

*На правах рукописи*



**Москаленко Ольга Александровна**

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕТОНАЦИИ  
ГАЗОКАПЕЛЬНЫХ СМЕСЕЙ В КАНАЛАХ**

Специальность 01.02.05 – «Механика жидкости, газа и плазмы»

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

**Москва – 2016**

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

- Научный руководитель:** **Гидаспов Владимир Юрьевич,**  
кандидат физико-математических наук, доцент
- Официальные оппоненты:** **Голуб Виктор Владимирович,**  
доктор физико-математических наук,  
профессор, заведующий отделом физической газовой динамики Объединенного института высоких температур РАН
- Загордан Надежда Леонидовна,**  
кандидат физико-математических наук,  
научный сотрудник ФИЦ «Информатика и управление» РАН
- Ведущая организация:** Государственный научный центр Российской Федерации федеральное государственное унитарное предприятие «Исследовательский центр имени М.В. Келдыша»

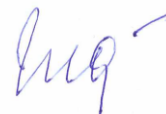
Защита состоится \_\_\_\_\_ 2016 года в \_\_\_\_ часов на заседании диссертационного совета Д212.125.14 Московского авиационного института по адресу: 125993, г. Москва, А-80, ГСП-3, Волоколамское шоссе, д. 4.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Московского авиационного института по адресу: 125993, г. Москва, А-80, ГСП-3, Волоколамское шоссе, д. 4. или на сайте МАИ по ссылке: [https://www.mai.ru/events/defence/index.php?ELEMENT\\_ID=74096](https://www.mai.ru/events/defence/index.php?ELEMENT_ID=74096)

Автореферат разослан \_\_\_\_\_ 2016 г.

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

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



Гидаспов В.Ю.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность темы.** Систематическое экспериментальное и теоретическое изучение детонации началось в конце 19 века. С пятидесятих годов 20 века активно развивается теория многомерной детонации газовых, газокапельных и газодисперсных смесей. Большой научный и практический интерес к изучению высокоскоростного горения и детонации газокапельных горючих смесей связан как с необходимостью создания систем взрывобезопасности, направленных на подавление детонации (при взрывах на угольных шахтах, в промышленности при образовании реагирующих пылей, в двигателях внутреннего сгорания, на атомных станциях и др.), так и с желанием научиться управлять детонационным горением при создании перспективных технологических и энергетических установок (установки детонационно-газового напыления, объемные взрывы, прямоточные воздушно-реактивные двигатели, перспективные двигатели, использующие энергию нестационарных и стационарных детонационных волн).

В настоящее время в России и за рубежом проводятся интенсивные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования высокоскоростного горения и детонации газовых, газокапельных и газодисперсных смесей. Результаты подобных работ представлены в авторитетных журналах, на большом числе международных симпозиумов, конференций и семинаров, отражены в ряде монографий. В связи с бурным развитием в последние 30 лет вычислительной техники численное моделирование, как альтернатива и дополнение к экспериментальным исследованиям, стало необходимым этапом научных исследований и конструкторских разработок. Причем, в тех случаях, когда используются хорошо апробированные математические модели и вычислительные алгоритмы, дополнительная информация, получаемая с помощью численного моделирования, не уступает по надежности экспериментальным данным и превосходит последние по своей полноте.

Необходимо отметить, что задача моделирования высокоскоростного горения и детонации газокапельных смесей 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 детонации газокапельных смесей.

**Целью** диссертационной работы является разработка физико-математической модели, вычислительных алгоритмов и комплекса программ для моделирования волн детонации и дефлаграции в газокапельных смесях в каналах.

**Методы исследования.** Основным методом исследования является математическое моделирование.

**Научная новизна.** В диссертационной работе получены следующие новые результаты:

1. Предложена уточненная универсальная физико-математическая модель высокоскоростных течений многокомпонентного газа и капель жидкости для случая равновесных и неравновесных, описываемых многостадийными кинетическими механизмами, химических превращений в газовой фазе, в которых участвуют как вещества, входящие в состав газа, так и продукты испарения капель.

2. Разработан эффективный вычислительный алгоритм совместного решения одномерных уравнений физической газовой динамики, сопротивления и тепломассообмена капель жидкости с многокомпонентным газом при наличии газофазных химических превращений, описываемых многостадийными кинетическими механизмами.

3. Численно решена задача о стационарных волнах детонации и дефлаграции в канале в горючей смеси, состоящей из многокомпонентного реагирующего газа и испаряющихся капель. Рассчитаны равновесные адиабаты и структура волн детонации в горючих газовых смесях (водород-кислород-аргон, водород-воздух, метан-воздух) с добавлением капель воды и горючих газочапельных смесях метанола и керосина с воздухом.

4. Получены коэффициенты, входящие в аппроксимационные формулы температурной части потенциала Гиббса для жидкого и газообразного состояния углеводородных горючих сложного состава (бензина, керосина и дизельного топлива), моделируемого в рамках модели однокомпонентной жидкости.

5. Расчетным путем получена нестационарная картина инициирования детонации в газочапельной керосино-воздушной смеси падающей ударной волной.

**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 (в которых реализуются высокоскоростные течения, в том числе с детонацией или дефлаграцией), а также в качестве элемента в составе комплексов программ многомерного моделирования. Предложенные в диссертации методики математического моделирования позволяют рассчитывать для газовых и газочапельных топлив произвольного состава: скорости волн детонации и дефлаграции, а также состав продуктов сгорания, температуру, давление и др., в том числе и в режиме Чепмена-Жуге; определять задержку воспламенения и тонкую структуру волн детонации, вплоть до выхода системы 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 в период с 2006 по 2014 гг. на научных семинарах по физической газовой динамике, руководителем которых был У.Г. Пирумов, а также на XV, XVIII и XIX Международных конференциях по Вычислительной механике и современным прикладным программным системам (2007-2015 гг.); на VII, IX, X, XI Международных конференциях по неравновесным процессам в соплах и струях (2008-2016 гг.); на Международных научно-практических конференциях Воскресенского филиала НОУ ВПО «Российский Новый Университет» (2013 -2015 гг.).

**Личный вклад.** Соискатель принимал непосредственное участие в постановке задач, разработке вычислительных программ, проведении расчетов, их обработке и анализе, а также подготовке статей и докладов на конференциях. Соискателем реализованы используемые численные методы решения задачи, проведены вычислительные эксперименты и выполнен анализ полученных расчетных данных. Все положения диссертации, выносимые на защиту, получены соискателем самостоятельно.

**Публикации.** Основные результаты диссертации опубликованы в 15 работах, включая 3 статьи в журналах, входящих в перечень ВАК, и в 12 статьях и тезисах докладов в материалах тематических конференций.

**Структура и объем работы.** Работа состоит из введения, четырех глав, заключения. Полный объем диссертации составляет 144 страницы с 63 рисунками и 6 таблицами. Список литературы состоит из 232 наименований.

## СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

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

**В первой главе** представлен обзор литературы по теме диссертации.

**Во второй главе** представлена физико-математическая модель газочапельных течений в каналах при наличии испарения и газочапельных химических реакций, описаны использованные в работе численные методы и вычислительные алгоритмы. Считается, что в выражениях для гидродинамических потоков вещества, импульса и энергии можно пренебречь слагаемыми, описывающими диффузию, вязкость и теплопроводность, и ограничиться только слагаемыми, описывающими конвективный перенос. Вязкость, теплопроводность и диффузия могут, тем не менее, существенно влиять на процессы, происходящие в непосредственной окрестности поверхности частиц, поэтому их необходимо учитывать в слагаемых, описывающих взаимодействие несущей и дисперсной фаз друг с другом.

Течение двухфазной смеси в каналах с пологими стенками можно рассматривать в рамках квазиодномерного приближения. Уравнения, описывающие течение многокомпонентного реагирующего газа в областях

непрерывности течения, при сделанных предположениях записываются в следующем виде:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho F + \frac{\partial}{\partial x} \rho u F = MF ; \quad (1)$$

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

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \left( e + \frac{u^2}{2} \right) F + \frac{\partial}{\partial x} \rho u \left( e + \frac{p}{\rho} + \frac{u^2}{2} \right) F = EF ; \quad (3)$$

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

Здесь  $M, I, E$  - слагаемые, учитывающее массообмен, тепловое и механическое взаимодействия газа с частицами,  $N$  - число газообразных компонентов в смеси,  $\rho, p, e, \gamma_i$  - плотность, давление, внутренняя энергия и мольно-массовые концентрации,  $F$  - площадь канала,  $W_i$  - число молей  $i$ -ого вещества, образующегося в единице объема в единицу времени за счет протекания химических реакций и фазовых переходов.

Для описания диспергированной фазы, применяется следующая система уравнений:

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

$$\frac{\partial}{\partial t} n_s m_s F + \frac{\partial}{\partial x} n_s u_s m_s F = -MF ; \quad (6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} n_s m_s u_s F + \frac{\partial}{\partial x} n_s m_s u_s^2 F = -IF ; \quad (7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} n_s m_s F \left( e_s + \frac{u_s^2}{2} \right) + \frac{\partial}{\partial x} n_s u_s m_s F \left( e_s + \frac{u_s^2}{2} \right) = -EF . \quad (8)$$

Здесь  $n_s, m_s, e_s, u_s$  - число капель в единице объема, масса, внутренняя энергия, скорость капель, соответственно.

Системы уравнений, описывающие совместное течение газа и частиц, связаны через правые части, учитывающие взаимное влияние фаз, выражения для которых имеют вид:

$$M = -n_s \dot{m}_s ; \quad (9)$$

$$I = -n_s (\dot{m}_s u_s + m_s \dot{u}) ; \quad (10)$$

$$E = -n_s \left( \dot{m}_s \left( e_s + \frac{u_s^2}{2} \right) + m_s \left( \dot{e}_s + u_s \dot{u}_s \right) \right) . \quad (11)$$

Здесь  $\dot{u}_s, \dot{m}_s, \dot{e}_s$  - выражения, описывающие скорость изменения скорости, массы и внутренней энергии капли.

Для замыкания системы уравнений используют термические и калорические уравнения состояния для смеси совершенных газов, с соответствующим им выражением для потенциала Гиббса:

$$G(p, T, \gamma) = \sum_{i=1}^N \gamma_i [RT \ln(p \gamma_i / P_0 \sum_{j=1}^N \gamma_j) + G_i^0(T)] , \quad (12)$$

где  $R = 8.3144 \text{ Дж}/(\text{моль}\cdot\text{К})$  - универсальная газовая постоянная,  $P_0 = 101325 \text{ Па}$  - стандартное давление,  $G_i^0(T)$  - известные функции, стандартные молярные потенциалы Гиббса отдельных компонентов.

Потенциал Гиббса жидкости считается зависящим от температуры и давления:

$$G_s(p, T) = \frac{1}{\mu_s} \left( G_s^0(T_s) + \frac{1}{\rho_s(T)} (p - P_0) \right). \quad (13)$$

Здесь  $\mu_s, \rho_s$  - молекулярный вес, плотность жидкости, соответственно.

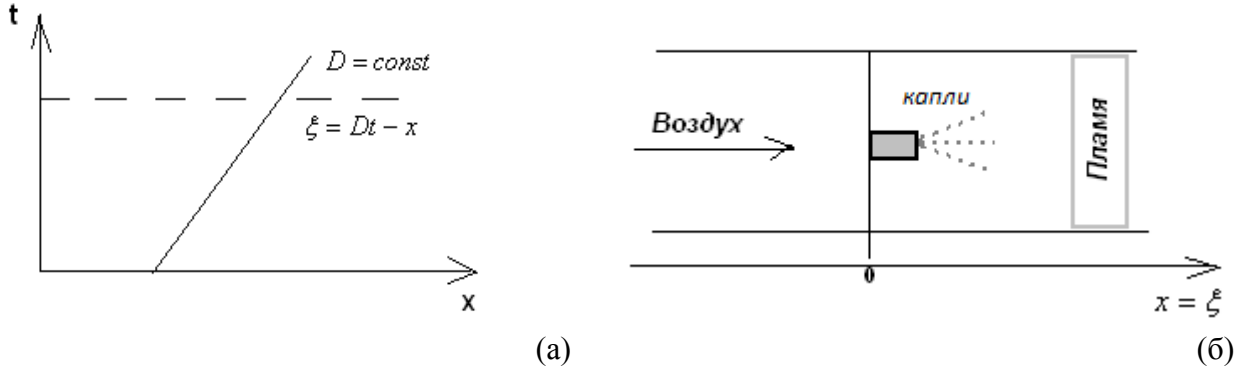


Рис. 1. (а) Стационарная ударная волна; (б) Случай впрыска частиц

Течение за ударной волной (УВ), распространяющейся по смеси с постоянной скоростью  $D$ , является автомодельным с координатой:  $\xi = Dt - x$  (расстояние от ударной волны до рассматриваемой точки  $x$ ,  $t$  - время) (рис. 1а),  $v = D - u$ ,  $v_s = D - u_s$  - скорость газа и частиц относительно УВ, а индексом “0” обозначить параметры перед УВ. Тогда из системы уравнений (1) - (11) можно получить следующую систему дифференциально - алгебраических уравнений:

$$\rho v + n_s m_s v_s = \rho_0 v_0 + n_{s0} m_{s0} v_{s0}; \quad (14)$$

$$\rho v + p + n_s m_s v_s^2 = \rho_0 v_0^2 + p_0 + n_{s0} m_{s0} v_{s0}^2; \quad (15)$$

$$\rho v \left( e + \frac{p}{\rho} + \frac{v^2}{2} \right) + n_s m_s v_s \left( e_s + \frac{v_s^2}{2} \right) = \rho_0 v_0 \left( e_0 + \frac{p_0}{\rho_0} + \frac{v_0^2}{2} \right) + n_{s0} m_{s0} v_{s0} \left( e_{s0} + \frac{v_{s0}^2}{2} \right); \quad (16)$$

$$n_s v_s = n_{s0} v_{s0}; \quad (17)$$

$$\frac{d\rho v \gamma_i + n_s m_s v_s \gamma_{is}}{d\xi} = W_i, \quad i = 1, \dots, N; \quad (18)$$

$$v_s \frac{dm_s}{d\xi} = \dot{m}_s = W_s \mu_s / n_s; \quad (19)$$

$$v_s \frac{du_s}{d\xi} = \dot{u}_s; \quad (20)$$

$$v_s \frac{dm_s h_s}{d\xi} = \dot{H}_s, \quad (21)$$

где  $h_s, \gamma_{is}$  - энтальпия, число молей  $i$ -ого вещества в килограмме массы частицы, соответственно;  $\dot{H}_s$  - выражение, описывающее скорость изменения энтальпии.

Начальные условия для системы обыкновенных дифференциальных уравнений (19)-(21) задаются непосредственно за ударной волной. При переходе через ударную волну остаются неизменными масса, скорость и температура частиц, а также состав газовой смеси.

$$\gamma_i(0) = \gamma_{i1} = \gamma_{i0}, m_s(0) = m_1 = m_{i0}, u_s(0) = u_{s1} = u_{s0}, H_s(0) = H_{s1} = H_{s0}. \quad (22)$$

При решении системы (14)-(21) предполагается, что двухфазная смесь перед ударной волной находится в состоянии скоростного и температурного равновесия:

$$u_{v0} = u_{i0} = u_0, W_i \approx 0, \dot{u}_s = 0, \dot{m}_s \approx 0, \dot{H}_s = 0. \quad (23)$$

В случае впрыска частиц (рис. 1б)  $\xi \equiv x$ ,  $v \equiv u$ ,  $v_s \equiv u_s$ , индексом “0” обозначены параметры в сечении впрыска, которые являются начальными условиями для (14)-(21).

Необходимо отметить, что система (14)-(21) содержит особенность, т.е. существуют значения скорости  $v_0$ , при которых она не имеет решения (“режим запирания”). Точки Чепмена-Жуге детонации и дефлаграции являются, соответственно, минимальным значением скорости детонации и максимальным значением скорости дефлаграции.

Кинетический механизм газозафазных реакций полагается многостадийным и состоящим из обратимых реакций.

$$\sum_{i=1}^N \vec{v}_i^{(r)} M_i \Leftrightarrow \sum_{i=1}^N \bar{v}_i^{(r)} M_i, \quad r = 1, \dots, N_r, \quad (24)$$

здесь  $r$  - номера стадий,  $\vec{v}_i^{(r)}$  - стехиометрические коэффициенты,  $M_i$  - символы молекул или атомов химических компонентов. Стехиометрические коэффициенты являются неотрицательными числами: целыми в случае реальных химических реакций, вещественными - в случае “брутто” реакций.

С целью согласования кинетики типа (24) с термодинамикой, описываемой потенциалом Гиббса вида (12), использовалась связь между константами скоростей каждой пары взаимобратных реакций через константу равновесия.

Процесс испарения описывался “реакцией фазового перехода”:

$$M_s^L \Leftrightarrow M_s^V, \quad \text{соответственно } W_s = \dot{m}_s n_s / \mu_s. \quad (25)$$

Используемые в работе модели сопротивления ( $\dot{u}_s$ ) и тепломассообмена ( $\dot{m}_s, \dot{H}_s$ ) подробно описаны в [1-3].

Для интегрирования жесткой системы обыкновенных дифференциальных уравнений (18)-(21) использовался модифицированный метод У.Г. Пирумова, на каждой итерации которого решалась система нелинейных алгебраических уравнений (14)-(17) (в случае отсутствия решения вырабатывался код диагностики “режима запирания”). Метод интегрирования обеспечивал точное выполнение законов сохранения элементов ( $C, H, O, N$ ) для газочапельной смеси.

При расчете равновесных детонационных и дефлаграционных адиабат (с определением точек Чепмена-Жуге) решалась система нелинейных



алгебраических уравнений, включающая уравнения типа Ренкина-Гюгонио и систему уравнений химического равновесия.

В третьей главе исследовано влияние капель воды на параметры и структуру стационарной детонационной волны (ДВ) в горючих смесях: водород-кислород-аргон, водород-воздух, метан-воздух и детонация метанола-воздушной газочапельной горючей смеси.

В разделе 3.1.1 исследовались влияние капель воды на параметры и тонкую структуру стационарных детонационных волн в водородо-кислородных смесях, разбавленных аргонном. Получены режимы течения с полным испарением капель воды и с установлением двухфазного равновесия.

Исследовалось влияние степени разбавления горючей смеси аргонном и отношения начальной массы капель воды к массе газа ( $m_{H_2O}/m_T$ ) на значение минимальной скорости ДВ. Расчеты показывают, что кинетика испарения и механизм химических превращений существенно влияют на значение минимальной скорости детонации. Минимальная скорость детонации газочапельной смеси совпадает со скоростью детонации Чепмена-Жуге при близкой к нулю массовой доле капель (рис. 2) и существенно отличается – при увеличении массовой доли капель.

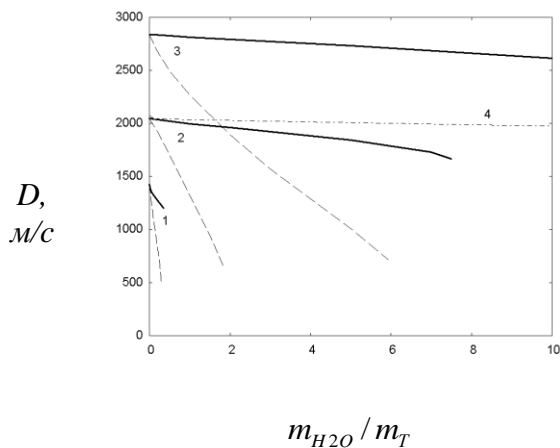


Рис. 2. Зависимость минимальной скорости ДВ от отношения массы жидкости к массе газа в исходной смеси. Двухфазный расчет (сплошная линия – капли диаметром 10 мкм, штрих-пунктир – 20 мкм); равновесный расчет – пунктир. 1-  $0.1H_2 + 0.05O_2 + 0.85Ar$ ; 2, 4 -  $0.4H_2 + 0.2O_2 + 0.4Ar$ ; 3 -  $0.6H_2 + 0.3O_2 + 0.1Ar$

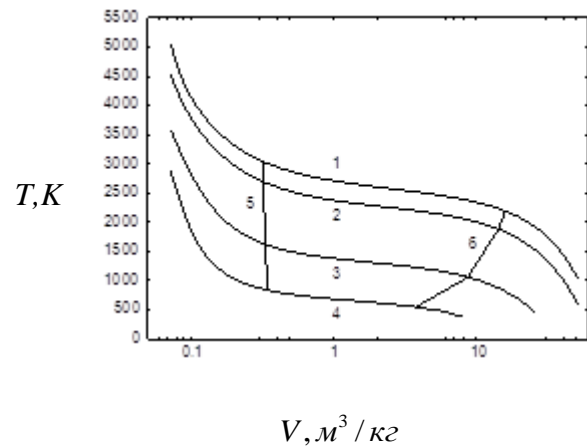


Рис. 3. Зависимость температуры от удельного объема при различных отношениях массы капель к массе топлива (1 – 0; 2 – 0.1; 3 – 0.5; 4 – 1.0). Линии 5 и 6 соединяют точки Чепмена-Жуге детонации и дефлаграции.

Пунктирные кривые на рис. 2 соответствуют скорости детонации Чепмена – Жуге, найденной из системы (14)-(21) при предположении о полном испарении капель воды и установлении состояния термодинамического равновесия. Точка окончания данных кривых соответствует равенству температуры за ДВ температуре перед ДВ. При малых значениях диаметров капель имеется предельное значение массовой доли воды, при которой существует минимальная скорость ДВ. Так для смеси  $0.1H_2 + 0.05O_2 + 0.85Ar +$

капли воды 10 мкм максимальное отношение –  $m_{H_2O}/m_T = 0.35$ , для смеси  $0.4H_2 + 0.2O_2 + 0.4Ar$  + капли воды диаметром 10 мкм –  $m_{H_2O}/m_T = 7.5$ . При диаметрах капель порядка 100 мкм минимальная скорость ДВ существует при всех рассмотренных значениях  $m_{H_2O}/m_T$  от 0 до 20. Необходимо отметить, что данный факт крайне важен при построении систем подавления детонации. Минимальную скорость детонации можно рассматривать как предельную, к которой стремится скорость нестационарной ДВ в газодисперсной смеси, т.е. газодинамика процесса такова, что образовавшаяся в результате произвольного процесса пересжатая ДВ, ослабевая, выходит на режим распространения со скоростью, близкой к минимальной. Отсутствие минимальной скорости детонации свидетельствует о том, что ДВ будет ослабевать до тех пор, пока не перейдет в звуковую волну. Таким образом, впрыск капель воды малого диаметра в достаточном количестве приводит к затуханию ДВ в каналах, а большого диаметра - нет.

В разделе 3.1.2 рассматривалась стехиометрическая водородо-воздушная смесь с добавлением капель воды. Продукты сгорания моделировались девятью компонентами  $H_2$ ,  $OH$ ,  $H_2O$ ,  $O_2$ ,  $H_2O_2$ ,  $H_2O$ ,  $N_2$ ,  $H$ ,  $O$ . Изучалось влияние на значения параметров в точках Чепмена-Жуге детонации и дефлаграции отношения массы капель воды к массе водородо-воздушной смеси ( $m_{H_2O}/m_T$ ) в начальном составе. Показано, что добавление капель воды приводит к уменьшению скорости детонации Чепмена-Жуге и температуры. При равенстве масс воды и водородо-воздушной смеси температура продуктов сгорания уменьшается более чем в 3 раза по сравнению с чисто газодисперсной горючей смесью (рис. 3).

Были проведены расчеты детонации стехиометрической водородо-воздушной горючей смеси с добавлением капель воды в многофазной неравновесной постановке при стандартных условиях ( $p = 1 \text{ атм.}$ ,  $T = 298.15 \text{ К}$ ). Получены различные режимы воспламенения горючей смеси в зависимости от соотношения длин испарения капель. В частности, для капель воды диаметром 1 мкм обнаружено увеличение длины воспламенения в 100 раз при изменении содержания капель в смеси на 0.4% (рис. 4).

Было проведено исследование влияния капель воды на параметры детонации Чепмена-Жуге. С увеличением массовой доли капель наблюдается снижение скорости детонации Чепмена-Жуге и температуры смеси. Аналогичная тенденция наблюдается и при уменьшении диаметра капель при фиксированной массовой доле. Обнаружено, что для диаметров капель менее 50 мкм существует предельная массовая доля капель, начиная с которой, решение рассматриваемой системы существует при всех рассмотренных режимах, и детонация Чепмена-Жуге отсутствует. Также необходимо отметить, что скорость детонации Чепмена-Жуге и температура смеси при наличии капель выше чем, рассчитанная в идеальной постановке с полным испарением капель (рис. 5).

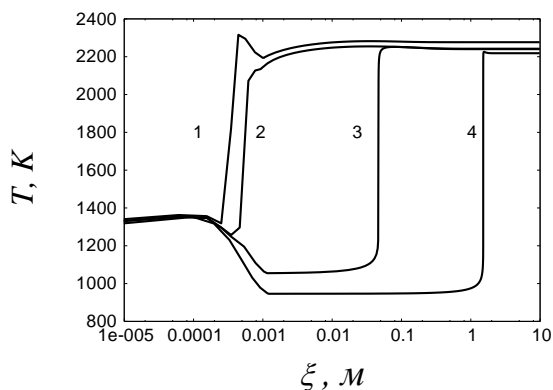


Рис. 4. Смена режимов воспламенения. Зависимость температуры в волне Чепмена-Жуге от продольной координаты при различных отношениях массы капель к массе топлива (1 – 0.230; 2 – 0.239; 3 – 0.240; 4 – 0.250). Диаметр капель воды – 1 мкм

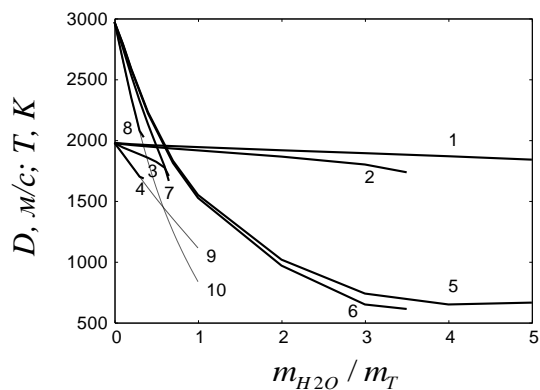


Рис. 5. Зависимость скорости детонации Чепмена-Жуге (1-4,9) и температуры (5-8,10) от отношения массы капель к массе топлива при различных диаметрах капель (100 мкм – 1,5; 50 мкм – 2,6; 10 мкм – 3, 7; 1 мкм – 4,8). Линии 9 и 10 соответствуют идеальному расчету

В разделе 3.1.3 исследовалось влияние капель воды на параметры детонации и дефлаграции метано-воздушных горючих смесей. Рассматривалась стехиометрическая метано-воздушная горючая смесь с добавлением капель воды в предположении, что капли воды полностью испарились, и достигнуто состояние термодинамического равновесия. Продукты сгорания моделировались двенадцатью компонентами:  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $CH_3$ ,  $CH_4$ ,  $HCO$ ,  $H_2$ ,  $OH$ ,  $H_2O$ ,  $O_2$ ,  $N_2$ ,  $H$ ,  $O$ . Изучалось влияние  $m_{H_2O}/m_T$  на значения параметров в точках Чепмена-Жуге детонации и дефлаграции. При изменении от 0 до 1 температура продуктов сгорания в состоянии Чепмена-Жуге изменялась от 2800 К до 600 К при детонации (кривая 2 рис. 6) и от 2000 К до 500 К при дефлаграции. В состав продуктов сгорания в основном входили азот, вода и углекислый газ, при  $m_{H_2O}/m_T < 0.2$  в заметных концентрациях присутствовали кислород, угарный газ, водород и радикал  $OH$ . Необходимо отметить слабую зависимость от  $m_{H_2O}/m_T$  давления и наличие точки минимума на графике скорости при  $m_{H_2O}/m_T \approx 0.4$  при дефлаграции (рис. 7).

Были проведены расчеты детонации стехиометрической метано-воздушной горючей смеси с добавлением капель воды в многофазной неравновесной постановке при стандартных условиях ( $p = 1 \text{ атм}$ ,  $T = 298.15 \text{ К}$ ). В расчетах использовался упрощенный механизм горения стехиометрической смеси метана и воздуха, включающий 18 обратимых стадий. Варьировались массовая доля капель воды и начальный диаметр капель. В случае, когда температура за ударной волной (рис. 8) превышает температуру самовоспламенения горючей смеси, начинают конкурировать два процесса: химические реакции, в результате которых происходит выделение тепла, и испарение капель воды, приводящее к поглощению тепла. Если тепла выделяется больше, чем поглощается, то вблизи ударной волны происходит воспламенение горючей смеси (кривые 1-3). После воспламенения при переходе системы к равновесному состоянию тепловыделение уменьшается, и

из-за испарения температура смеси уменьшается по сравнению со случаем воспламенения чисто газовой горючей смеси (кривая 0). Кривая 4 соответствует случаю, когда потери тепла за счет испарения вблизи ударной волны превосходят приток тепла за счет химических реакций. В этом случае температура смеси снижается. Если уровень температуры после полного испарения каплей превышает температуру самовоспламенения смеси, то воспламенение и полное сгорание смеси происходит (кривая 4).

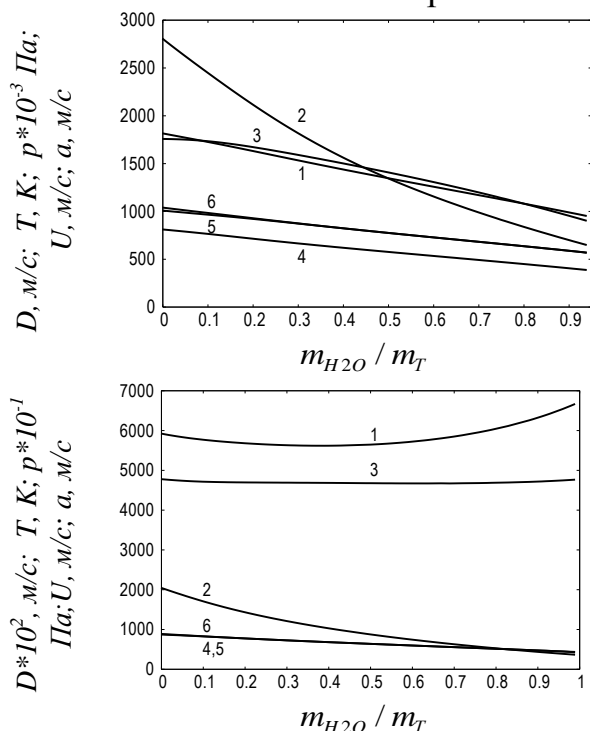


Рис. 6. Зависимость параметров течения в точке Чепмена-Жуге от отношения масс воды и газовой смеси (1 - Скорость ДВ Чепмена-Жуге, 2 - температура, 3 - давление ( $\cdot 0.001$ ), 4 - скорость потока, 5 - равновесная скорость звука, 6 - замороженная скорость звука)

Рис. 7. Зависимость параметров течения в точке Чепмена-Жуге дефлаграции от отношения масс воды и газовой смеси (1 - начальная скорость потока Чепмена-Жуге ( $\cdot 100$ ), 2 - температура, 3 - давление ( $\cdot 0.1$ ), 4 - скорость потока, 5 - равновесная скорость звука, 6 - замороженная скорость звука)

Необходимо отметить, что в приведенном на рисунке случае, воспламенение наблюдается на расстоянии 2000 м от ударной волны, что к реальности, конечно, отношения не имеет, но в тоже время свидетельствует о работоспособности применяемых алгоритмов.

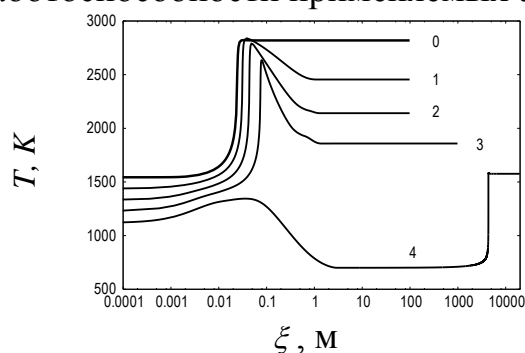


Рис. 8. Зависимость температуры продуктов сгорания в волне Чепмена-Жуге от продольной координаты при различных отношениях массы каплей к массе топлива (0 - 0; 1 - 0.1; 2 - 0.2; 3 - 0.3, 4 - 0.4),  $d_s = 50 \text{ мкм}$

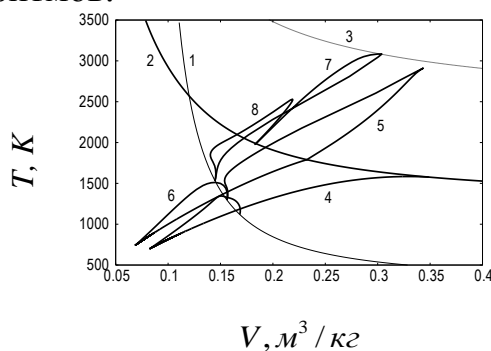


Рис. 9.  $V$ - $T$  диаграмма (вода/топливо=0.4). 1- ударная адиабата; 2 - детонационная адиабата; 3 - детонационная адиабата, соответствующая отсутствию каплей воды; 4 -  $D = 1436 \text{ м/с}$  - минимальная скорость при которой существует решение ( $d_s = 50 \text{ мкм}$ ); 5 -  $D = 1600 \text{ м/с}$ ,  $d_s = 50 \text{ мкм}$ ; 6 -  $D = 1600 \text{ м/с}$ ,  $d_s = 10 \text{ мкм}$ ; 7 -  $D = 1800 \text{ м/с}$ ,  $d_s = 50 \text{ мкм}$ ; 8 -  $D = 1800 \text{ м/с}$ ,  $d_s = 10 \text{ мкм}$

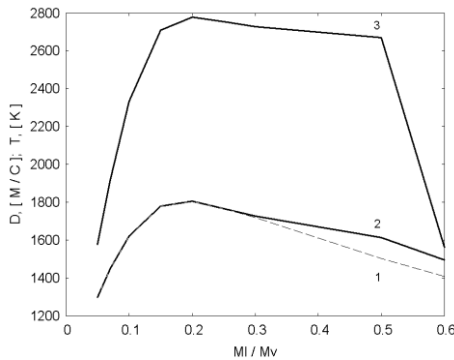
Рассмотрим поведение системы на фазовой плоскости  $V-T$  на примере расчета, выполненного для капель диаметром 10 и 50 мкм и  $m_{H_2O}/m_T = 0.4$  (рис. 9). Состоянию Чепмена-Жуге соответствует кривая 4, зависимости температуры газа как функции расстояния от ударной волны приведены на рис. 8, кривая 4. Первый сценарий. Фазовая траектория начинается на ударной адиабате, кривая 1 рис. 9, наблюдается рост плотности смеси, который сопровождается небольшим ростом, а затем существенным падением температуры; далее процесс идет с уменьшением плотности и ростом температуры, который заканчивается в точке на равновесной детонационной адиабате (кривая 2). Кривая 5 соответствует случаю пересжатой детонации ( $D=1600$  м/с), при этом поведение фазовой траектории существенно отличается от описанного выше. Второй сценарий. Сначала температура заметно возрастает практически при неизменном объеме, затем плотность уменьшается, а температура продолжает возрастать и приближается к температуре на равновесной детонационной адиабате горючей смеси при отсутствии капель (кривая 3); далее, из-за испарения капель плотность смеси растет, а температура уменьшается. Необходимо отметить, что для частиц диаметром 10 мкм при скорости детонационной волны 1600 м/с фазовая траектория соответствует первому сценарию развития событий. При скорости детонационной волны 1800 м/с и для частиц размером 10 мкм и для 50 мкм фазовые траектории соответствуют второму сценарию. В целом, второй сценарий изменения параметров можно интерпретировать как детонационную волну, первый сценарий - как срыв детонации, а промежуточные режимы - как возможность для развития галолирующей детонации.

В разделе 3.2 приводятся результаты моделирования детонации в газочапельной смеси метанола с воздухом. Для моделирования химических превращений использовалось 56 обратимых реакций. Варьировались начальный диаметр капель метанола в диапазоне от 5 до 50 мкм и отношение массы капель к массе воздуха от 5 до 50%.

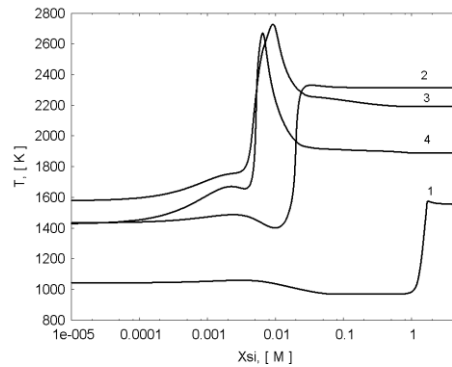
Минимальная скорость ДВ в газочапельной среде вплоть до массовых долей жидкой фазы  $M_l/M_v \approx 0.3$  практически совпадает со скоростью детонации Чепмена-Жуге, определенной в результате равновесного расчета (рис. 10а). В рассмотренном случае с испарением капель воды указанные скорости отличались уже при  $M_l/M_v = 0.02$ . 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.

Цифрой 1 помечены графики с недостаточным количеством горючего  $M_l/M_v = 0.05$ ; процесс воспламенения начинается после полного испарения капель (рис. 10б, 10г), при этом в процессе испарения температура падает до 900 К (рис. 10б); расстояние от ударной волны, на котором происходит воспламенение, равно 140 см (рис. 10б); скорость газа в волне воспламенения падает (рис. 10в), температура после воспламенения изменяется слабо и остается на уровне 1550 К. При  $M_l/M_v = 0.1$  точки воспламенения горючей

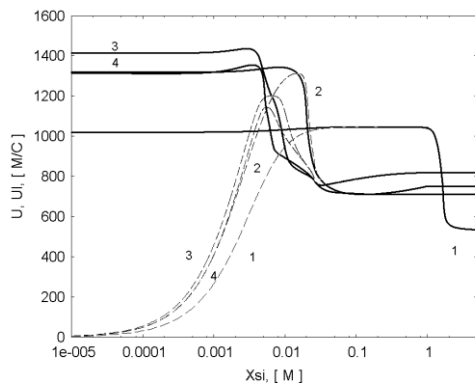
смеси и полного испарения каплей горючего практически совпадают. Наиболее интенсивному испарению каплей соответствует участок снижения температуры газовой фазы, предшествующий воспламенению (рис. 10б). При  $M_l/M_v = 0.3-0.4$ , воспламенение горючей смеси происходит тогда, когда капли горючего еще полностью не испарились (рис. 10б, 10г), 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 каплей в среду, где уже нет молекул окислителя (рис. 10б).



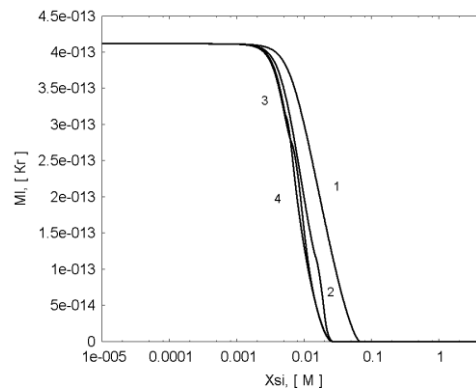
(а)



(б)



(в)



(г)

Рис. 10. Параметры детонации Чепмена-Жуге в смеси  $0.79N_2 + 0.21O_2$  + капли метанола ( $CH_3OH$ ) диаметром 10 мкм; (а) – скорость детонации Чепмена-Жуге (газофазная) – кривая 1, минимальная скорость ДВ (газочапельная смесь) – кривая 2, максимальная достигаемая температура – 2, в зависимости от отношения массы капель к массе воздуха; (б) распределение температуры, (в) – скорость газа- сплошная кривая и капель - пунктирная, (г) – масса капли; 1-  $M_l/M_v = 0.05$ , 2 -  $M_l/M_v = 0.1$ , 3 -  $M_l/M_v = 0.3$ , 4 -  $M_l/M_v = 0.5$

Рассмотрим поведение решения на фазовой плоскости  $V-T$ . При  $M_l/M_v = 0.1$  и начальном диаметре каплей 10 мкм скорость детонации Чепмена-Жуге составляет 1619.8 м/с (кривая 1, рис. 11). Температура за ударной волной – 1400 К; в начале наблюдается небольшой рост температуры из-за сопротивления каплей газовому потоку, потом ее уменьшение, связанное с интенсивным испарением каплей, 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, снижения температуры не происходит). Процесс заканчивается

достижением системой состояния термодинамического равновесия – точки на равновесной детонационной адиабате.

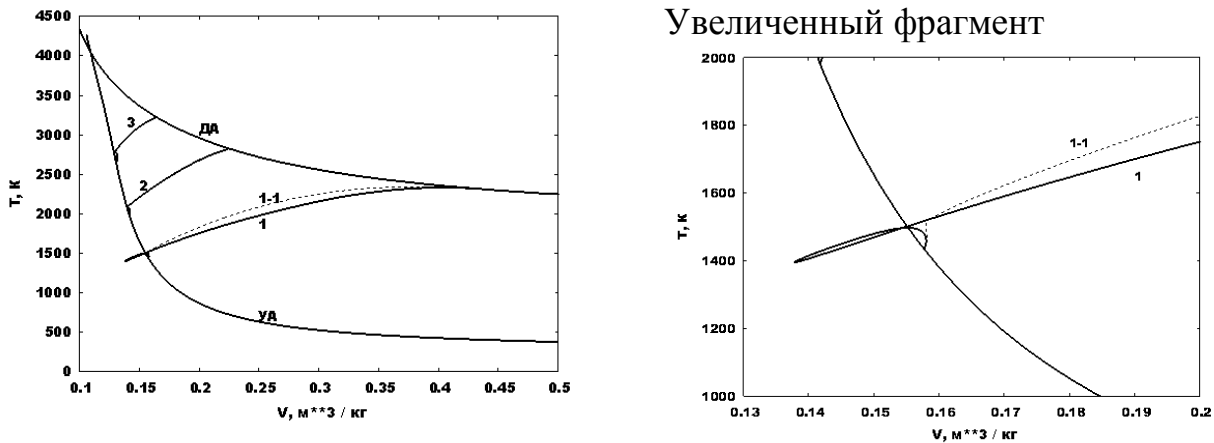


Рис. 11.  $V$ - $T$  диаграмма (вода/топливо=0.1,  $d=10$  мкм,  $P=1$  атм.). УА - ударная адиабата, ДА – детонационная адиабата, 1-1-равновесная модель, 1,2,3 – неравновесная модель. 1-детонация Чепмена-Жуге  $D=1619.8$  м/с; 2 -  $D=2000$  м/с; 3 –  $D=2400$  м/с

Для выявления влияния кинетического механизма на параметры течения были проведены расчеты, в которых предполагалось, что неравновесным является только процесс испарения, а химические реакции в газовой фазе протекают равновесно (кривая 1-1). Необходимо отметить, что если численное моделирование проводится корректно и константы скоростей обратных химических реакций рассчитываются через скорости прямых реакций с использованием констант равновесия, то начала и концы фазовых траекторий в равновесных и неравновесных расчетах совпадают. Получено, что при повышенных температурах и вблизи стехиометрии равновесные и неравновесные фазовые траектории близки ( $M_l/M_v = 0.1-0.2$ ) и могут отличаться при понижении температуры или удалении от стехиометрии ( $M_l/M_v = 0.3$ ).

В целом по результатам моделирования метанола-воздушных смесей в работе делаются следующие выводы:

1. Расстояние, на котором капли полностью испаряются, увеличивается с ростом диаметра капель.
2. Зависимость расстояния до точки воспламенения от диаметра капель имеет точку минимума при малых размерах капель, что связано с более быстрым понижением температуры смеси при испарении капель меньшего диаметра.
3. Зависимость расстояния до точки воспламенения имеет пологий минимум при повышении массовой доли капель фиксированного диаметра, но оно быстро увеличивается при снижении скорости ДВ.
4. Минимальная скорость ДВ близка к равновесной скорости детонации Чепмена-Жуге вплоть до  $M_l/M_v = 0.3$ .

В **четвертой** главе рассмотрена задача численного моделирования стационарных волн горения и детонации и нестационарной детонационной волны в керосино-воздушной горючей смеси.

В разделе 4.1 приводится анализ справочных данных по свойствам тяжелых углеводородных горючих и приводится методика восстановления вида потенциала Гиббса для жидкой и паровой фаз.

Для моделирования углеводородного горючего в работе использовалось "псевдовещество" с условной формулой  $C_xH_y$  (бензин -  $C_{8,12}H_{16,53}$ , керосин -  $C_{9,32}H_{18,2}$ , дизельное топливо -  $C_{12,33}H_{22,1}$ ).

При описании углеводородного горючего не учитывается его фракционный состав, его свойства описываются "брутто зависимостями", такими как зависимости теплоемкости, давления насыщения, теплоты испарения и т.д. от температуры. По этим данным восстанавливается потенциал Гиббса "псевдовещества", каким является углеводородное горючее, причем как в жидком, так и в газообразном состояниях.

Для расчета термодинамических свойств газообразного вещества в идеальном газе 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:  $PV = RT$ . По этим данным можно восстановить выражение для потенциала Гиббса вещества, которого достаточно для вычисления произвольных термодинамических свойств.

$$G_V(p, T) = \Delta_f H_V^0(T_0) - T_0 S_V(P_0, T_0) + \int_{T_0}^T C_{p,V} dT - (T - T_0) S_V^0(P_0, T_0) - T \int_{T_0}^T \frac{C_{p,V}}{T} dT + RT \ln\left(\frac{p}{P_0}\right), \quad (26)$$

здесь  $R$  - универсальная газовая постоянная,  $P_0 = 101325 \text{ Па}$  - стандартное давление,  $T_0 = 298,15 \text{ К}$  - стандартная температура. Аналогично для жидкости:

$$G_L(p, T) = \Delta_f H_L^0(T_0) - T_0 S_L(P_0, T_0) + \int_{T_0}^T C_{p,L} dT - (T - T_0) S_L^0(P_0, T_0) - T \int_{T_0}^T \frac{C_{p,L}}{T} dT + \frac{(p - P_0)}{\rho_L(T)}. \quad (27)$$

Выражения для потенциалов Гиббса фаз содержат ряд функций и констант, которые могут быть вычислены на основе справочных данных. При моделировании течений газочапельных смесей при наличии испарения капель, привязка теплофизических свойств должна осуществляться к справочным данным по теплоте парообразования и, по возможности, к кривой насыщения. В работе приводятся свойства углеводородных топлив и предлагается три способа восстановления недостающих величин. Для восстановления выражения для потенциала Гиббса газовой фазы задаются: условная формула, температура кипения, критическая температура, энтальпия образования жидкой фазы, теплота парообразования при температуре кипения и при температуре вблизи критической, полином от температуры для теплоемкости и плотности жидкой фазы, а также энтропия жидкой фазы, которая вычисляется из предположения, что она стремится к нулю как степенная функция при стремлении температуры к нулю.

Были восстановлены для докритических температур, выражения для потенциалов Гиббса жидких и газообразных углеводородных горючих. На рис. 12 представлено сравнение зависимости теплоты парообразования углеводородного топлива (вычисленной с использованием восстановленной



зависимости для потенциала Гиббса) с расчетами по эмпирическим, аппроксимирующим экспериментальные данные, степенным формулам. На рис. 13 приведены результаты сравнения рассчитанной скорости испарения капель (сплошные кривые) с данными К.Н. Liew, Е. Urip, S.L. Yang, С.Ј. Marek An Interactive Microsoft Excel Program for Tracking a Single Evaporating Droplet in Crossflow // NASA/TM-2004-212910, которые отмечены маркерами.

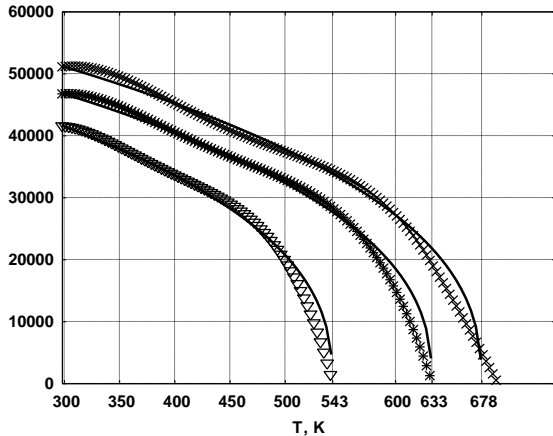


Рис.12. Теплота парообразования ( × - дизельное топливо, \* - керосин, ∇ - бензин (расчет по восстановленным зависимостям потенциалов Гиббса жидкой и газовой фаз), сплошные линии - эмпирические формулы

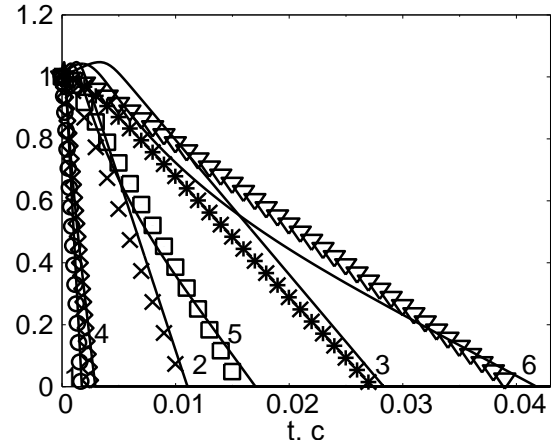
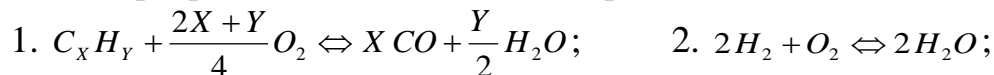
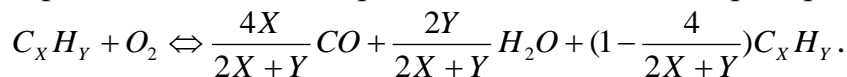


Рис.13. Временная зависимость относительно квадрата диаметра испаряющейся одиночной капли керосина в воздухе  $T_{s0} = 298.15$  К (1, 2, 3, ○, ×, \* – без скоростного отставания,  $T_0 = 1000$  К; 4, 5, 6, ◇, □, ∇-  $u_0 - u_{s0} = 20$  м/с,  $T_0 = 600$  К; 1, 4, ○, ◇-  $d_{s0} = 20$  мкм; 2, 5, ×, □-  $d_{s0} = 50$  мкм, 3, 6, \*, ∇, -  $d_{s0} = 80$  мкм).

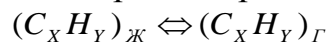
В разделе 4.2 описывается упрощенный кинетический механизм химических превращений (Басевич В.Я., Фролов С.М., 2006):



Предлагается для корректного перехода к равновесному состоянию первую реакцию считать обратимой, для этого ее преобразовать к виду:



Процесс испарения горючего описывается реакцией фазового перехода:



В разделе 4.3 приводятся результаты численного моделирования волн детонации и дефлаграции в керосино-воздушной газочапельной смеси. При предположении о полном испарении керосина сравнивались равновесные адиабаты, рассчитанные для 7 веществ, входящих в приведенный механизм, и для продуктов сгорания, включающих 26 веществ. На рисунке 14 представлены результаты сравнения  $V-T$  диаграмм. Видно, что в диапазоне  $0.5 \leq M_K / M_{Air} \leq 0.2$ , 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  $M_K / M_{Air} = 0.2$ .

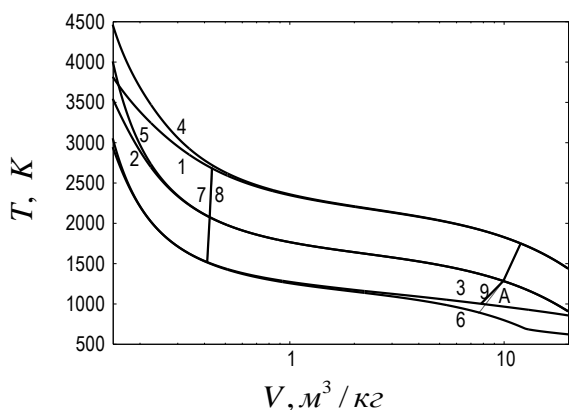


Рис. 14.  $V$ - $T$  диаграмма процесса при различных  $m_k/m_{air}$ . Полный (1-3, 7, 9) и сокращенный (4-6, 8, A) набор веществ 1, 4-0.1; 2, 5 – 0.15; 3, 6 – 0.2; 4 – 0.2; 5 – 0.3; 6 – 1.0; точки Чепмена-Жуге: 7, 8 – детонации; 9, A – дефлаграции

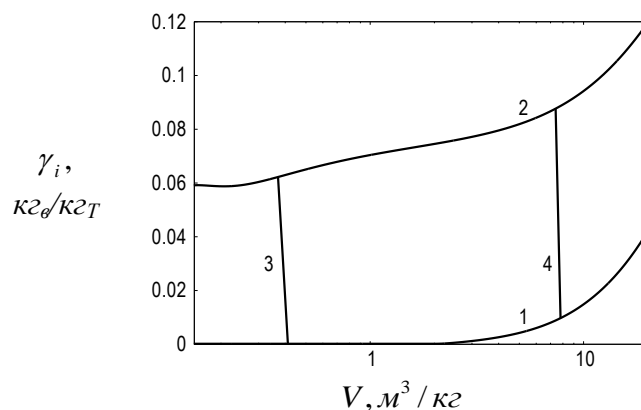
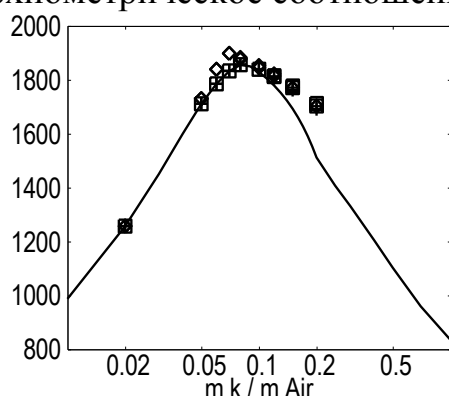


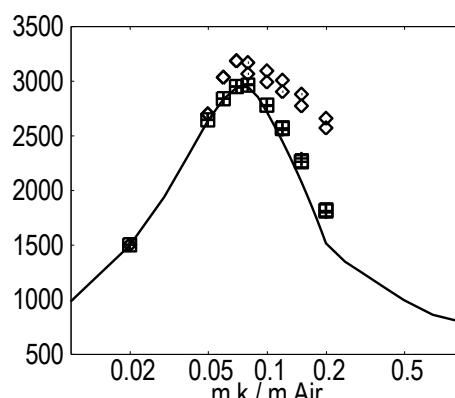
Рис. 15 Зависимость массовой доли твердого углерода от удельного объема вдоль равновесной адиабаты при различных отношениях массы керосина к массе воздуха. 1- 0.2; 2 – 0.3; точки Чепмена-Жуге 3 – детонации, 4 – дефлаграции

Содержание сажи (рис. 15) в продуктах сгорания в заметных концентрациях начинает проявляться при дефлаграции при  $M_K/M_{Air} = 0.2$  и составляет около 2 % по массе, при  $M_K/M_{Air} = 0.3$  сажа присутствует и при детонации и при дефлаграции.

Расчеты по “неравновесной” модели (интегрировалась система дифференциально-алгебраических уравнений (14)-(21)) проводились для случаев, когда реакции 1-3 считались необратимыми и, когда все реакции считались обратимыми. Рассчитанные параметры детонации Чепмена-Жуге (удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными) по “равновесной” и “неравновесной” с обратимыми реакциями моделям (рис. 16), они также близки при соотношении горючее-окислитель  $< 0.3$  (стехиометрическое соотношение  $\sim 0.07$ ).



(a)



(б)

Рис. 16. Зависимость параметров детонации керосино-воздушной горючей смеси в состоянии Чепмена-Жуге от  $m_k/m_{air}$  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”

“Неравновесная” модель с необратимыми реакциями дает завышенные значения температуры (рис. 16, 17), при этом равновесные температуры,

достигаемые в ДВ, зависят от начального диаметра каплей (кривые 3, 6 рис. 17). Задержки воспламенения, рассчитанные по всем моделям, в рассмотренных вариантах, близки.

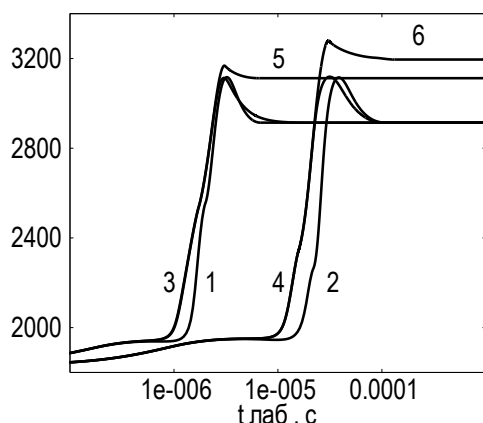


Рис. 17. Распределение температуры в ДВ ( $m_k/m_{air}=0.1$ ). Модели: 1, 2 - “равновесная”; 3, 4 - “неравновесная обратимая”; 5, 6 - “неравновесная необратимая”; 1, 3, 5 – начальный диаметр каплей  $d_s^0=10$  мкм; 2, 4, 6 -  $d_s^0=50$  мкм

В разделе 4.4 приведены результаты численного моделирования одномерного нестационарного течения газок капельной смеси керосина с воздухом. Численное моделирование проводилось с использованием сеточно-характеристического метода (компьютерный код разработан в МАИ В.Ю. Гидасповым). В качестве расчетных узлов задавались: траектории газа и частиц; траектория ударной волны; контактного разрыва; характеристики, образующие веер волн разрежения; граничные траектории частиц и 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 выбиралось из условия сходимости результатов и составляло, в зависимости от начальных данных, от 5 до 10 тысяч.

Исследовалось течение в ударной трубе (рис. 18), заполненной воздухом, возникающее после распада разрыва на границе камер высокого ( $X < 1$  м) и низкого давления. Капли керосина размещались при  $2 < X < 9$  м. После распада разрыва образовывалась ударная волна, которая инициировала испарение капель керосина и воспламенение горючей смеси.

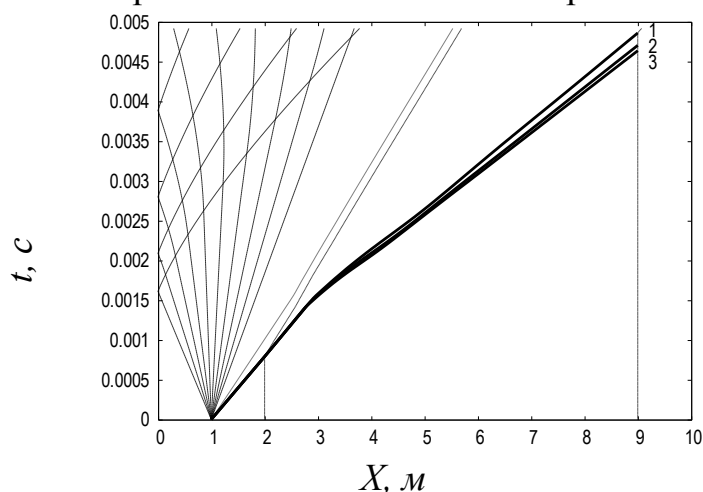


Рис. 18. Временная развертка течения в ударной трубе (крупный пунктир – характеристики, образующие веер волн разрежения; пунктир – контактный разрыв; штрих-пунктир – границы области распространения каплей керосина; сплошная линия – траектория головной ударной волны при различных значениях  $m_k/m_{air}$  (1 – 0.06, 2 – 0.08, 3 – 0.1))

Временная развертка течения (рис. 18) приведена схематично 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 (начиная с точки излома на графике).

Скорость ударной волны (рис. 19) после входа в двухфазную область в начале несколько падает, затем капли испаряются, начинаются экзотермические химические реакции (температура за ударной волной после распада разрыва составляет около 1000 К (рис. 20), что превышает температуру самовоспламенения горючей смеси), образуется волна горения, сопровождающаяся ростом давления, которая распространяется вслед за ударной волной. В момент времени около 1.4 мс образовавшаяся перед фронтом горения ударная волна догоняет головную ударную волну (рис. 19), что приводит к резкому увеличению ее скорости и к образованию детонационной волны. К моменту времени около 3 мс детонационная волна выходит на режим распространения, близкий к стационарному.

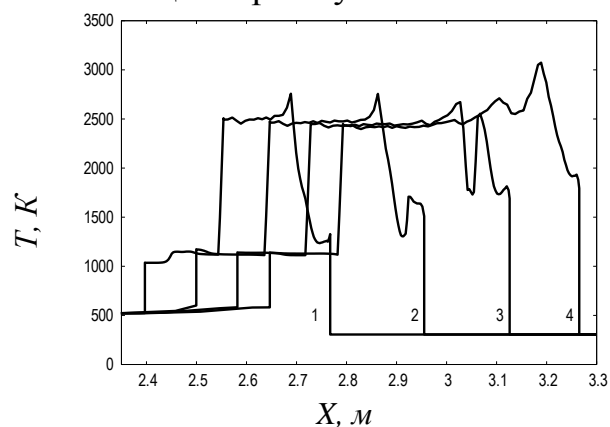
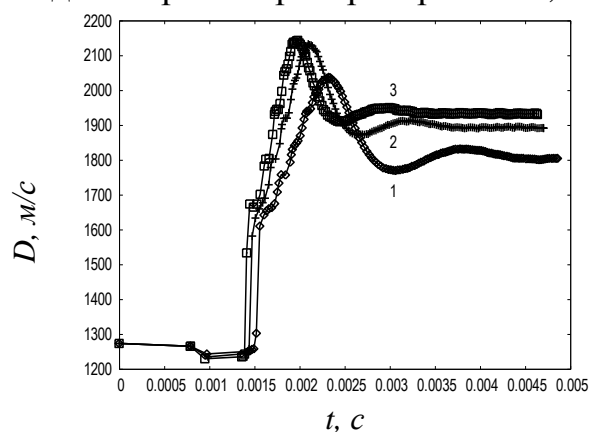


Рис. 19. Зависимость скорости ударной волны от времени при различных значениях  $m_k/m_{air}$  (1 – 0.06, 2 – 0.08, 3 – 0.1). Диаметр капель керосина – 40 мкм

Рис. 20. Распределение температуры в различные моменты времени (1 – 1.41 мс, 2 – 1.53 мс, 3 – 1.63 мс, 4 – 1.70 мс),  $m_k/m_{air} = 0.1$

Необходимо отметить, что расчетным путем получена картина течения с двумя очагами воспламенения, качественно совпадающая с наблюдаемой в экспериментах. После ускорения головной ударной волны температура за ней существенно выросла, что привело к воспламенению горючей смеси непосредственно за ударной волной (рис. 20, кривые 1-3). При дальнейшем распространении детонационной волны очаги воспламенения слились, образовав непрерывную область “сгоревшего” газа (кривая 4).

В заключении сформулированы основные результаты диссертационной работы.

## ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ, ВЫНОСИМЫЕ НА ЗАЩИТУ

1. Уточненная замкнутая физико-математическая модель (включающая подмодели: термодинамики, химической кинетики и теплообмена) детонации и дефлаграции газочапельной смеси, состоящей из многокомпонентного газа и испаряющихся капель, в каналах.

2. Вычислительные алгоритмы решения дифференциально-алгебраической системы уравнений, включающей уравнения, описывающие законы сохранения массы, импульса, энергии, химических элементов и числа частиц, а также газочапельную химическую кинетику, сопротивление и теплообмен.

3. Вычислительный алгоритм и результаты расчета равновесных адиабат (детонационные и дефлаграционные) для смесей водород-кислород-вода, водород-воздух-вода, метан-воздух-вода, метанол-воздух, керосин-воздух.

4. Результаты численного моделирования стационарной детонационной волны в газочапельных смесях, состоящих из горючей смеси водорода и метана с воздухом и капель распыленной воды. Исследовано влияние массовой доли и диаметра капель на параметры волны детонации. Определены параметры пересжатых детонационных волн и волн детонации Чепмена - Жуге.

5. Результаты численного моделирования стационарной детонационной волны в газочапельной смеси, состоящей из капель метанола и воздуха. Данные по влиянию массовой доли и диаметра капель на тонкую структуру детонационной волны. Определены параметры детонации Чепмена-Жуге.

6. Методика восстановления термодинамических свойств углеводородных горючих сложного состава (в рамках модели однокомпонентной капли) для жидкой и газовой фазы. Получены соответствующие коэффициенты, входящие в температурную часть потенциалов Гиббса для бензина, керосина и дизельного топлива.

7. Результаты численного моделирования стационарных волн дефлаграции и детонации керосино-воздушных газочапельных горючих смесей при различных значениях массовой доли горючего. Получены параметры волн детонации и дефлаграции в режимах Чепмена-Жуге.

8. Результаты численного моделирования детонации газочапельной керосино-воздушной горючей смеси в модельной ударной трубе при различных соотношениях горючее-окислитель. Расчетным путем получена временная развертка процесса, включающая: взаимодействие падающей ударной волны с керосино-воздушной газочапельной горючей смесью; нагрев горючей смеси; испарение капель керосина с последующими экзотермическими газочапельными химическими превращениями; образование волны сжатия; формирование и распространение волны детонации; выход детонационной волны на режим, близкий к стационарному.

**СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ****Статьи в журналах из перечня ВАК:**

1. Гидаспов В.Ю., Москаленко О.А., Пирумов У.Г. Численное моделирование стационарных детонационных волн в газовых и газокапельных реагирующих смесях // Вестник МАИ, М., Изд-во МАИ-ПРИНТ, 2009. Т. 16. № 2. С. 51-61.
2. Гидаспов В.Ю., Москаленко О.А., Пирумов У.Г. Численное моделирование стационарных волн горения и детонации в керосино-воздушной горючей смеси // Вестник МАИ, М., Изд-во МАИ, 2014. Т.21. № 1. С. 169-177.
3. Гидаспов В.Ю., Москаленко О.А. Численное моделирование инициирования детонации в керосино-воздушной газокапельной смеси падающей ударной волной // Электронный журнал “Труды МАИ”. 2016. № 90.

**Публикации в других изданиях:**

4. Гидаспов В.Ю., Кузнецова С.В., Москаленко О.А., Чугунков С.А. Комплекс программ для решения модельных задач физической газовой динамики // Материалы XV Международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2007), Алушта, 25-31 мая 2007 г. – М.: ЗАО «Издательское предприятие «Вузовская книга», 2007. С. 157-158.
5. Гидаспов В.Ю., Москаленко О.А. Численное моделирование стационарных детонационных волн в газовых и газокапельных реагирующих смесях // 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. 140-143.
6. Гидаспов В.Ю., Москаленко О.А. Численное моделирование стационарных детонационных волн в керосино-воздушных смесях // Материалы IX Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ'2012), 25-31 мая 2012 г., Алушта. – М.: Изд-во МАИ, 2012. С.127-130.
7. Гидаспов В.Ю., Москаленко О.А. Численное моделирование стационарных детонационных волн в горючей смеси водорода с кислородом и керосино - воздушных смесях // Интеграция науки и практики как механизм эффективного развития современного общества, Воскресенск, Вф НОУ ВПО «РосНОУ», 2012. С. 85-89.
8. 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.
9. Гидаспов В.Ю., Москаленко О.А. Численное моделирование стационарных волн горения и детонации в горючих смесях углеводородов с

воздухом // Современная система высшего образования: опыт прошлого – взгляд в будущее, Сборник материалов и докладов второй международной научно-практической конференции, Воскресенск, Вф НОУ ВПО «РосНОУ», 2013. С. 187-192.

10. Гидаспов В.Ю., Москаленко О.А. Численное моделирование стационарных волн горения и детонации в керосино-воздушной горючей смеси // 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.133-135.

11. Гидаспов В.Ю., Москаленко О.А. Численное моделирование стационарных волн горения и детонации в керосино-воздушных горючих смесях // Труды ТГУ. Серия физическая. Издательский дом ТГУ, 2014. Т.292. С.51-53.

12. Гидаспов В.Ю., Москаленко О.А. Численное моделирование стационарных волн горения и детонации в смеси тяжелого углеводородного горючего с воздухом // Материалы XIX Международной конференции по Вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2015), 24-31 мая 2015 г., Алушта. – М.: Изд-во МАИ, 2015. С. 408-411.

13. Гидаспов В.Ю., Москаленко О.А. Восстановление теплофизических свойств и численное моделирование стационарных волн горения и детонации в смеси тяжелого углеводородного горючего с воздухом // Наука, культура и общество: исторический опыт и перспективы развития, Материалы седьмой международной научно-практической конференции, Воскресенск, Вф НОУ ВПО «РосНОУ», 2015. С. 58-61.

14. Гидаспов В.Ю., Москаленко О.А. Численное моделирование инициирования детонации в керосино-воздушной газочапельной смеси падающей ударной волной // Материалы XI Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ'2016), 25-31 мая 2016 г., Алушта. – М.: Изд-во МАИ, 2016. С. 132-135.

15. Гидаспов В.Ю., Москаленко О.А., Северена Н.С. Rough analysis of the flow with the shock waves in the channels with sloping borders // International Symposium on Nonequilibrium Processes, Plasma, Combustion and Atmospheric Phenomena, 2-6 of October 2016, Sochi. 2016. С. 115-121.

