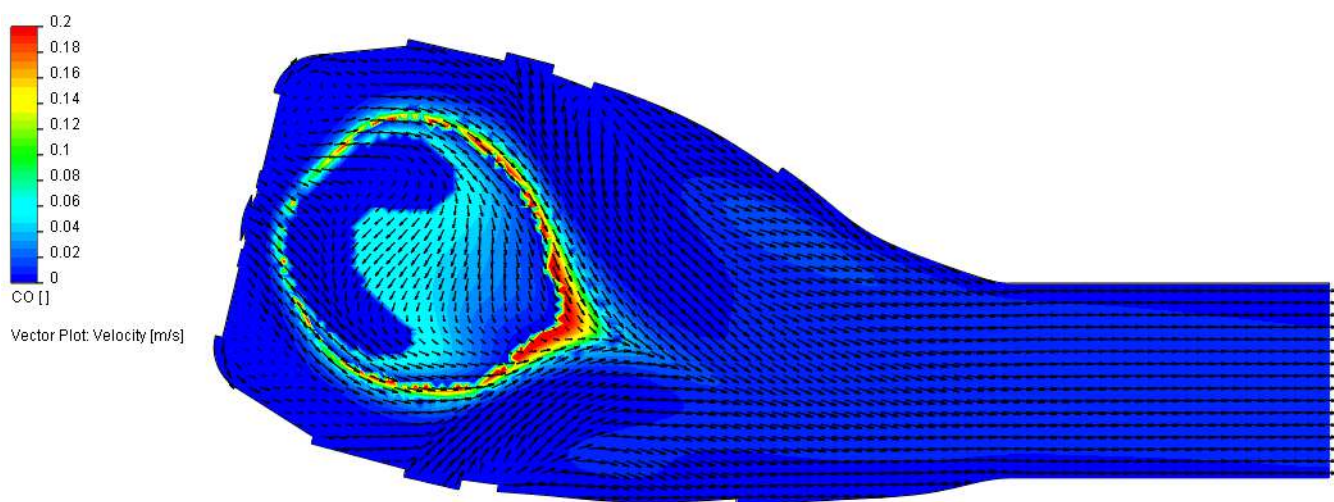
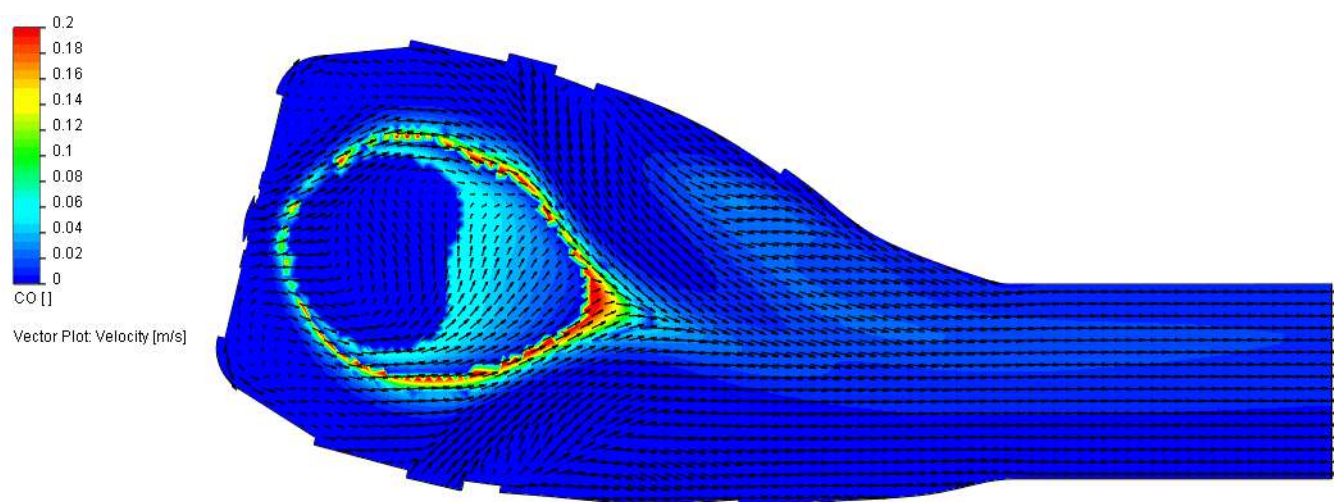
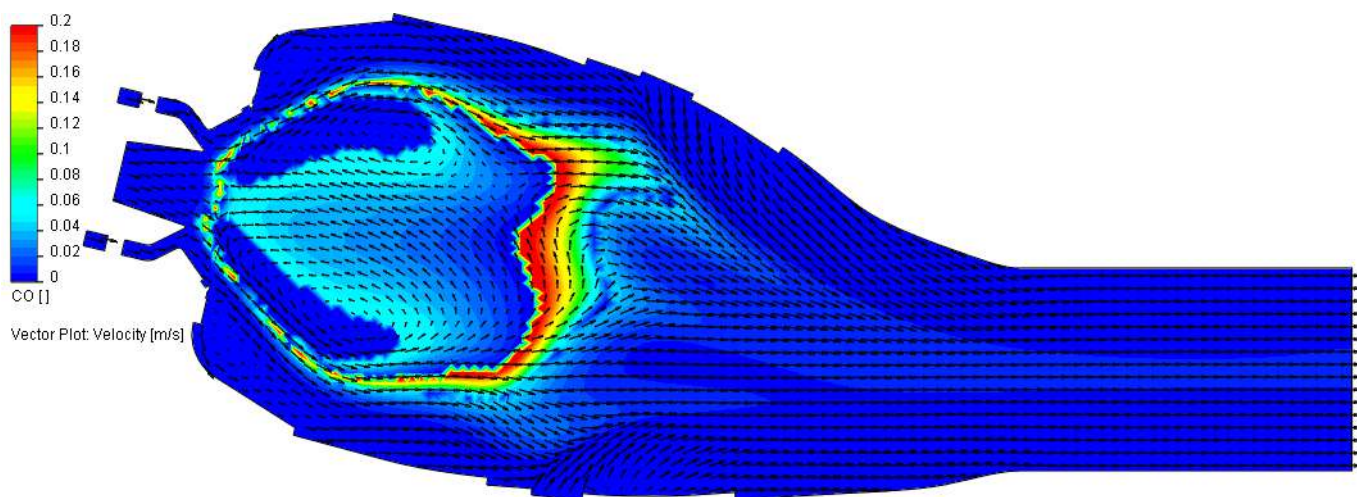


Рис. 6.68. Поле массовых долей CO в камере сгорания в сечениях (а) - центральное, (б, в), проходящие через центры сечений подачи воздуха.

6.3.2. Оценка теплового воздействия на стенки камеры кислородно-водородного ЖРД

Оптимизация рабочих процессов в камере сгорания ЖРД связана с анализом такой информации как температурное воздействие на стенки камеры, полнота сгорания, потери на трение и неравновесность, потери, связанные с несовершенством геометрии. Для демонстрации возможностей предложенного метода проведен расчет теплового воздействия на стенки камеры сгорания [52]. Специфика задачи заключается в том, что в камеру подаются криогенные компоненты топлива, причем один из компонентов (кислород) подается в виде жидкости при сверхкритических условиях. Компоненты реагируют неравновесно, а процесс смешения и сгорания имеет нестационарный характер. Необходимо учесть течение в пограничном слое и рассчитать коэффициент теплоотдачи.

В соответствии с указанными особенностями, использовалось специальное уравнение состояния, которое правильно аппроксимирует свойства сверхкритического кислорода. Для расчета химических реакций применяется механизм, хорошо апробированный на разных задачах, включая задачи детонации и самовоспламенения. Механизм учитывает восемь компонент (O_2 , H_2 , H_2O , OH , OH_2 , H_2O_2 , H , O) и состоит из 19 обратимых реакций [265].

В качестве объекта моделирования была выбрана калориметрическая экспериментальная кислород - водородная камера [291]. Камера была условно разделена на сегменты в поперечном направлении, и количество теплоты, поступающее в каждый из сегментов, было измерено. В качестве входных параметров были приняты следующие: давление в камере $P_k=10$ МПа, соотношение компонент $K_m=5.9$, температуры компонент $T_{O_2}=101.3$ К и $T_{H_2}=106.4$ К, расход топлива 8 кг/с. Расчетная сетка (рис. 6.69) имела 161886 ячеек.

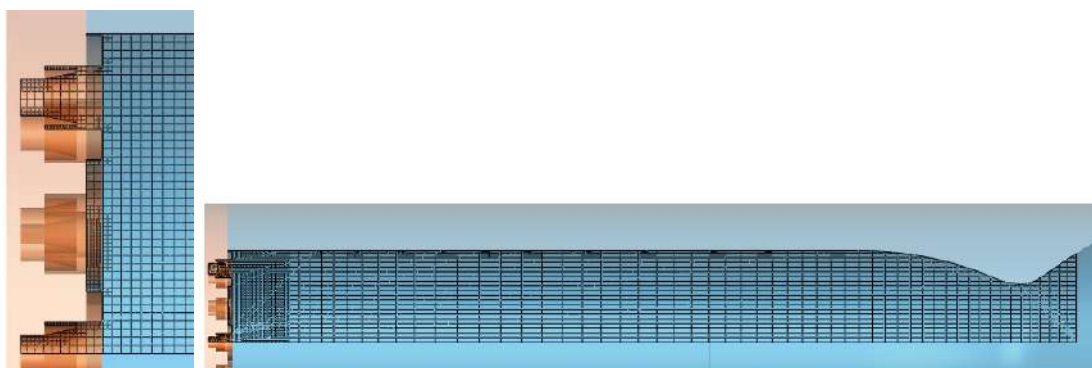


Рис. 6.69. След расчетной сетки в осевом сечении.

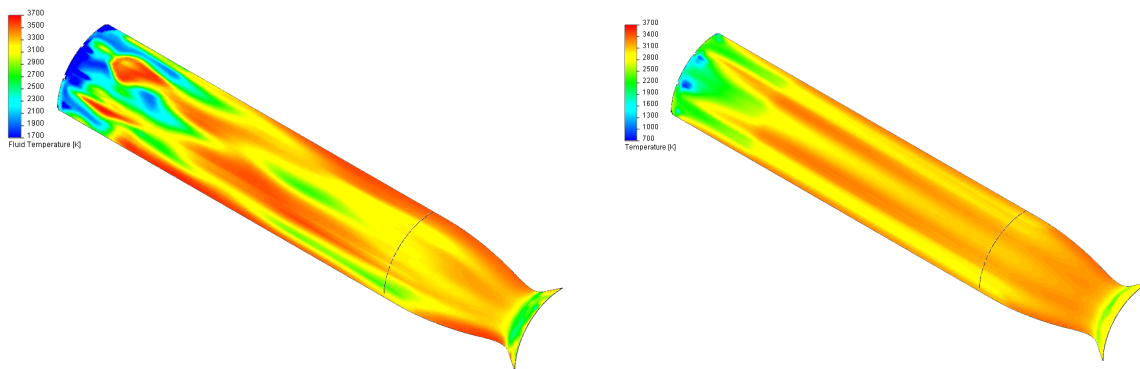


Рис. 6.70 Мгновенная (слева) и осредненная (справа) температура стенки камеры.

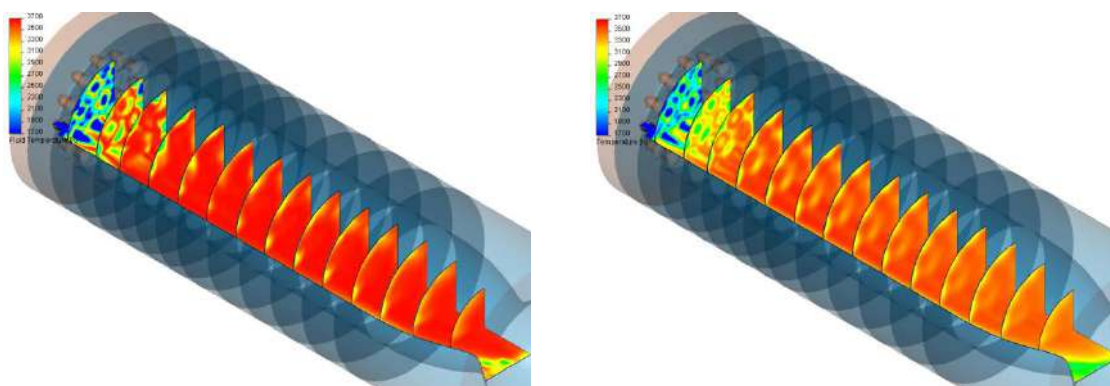


Рис. 6.71. Мгновенная (слева) и осредненная (справа) температура в некоторых сечениях.

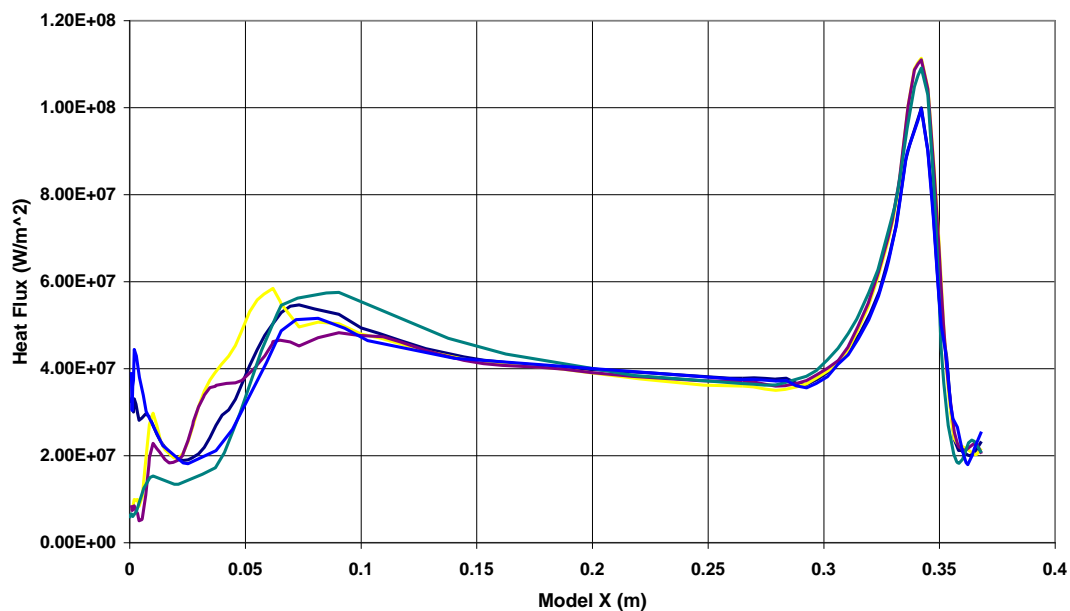


Рис. 6.72 Осредненный тепловой поток вдоль ряда образующих.

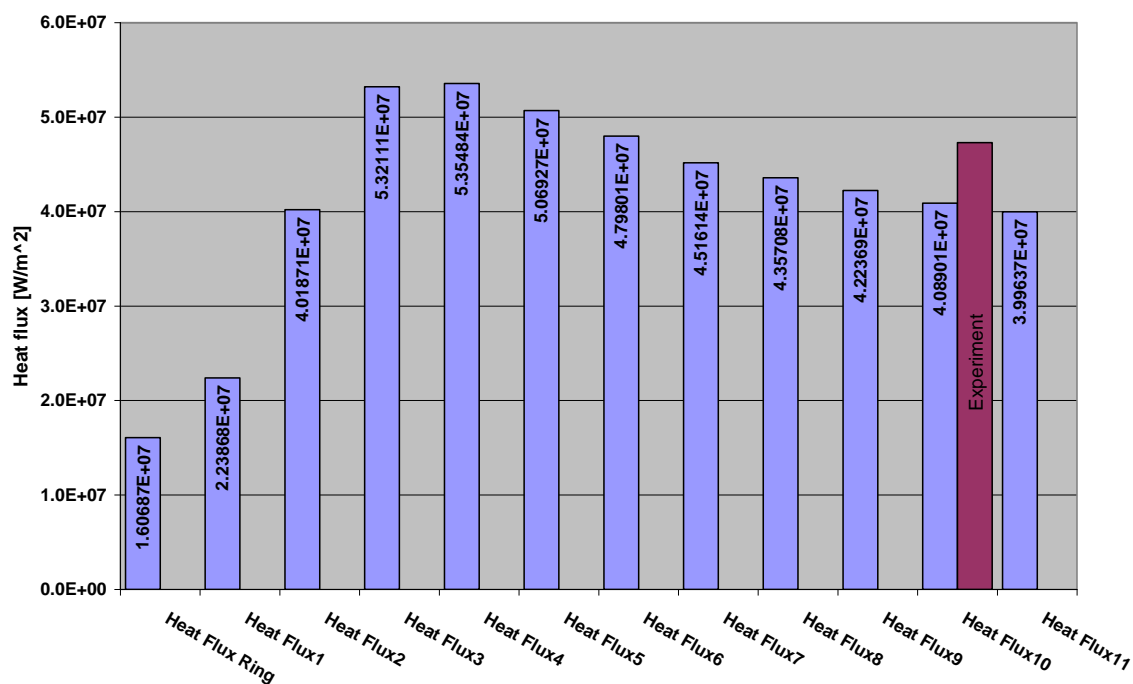


Рис. 6.73 Сравнение тепловой нагрузки на сегменты камеры с экспериментальными данными.

Использовалась методика расчета [52], которая позволяет учитывать нестационарный характер течения и обеспечивает простое и правильное согласование газодинамического и химического масштабов времени, а также возможность моделировать процесс запуска. Для получения осредненных величин по времени накапливается средняя величина температуры газа и теплового потока. Расчет продолжается до стабилизации осредненных величин. Для ускорения расчета применялись расщепление по физическим процессам и SMP модель для параллельного расчета уравнений химической кинетики.

Рисунки 6.69 и 6.70 показывают мгновенное и осредненное по времени распределение температуры внутри и на стенках камеры. Использование осредненных величин позволяет определить локальные тепловые потоки, которые в случае их вычисления по мгновенным величинам, могут существенно отличаться от реальных. Распределение тепловых потоков вдоль ряда образующих стенки камеры показано на рисунке 6.71. Можно отметить повышение тепловых потоков в сечении, соответствующем началу активного горения, и пик в критическом сечении сопла. Такое повышение в начальной части камеры не всегда регистрируется в экспериментах. Сравнение тепловой нагрузки, измеренной экспериментально и полученной в расчете для одного из сечений, показано на рис. 6.72.

6.3.3. Численное моделирование гиперзвукового обтекания тел воздухом с учетом равновесной диссоциации

Приводятся результаты численного моделирования трехмерного турбулентного обтекания тел гиперзвуковым потоком воздуха с учетом равновесной диссоциации [51, 57, 77, 159, 163]. Современное состояние исследований, связанных с высокоскоростным движением тел в атмосфере представлено в [236]. Описывается метод решения таких задач, и приводятся результаты расчета силового и теплового воздействия на обтекаемый объект [51]. Модель основана на решении системы осредненных по Фавру трехмерных нестационарных уравнений Навье-Стокса и уравнения переноса энергии (6.13)-(6.18), дополненных моделями термодинамических и теплофизических свойств равновесно диссоциированного воздуха [51]. При умеренных температурах ($T < 15000$ К) воздух можно рассматривать как электронейтральную однократно ионизированную плазму, в состав которой входят: $O_2, N_2, NO, N_2^+, NO^+, O^+, N^+, O, N, Ar, e$. Термодинамические свойства высокотемпературного воздуха описываются с помощью модели многокомпонентного совершенного газа в рамках допущения о равновесной заселенности энергетических уровней, отвечающих всем внутренним степеням свободы молекул и атомов [121]. Для замыкания системы (6.13)-(6.18) используется модель термодинамики и модель равновесно-реагирующей смеси совершенных газов, дополненная условием электронейтральности, подробно описанные в Главах 1 и 2.

Для решения системы (6.13)-(6.18) использовался вариант метода Годунова. Для определения потоков переносимых величин на каждой грани контрольного объема решается задача о распаде газодинамического разрыва. В случае переменного отношения теплоемкостей и таких свойств, как скорость звука, которые являются определяющими для этой задачи, решение усложняется, если уравнение состояния становится нелинейным. В этом случае необходимо учитывать нелинейность уравнения состояния в веерах волн разрежения. Приемлемым в ряде случаев подходом является аппроксимация уравнения состояния справа и слева от рассматриваемой грани с помощью линейной или иной функции. Использование строгой задачи [72] с полным учетом переменности всех свойств невозможно для практически значимых задач в силу больших вычислительных затрат. Её решение используется при построении приближенных решателей и в качестве теста. Принимая во внимание грубость сетки в

случае трехмерных задач, необходимо построить решатель задачи о распаде разрыва таким образом, чтобы он сочетал необходимое быстродействие с достаточной точностью. Одним из способов ускоренного решения задачи является использование только «слабых» конфигураций с замороженным показателем адиабаты и получение на их основе чисто алгебраических соотношений для определения давления и скорости контактного разрыва [107]. Такие соотношения выведены для уравнения состояния совершенного газа. Практический опыт расчетов с использованием этого способа дает хорошие результаты в случае совершенного газа [266, 282]. С ростом числа Маха набегающего потока, начиная с $M=6$, реальные свойства воздуха оказывают все большее влияние. Точность вычисления параметров при сквозном счете с использованием линейной задачи падает, особенно при расчете вееров разрежения. Поэтому для гиперзвуковых течений был применен подход с использованием табличного уравнения состояния, основанного на расчете термодинамически равновесного состава в опорных точках. При интегрировании уравнений физической газовой динамики методами типа Годунова как уже отмечалось выше, являются плотность, компоненты импульса, полная внутренняя энергия, энергия турбулентности и степень её диссипации, а также массовые доли компонент. Соответственно термодинамическими переменными являются плотность и внутренняя энергия смеси. Характеристической функцией в этих переменных является энтропия $ds = \frac{1}{T} de + \frac{p}{T} d\frac{1}{\rho}$, поэтому наиболее естественным является табулирование энтропии как функции внутренней энергии и удельного объема смеси в состоянии термодинамического равновесия [215] - $s = s(e, V)$, $V = \frac{1}{\rho}$. В этом

случае: $\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial s}{\partial e} \right)_V = S_e$, $\frac{p}{T} = \left(\frac{\partial s}{\partial V} \right)_e = S_V$.

Для создания соответствующих таблиц могут быть использованы справочные данные, например [214], явные аналитические формулы, предложенные в [168], или разработанные автором вычислительные алгоритмы и программа расчета равновесного состава однократно ионизированной плазмы при заданных внутренней энергии и удельном объеме. Вычислительный алгоритм решения данной задачи приводится в главе 2. Необходимо отметить, что таблица необходима достаточно подробная, позволяющая с высокой точностью находить, по крайней мере, первую и вторую

производные от энтропии по внутренней энергии и удельному объему. В частности, выражение для скорости звука через энтропию и ее частные производные имеет вид

$$a^2 = \frac{V^2}{S_e^3} (2S_V S_{eV} S_e - S_V^2 S_{ee} - S_e^2 S_{VV}), \quad S_{eV} = \left(\frac{\partial^2 s}{\partial e \partial V} \right) = \left(\frac{\partial^2 s}{\partial V \partial e} \right), \quad S_{ee} = \left(\frac{\partial^2 s}{\partial e^2} \right), \quad S_{VV} = \left(\frac{\partial^2 s}{\partial V^2} \right).$$

Авторское алгоритмическое и программное обеспечение, позволяющее рассчитывать равновесный состав ионизированной плазмы при заданных внутренней энергии и удельном объеме, равновесную ударную адиабату атмосферного газа, является необходимым инструментом для исследователя, занимающегося численным моделированием движения и теплообмена объектов, двигающихся в атмосфере со сверхзвуковыми скоростями. Данное программное обеспечение позволяет построить с необходимым уровнем подробности соответствующие таблицы и интерполяционные функции, необходимых для многомерного расчета параметров течения, совпадающие в табличных точках с точно рассчитанными значениями. В частности, могут быть также найдены молекулярный вес смеси, локальные значения показателя адиабаты,

теплоемкостей и и др. $M = \frac{RT}{pV}, \quad \kappa = \frac{a^2}{pV}, \quad C_p = \frac{k}{k-1}, \quad C_p = \frac{1}{k-1}.$

Для оценки правильности расчета аэродинамических характеристик проведены расчеты обтекания полуконуса под разными углами атаки. Экспериментальные данные для сравнения взяты из [174]. Обтекаемый объект представляет собой половину конуса с углом полураствора 10° и сферическим скруглением. Половина отсекается плоскостью, проходящей через ось симметрии. Радиус скругления равен 0.3 радиуса основания конуса. Угол атаки определен как угол между направлением набегающего потока и продольной осью в плоскости симметрии полуконуса и считается положительным для наветренной плоскости отсечения. В расчете использовались насчитанные табличные термодинамические данные.

Сравнение с экспериментом проводилось в области данных, соответствующих сплошной среде $Re = 160000$ при $M = 6$. Расчет проводился для набора углов атаки $-20^\circ, 0^\circ, 5^\circ, 10^\circ, 20^\circ$, при которых определялись аэродинамические коэффициенты.

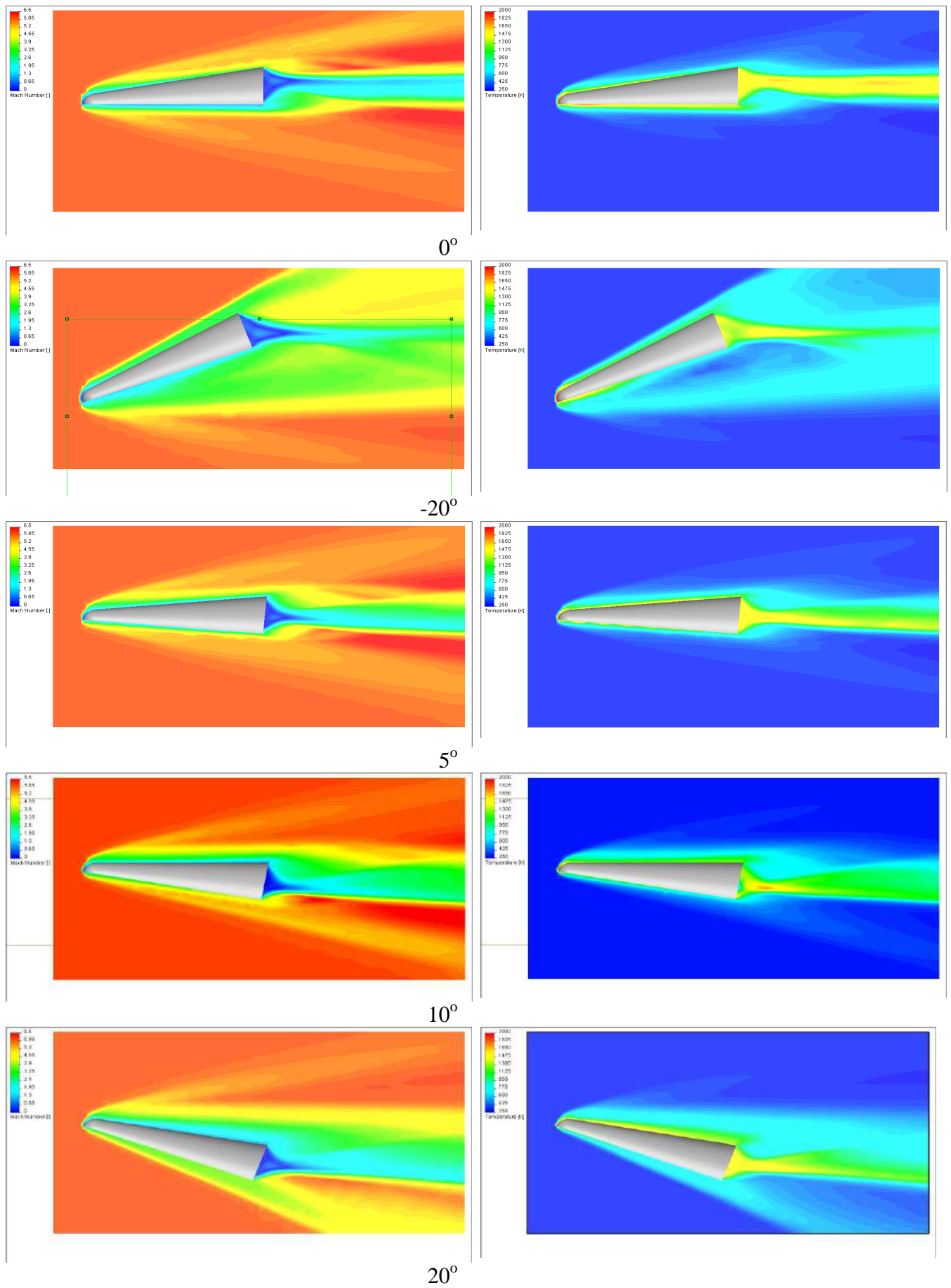


Рис. 6.74. Поля чисел Маха и давления, при различных углах атаки.

Серия рисунков ниже показывает хорошее согласование расчетов с экспериментальными данными для всех рассчитанных углов атаки α [51]. Для вычисления аэродинамических коэффициентов использовались параметры невозмущенного потока, площадь конуса в плане и длина конуса вдоль оси симметрии. Также на рисунках представлено распределение числа Маха и температуры в плоскости, проходящей через ось симметрии для рассмотренных углов атаки.

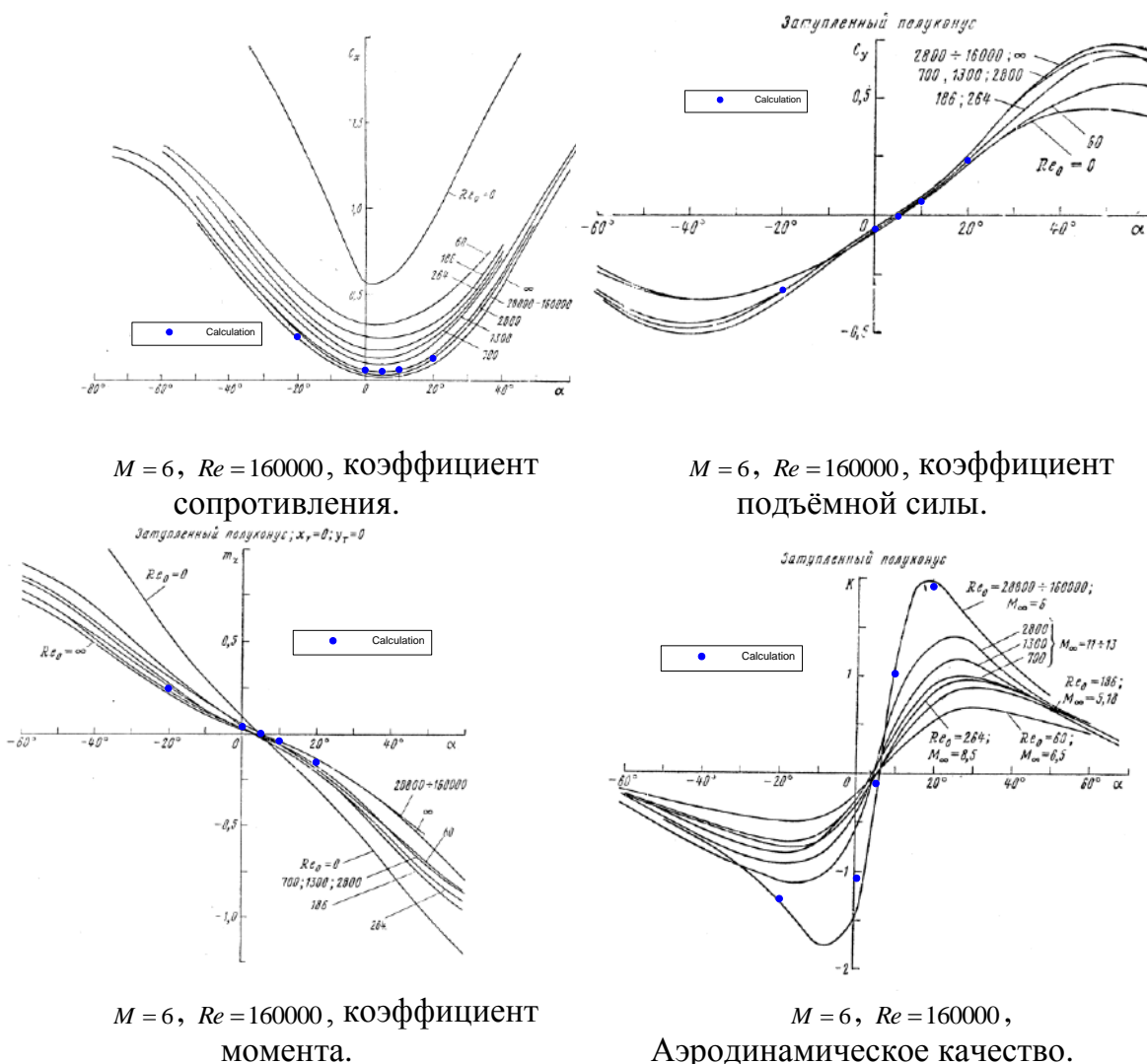


Рис. 6.75. Сравнение рассчитанных характеристик обтекания с экспериментами.

Рассматривается задача обтекания сферически скругленного цилиндра гиперзвуковым потоком газа. Радиус цилиндра $R=0.038$ м, параметры набегающего потока $M_\infty = 16, T_\infty = 52\text{K}, P_\infty = 82.95$ Па, температура стенки $T_w = 294.4\text{K}$ [279]. Рассчитывалось поле течения для 1/4 части цилиндра и определялись тепловые потоки на поверхности. При численном моделировании использовалось уравнение состояния, на основе решения задачи о равновесной диссоциации, и интегрировались два уравнения переноса компонент. При низкой начальной температуре влияние

диссоциации оказалось не очень значительным, однако, разница температуры между расчетом с учетом диссоциации и расчетом для идеального газа составила в точке торможения около 200 К. Результаты расчета неплохо согласуются с экспериментальными данными, при этом сетка является достаточно «грубой» в пристеночной области, а уравнения пограничного слоя интегрируются на подсеточном уровне.

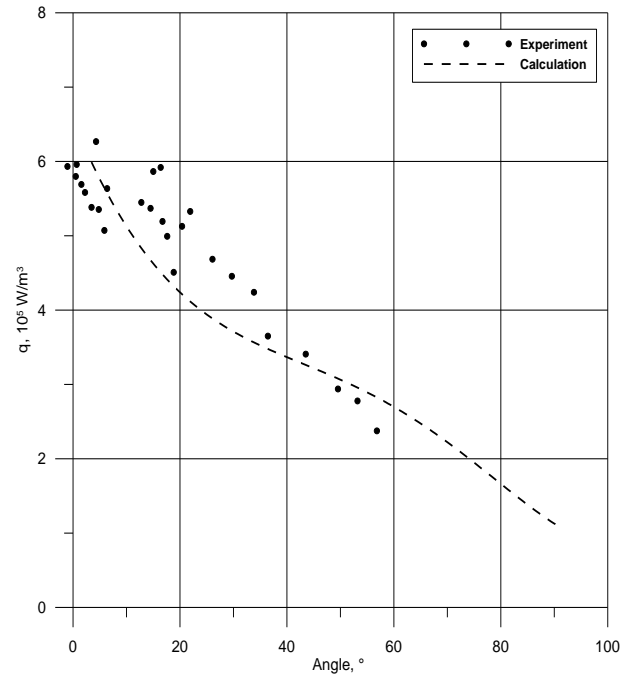
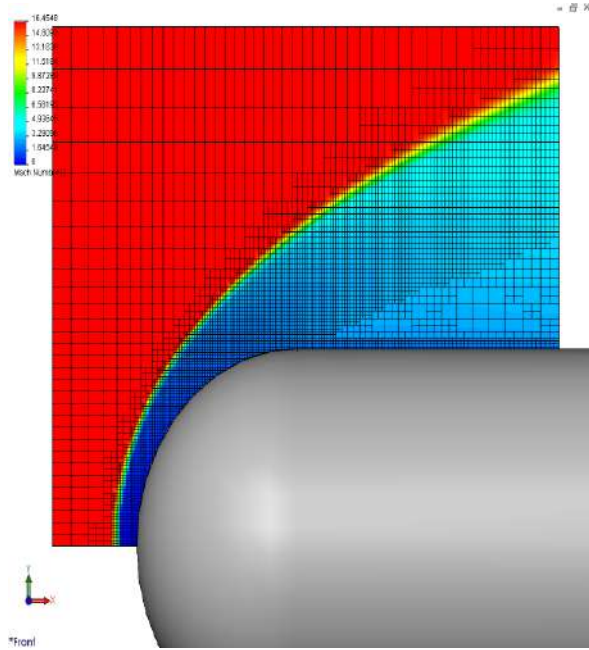


Рис. 6.76. Поле чисел Маха и след расчетной сетки. Рис. 6.77. Сравнение теплового потока с экспериментальными данными [279].

Также было проведено исследование обтекания сферы гиперзвуковым потоком воздуха $M_\infty=10$ при $P_\infty=10132.5 \text{ Па}$, $T_\infty=250 \text{ К}$ (рис.6.76). Было проведено сравнение с результатами работы [131] (рис. 6.77) по распределению давления и температуры вдоль поверхности сферы (рис. 6.78).

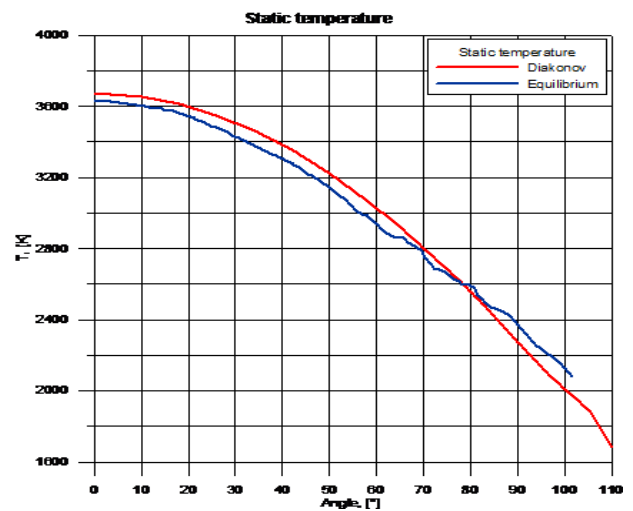
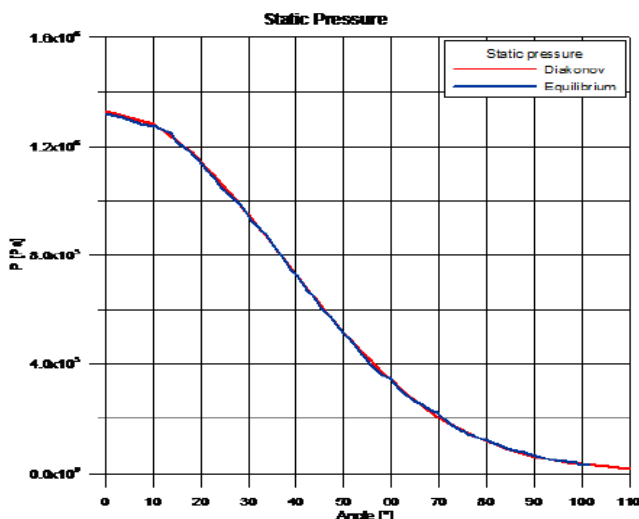


Рис. 6.78. Сравнение рассчитанных давления и температуры с данными [131].

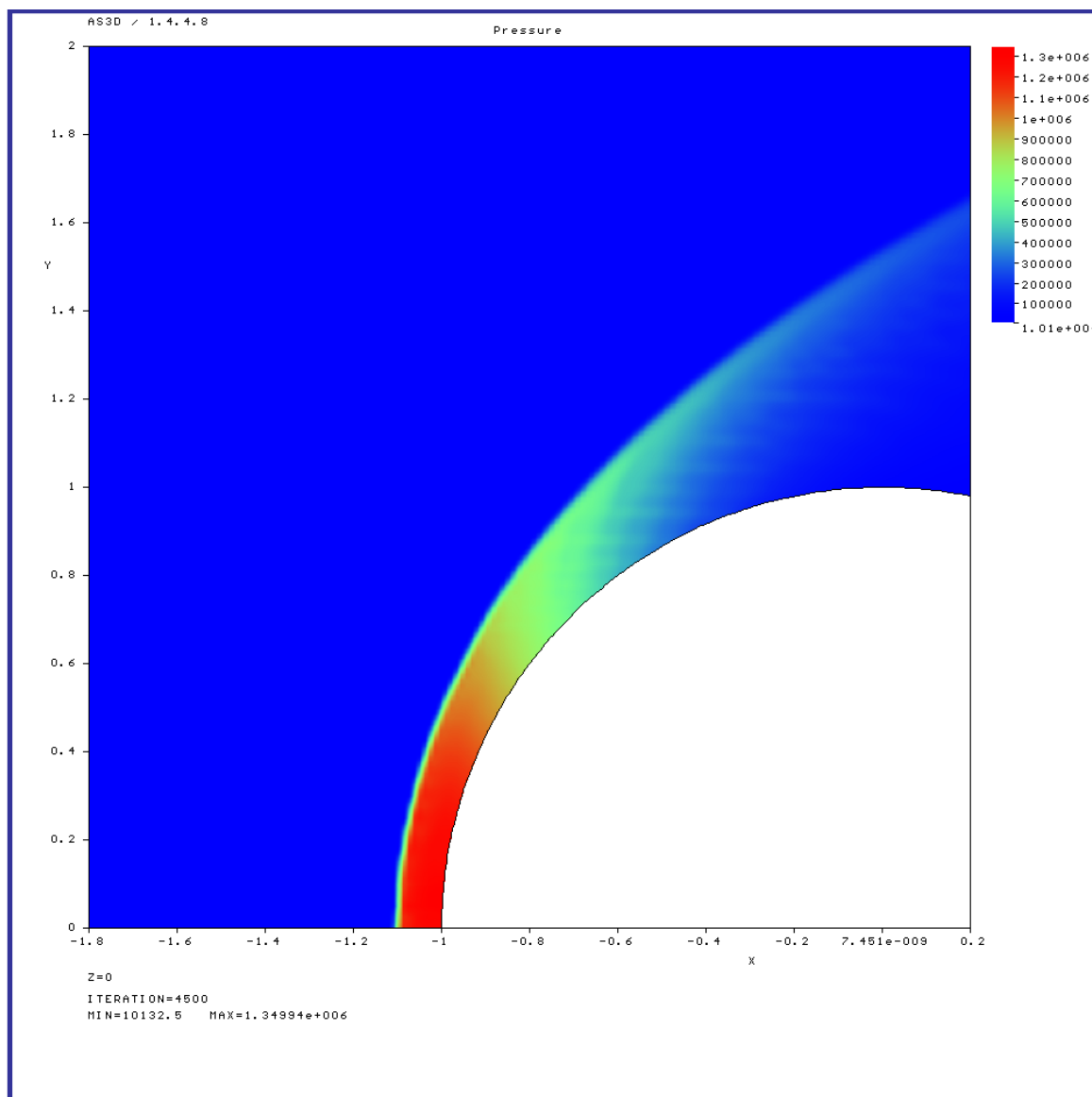


Рис. 6.79. Поле давления при обтекании сферы $M=10$.

Выводы

В шестой главе работы при непосредственном участии автора проведено численное моделирование детонации в модельных камерах сгорания и воспламенителях. Проведено численное моделирование загрязняющего воздействия на полезную нагрузку кластеров свинца, образованных в результате гомогенной конденсации паров, в струях твердотопливных ракетных двигателей. Проведено численное моделирование воспламенения, горения и эмиссионных характеристик керосино-воздушной газочапельной смеси, на основе которого уточнена конфигурация проектируемой камеры сгорания. Рассчитаны тепловые потоки на стенки камеры сгорания двигателя, работающего на смеси водорода с кислородом. Решены задачи обтекания летательного аппарата при движении с большой скоростью в атмосфере Земли.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В Заключении приведем основные положения, выносимые на защиту.

1. Комплексная физико-математическая модель высокоскоростных течений многокомпонентного газа и частиц для случая 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. Сеточно-характеристический метод с явным выделением произвольного числа взаимодействующих разрывов для моделирования многофазных течений с физико-химическими превращениями в каналах. Используются нерегулярные конечно-разностные сетки. Подвижными сеточными линиями являются фиксированные узлы, траектории газа и частиц, ударные волны, контактные разрывы, звуковые характеристики, граничные траектории зоны распространения частиц, различные неподвижные границы расчетной области. 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, характеризующиеся разными значениями массы, скорости, температуры и др. Сеточно-характеристический метод апробирован на решении классических задач газовой динамики, 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 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, 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 сопротивления 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 дефлаграции в горючих газовых, газокапельных и металлогазовых смесях, а также качестве элемента программных комплексов моделирования многомерных газовазных 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, для смеси совершенных газов, с химическими превращениями, описываемыми многостадийными кинетическими механизмами. При прохождении особой точки, связанной с равенством единице числа Маха, обеспечивается выполнение 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 аргоном, 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 газокапельных 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, ослабление и затухание детонации при впрыске капель воды.

9. Результаты исследования тонкой структуры стационарных детонационных волн в газовых, газокапельных и металлогазовых горючих смесях, в предположении, что продукты испарения участвуют в равновесных и неравновесных газофазных химических реакциях. 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 установление состояния близкого к термодинамическому равновесию. Рассмотрены случаи установления двухфазного равновесия. При исследовании воздействия капель воды на детонацию установлено наличие режима течения, зависящего от массового содержания и начального диаметра капель воды, при котором детонация Чепмена-Жуге отсутствует. 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 сверх малыми концентрациями. Результаты исследования влияния на усечения бесконечной системы кинетики конденсации до конечной на параметры процесса, полученные при численном моделировании. 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 использованы при решении многомерных задач физической динамики многофазных сред (методики многомерных расчетов и программы разработаны соавторами при участии автора). С использованием данных программных комплексов 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, на полезную нагрузку; численные исследования воспламенения и горения керосино-воздушной газочапельной смеси, а также эмиссионных характеристик, 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 ЛИТЕРАТУРЫ

1. К.А.Авдеев, Ф.С.Фролов, А.А.Басевич, С.М.Фролов. Модифицированная модель воспламенения частицы магния. Химическая физика, 2008, т.27, № 6, с. 47-53.
2. Адрианов А. Л. Выделение множества разрывов на несогласованной сетке в двумерных стационарных сверхзвуковых течениях. - Моделирование в механике, т. 2 (19), N 6, 1983.
3. Адрианов А. Л. Некоторые особенности численного моделирования разрывных газодинамических течений на комбинированной нерегулярной сетке. - Моделирование в механике, т. 4 (21), N 5, 1988.
4. О.А. Азарова, В.В. Власов, В.Г. Грудницкий, В.Н. Рыгалин. Расчёты одномерных газодинамических течений с выделением ударных волн и контактных разрывов.Сб. Алгоритмы для численного исследования разрывных течений, 1993, с.56-80.
5. О.А. Азарова, В.В. Власов, В.Г. Грудницкий, Н.А. Попов, В.Н. Рыгалин. Разностная схема на минимальном шаблоне и её применение в алгоритмах выделения разрывов. Сб. Алгоритмы для численного исследования разрывных течений,1993,с.9-56.
6. Азарова О.А., Грудницкий В.Г. Расчет взрыва в воде с последующей пульсацией парогазовой полости. Химическая физика. 2000. Т. 19. № 1. С.18.
7. 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.: ил.
8. В.Г.Александров, А.Н.Крайко, К.С.Реент. Интегральные и локальные характеристики сверхзвукового пульсирующего детонационного прямоточного двигателя.Математическое моделирование. 2003. Т. 15. № 6. С. 17-26.
9. Александров А.А., Григорьев Б.А. Таблицы теплофизических свойств воды и водяного пара: Справочник. М. Издательство МЭИ. 1999. 168 с.
10. Алексеев Б.В. Математическая кинетика реагирующих газов.М.:Наука,1982,420 с.
11. Алексеев Б.В., А.М.Гришин. Физическая газодинамика реагирующих сред. М.: Высшая школа, 1985, 464 с.
12. В. Е. Алемасов, А. Ф. Дрегаллин, А. П. Тишин. Теория ракетных двигателей: Учебник для студентов высших технических учебных заведений /Под ред. В. П. Глушко. – М.: Машиностроение, 1989. – 464 с: ил.

13. Ананьев А.В., Борисов Д.М., Васютичев А.С., Гидаспов В.Ю., Дегтярёв С.А., Лаптев И.В., Руденко А.М. Численное моделирование пространственных смешанных двухфазных течений с химическими превращениями применительно к воздушно-реактивным двигателям. Вестник МАИ, М., Изд-во МАИ-ПРИНТ, Т. 16 № 2, 2009, с.131-140.
14. Антонов Н.Н., Жабин С.Н., Гавриков А.В., Смирнов В.П., Тимирханов Р.А. Исследование эффективности осаждения свинца для задач плазменной сепарации отработавшего ядерного топлива. Прикладная физика. 2016. № 5. С. 70-74.
15. Е.В.Астраханцева, В.Ю.Гидаспов, Д.Л.Ревизников. Математическое моделирование гемодинамики крупных кровеносных сосудов. Математическое моделирование, 2005, т. 17, н. 8, стр. 61-80
16. Е.В.Астраханцева, В.Ю.Гидаспов, Д.Л.Ревизников. Применение TVD-схем для решения уравнений гемодинамики. Труды МАИ, 2005, № 20, 29 с.
17. Е.В.Астраханцева, В.Ю.Гидаспов, У.Г.Пирумов, Д.Л.Ревизников. Численное моделирование гемодинамических процессов в артериальном дереве. Исследование влияния пересжатия сосуда на параметры течения. Математическое моделирование, 2006, т. 18, н. 8, стр. 25-36
18. Афанасьева Е.А., Левин В.А. Воспламенение и горение частиц алюминия за ударными и детонационными волнами. ФГВ, 1987, т. 23, №1, с. 8-14.
19. Баженова Т.В., Гвоздева Л.Г. Нестационарные взаимодействия ударных волн. - М., Наука, 1977, 274 с.
20. Базаров И.П. Термодинамика. М., Высшая школа, 1991, 376 стр.
21. Бакланов Д.И., Голуб В.В., Иванов К.В., Кривокорытов М.С. Переход горения в детонацию в канале с диаметром меньше критического диаметра существования стационарной детонации. Теплофизика высоких температур. 2012. Т. 50. № 2. С. 258.
22. Бам-Зеликович Г.М. Распад произвольного разрыва в горючей смеси . Теоретическая гидромеханика. М.: Оборонгиз, 1949. № 4. С. 112-141.
23. Басевич В.Я., Фролов С.М. Глобальные кинетические механизмы, использующиеся при моделировании многостадийного самовоспламенения углеводородов в реагирующих течениях. Химическая физика. 2006. Т. 25. № 6. С. 54-62.
24. Басевич В. Я., Фролов С. М., Посвянский В. С. Условия существования

- стационарной гетерогенной детонации. Химическая физика. 2005. Т. 24. № 7. С. 58-68.
25. И. А. Бедарев, А. В. Федоров. Сравнительный анализ трех математических моделей воспламенения водорода. Физика горения и взрыва, 2006, № 1, т. 42, с. 26-33.
 26. В. В. Беликов, Г. В. Беликова, В. М. Головизнин, Н.В. Семенов, Л. П. Стародубцева, А. Л. Фокин. Подавление детонации в водородовоздушных смесях. ТВТ, 1995, том 33, выпуск 3, 452–457.
 27. Белоцерковский О.М., Грудницкий В.Г., Рыгалин В.Н. Выделение разрывов при расчете одномерных нестационарных течений газа. ДАН СССР, 1983, Т.272, № 1, С.49-52.
 28. Белов Г.В. Расчет параметров равновесного состояния многокомпонентных гетерогенных систем с использованием уравнения состояния реального газа. Изв. Вузов. Машиностроение. 1985. № 5. С 69-72.
 29. Г.В.Белов. Термодинамическое моделирование: методы, алгоритмы, программы. М.: Научный Мир, 2002, 184 с.
 30. Белов Г.В. Моделирование равновесных состояний многокомпонентных гетерогенных систем. Математическое моделирование. 2005. Т. 17. № 2. С. 81-91.
 31. Бивол Г.Ю., Головастов С.В., Голуб В.В. Формирование пересжатой волны детонации в потоке метано-кислородных смесей в канале переменного сечения. ТВТ. 2017. Т.55. №4. с. 576.
 32. Большаков Г. Ф. Физико-химические основы применения топлив и масел. Новосибирск: Наука, 1987. 209с.
 33. Бутаков В.А. Метод расчета течений идеального газа с выделением ударных волн. Примеры течений около тел с протоком. Исследование газодинамики и теплообмена сложных течений однородных и многофазных сред. М: Изд-во МГУ, 1990, С.20-25.
 34. Н.Ю. Быков, А.И. Сафонов, Д.В. Лещев, С.В. Старинский, А.В. Булгаков. О газоструйном методе осаждения наноструктурных пленок серебра. Журнал технической физики, 2019, том 89, вып. 6, с. 830-843.
 35. Варгафтик Н.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. М.: Физматгиз, 1963, 708с.

36. Варнатц Ю., Маас У., Диббл Р. Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ. М.: Физматлит, 2003. 352 с.
37. Васильев А.А., Митрофанов В.В., Топчийн М.Е. Детонационные волны в газах. Физика горения и взрыва. 1987. Т. 23. № 5. С. 109.
38. Н.А.Ватолин, Г.К.Моисеев, Б.Г. Трусов. Термодинамическое моделирование в высокотемпературных неорганических смесях. М.: Металлургия. 1994. 352 с.
39. Взрывающиеся проволочки. Сборник статей/Под ред. Чейса и Мура. М.: ИЛ, 1963, 341 с.
40. 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. N 11. С. 20-24.
41. Виноградов А.В., Волков В.А., Гидаспов В.Ю., Муслаев 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.
42. Виноградов А.В., Волков В.А., Гидаспов В.Ю., Муслаев А.В., Розовский П.В. Комплекс программ для исследования нестационарных неравновесных течений конденсирующегося газа с явным выделением поверхностей сильных и слабых разрывов. Вычислительные технологии. 1995. Т. 4. N 10. С. 89-97.
43. 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.
44. В.А.Волков, В.Н.Гаврилюк, В.Ю.Гидаспов, В.Ю.Стрельцов, А.В.Хохлов. Численное моделирование горения в камерах ВРД. Тезисы доклада XI международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам, Москва-Истра, 2-6 июля 2001г.-М.: МАИ,2001.-с.329-332.
45. Волков В.А., Гидаспов В.Ю., Козелько А.Н., Пирумов У.Г. Маршевый полисеточный алгоритм расчета сверхзвуковых стационарных течений газа на естественно адаптированных сетках. Математическое моделирование, том 8, N 6, 1996, с. 121-127.
46. Волков В.А. Расчет равновесного состава смеси реагирующих газов при заданном внешнем давлении.- В кн. Математические аспекты задач охраны воздушного

бассейна. М. : МАИ, 1984.

47. В.А.Волков, В.Ю.Гидаспов, А.В.Муслаев, У.Г.Пирумов. Численное моделирование конденсации паров металлов. Материалы VII Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ'2008)- М.: Изд-во МАИ, 2008. с. 111-114.
48. Волков В. А. , Гидаспов В. Ю. , Муслаев А. В. , Пирумов У. Г. Численная модель процесса детонационного напыления. Современные вопросы механики и технологии машиностроения : Тез. докл. Всес. конф.-М. : ВИНТИ, 1986, с. 20.
49. 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, N 3.
50. 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.
51. 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, н. 12, стр. 70-80.
52. 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, н. 8, стр. 46-60.
53. В.А.Волков, В.Ю.Гидаспов, А.В.Муслаев, У.Г.Пирумов, А.В.Соколов. Численное моделирование конденсации паров металлов. Материалы VII Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ'2008), 24-31 мая 2008 г., Алушта.- М.: Изд-во МАИ, 2008. с. 111-114.
54. В.А.Волков, В.Ю.Гидаспов, В.Ю.Стрельцов, А.В.Хохлов, Цымбал А.Н. Численное моделирование горения в камерах кислородо-водородных ЖРД с учетом сопряженного теплообмена. Тезисы докладов V международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях, Самара, 5-10 июля 2004 г., М.: Вузовская книга, 2004, стр. 196-197.

55. Волков В.А., Муслиев А.В., Пирумов У.Г., Розовский П.В. Неравновесная конденсация паров металла в смеси с инертным газом в соплах установок для генерации кластерных пучков . Изв. РАН, МЖГ, 1995, N 3, с.80-91.
56. В.А. Волков, А.В. Муслиев, П.В. Розовский. Численное моделирование неравновесной конденсации паров металла в свехзвуковом сопле. Математическое моделирование, том 2, N 11, 1990, с. 56-63.
57. В.Н.Гаврилюк, В.Ю.Гидаспов, А.В.Хохлов. Численное моделирование гиперзвукового обтекания тел воздухом с учетом равновесной диссоциации. Материалы VI Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях, 26 июня-1 июля 2006 г., Санкт-Петербург-М.: Вузовская книга, 2006, с. 332-334.
58. Гардинер У. мл., Диксон-Льюис Г., Целнер Р. Химия горения. М.: Мир, 1988. 461 с.
59. Гидаспов В. Ю. Алгоритм численного расчета послойным методом характеристик квазиодномерных нестационарных внутренних течений газа с ударными и детонационными волнами. Вычислительные аспекты решения задач охраны окружающей среды: Тем. сб. науч. тр./ Под ред. У. Г. Пирумова, -М.: МАИ, 1988, с. 33-37.
60. Гидаспов В.Ю. Численное моделирование двухфазных течений с ударными и детонационными волнами: Диссертация кандидата физико-математических наук : 01.02.05.- Москва, 1993.- 192 с.: ил.
61. В.Ю.Гидаспов, У.Г.Пирумов. Численное моделирование образования кластеров аргона в сопле. Материалы X Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ'2014), 25-31 мая 2014 г., Алушта.- М.: Изд-во МАИ, 2014. -с. 73-76.
62. 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.
63. В.Ю.Гидаспов, Е.В.Гидаспова, В.В.Пухов. Численное моделирование процесса образования наночастиц свинца в струе ракетного двигателя. Материалы VIII Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ'2010), 25-31 мая 2010 г., Алушта.- М.: Изд-во МАИ-ПРИНТ, 2010. -с. 109-112.
64. Гидаспов В.Ю., Иванов И.Э., Крюков И.А. Стрельцов В.Ю. Исследование нестационарных неравновесных процессов в акустическом резонаторе Гартмана . Математическое моделирование. 2003, Том 15, №6, с.41-47.

65. Гидаспов В.Ю., Иванов И.Э., Крюков И.А. Численное моделирование инициирования детонации в фокусирующем канале. Математическое моделирование, 1992, т.4, N 12, с. 85-88.
66. В.Ю.Гидаспов, И.Э.Иванов, И.А.Крюков. Численное моделирование течений многокомпонентного газа с сильными разрывами свойств среды. IX Всероссийский съезд по теоретической и прикладной механике. Аннотация докладов. (Нижний Новгород 22-28 августа 2006). Нижний Новгород: Изд-во НГУ, 2006, стр. 56-57.
67. 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.
68. В.Ю.Гидаспов, И.Э.Иванов, И.А. Крюков, У.Г.Пирумов, Д.Л.Ревизников. Численное моделирование высокоскоростных неравновесных многофазных течений. Материалы VIII Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ'2010), 25-31 мая 2010 г., Алушта.- М.: Изд-во МАИ-ПРИНТ, 2010. с. 59-62.
69. В.Ю.Гидаспов, И.Э.Иванов, Д.Л.Ревизников, В.Ю.Стрельцов, В.Ф.Формалев. Численные методы. Сборник задач: учебное пособие для вузов/Под ред. У.Г.Пирумова. - Москва, Дрофа, 2007, 144 с. с ил.
70. Гидаспов В.Ю., Крюков И.А., Стрельцов В.Ю. Моделирование воздействия струй двигательных установок на элементы космического аппарата. Труды XI международного научно-технического семинара "Современные технологии в задачах управления, автоматизации и обработки информации". Сентябрь 2002г., Алушта.-М.: МГАПИ, 2002, с. 218.
71. 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.
72. В.Ю.Гидаспов. Вычислительный алгоритм решения задачи о распаде произвольного разрыва в равновесно-реагирующем газе. Математическое моделирование, 2006, т. 18, н. 8, с. 64-76.
73. В.Ю.Гидаспов, У.Г.Пирумов. Математическое моделирование процессов образования наночастиц в высокоскоростных потоках. Материалы XVIII Международной конференции по вычислительной механике и современным

- прикладным программным системам (ВМСППС'2013, 22-31 мая 2013 г., Алушта). - М.: Изд-во МАИ, 2013, с. 61-64.
74. В.Ю.Гидаспов, У.Г.Пирумов, Н.С.Северина. Математическое моделирование квазиодномерных нестационарных течений реагирующего газа с произвольным числом взаимодействующих разрывов. Вестник МАИ, М., Изд-во МАИ-ПРИНТ, Т. 15, № 5, 2008, с. 83-94.
75. В.Ю.Гидаспов, Н.С. Северина. Моделирование детонации металлогазовых горючих смесей в высокоскоростном потоке за ударной волной. ТВТ, 57:4(2019), 560-571.
76. В.Ю.Гидаспов, О.А.Москаленко, У.Г.Пирумов. Численное моделирование стационарных детонационных волн в газовых и газокапельных реагирующих смесях. Вестник МАИ, М., Изд-во МАИ-ПРИНТ, Т. 16 № 2, 2009, с. 51-61.
77. В.Ю.Гидаспов, А.В.Муслиев, А.В.Хохлов. Численное моделирование аэротермического воздействия при гиперзвуковом обтекании тел воздухом. Материалы VII Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ'2008), 24-31 мая 2008 г., Алушта.- М.: Изд-во МАИ, 2008. с. 421-424
78. В.Ю.Гидаспов, Н.С. Северина. Численное моделирование экспериментов по определению времени задержки воспламенения в ударных трубах. Вестник МАИ, М., Изд-во МАИ-ПРИНТ, Т. 16 № 6, 2009, с.182-192.
79. В.Ю.Гидаспов. Распад разрыва в детонирующем газе. Вестник МАИ, М., Изд-во МАИ-ПРИНТ, Т. 17 № 6, 2010, с. 72-79.
80. В.Ю.Гидаспов, Н.С. Северина. Численное исследование газовой детонации в ударной трубе. Вестник Нижегородского университета им.Н.И.Лобачевского. №4. Часть 3.- Нижний Новгород: Изд-во ННГУ им. Н.И.Лобачевского, 2011.с. 714-716.
81. Гидаспов В.Ю., Пирумов У.Г., Иванов И.Э., Северина Н.С. Модели образования наночастиц в потоках газа: Учебно-методический комплекс, Калуга, Москва: Изд-во «Эйдос», 2011, 214 с.
82. В.Ю.Гидаспов, У.Г.Пирумов, Н.С.Северина. Тестирование методики моделирования нестационарных течений газа с ударными и детонационными волнами. Вестник МАИ, М., Изд-во МАИ-ПРИНТ, Т. 18 № 6, 2011, с. 119-124.
83. В.Ю.Гидаспов. Численное моделирование стационарных волн горения и детонации в смеси частиц алюминия с воздухом. "Труды МАИ", 2011, № 49 , 18 с.

84. В.Ю.Гидаспов. Численное моделирование стационарных волн горения и детонации в смеси частиц магния с воздухом. Электронный журнал “Труды МАИ”, 2013, № 66, 14 с.
85. 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.
86. В.Ю.Гидаспов, О.А.Москаленко, У.Г.Пирумов. Численное моделирование стационарных волн горения и детонации в керосино-воздушной горючей смеси. Вестник МАИ, М., Изд-во МАИ-ПРИНТ, Т. 21 № 1, 2014, с.169-177.
87. В.Ю.Гидаспов, Н.С. Северина. Численное моделирование тонкой структуры цилиндрической детонационной волны в водородно-воздушной горючей смеси. ТВТ, 53:4 (2015), 556–560.
88. В.Ю.Гидаспов. Численное моделирование одномерного стационарного равновесного течения в детонационном двигателе. “Труды МАИ”, 2015, № 83, 20 с.
89. В.Ю.Гидаспов, О.А.Москаленко. Численное моделирование инициирования детонации в керосино-воздушной газочапельной смеси падающей ударной волной. “Труды МАИ”. 2016. № 90.
90. Гидаспов В.Ю., Москаленко О.А. Численное моделирование стационарных волн детонации в горючих смесях углеводородов с воздухом. Материалы XVIII Международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС’2013, 22-31 мая 2013 г., Алушта). - М.: Изд-во МАИ, 2013, с. 539-542.
91. В.Ю.Гидаспов. Численное моделирование стационарных волн горения и детонации в смеси частиц бора с воздухом. “Труды МАИ”. 2016. № 91.
92. В.Ю.Гидаспов, Н.С. Северина. Численное моделирование детонации пропано-воздушной горючей смеси с учетом необратимых химических реакций. ТВТ, 55:5 (2017), 795-799.
93. В.Ю.Гидаспов, О.А.Москаленко, Н.С. Северина. Численное исследование влияния капель воды на структуру детонационной волны в водородо-воздушной горючей смеси. ТВТ, 56:5 (2018), 751-757.

94. В.Ю.Гидаспов, Н.С.Северина. Элементарные модели и вычислительные алгоритмы физической газовой динамики. Термодинамика и химическая кинетика. Учебное пособие. Москва.: Факториал, 2014.- 84 с.
95. В.Ю.Гидаспов, Н.С.Северина. Элементарные модели и вычислительные алгоритмы физической газовой динамики. Одномерные нестационарные течения. Учебное пособие. Москва: Факториал, 2015.- 84 с.
96. В.Ю.Гидаспов, Н.С.Северина. Элементарные модели и вычислительные алгоритмы физической газовой динамики. Ударные и детонационные волны. Учебное пособие. Москва.: Факториал, 2016.- 84 с.
97. В.Ю.Гидаспов, Н.С.Северина. Некоторые задачи физической газовой динамики. М.: Изд-во МАИ, 2016.-196 с.
98. 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.
99. В.Ю.Гидаспов, С.А.Лосев, Н.С.Северина, В.Н.Ярыгина. Влияние электронного возбуждения на структуру ударной волны в кислороде. Вестник МАИ, М., Изд-во МАИ-ПРИНТ, Т. 16 № 2, 2009, с.93-100.
100. В.Ю.Гидаспов. Численное моделирование химически неравновесного течения в сопле жидкостного ракетного двигателя. Вестник МАИ, М., Изд-во МАИ-ПРИНТ, Т. 20 № 2, 2013, с. 90-97.
101. 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. <http://chemphys.edu.ru/issues/2018-19-2/articles/737/>
102. В.Ю.Гидаспов, Н.С. Северина. Численное моделирование рабочего цикла однотрубного импульсного детонационного двигателя. Известия ТулГУ. Технические науки. 2018 г., вып. 4, с. 180-192.
103. В.Ю.Гидаспов. Исследование влияния учета конденсированной фазы на рассчитываемые параметры детонации Чепмена-Жуге металлогазовых горючих смесей. Материалы XII Международной конференции по прикладной математике и механике в аэрокосмической отрасли (NPNJ'2018), 24-31 мая 2018 г., Алушта.- М.: Изд-во МАИ, 2018.с. 113-115.

104. Гишинский С.М., Теленин Г.Ф., Тиняков Г.П. Метод расчета сверхзвукового обтекания затупленных тел с отошедшей ударной волной. Изв. АН СССР. Мех. и маш., 1964, № 4, С.9-28.
105. Гишинский М. М., Стасенко А. Л. Сверхзвуковые двухфазные струи. - М. , Машиностроение, 1990, 176 с.
106. Гинзбург И. П. Прикладная гидрогазодинамика.-Л. , ЛГУ, 1958.
107. Годунов С. К. , Забродин А. В. , Иванов М. Я., Крайко А. Н. , Прокопов Г. П. Численное решение многомерных задач газовой динамики. Под ред. С. К. Годунова.- М.: Наука, 1976, 400 с.
108. В. В. Голуб, Т. В. Баженова. Импульсные сверхзвуковые струйные течения. Российская акад. Наук. Объед. ин-т высоких температур. Отв. ред. В. Е. Фортов. Москва. Наука. 2008. 278 с.
109. В.Н.Горбунов, У.Г.Пирумов, Ю.А.Рыжов. Неравновесная конденсация в высокоскоростных потоках газа. – М. Машиностроение, 1984, 200 с.
110. Гремячкин В.М., Истратов А.Г., Лейпунский О.И. Модель горения мелких капель металла . ФГВ. 1975. Т. 11. № 3. С. 366.
111. Гремячкин В.М., Истратов А.Г., Лейпунский О.И. К теории горения частицы бора в гислороде при высоких температурах . ФГВ. 1979. Т. 15. № 6. С. 5-13.
112. Гринь В.Т., Крайко А.Н., Миллер Л.Г. К распаду произвольного разрыва на перфорированной перегородке. Прикладная механика и техническая физика. 1981. Т. 22. № 3 (127). С. 95-103.
113. Громов А.А., Хабас Т.А., Ильин А.П. и др. Горение нанопорошков металлов /Под ред. Громова А.А./ Томск. Дельтаплан. 2008. 382 с.
114. Грудницкий В.Г. Прямой обобщенно-характеристический метод для расчета разрывных решений законов сохранения газовой динамики. . Математическое Моделирование, 2004, т.16., №1, с.90-96.
115. В.Г. Грудницкий. Обобщённые характеристики для систем уравнений Эйлера и их применение к конструированию численных схем. . Матем. Моделирование, 1992, т.4, №12, с.45-48.
116. Грудницкий В.Г., Мендель М.А. Характеристическая консервативная форма законов сохранения и устойчивые, монотонные вычислительные схемы для исследования разрывных течений) Труды МАИ. 2013. № 67. С. 4.

117. Груздь С.А.. Моделирование гомогенной конденсации при сверхзвуковых течениях в соплах. Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук / Институт механики УрО РАН. Ижевск, 2016.
118. Губайдуллин Д.А., Тукмаков Д.А. Численное моделирование прохождения прямого скачка уплотнения по взвеси с неравномерной концентрацией твердых частиц. Известия высших учебных заведений. Проблемы энергетики. 2018. Т. 20. № 7-8. С. 117-123.
119. Губайдуллин Д.А., Зарипов Р.Р. Распространение сферических и цилиндрических волн в многофракционных полидисперсных газовзвесах. Теплофизика высоких температур. 2019. Т. 57. № 4. С. 638-640.
120. Губайдуллин Д.А. Динамика двухфазных парогасокапельных сред. Казань: Изд-во Казанского матем.общества, 1998.
121. Гурвич Л.В., Вейц И.В., Медведев В.А. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: Справочник в 4-х томах под ред. акад. В. П. Глушко.-М.:Наука, 1978.
122. Гурвич Л.В., Ртищева Н.П. Аналитическое представление табулированных значений термодинамических свойств газов Теплофизика высоких температур. 1965. Т. 3. № 1. С. 33.
123. Гуревич М.А., Кирьянов И.М., Озеров Е.С. Горение одиночных частиц бора . ФГВ. 1969. Т. 5. № 2. С. 217.
124. Гуськов О.В., Копченков В.И., Липатов И.И., Острась В.Н. Процессы торможения сверхзвуковых течений в каналах. Москва, 2008, 163 с.
125. Е. Л. Давидчук, В. И. Димитров, М. Л. Рафалович, Ю. И. Тулупов, Н. А. Славинская. Кинетика горения бора в сухом воздухе. ФГВ. 1991. Т. 27. № 1. С. 45-52.
126. Е. Л. Давидчук, В. И. Димитров, В. А. Залож, Н. А. Славинская, Ю. И. Тулупов. Коэффициенты переноса продуктов горения бора в сухом воздухе. ФГВ. 1991. Т. 27. № 1. С. 52-56.
127. Димитров В. И. Простая кинетика.-Новосибирск, Наука, 1982.
128. Демьянов Ю. А., Секриеру Г. В., Игошин А. И., Киреев В. Т., Пинский В.Л. Одномерные нестационарные течения реального газа. Кишинев, Штиница,1980,188 с.
129. Дрегаллин А.Ф., Зенуков И.А., Крюков В.Г., Наумов В.И. Математическое моделирование высокотемпературных процессов в энергоустановках / Под ред. В.Е. Алемасова. Казань: Изд-во Казанского университета, 1985. 263 с.

130. Дубовкин Н. Ф. Справочник по углеводородным топливам и их продуктам сгорания. М.-Л. Госэнергоиздат, 1962. 288 с.
131. Ю.Н. Дьяконов, Л.В. Пчелкина, И.Д. Сандомирская Сверхзвуковое обтекание затупленных тел. Изд. МГУ, 1971.
132. Ждан С. А., Прохоров Е. С. Квазиодномерный расчет детонации в канале переменного сечения. - ФГВ, 1984, т. 20, N 5, с. 96-100.
133. Жоров Ю. М. Моделирование физико-химических процессов нефтепереработки и нефтехимии. М.: Химия, 1978. 376с.
134. Журавская Т.А., Левин В.А. Исследование некоторых способов стабилизации детонационной волны в сверхзвуковом потоке. Механика жидкости и газа. 2012. № 6. С. 126-136.
135. Зельдович Я.Б. Теория горения и детонации газов. Москва: Изд-во АН СССР, 1944, 71 с.
136. Зельдович Я. Б. К теории возникновения детонации в газах. ЖТФ, т. 17, с. 3, 1947.
137. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных газодинамических явлений. - М. , Наука, 1976.
138. Зельдович Я. Б. и др. Математическая теория горения и взрыва. - М, Наука, 1980.
139. Зельдович Я. Б., Компанеец А. С. Теория детонации. М.: ГИТТЛ, 1955. —268 с.
140. Ибрагимова Л.Б., Смехов Г.Д., Шаталов О.П. Сравнительный анализ констант скоростей химических реакций, описывающих горение водородо-кислородных смесей. Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2009, Т.8.
141. Ивандаев А.И., Кутушев А.Г., Нигматулин Р.И. Газовая динамика многофазных сред. Ударные и детонационные волны в газовзвесах . Итоги науки и техн. Механика жидкости и газа. М.: Изд. ВИНТИ, 1982. Т.16. С. 209-290.
142. Иванов И.Э., Крюков И.А. Квазимонотонный метод повышенного порядка точности для расчета внутренних и струйных течений невязкого газа . Математическое моделирование. 1996, Том 8, №6, с.47-55.
143. Иванов И.Э., Крюков И.А. Пульсационные режимы течения в газодинамическом воспламенителе. . Математическое моделирование, т.11, №2, 1999, с. 45-54.
144. Иванов И.Э., Крюков И.А. Численное моделирование течений многокомпонентного газа с сильными разрывами свойств среды. Математическое моделирование. 2007. Т. 19. № 12. С. 89-100.

145. И.Э. Иванов, И.А. Крюков. Учет особенностей метода контрольного объема при адаптации расчетной сетки. Математическое моделирование, том 13, №1, 2001, с.99.
146. Иванов В.С., Фролов С.М. Математическое моделирование рабочего процесса и тяговых характеристик воздушно-реактивного импульсного детонационного двигателя в условиях сверхзвукового полета. Хим. физика. 2011.Т. 30. № 7. С. 48-61.
147. Ильин А.П., Громов А.А. Горение порошков алюминия и бора в сверхтонком состоянии. Томск, ТГУ, 2002. — 154 с.
148. Импульсные детонационные двигатели / Под ред. Фролова С.М. М.:Торус Пресс, 2006. 592 с.
149. Камзолов В. Н., Пирумов У. Г. Расчет неравновесных течений в соплах . Известия АН СССР. Механика жидкости и газа. — 1966. № 6. С. 25-33.
150. Капитанец П.И., Лунев В.В. Ударно-характеристический метод решения разрывных газодинамических задач .ЖВМ МФ, 1988, Т. 28, № 6, С.945-950.
151. Кенцер Ч. Дискретизация граничных условий на движущихся разрывах .Численные методы в механике жидкости. М.: Мир, 1973, С.62-72.
152. Дж. Кларк, М. Макчесни. Динамика реальных газов. М.: Мир, 1967, 566 с.
153. Когарко С. М. , Басевич В. Я. Теоретическое рассмотрение возможных схем снижения концентраций N_0 при горении.- ФГВ, т. 17, N 5, с. 3-8.
154. Когарко С. М. , Басевич В. Я. Теоретическое рассмотрение возможных схем снижения концентраций N_0 при горении.- ФГВ, т. 17, N 5, с. 3-8.
155. Колган В.П. Применение принципа минимальных значений производных к построению конечноразностных схем для расчета разрывных решений газодинамики . Уч. Записки ЦАГИ, 1972, т.3, №6, с.68-77.
156. Колесниченко А.В., Маров М.Я. Турбулентность многокомпонентных сред. М.: Наука, 1999
157. Кондратьев В.Н. Кинетика химических газовых реакций.-М. : Изд-во АН СССР, 1958.
158. 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.
159. 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.
160. Корепанов М.А., Груздь С.А. Гомогенная конденсация паров воды при течении в соплах. Сравнение с экспериментальными данными. Химическая физика и мезоскопия. 2016. Т. 18. № 2. С. 215-224.
161. Коробейников В. П. Задачи теории точечного взрыва. М.: Физматлит, 1985. 400 с.
162. Коробейников В.П., Левин В.А. Сильный взрыв в горючей смеси газов . Известия АН СССР. Механика жидкости и газа. 1969. № 6. С. 48-51.
163. В. П. Коробейников, В. В. Марков, Л. И. Седов. Теория распространения взрывных волн, Труды МИАН СССР, 175 (1986), с. 178–216.
164. В. П. Коробейников, В. В. Марков, Г. В. Сизых, “Численное решение двумерных нестационарных задач о движении горючей пылегазовой смеси”, Доклады АН СССР, 316:5 (1991), с. 1077–1081.
165. Котов М.А., Крюков И.А., Рулева Л.Б., Солодовников С.И., Суржиков С.Т. Расчетно-экспериментальное исследование структуры гиперзвукового потока в плоском канале сложной конфигурации. Вестник Московского государственного технического университета им. Н.Э. Баумана. Серия: Машиностроение. 2015. № 1 (100). С. 4-21.
166. Котов Д. В. , Суржиков С. Т. Расчет гиперзвукового течения и излучения вязкого химически реагирующего газа в канале, моделирующем участок ГПВРД . Теплофизика высоких температур. — 2012. Т 50, № 1, с. 126-136.
167. Крайко А. Н. , Нигматулин Р. И. , Старков В. К. , Стернин Л. Е. Механика многофазных сред.- "Итоги науки и техники". Гидромеханика - М. : ВИНТИ, 1972, т. 6, 174 с.
168. А. Н. Крайко, В. Е. Макаров, Явные аналитические формулы, определяющие равновесный состав и термодинамические функции воздуха для температур от 200 до 20000 К, ТВТ, 1996, том 34, выпуск 2, 208–219.
169. Крайко А.Н., Макаров В.Е., Тилляева Н.И. К численному построению ударных волн .ЖВМ и МФ, 1980, Т.20, № 3, С.716-723.
170. Крайко А.Н., Ватажин А.Б., Секундов А.Н. Газовая динамика. Избранное: в 2 томах. Том 1/под общей редакцией А.Н. Крайко.- М.:Физико-математическая литература,2000.720 с.
171. Кратова Ю. В., Федоров А. В., Хмель Т. А. Особенности ячеистой детонации в

- полидисперсных газовзвесах частиц алюминия.ФГВ. -2011. -Т. 47, № 5. -С. 85-94.
172. Кратова Ю. В., Хмель Т. А., Федоров А. В. Осесимметричная расширяющаяся гетерогенная детонация в газовзвесах частиц алюминия.ФГВ. -2016. -Т. 52, № 1.-С. 84-95.
173. Крюков В. Г., Абдуллин А. Л., Демин А. В., Сафиуллин И. И. Сравнение явных и неявных разностных схем расчета химически неравновесных процессов в соплах. “Труды МАИ”.2017.№ 92.
174. Крюкова С.Г. Некоторые особенности обтекания затупленного полуконуса и полуконуса с крыльями в гиперзвуковом потоке разреженного газа. Труды ЦАГИ, вып. 2111, 1981.
175. Левин В. А. Приближенное решение задачи о сильном точечном взрыве в горючей смеси . Механика жидкости и газа. 1967. №1. С. 122.
176. Левин В. А. Инициирование, распространение и срыв детонации в газах . Вестник ННГУ. 2011. №4-3. С.925-927.
177. Левин В. А., Туник Ю.В. Инициирование детонационного горения угольной пыли в метано-воздушной смеси . ФГВ. 1987. №1. С. 3-8.
178. Левин В. А. Детонация. Горение. Владивосток: ИАПУ ДВО РАН, 1995. 53 с.
179. Левин В.А., Марков В.В. Возникновение детонации при концентрированном подводе энергии. Физика горения и взрыва. 1975. Т. 11. № 4. С. 623.
180. Левин В. А., Черный Г. Г. Асимптотические законы поведения детонационных волн . Прикладная математика и механика. 1967. Т. 31. № 3. С. 393.
181. Левин В.А., Мануйлович И.С., Марков В.В. Стабилизация волны детонации в сверхзвуковом потоке. Вестник Московского университета. Серия 1: Математика. Механика. 2011. № 4. С. 28-33.
182. Левин В. А., Мануйлович И. С., Марков В. В. Инициирование и распространение многомерных волн детонации. Физика горения и взрыва.- 2015.-Т. 51, №1.С. 47-56.
183. В.В.Лунев. Течение реальных газов с большими скоростями. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007. – 760 с.
184. Льюис Б., Эльбе Г. Горение пламя и взрывы в газах. -М. , Мир, 1968..
185. К.М.Магомедов, А.С.Холодов. Сеточно-характеристические численные методы. М. Наука, 1988. 290 с.
186. Марков В.В. Численное моделирование образования многофронтной структуры

- детонационной волны . Доклады АН СССР. 1981. Т. 258. № 2. С. 158-163.
187. Ч.Л.Мейдер. Численное моделирование детонации. Пер. с англ.-М.: Мир, 1985.- 384 с.
188. Медведев А.Е., Федоров А.В., Фомин В.М. Описание горения смесей газа и твердых частиц методами механики сплошной среды.ФГВ, 1984, т. 20, №2, с. 3-9.
189. Минеев В.Н., Набоко И.М., Паршиков А.Н., и др. Горение и взрыв в замкнутой конической полости. Физический эксперимент. Теплофизика высоких температур, 1999, Том 37, №2,с.313-318.
190. Мирова О.А., Котельников А.Л., Голуб В.В., Баженова Т.В. Многократные отражения ударных волн при взрыве в замкнутом объеме с защищенными экранами стенками. Теплофизика высоких температур. 2017. Т. 55. № 2. С. 324-32
191. Митрофанов В.В. Детонация гомогенных и гетерогенных систем. Новосибирск: Изд-во Ин-та гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, 2003. 200 с.
192. Михатулин Д. С. , Полежаев Ю. В. , Ревизников Д. Л. Теплообмен, термохимическое и термоэрозийное разрушение тепловой защиты. Издательство Янус-К, 2011, 553 с.
193. Москаленко О.А.Численное моделирование детонации газочапельных смесей в каналах.Диссертация кандидата физико-математических наук.01.02.05,Москва. 2016.
194. Моретти Дж. К вопросу о выделении скачка .Численное решение задач гидромеханики. М.: Мир, 1977, С.55-63.
195. Мюнстер А. Химическая термодинамика. М. : Мир, 1971, 295 с.
196. Назырова Р. Р. Вариационное исчисление как фундамент исследования течения среды при учете уравнения состояния реальных газов. .“Труды МАИ”. 2017. № 92.
197. Нетлетон М. Детонация в газах. Пер. с англ. — М. : Мир, 1989, 280 с.
198. Нигматулин Р. И. Динамика многофазных сред. -М. , Наука, 1987, 464 с.
199. Нигматуллин Р.И., Губайдуллин Д.А., Тукмаков Д.А. Ударно-волновой разлет газовзвесей. Доклады Академии наук. 2016. Т. 466. № 4. С. 418.
200. Николаев Ю.А. Модель кинетики химических реакций при высоких температурах. - ФГВ, 1978, т. 14, N 4.
201. Николаев Ю. А.,Топчиян М. Е. Расчет равновесных течений в детонационных волнах в газах. - ФГВ, 1977, т. 13, N 3.

202. Э. Оран, Дж. Борис. Численное моделирование реагирующих потоков. - М.: Мир, 1990, 661 с.
203. Основные результаты экспериментов на ударных трубах. под ред. А.Ферри/ Госатомиздат. Москва. 1963. 442 с.
204. Павлов В.А. Некоторые особенности измерения и интерпретации времени индукции воспламенения водородо-кислородных смесей за фронтом ударной волны. Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2009, Т.8.
205. Петров Ю.И. Кластеры и малые частицы. – М. Наука, 1986, 368 с.
206. Пирумов У. Г. Обратная задача теории сопла - М: Машиностроение, 1988, 240 с.
207. Пирумов У. Г., Росляков Г. С. Течение газа в соплах. -М, МГУ, 1978, 352 с.
208. Пирумов У. Г., Росляков Г. С. Газовая динамика сопел. -М.: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1990. - 368 с.
209. Пирумов У.Г.. Математическое моделирование в проблемах охраны воздушного бассейна.- М.: Изд-во МАИ, 2001. 340 с.
210. У.Г.Пирумов, В.Ю.Гидаспов, И.Э.Иванов, Д.Л.Ревизников, В.Ю.Стрельцов, В.Ф.Формалев. Численные методы. Учебник и практикум. Сер. 58 Бакалавр. Академический курс (5-е изд., пер. и доп). М.: Издательство Юрайт, 2017, 421 с
211. Пирумов У.Г., Гидаспов В.Ю., Даниелян А.А., Иванов И.Э., Крюков И.А., Муслаев А.В. Численный анализ двухфазного течения в газодинамическом фильтре. Математическое моделирование. 1998. Т. 10. № 11. С. 19.
212. В.Н.Попов, А.В.Федоров, А.В.Шульгин. Численное моделирование воспламенения частицы магния в неоднородном тепловом поле. Математическое моделирование, 2007, т. 19, н. 6, стр. 109- 117.
213. Похил П.Ф., Беляев А.Ф., Фролов Ю.В., Логачаев В.С., Коротков А.И. Горение порошкообразных металлов в активных средах — М.: «Наука», 1972. — 294 с.
214. Предвадителей А.С., Е. В. Ступоченко, И. П. Стахановой, Е. В. Самуйлов, А. С. Плешанов, И. Б. Рождественский. Таблицы термодинамических функций воздуха (для температур от 6000° до 12 000°К и давлений от 0,001 до 1000 атм.).— М., Изд-во АН СССР, 1957, 302 с.
215. Прокопов Г.П. Аппроксимация табличных уравнений состояния для расчета газодинамических задач. Препринт ИПМ №80. – М.: 2004

216. Прокопов Г.П. Аппроксимация табличных уравнений состояния для расчета газодинамических задач. Препринт ИПМ №80. – М.: 2004
217. Пухначев В.В. Об устойчивости детонации Чепмена-Жуге . Доклады АН СССР. 1963. Т. 149. № 4.С. 798-801.
218. Рахматулин Х. А. Основы газодинамики взаимопроникающих движений сжимаемых сред. - ПММ, 1956, т. 20, вып. 2, с. 184-195.
219. Рахматуллин Х.А., Сагомоян А.Я., Бунимович А.И., Зверев И.Н. Газовая динамика. М. Высшая школа, 1965, 722 с.
220. Рашковский С.А., Милёхин Ю.М., Федорычев А.В. Влияние распределенного подвода воздуха в камеру дожигания ракетно-прямоточного двигателя на полноту сгорания частиц бора . ФГВ. 2017. Т. 53. № 6. С. 38.
221. Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей. -Л.: Химия, 1982. - 592с.
222. Ревизников Д.Л., Гидаспов В.Ю., Морозов А.Ю. Алгоритм адаптивной интерполяции на основе KD-дерева для решения задач химической кинетики с интервальными параметрами. Математическое моделирование. 2018. № 12. С. 129-144.
223. Рычков А. Д. Математическое моделирование газодинамических процессов в каналах и соплах.-Новосибирск, Наука, 1988, 222 с.
224. В.А.Рябин, М.А.Остроумов, Т.Ф.Свит. Термодинамические свойства веществ. Справочник. Л., Химия, 1977.
225. Салтанов Г. А. Неравновесные и нестационарные процессы в газодинамике однофазных и двухфазных сред.- М., Наука, 1979, 286 с.
226. Северина Н.С. Численное моделирование нестационарных течений реагирующего газа с явным выделением произвольного числа взаимодействующих разрывов. Диссертация кандидата физико-математических наук. 05.13.18, Москва. 2009.
227. Седов Л. И. Движение воздуха при сильном взрыве.-ДАН СССР, 1946, т. 42, N 1, с. 17-20.
228. Смирнов Н.Н., Зверев И.Н. Гетерогенное горение. М.: Изд-во МГУ, 1992. 446 с.
229. Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений. / Пер, с англ. .Под ред. Дж. Холл и Дж. Уатт. - М., Мир, 1979.

230. Солнцев В.П., Голубев В.А. Исследование процесса сгорания бензино-воздушной смеси в условиях взаимодействия турбулентных следов, образованных стабилизаторами . Известия высших учебных заведений МВО СССР, серия «Авиационная техника», 1959.
231. Солоухин Р.И. Ударные волны и детонация в газах. М. , ГИФМЛ, 1963.
232. К.П.Станюкович. Неустановившиеся движения сплошной среды. Москва, Наука, 1971, 856 с.
233. Стернин Л. Е. Основы газодинамики двухфазных течений в соплах. - М.: Машиностроение, 1974.
234. Стулов В.Я. Расчет невязких течений газа с внутренними разрывами. Матем. Моделирование, 1992, т.4., №12, с.97-105.
235. Суздалев И.П. Нанотехнология. Физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. Издательство: КомКнига, 2006, 592 с.
236. Суржиков С.Т. Радиационная газовая динамика спускаемых космических аппаратов. Многотемпературные модели. Москва: ИПМех им. А.Ю.Ишлинского РАН, 2013. - 706 с.
237. Теплофизические свойства некоторых авиационных топлив в жидком и газообразном состояниях / Сборник статей под ред. Варгафтика Н.Б. М.: Оборонгиз, 1961. 162 с.
238. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания. М., Изд-во АН СССР , т. 1-10, 1971-1981 гг.
239. Н.С. Титова, П.С. Кулешов, А.М. Старик. Кинетический механизм воспламенения и горения пропана в воздухе. Физика горения и взрыва. 2011. Т. 47. № 3. С. 3.
240. Трусов Б.Г., Маланичев А.Г. Применение вариационного принципа для решения задач химической кинетики. Доклады Академии наук. 1994. Т. 339. № 6. С. 771.
241. Туник Ю.В. Численное моделирование детонационного горения водородовоздушных смесей в сопле Лавалья . Известия Российской академии наук. Механика жидкости и газа. 2010. № 2. С.107-114.
242. Ю.В. Туник, Г.Я. Герасимов. Воспламенение паров керосина при сверхзвуковом обтекании цилиндра с торцевой наветренной стенкой. Физико-химическая кинетика в газовой динамике 2018 Т.19 (2)

243. А.В.Федоров, Д.А.Тропин. Математическая модель воспламенения магния в расширенном диапазоне параметров. Физика горения и взрыва, 2008, т.44, №5. с. 64-71.
244. Федоров А. В., Тропин Д.А. Математическая модель детонационного сгорания пара керосина в окислителе . Физика горения и взрыва. 2012. Т.48. № 1. С. 47-54.
245. Федоров А.В., Фомин В.М., Хмель Т.А. Гетерогенная детонация. В кн. Законы горения/Под ред. Ю.В.Полежаева. М.: Энергомаш, 2006, с. 276-302.
246. Фет, Лазар. Скорость горения капель горючего в газообразных продуктах сгорания . РТК. 1971. №11. С. 63,
247. Физика взрыва / Под ред. Л. П. Орленко. М.: Физматлит, 2004. Т 1. — 832 с.: ил.
248. Физико-химические процессы в газовой динамике. Справочник. Том 2: Физико-химическая кинетика и термодинамика. Под ред. Г.Г.Черного и С.А.Лосева – М.: Научно-издательский центр механики. 202. 368 с.
249. Франк-Каменецкий А.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М: Наука, 1987. 502 с.
250. Френкель Я.И. Кинетическая теория жидкостей. АН СССР. М. ; Л. : Изд-во АН СССР, 1945. – 424 с.
251. Фролов С.М., Аксёнов В.С., Садыков И.А., Авдеев К.А., Шамшин И.О. Испытания экспериментальных образцов водометного движителя с импульсно-детонационным горением жидкого топлива. Горение и взрыв. 2017. Т.10. № 2. С. 73-82.
252. Хмель Т. А., Федоров А. В Особенности детонации в полидисперсных газовзвесьях . Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. 2011. № 4 (3). С. 1232-1234.
253. Черный Г.Г. Газовая динамика. М.: Наука, 1988, 424 с.
254. Щетинков Е. С. Физика горения газов. М.: Физматлит, 1965. 740 с.
255. 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, М., Изд-во МАИ-ПРИНТ, Т. 16 № 7, 2009, с. 31-42.
256. Ягодников Д.А. Воспламенение и горение порошкообразных металлов. - М: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2009. - 432 с.
257. Яненко Н. Н., Солоухин Р. И. , Папырин А. Н. , Фомин В. М. Сверхзвуковые двухфазные течения в условиях скоростной неравновесности частиц. - Новосибирск, Наука, 1980, 160 с.

258. Яненко Н.Н., Фомин В.М., Федоров А.В. Структура ударных, детонационных волн и комбинированных разрывов в смесях газа и частиц . Механика реагирующих сред и ее приложения. Новосибирск: Наука. Сиб. Отд-ние, 1989. С. 133-143.
259. Abgrall R., Karni S., Computations of Compressible Multifluids . Journal of Computational Physics. 2001, V. 169, p. 594-623.
260. Adelman H.G., Browning L.H., Pefley R.K. Predicted Exhaust Emissions from a Methanol and Jet Fueled Gas Turbine Combustor . AIAA Journal, 1976, v.14, p.793-798.
261. Bowman CT. A Shock-Tube Investigation of the High- Temperature Oxidation of Methanol . Comb, and Flame. 1975. V. 25. P. 343.
262. Bivol G., Golovastov S.V., Golub V.V. Prechamber initiation of gaseous detonation in a channel. Combustion Science and Technology. 2016. Т. 188. № 7. С. 1165-1179.
263. Burago N.G., Nikitin I.S., Yakushev V.L. Hybrid numerical method with adaptive overlapping meshes for solving nonstationary problems in continuum mechanics. computational mathematics and mathematical physics. 2016. т. 56. № 6. с. 1065-1074
264. Ivanov I.E., Abgarian A.K. Second-order numerical method for solving the 3-D steady Euler equations . Proceeding of the second Japan-Soviet Union joint symposium on computational fluid dynamics.- Tsucuba: Univercity of Tsucuba, 1991, Vol 1,pp. 1-9.
265. T. Dohi, A.K. Hayashi, S. Ogawa Numerical simulations of layered detonation using a detailed hydrogen chemistry / 21st International Symposium on Shock Waves, Great Keppel Island, Australia, July 20-25, 1997. Paper 2660.
266. Gavrioliok V.N., Denisov O.P., Nakonechny V.P., Odintsov E.V., Sergienko A.A., Sobachkin A.A. Numerical Similation of Working Processes in Rocket Engine Combustion Chamber . IAF-93-S.463, October, 1993, Graz, Austria.
267. Gidaspov V.Yu., Golubev V.K, Severina N.S. A Software package for simulation of unsteady flows of the reacting gas in the chanel. Вестник Южно-уральского государственного университета. Серия: Математическое моделирование и программирование, 2016, Т. 9, № 3, С. 94-104.
268. Gidaspov V.Yu., Ivanov I.E., Pirumov U.G., Strel'tsov V.Yu., Khohlov A.V. Numerical simulation of reacting flows for propulsion systems. Procceding of conference of Physics of Shock Waves, Combustion, Detonation and Non-Equilibrium Processes. Soloukhin Memorial. 12-17 November, 2005,12 с.

269. Gidasov V.Yu., Losev S.A., Severina N.S. Nonequilibrium Kinetics in Oxygen Dissociation Behind a Shock Wave Front. *Mathematical Models and Computer Simulations*. 2010, Vol. 2, No. 2, pp. 211–221.
270. Golub V.V., Baklanov D.I., Bazhenova T.V., Golovastov S.V., Ivanov M.F., Laskin I.N., Semin N.V., Volodin V.V. Experimental and numerical investigation of hydrogen gas auto-ignition *International Journal of Hydrogen Energy*. 2009. T. 34. № 14. C. 5946-5953.
271. Desyatov A.V., Kubyskin A.P., Cherkasov S.G. Simplified approach to the calculation of variation of composition of liquid mixture under conditions of its isothermal evaporation. *High Temperature*. 2009. T. 47. № 2. C. 299-301.
272. Faeth G.M.- Evaporation and combustion of sprays.- *Prog. Energy Combust. Sci.* Vol. 9, 1983, N 1/2, pp. 1-76.
273. B.Franzelli, E.Riber, M.Sanjósé, T.Poinsot. A two-step chemical scheme for kerosene–air premixed flames. *Combustion and Flame*, Elsevier, 2010, 157 (7), pp.1364-1373.
274. *Fundamental Data Obtained From Shock-Tube Experiments*. Editor A.Ferri. Pergamon Press, 1961
275. Gubaidullin D.A., Tukmakov D.A. Influence of the disperse phase properties on characteristics of the shock wave passing the direct shock from pure gas in the gas mixture *Russian Aeronautics*. 2017. T. 60. № 3. C. 457-462.
276. Harten A. High Resolution Schemes for Hyperbolic Conservation Laws.- *J. Corp. Phys.*, 49, 357-393, 1983.
277. Harten A., Osher S. Uniformly high-order accurate nonoscillatory schemes. . *SIAM Journal Numer. Anal.*, 1987, № 2, pp. 279-309.
278. Henderson C.B. Drag coefficient of spheres in continuum and rarefied flows.- *AIAA J*, 1967, v. 14, N 6, pp. 707 - 708.
279. Holden M.S, Wieting A.R. Moselle J.R and Glass C. Studies of Aerothermal Loads Generated in Regions of Shock/Shock Interaction in Hypersonic Flow, *AIAA Paper 88-0477*, Jan. 1988.
280. Kailasanath K., Oran E.S. Ignition of Flameless behind Incident Shock Waves and the Transition to Detonation.- *Ccnb. Sci. Tech.*, 34 345-362, 1983.
281. Korobeinikov V.P., Levin V.A., Markov V.V., Chernyi G.G. Propagation of blast waves in a combustible gas. *Acta Astronautica*. 1972. Vol. 17. № 5-6. P. 529-537.
282. Krulle G., Gavriliouk V., Schley C.-A. and Sobachkin A. Numerical simulation

- technology of aerodynamic processes and its applications in rocket engine problems . 45th Congress of the Int. Astronautical Federation, Jerusalem, Israel, October 9-14, 1994, IAF-94-S2.414, p.1-12.
283. K.H. Liew, E. Urip, S.L. Yang, C.J. Marek An Interactive Microsoft Excel Program for Tracking a Single Evaporating Droplet in Crossflow . NASA/TM-2004-212910.
284. Lister D. ICAO Engine Exhaust Emission Data Bank, update 2003, based on ICAO doc 9646, 1995.
285. Liu X.-D., Osher S., Chan T. Weighted essentially non-oscillatory schemes, . Journal of Computation Physics, 1994, №1, pp.200-212.
286. Marconi F., Rudman S., Calia V. One Dimensional Unsteady Two-Phase Flows with Shock Waves.- AIAA Paper 80-1448,1980,1-15.
287. Mullinz BP. Studies on the Spontaneous Ignition of Fuels Injected into a Hot Air Stream . Fuel. 1953. V. 32.
288. Nishiwaki N. Kinetics of Liquid Combustion Processes: Evaporation and Ignition Lag of Fuel Droplets .5th Symp. (Int.) on Combustion. 1955. P. 148.
289. Oran E.S., Young T.R., Boris J.P., Coxen A. Weak and Strong Ignition: I, Numerical Simulation of Shock Tube Experiments, Comb. Flame, 48, 135-148, 1982.
290. Oran E.S., Boris J.P. Weak and Strong Ignition: II, Sensitivity of the Hydrogen-Oxygen System, Comb. Flame, 48, 145-161, 1982.
291. Prelic D et al. Cryogenic Rocket Calorimeter Chamber Experiments and Heat Transfer Simulations . AIAA 98-3440.
292. Roberts R., Aceto L.D., Kollrak R. et al. An Analytical Model for Nitric Oxide Formation in a Gas Turbine Combustor . AIAA Journal, 1972, v.10, №6, p.820-826.
293. Roe P. L. Approximate Riemann Solvers, Parameter Vectors and Different Schemes. J. Comput. Phys., 1981, v.43,N 2, 357-372.
294. P.L. Roe. Some contributions to the modelling of discontinuous. Lect. Notes Appl. Math., 22 163–193, 1985
295. Shang H.M. et al. Investigation of Chemical Kinetics Integration Algorithms for Reacting Flows . AIAA Paper 95-0806, 1995.
296. Sod G. A' Survey of Several Finite Difference Methods Systems of Nonlinear Hyperbolic Conservation Laws.- J. Comput. Phys,v. 27, 1978, pp. 1-31.
297. Sriram V., Steele W.G. Temperature distribution and nitrous oxide formation in the non-adiabatic combustion of fuel oil . AIAA Paper, 1982, №882, p.1-8.

298. Thomas G.O., Ward S.M., Williams R.Li., Bambrey R.J. On critical conditions for detonation initiation by shock reflection from obstacles. *Shock Waves*, 2002, №12, pp. 111-119.
299. Tsuboi T., Hashimoto K. Shock Tube Study on Homogeneous Thermal Oxidation of Methanol. *Comb, and Flame*. 19.81. V. 42. P. 61.
300. Volkov V.A. and Gidasпов V.Yu. Numerical simulation of initiating detonation with the help of strong shock waves/ Proceeding of the second Japan-Soviet Union joint symposium on computational fluid dynamics.- Tsucuba: Univercity of Tsucuba, 1991, Vol 2, pp. 80-88.
301. Vinogradov A.V., Volkov V.A., Gidasпов V.Yu., Muslaev A.V., Rozovsky P.V. Numerical simulation nonequilibrium condensation during unsteady expansion of gas cloud into closed vacuum chamber. 1st International Conference on Nonequilibrium Processes in Nozzles and Jets, 26-30 June, 1995, Moscow, Russia, p.155-158.
302. Westbrook C.K., Dryer F.L. A Comprehensive Mechanism for Methanol Oxidation. *Comb. Sci. and Tech*. 1979. V. 20. P. 125.
303. Wyslouzil B.E, Heath C.H., Cheung J.L., Wilemski G. Binary condensation in a supersonic nozzle *J. Chem. Phys.*, Vol. 113, No. 17, 2000, pp. 7317-7329.
304. Yang J., Zombard C., Bershades D. A Characteristic Flux Difference Splitting for the Hyperbolic Conservation Zaros of Inviscid Gasdinamics. AIAA-83-0040, 1983.

Зарегистрированные объекты интеллектуальной собственности. Программы для ЭВМ

305. Гидаспов В.Ю. № 2010617711 от 20.09.2010 г. Расчёт равновесного состава смеси совершенных газов при заданных плотности и внутренней энергии.
306. Гидаспов В.Ю. № 2011610174 от 08.10.2010 г. Расчёт воспламенения горючей газовой смеси в камере постоянного объема.
307. Гидаспов В.Ю. № 2011619241 от 05.10.2011 г. Расчет равновесной детонационной адиабаты горючих газовых смесей.
308. Гидаспов В.Ю. № 2011619242 от 05.10.2011 г. Моделирование движения и тепломассообмена частиц в двумерном газовом поле.
309. Гидаспов В.Ю. № 2012618917 от 02.08.2012 г. Равновесный расчет камеры сгорания жидкостного ракетного двигателя.

310. Гидаспов В.Ю. № 2012618882 от 02.08.2012 г. Моделирование нестационарного течения, возникающего после распада разрыва в равновесно реагирующем многокомпонентном газе.
311. Гидаспов В.Ю. № 2013617749 от 25.06.2013 г. Программный комплекс для моделирования химически неравновесного течения в сопле ЖРД.
312. Гидаспов В.Ю., Северина Н.С. № 2013617251 от 25.06.2013 г. Программный комплекс для моделирования квазиодномерных нестационарных течений нереагирующего газа с явным выделением сильных разрывов.
313. Гидаспов В.Ю. № 2016662644 от 26.09.2016 г. Программа моделирования квазиодномерного стационарного равновесного течения в сопле детонационного двигателя.
314. Гидаспов В.Ю. № 2018610909 от 20.11.2017 г. Программа расчета равновесных функций распределения по размерам конденсирующейся компоненты в смеси совершенных газов.
315. 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.