

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«МОСКОВСКИЙ АВИАЦИОННЫЙ ИНСТИТУТ (НАЦИОНАЛЬНЫЙ
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)» - МАИ

На правах рукописи



КОНОНОВ ДМИТРИЙ СЕРГЕЕВИЧ

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЫСОКОСКОРОСТНЫХ ТЕЧЕНИЙ С
УДАРНЫМИ И ДЕТОНАЦИОННЫМИ ВОЛНАМИ В КАНАЛАХ

01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель

д.ф.-м.н., с. н. с.

В.Ю. Гидаспов

Москва 2021

Оглавление

Введение	4
ГЛАВА 1. ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ	22
Введение	22
1.1 Математическая модель	22
1.2 Модель термодинамики и химической кинетики	24
1.3 Численные методы и вычислительные алгоритмы	33
1.4 Тестирование	39
Выводы	45
ГЛАВА 2. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СТАЦИОНАРНОГО ТЕЧЕНИЯ С ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНОЙ В КАНАЛЕ ПЕРЕМЕННОГО СЕЧЕНИЯ СО СВЕРХЗВУКОВЫМ ПОТОКОМ НА ВХОДЕ И ВЫХОДЕ	46
Введение	46
2.1 Физико-математическая модель течения	46
2.2 Постановка задачи	51
2.3 Глобальный вычислительный алгоритм	52
2.4 Вычислительные алгоритмы	55
2.5 Результаты численного моделирования течения с детонационной волной в канале переменного сечения	62
2.6 RR – диаграмма течения в канале с детонационной волной со сверхзвуковым потоком во входном и выходном сечениях	66
2.7 Результаты численного моделирования течения метано-воздушной горючей смеси в канале	70
Выводы	85
ГЛАВА 3. ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТАБИЛИЗАЦИИ ТЕЧЕНИЯ С ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНОЙ В КАНАЛЕ ПЕРЕМЕННОГО СЕЧЕНИЯ СО СВЕРХЗВУКОВЫМ ПОТОКОМ НА ВХОДЕ И ВЫХОДЕ	86
Введение	86
3.1 Физико-математическая модель течения	86
3.2 Равновесный анализ течения в канале	87
3.3 Задача о нахождении стационарного химически неравновесного течения с переходом через скорость звука в канале с заданным контуром	90
3.4 Применение метода установления для моделирования течения со	

стационарной детонационной волной. Анализ устойчивости полученных решений	98
Выводы.....	107
ГЛАВА 4. МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЯ В ДЕТОНИРУЮЩЕМ ГАЗЕ ЗА ОТРАЖЕННОЙ УДАРНОЙ ВОЛНОЙ	108
Введение. Задача об отраженной ударной волне.	108
4.1 Моделирование течения реагирующей смеси за отраженной ударной волной в одномерной нестационарной постановке	113
4.2 Моделирование течения реагирующей смеси за отраженной ударной волной в двумерной нестационарной постановке.....	132
4.3 Режим Чепмена-Жуге при распространении детонации в канале, инициированной отраженной ударной волной	146
Выводы.....	152
Заключение.....	153
Список использованной литературы	155

Введение

Исследование процессов детонации представляет большой практический интерес для отечественных и зарубежных исследователей. Он обусловлен как желанием использования детонации в перспективных энергетических установках [110], так и необходимостью обеспечения безопасности труда путем подавления процессов горения [112, 115].

Происхождение самого термина «детонация» уходит корнями в конец XVIII века, и уже тогда он использовался для описания характера взрывных процессов в твердых веществах. В «Трактате по элементарной химии» Лавуазье приводит данные по взрывам смесей нитрата калия с углеродом [1], и используется термин «детонация».

Начало экспериментальному и теоретическому исследованиям явления детонационного горения в газовых смесях было положено в конце XIX века. После взрывов в угольных шахтах в разных странах был проведен ряд экспериментальных и теоретических исследований, одним из результатов которых оказалось открытие французскими физиками Маляром и Шателье [2] и Бертло и Вьеем [3] в 1881-1882 годах явления детонации в газах. Ими было установлено два важных обстоятельства: при поджиге газообразной смеси в закрытой трубе при нормальных температуре и давлении скорость пламени, как правило, увеличивается, затем достигает максимума, который остается постоянным; у каждой смеси есть своя собственная, вполне определенная максимальная скорость [4]. На практике, при нормальных условиях, данные скорости превышают скорость звука в несколько раз.

В 1890 г. русским ученым Михельсоном было выведено уравнение распространения детонационной волны, и было получено выражение для расчета скорости детонации [5]. Его работа явилась следствием предположения Маляра и Шателье, что детонацию можно рассматривать как процесс очень быстрого сжатия с последующим воспламенением газа в

результате прохождения интенсивной волны сжатия (так называемой ударной волны), математическая теория которой была до этого описана в трудах Римана [6] и Гюгонио [7]. Согласно теории Михельсона, отличие детонации от звуковых волн заключается в нарушении непрерывности изменения некоторых физических параметров и наличии тепловыделения из-за интенсивно протекающих химических реакций. Поскольку движение волн в инертной среде происходит с уменьшением амплитуды и переходит в скорость обычной звуковой волны, а скорость детонации характеризуется постоянством во времени, то данный факт указывает на то, что в детонационной волне присутствуют условия, которых нет в обычной ударной волне, и которые привнесены химическими реакциями. Данный факт является следствием вывода, полученного Ренкиным [8], в котором говорится, что для того, чтобы нарушения непрерывности могли без изменений перемещаться в упругой жидкости, необходима связь между давлением и плотностью. Данная связь невозможна без протекания тепловых процессов [4].

Дальнейшее развитие теория детонации получила в работах Чепмена [9] и Жуге [10]. Уравнения, полученные Михельсоном, не давали возможности определить скорость распространения детонации и параметры газа в детонационной волне. Чепменом была выдвинута гипотеза о существовании минимальной скорости распространения детонации, выбор данной скорости был обоснован в работах Жуге. Режим распространения детонационной волны с постоянной минимальной скоростью, таким образом, получил название «детонации Чепмена-Жуге», а сама теория детонации – «детонация Михельсона-Чепмена-Жуге». Таким образом, можно утверждать, что классическая теория детонации была оформлена к первому десятилетию XX века.

В 1926 году Кемпбеллом и Вудхедом [17] было открыто распространение детонационного фронта по спирали. Обнаруженное явление

было названо «спиновой детонацией». При существенном избытке или недостатке горючего в гладкой трубе процесс горения, имеющий шарообразную форму, двигался вперед со скоростью, равной скорости распространения детонации и вращался вокруг оси канала. Пламя от него затем переходило на все сечение рассматриваемой трубы. Характер наблюдаемой зоны горения явно отличается от плоского. При этом, значение скорости распространения трехмерной спиновой детонации оказалось равным скорости детонации в этой же смеси, рассчитанной по одномерной теории.

Впервые модель распространения детонационного горения была предложена в 1940-е годы Зельдовичем [11]. В ней предполагается, что воспламенение смеси происходит во фронте ударной волны из-за мгновенного сжатия, и, как следствие, скачкообразного повышения температуры. Геометрические параметры рассматриваемого канала не оказывает влияния на ширину зоны протекания химических реакций, поэтому в модели ее размер положен равным нулю. Протяженность зоны горения зависит от скорости течения реакции окисления и наблюдаемых значений давления и температуры за фронтом ударной волны. Ширина зоны индукции зависит от скорости распространения ударной волны и времени образования свободных радикалов в химической реакции [92-94]. Схожие результаты практически были одновременно получены Нейманом [12] и Дёрингом [13], поэтому данная модель получила название «Зельдовича-Неймана-Дёринга» (ZND). В это же время [20] было установлено, что распространение плоской детонационной волны должно осуществляться в режиме Чепмена-Жуге.

В 1940-е годы Зельдовичем так же была выдвинута идея использования детонации в двигательных установках. В работе [14] эффективность цикла детонационного горения была сопоставлена с традиционными термодинамическими циклами. По полученным результатам, даже в режиме

детонации Чепмена-Жуге цикл детонационного горения показывает значительную эффективность, так же при увеличении скорости распространения фронта детонационной волны эффективность цикла энергетической установки возрастает. В настоящее время интерес к установкам данного типа сохраняется, экспериментальные и теоретические исследования продолжаются [118].

Изначально спиновая детонация рассматривалась как исключительное явление, поскольку не укладывалась в модель ZND. Но в дальнейших исследованиях [47] было показано, что спиновая детонация возникает вблизи пределов распространения детонации во всех смесях. Предел распространения может быть достигнут уменьшением горючего, понижением начального давления в смеси и т.п. В [48, 49] была установлена газодинамическая природа спиновой детонации. Она является формой кривой пересеченной детонации, которая спирально движется вдоль стенок трубы. При удалении от пределов распространения детонации наблюдается увеличение количества ядер спина с дальнейшей трансформацией явления в плоскую структуру. В 1959 году было открыто явление распространения детонационной волны в режиме пульсирования и образование ячеистой структуры возмущений [40, 41], изучение которого в настоящее время активно продолжается [111, 113, 125]. Было установлено, что и спиновая, и обычная детонация имеют трехмерную структуру. В связи с результатами [40, 41] была проведена работа [50], показавшая неустойчивость плоской детонации в модели ZND. При этом, если неустойчивость при медленном горении может являться следствием различия коэффициентов диффузии и теплопроводности при пересечении зоны горения потоком газа, то неустойчивость детонации связана с экспоненциальной зависимостью времени протекания химической реакции от температуры. Этим объясняются и неустойчивость детонации к искривлениям фронта пламени, и неустойчивость к одномерным возмущениям [103].

Неоднородности в детонационном фронте были впервые обнаружены при помощи следового метода [41, 54] и фотографическим способом [55]. В работе [56] описывается исследование смеси водорода, кислорода и монооксида углерода методом интерференции, при проведении которого была обнаружена зона турбулентности за зоной химической реакции, что также является доказательством наличия трехмерной структуры детонационного фронта. Детонация, имеющая многочисленные неоднородности, получила название «пульсирующая детонация» и может рассматриваться как самостоятельный вид горения. Спиновая детонация возникает при наличии лишь одной неоднородности на сечении трубы и является предельным случаем пульсирующей. Неоднородности пульсирующей детонации рассмотрены в работе [57]. В [58, 59] описывается наличие неоднородной структуры фронта детонации в смеси нитрометана и ацетона.

Результаты систематического экспериментального изучения спиновой детонации обобщены и представлены в [60, 114]. В работе описываются структуры течений, условия существования и свойства непрерывной спиновой детонации различных топлив в камерах сгорания различных типов двигателей. Авторами приведен анализ геометрических и физико-химических параметров, оказывающих влияние на возникновение и поддержание спиновой детонации в топливокислородных и топливовоздушных смесях.

Неустойчивость детонации к искривлениям фронта пламени математически проанализирована в [51, 52]. Авторами подтверждена неустойчивость плоской детонации, и утверждается, что детонация устойчива по отношению к возмущениям, имеющим длину волны меньше, чем ширина зоны протекания химических реакций. В экспериментах данную устойчивость можно получить в узких трубках, имеющих диаметр меньше, чем ширина зоны течения химических реакций.

С 50-х годов XX века в научной среде начинает широко распространяться численное моделирование. Самарским была сформулирована знаменитая триада «модель-алгоритм-программа», получившая свое развитие в виде методологии «численного эксперимента». Использование ЭВМ позволило провести масштабные расчеты, которые не могли бы быть получены аналитически вследствие сложности соответствующей им математической модели и/или не могли быть проведены методом натурального эксперимента. В 1948 году совместно с Тихоновым Самарский разработал численные методы и провел первые в СССР прямые расчёты мощности взрыва атомной и водородной бомб, которые хорошо совпали с экспериментальными результатами. Теоретические основы, заложенные Самарским, представлены в [61, 62]. Большой вклад в развитие численной методологии применимо к газодинамическим исследованиям внесен Годуновым [63]. В 1954 г. им была предложена эффективная разностная схема для решения уравнений газовой динамики, базирующуюся на решении задачи распада разрыва. В 1960 г. был представлен сеточно-характеристический метод расчета двумерных стационарных задач газовой динамики, в дальнейшем примененный и для решения трехмерных задач [104]. В 1961 г. Годуновым был предложен метод расчета стационарных многомерных течений, в основу которого был положен расчет процесса установления потока. Достигнутый в эти годы прогресс в развитии вычислительной техники и методов математического моделирования позволили существенно дополнить физические эксперименты, ускорить вычислительный процесс и использовать более сложные физико-математические модели, в том числе и в сфере изучения явления детонации.

После проведения дальнейших экспериментов было установлено, что ударно-волновая структура детонации в ряде случаев имеет сложную структуру. В 1969 году Коробейниковым и Левиным была предложена более

приближенная к реальности, по сравнению с ZND, модель структуры детонации [15]. В модели Коробейникова-Левина применяются уравнения Эйлера с двумя модельными уравнениями химической кинетики. Они моделируют задержку воспламенения и выделения тепла. Таким образом, данная модель, в отличие от ZND, описывает нестационарные процессы за фронтом распространения детонационной волны. С использованием модели Коробейникова-Левина был открыт эффект расщепления детонационной волны [16], и исследована начальная стадия течения при наличии точечного взрыва.

Для описания различных режимов горения веществ, в том числе детонационного, так же могут быть использованы детальные кинетические механизмы. Они позволяют наиболее полно учитывать протекание химических превращений в широком диапазоне начальных данных и граничных условий. Недостатком таких расчетов является объем требуемых вычислений, поскольку детальный кинетический механизм может включать в себя тысячи элементарных стадий в сотнях химических веществах. Кинетические механизмы, описывающие процесс горения в простых веществах, описываются в [21, 27], более сложных – в работах [22, 23, 24].

Теоретически точное описание протекающих химических стадий в детальных кинетических механизмах требует решение уравнения сохранения для каждого компонента, что сказывается на расчетной сложности. Данный факт побуждает в практических вычислениях использовать аппроксимацию детальных кинетических механизмов более простыми аналогами [25, 26, 28], содержащими на порядки меньше веществ и стадий, но согласующимися с экспериментальными данными. Помимо сокращения кинетических механизмов, хороший расчетный результат дает использование брутто-реакций [29]. Подобные упрощения, однако, сокращают допустимый диапазон применения кинетических механизмов [30].

Для применения детальных и брутто кинетических механизмов необходима информация о термодинамических свойствах индивидуальных компонент химической реакции. Способы ее получения и задания рассмотрены в [31, 32].

Инициирование детонации в горючей смеси может быть осуществлено двумя способами: переходом из стадии дефлаграционного горения в детонационное и методом подвода импульсным источником дополнительной энергии. Переход медленного горения в детонационное рассматривался в [43, 44]. Инициирование детонации путем прямого подвода создает ударную волну, которая вызывает химическую реакцию в реагирующей смеси. К возникновению детонации могут также приводить неоднородности параметров [46]. В исследованиях Зельдовича [45] указывается, что инициатором детонации может выступать градиентный механизм. Образование градиента температуры и процессы, приводящие к нему, на данный момент плохо изучены. Процесс перехода горения в детонацию активно продолжает исследоваться в настоящее время [120, 121, 124].

Использование численных расчетов с применением детальной и модельной химической кинетики дало научному сообществу ряд важных результатов в областях исследования процессов возникновения и распространения детонационных волн. Так, в [18] исследовано возникновение детонации при точечном подводе энергии и развитие возмущений в структуре детонационной волны, в [19] рассмотрено возникновение детонационной волны при движении поршня в горючих смесях. Если образующейся энергии достаточно, реализуется детонационный режим горения, если же значение меньше, детонационная волна распадается на ударную волну и фронт дефлаграционного горения. В [35] рассмотрен процесс инициирования детонации электрическими разрядами и ее распространение в каналах сложной формы со смесью водорода с окислителем. Расчет проводился авторами при помощи метода,

базирующегося на схеме Годунова. Получена структура ячеистой детонации, исследован вопрос устойчивости двумерной волновой структуры, рассмотрен вопрос минимизации энергии инициирования детонации. В [39] рассмотрены условия инициирования двумерной детонации при вращении в каналах эллиптической формы и квадратного сечения, показана возможность оценки условий формирования детонации в трехмерных каналах на основании результатов двумерных расчетов. В [42] исследованы волновые процессы, протекающие в каналах сложной формы в стехиометрической водородо-воздушной смеси с учетом реальной химической кинетики.

В [65] рассмотрено инициирование детонации в сверхзвуковом потоке смеси водород-воздух при помощи электрического разряда с двумя режимами энерговыделения (неоднородный и однородный), показано влияние времени осуществления разряда и скорости потока на процесс возникновения детонации. Авторами определены критические значения энергии для детонации, исследована зависимость развития детонации от толщины плоского слоя. При относительно больших значениях толщины слоя инициирование осуществляется только за счет энергии разряда, которая обеспечивает распространение ударной волны достаточной интенсивности за время, сопоставимое с порядком времени формирования зоны протекания устойчивых химических реакций.

Детонация в узких трубках является устойчивой по отношению к искривлению зоны горения и неустойчивой по отношению к одномерным возмущениям [53]. Устойчивость одномерных стационарных ударных и детонационных возмущений в каналах переменного сечения описывается в [34, 36, 37, 38]. В [34, 99] отмечается, что в нереагирующем потоке стационарная ударная волна является устойчивой в расширяющейся части канала и неустойчивой в сужающейся. В [36, 37] исследована устойчивость течения в канале с возмущением в случае, когда значение скорости потока перед ним близко к скорости звука, получены области устойчивости данного

скачка. Согласно [38], стационарные течения с горением в детонационной волне Чепмена–Жуге всегда неустойчивы, остаются устойчивыми течения со сгоранием топлива в пересжатой детонационной волне.

Исследования влияния структуры канала на режим распространения детонационного горения продолжены в [66]. В работе изучено влияние установленного препятствия с высотой меньше ширины канала на процесс распространения ячеистой волны детонации. Установлено, что при превышении высоты данного препятствия определенного значения режим детонационного горения прекращается с течением времени. Если высота препятствия меньше данного значения, то ячеистая структура волны восстанавливается по прошествии некоторого времени. При срыве детонационного горения возможно его восстановление при помощи дополнительной стенки, установленной в канал. При переходе детонационной волны из канала постоянного сечения в канал с резким расширением детонационный режим горения сохраняется, если величина расширения не превосходит некоторого критического значения.

Инициирование детонации возможно также после взаимодействия фронта пламени с сильной ударной волной, интенсивности которой при этом недостаточно для непосредственного запуска детонационных процессов [67, 68]. Детонационное горение возникало вследствие взаимодействия в окрестности фронта пламени с прогретыми слоями. После взаимодействия с падающими и отраженными ударными волнами фронта пламени [69] может быть получен как детонационный режим горения, так и ускорение фронта пламени в зависимости от силы падающей ударной волны.

В работах [70, 71] исследуется влияние внутренней геометрии канала, а также таких параметров, как турбулизации потока, температуры, концентрации топлива в несгоревшей смеси на процесс перехода горения в детонацию. Зарождение детонации происходит в локальных экзотермических центрах между ускоряющейся зоной турбулентного горения и главной

ударной волной. Сами же горячие точки появляются вследствие неоднородности потока и могут служить как источниками дефлаграционного, так и детонационного горения. Детонация при возникновении распространяется во все стороны от источника, догоняет головную ударную волну и по прошествии их взаимодействия распространяется сильная волна детонации, которая затем замедляется до самоподдерживающегося режима Чепмена-Жуге. Волна дефлаграционного горения, идущая из горячей точки, распространяется медленнее, но способствует воспламенению в других горячих точках и в итоге может привести к возникновению детонационной волны. Наличие турбулизационных камер сокращает преддетонационное расстояние для углеводородных смесей и делает переход к детонации более стабильным. Увеличение числа турбулизационных камер блокирует переход к детонации. Сокращение длины камер и увеличение длины участков соединения приводят к увеличению преддетонационных времени и расстояния.

В настоящий момент проходят испытания демонстратора прямого пульсирующего детонационного двигателя [72, 97]. Стоит отметить, что для создания реально функционирующего детонационного двигателя нет фундаментальных ограничений [73]. При этом, на него накладываются эксплуатационные требования: он должен использовать минимальную энергию зажигания детонации, быть компактным и легким. Данные ограничения в настоящий момент и составляют основную проблему для создания этого устройства. Поэтому исследования в области поиска новых способов инициирования детонации, позволяющих сократить длину канала, уменьшить энергию, необходимую для инициирования детонации, и время перехода дефлаграционного горения в детонационное, не теряют своей актуальности.

Таким образом, в настоящее время крайне важна работа над созданием вычислительных методов и физико-химических моделей, описывающих

процессы, протекающие в горючих жидкостях и газах. Особое внимание уделяется инициированию, поддержанию, течению, установлению и подавлению детонационных процессов. Они представляют интерес как с точки зрения обеспечения безопасности на производстве, так и в контексте создания перспективных энергетических установок. Развитие вычислительной техники в настоящее время позволяет усложнять имеющиеся модели и исследовать все более тонкие аспекты детонационного и дефлаграционного режимов горения. Используемые алгоритмы и вычислительные модели должны обеспечивать выполнение законов сохранения и начал термодинамики, гарантировать переход изучаемой системы в состояние термодинамического равновесия. Выполнение данных условий является необходимым условием для обеспечения энергетического баланса в системе.

Цель диссертационной работы состоит в том, чтобы построить физико-математическую и вычислительную модели высокоскоростных течений многокомпонентного газа при наличии ударных и детонационных волн с учетом протекания равновесных и неравновесных газофазных химических превращений. Разработать уточненные вычислительные алгоритмы, с помощью которых провести термодинамический анализ равновесного и неравновесного стационарных течений горючих смесей со стационарной детонационной волной в канале переменного сечения со сверхзвуковым потоком на входе и выходе. Провести численные исследования по определению устойчивых стационарных режимов течения горючих смесей с детонационной волной в канале переменного сечения со сверхзвуковым потоком на входе и выходе. Определить параметры отраженной плоской ударной волны в канале в предположении, что за ней реализуется состояние термодинамического равновесия. Численно исследовать процесс инициирования и распространения детонации за отраженной ударной волной.

Для достижения поставленных целей были решены следующие задачи:

- построение замкнутой термодинамически согласованной физико-математической модели высокоскоростных течений многокомпонентного газа при наличии ударных и детонационных волн с учетом протекания равновесных и неравновесных газофазных химических превращений.

- разработка уточненных вычислительных алгоритмов и программ для решения уравнений физической газовой динамики для случая равновесного и неравновесного протекания химических превращений;

- верификация и валидация математической и вычислительной моделей на классических тестовых задачах и экспериментальных данных.

- проведение широкомасштабных расчетно-теоретических исследований высокоскоростных течений с ударными и детонационными волнами.

Основными защищаемыми положениями и результатами являются:

1. Разработаны математические модели и алгоритмы для экспресс-анализа течений с химическими превращениями, созданы программные комплексы, реализующие их.

2. Получены аппроксимационные формулы, позволяющие определить положение стационарной детонационной волны в канале, допускаемые одномерной теорией;

3. Установлены устойчивые положения детонационной волны в канале переменного сечения, допускаемые квазиодномерными нестационарными уравнениями невязкой газовой динамики для многокомпонентного газа с химическими превращениями, описываемыми многостадийными кинетическими механизмами;

4. Показано, что распространение пересжатой детонационной волны (инициированной отраженной ударной волной) в плоском канале происходит с параметрами, соответствующими решению задачи о равновесной отраженной ударной волне.

Научная новизна исследования состоит:

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

Практическая значимость исследований состоит в том, что разработанные вычислительные алгоритмы и комплекс программ могут использоваться для анализа течений с химическими превращениями, описываемыми как многостадийными, так и упрощенными кинетическими механизмами, в энергетических и технологических установках, которые используются в ракетно-космической и авиационной отраслях промышленности. Предложенные в диссертации методики математического моделирования позволяют рассчитывать равновесные и неравновесные течения с физико-химическими превращениями, которые могут использоваться при моделировании в частности таких явлений, как горение и детонация, образование токсичных компонент, позволяют определять тонкую структуру химически неравновесных течений от их инициирования реакций до перехода к термодинамическому равновесию.

Положения, выносимые на защиту:

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

4. Результаты численного исследования устойчивости положения детонационной волны в канале, выполненные в квазиодномерной нестационарной постановке.
5. Результаты решения задачи об отраженной ударной волне в детонирующем газе.

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

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

Результаты работы использовались в отчетах по работам, выполняемым по заказу предприятий ракетно-космической отрасли

промышленности и по государственному заданию (проекты №9.7555.2017/БЧ и № FSFF-2020-0013).

Публикации. Основные положения диссертационного исследования опубликованы в 17 печатных работах, из них 3 статьи в рецензируемых журналах, входящих в перечень ВАК и в международные реферативные базы данных Scopus и Web of Science, 1 – в материалах международных конференций и симпозиумов.

В статьях автором разработаны вычислительные алгоритмы и компьютерные программы, а также проведено численное моделирование. Постановка задачи и анализ результатов произведен соавторами совместно.

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

Во введении приводится обзор литературы, обоснована актуальность, сформулированы цели и задачи диссертационной работы, перечислены новизна, практическая ценность и положения, выносимые на защиту.

В первой главе рассматриваются физико-математические модели течений с газофазными химическими превращениями, дополненные подмоделями термодинамики и химической кинетики. Приводятся основные вычислительные алгоритмы и результаты их верификации.

Во второй главе рассматривается равновесное течение со стационарной детонационной волной в канале со сверхзвуковым течением на входе и выходе, приводятся результаты параметрических исследования для определения параметров стационарных детонационных волн в метано-воздушной горючей смеси в канале. Приводятся RR-диаграммы течений, получены аппроксимационные формулы определения координаты расположения детонационной волны в канале.

В третьей главе исследуется устойчивость режимов течения горючей смеси водорода с воздухом с учетом протекания неравновесных химических реакций в канале со сверхзвуковым течением на входе и выходе. Получены устойчивые режимы течения с пересжатой детонационной волной в расширяющейся части. Приводятся результаты численного решения стационарной задачи в канале переменного сечения с непрерывным переходом от дозвукового режима течения к сверхзвуковому с учетом наличия стационарной детонационной волны в докритической области.

В четвертой главе решается задача об определении параметров отраженной плоской ударной волны в канале в предположении, что за ней реализуется состояние термодинамического равновесия. В одномерной и двумерной постановках решается задача об инициировании и распространении пересжатой детонационной волны в канале с закрытым торцом. Показано, что на значительном удалении от закрытого торца детонационная волна распространяется в пересжатом режиме. При этом, доминирующие параметры течения соответствуют задаче об отраженной равновесной ударной волне. Установлены условия для обеспечения выхода детонации на режим Чепмена-Жуге.

В заключении приводятся полученные в работе научные результаты, отражающие её новизну и практическую значимость.

ГЛАВА 1. ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

Введение

В данной главе приводится термодинамически согласованная физико-математическая модель течения с газофазными химическими превращениями, дополненная подмоделями термодинамики и химической кинетики. Описываются основные вычислительные алгоритмы и результаты их верификации. Для описания газофазных химических превращений используются многостадийные кинетические механизмы в которых участвуют вещества, свойства которых описываются в рамках модели смеси совершенных газов. Разработанные вычислительные алгоритмы обеспечивают при численном моделировании непрерывный переход от неравновесного состояния к термодинамическому равновесию при неубывании энтропии, обеспечивают строгое соблюдение законов сохранения элементного состава.

1.1 Математическая модель

В энергетических установках протекают различные физико-химические превращения. Нестационарные химически неравновесные течения газа в канале описываются системой уравнений Эйлера, дополненной термическим и калорическим уравнениями состояния и N уравнениями химической кинетики [74, 109]:

$$\frac{\partial \rho F}{\partial t} + \frac{\partial \rho u F}{\partial x} + \frac{\partial \rho v F}{\partial y} = 0, \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial \rho u F}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u^2 + P) F}{\partial x} + \frac{\partial \rho u v F}{\partial y} = 0, \quad (1.2)$$

$$\frac{\partial \rho v F}{\partial t} + \frac{\partial \rho u v F}{\partial x} + \frac{\partial (\rho v^2 + P) F}{\partial y} = 0, \quad (1.3)$$

$$\frac{\partial \rho \left(U + \frac{u^2}{2} \right) F}{\partial t} + \frac{\partial \rho u F \left(U + \frac{P}{\rho} + \frac{u^2}{2} \right)}{\partial x} + \frac{\partial \rho v F \left(U + \frac{P}{\rho} + \frac{v^2}{2} \right)}{\partial y} = 0, \quad (1.4)$$

$$\frac{\partial \rho F \gamma_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u F \gamma_i}{\partial x} + \frac{\partial \rho v F \gamma_i}{\partial y} = F W_i, \quad i = 1..N, \quad (1.5)$$

$$P = \rho R T \sum_{i=1}^N \gamma_i, \quad (1.6)$$

$$U = \sum_{i=1}^N \gamma_i U_i(T). \quad (1.7)$$

Здесь x, y – продольная и поперечная координаты, t – время, ρ – плотность, u – скорость смеси вдоль направления x , v – скорость смеси вдоль направления y , P – давление, T – температура, H – энтальпия, $U_i(T)$ – заданная функция [31] – внутренняя энергия и γ_i – мольно-массовая концентрация i -ого компонента в смеси, $\bar{\gamma}$ – вектор мольно-массовых концентраций компонентов смеси, $F = F(x, y)$ – зависимость площади поперечного сечения канала от продольной координаты.

В каналах возможны 3 вида течения газа:

- 1) «Замороженное» – $\gamma_i = const, W_i = 0$, химические реакции не протекают;
- 2) «Равновесное» – $\gamma_i: W_i(P, Y, \bar{\gamma}) = 0$, химические реакции протекают с бесконечно большими скоростями. В условиях химического равновесия концентрации химических компонентов так же удовлетворяют уравнениям материального баланса;
- 3) «Неравновесное» – $W_i(P, Y, \bar{\gamma}) \neq 0$, химические реакции протекают с конечными скоростями.

При постановке ударной волны на ней разрешались интегральные законы сохранения (в форме соотношений Ренкина-Гюгонио) [34]:

$$\rho_1 v_1 = \rho_2 v_2, \quad (1.8)$$

$$P_1 + \rho_1 v_1^2 = P_2 + \rho_2 v_2^2, \quad (1.9)$$

$$E_1 + \frac{P_1}{\rho_1} + \frac{v_1^2}{2} = H_2 + \frac{P_2}{\rho_2} + \frac{v_2^2}{2}, \quad (1.10)$$

$$\bar{\gamma}_1 = \bar{\gamma}_2. \quad (1.11)$$

Индексами «1» и «2» обозначены параметры слева и справа от разрыва.

1.2 Модель термодинамики и химической кинетики

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

$$\sum_{i=1}^N \bar{v}_i^{(r)} M_i \xrightleftharpoons[\bar{W}^{(r)}]{\bar{W}^{(r)}} \sum_{i=1}^N \bar{v}_i^{(r)} M_i, \quad \bar{q}^{(r)} = \sum_{i=1}^N \bar{v}_i^{(r)}, r = 1..N_r, \quad (1.12)$$

где r – порядковый номер реакции, $\bar{v}_i^{(r)}$ – стехиометрические коэффициенты, $\bar{q}^{(r)}$ – молекулярность соответствующих элементарных реакций, $\bar{W}^{(r)}$ – скорость (r)-ой химической реакции в прямом и обратном направлениях [21, 89].

Скорость химической реакции прямо пропорциональна произведению объемных концентраций участвующих компонентов и константы скорости реакции $\bar{K}^{(r)}$:

$$\bar{W}^{(r)} = \bar{K}^{(r)} \prod_i (\rho \gamma_i)^{\bar{v}_i^{(r)}}, \left[\frac{\text{моль}}{\text{с} \cdot \text{м}^3} \right], \quad (1.13)$$

где ρ – плотность, γ_i – концентрация i -того компонента смеси.

Константа скоростей прямых реакций рассчитывается по обобщенной формуле Аррениуса:

$$\bar{K}^{(r)} = AT^n \exp\left(-\frac{E}{T}\right), \left[\frac{(\text{моль}/\text{м}^3)^{\bar{q}^{(r)}-1}}{\text{с}} \right], \quad (1.14)$$

где A , n , E – постоянные величины, индивидуальные для каждой реакции, T – температура смеси.

Зная скорость химической реакции, выражение для числа молей i -того компонента, образующегося в реакциях в кубическом метре смеси в единицу времени имеет вид:

$$W_i = \sum_{r=1}^{N_R} (\hat{v}_i^{(r)} - \vec{v}_i^{(r)}) (\vec{W}^{(r)} - \bar{W}^{(r)}). \quad (1.15)$$

Состояние термодинамического равновесия соответствует точке минимума соответствующей характеристической функции. В состоянии термодинамического равновесия должно выполняться условие химического равновесия, то есть состав смеси не должен меняться:

$$\sum_{i=1}^N \mu_i d\gamma_i = 0, \quad (1.16)$$

где μ_i – химический потенциал i -того компонента смеси.

Поскольку $W_i = \rho \frac{d\gamma_i}{dt}$, то

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \mu_i \sum_{r=1}^{N_R} (\hat{v}_i^{(r)} - \vec{v}_i^{(r)}) (\vec{W}^{(r)} - \bar{W}^{(r)}) = \\ \sum_{r=1}^{N_R} (\vec{W}^{(r)} - \bar{W}^{(r)}) \sum_{i=1}^N (\hat{v}_i^{(r)} - \vec{v}_i^{(r)}) = 0. \end{aligned} \quad (1.17)$$

Отсюда получаем другую запись условия химического равновесия (принцип постадийного согласования):

$$\sum_{i=1}^N \mu_i (\hat{v}_i^{(r)} - \vec{v}_i^{(r)}) = 0, r = 1, \dots, N_R. \quad (1.18)$$

Если в качестве независимого набора реакций выбраны реакции образования i -того вещества из элементов, то систему можно переписать в виде:

$$\mu_i = \sum_{K=1}^{N_e} A_K^i \tilde{\mu}_K, i = 1, \dots, N, \quad (1.19)$$

где N_e – количество элементов, $\tilde{\mu}_K$ – химический потенциал K -го элемента, A_K^i – количество атомов K -го элемента в i -ом веществе (матрица состава).

В изолированной системе при отсутствии ядерных превращений при протекании химических реакций сохраняется число элементарных частиц:

$$\sum_{i=1}^N A_K^i \gamma_i = \gamma_K^0, K = 1, \dots, N_e, \quad (1.20)$$

где γ_K^0 - количество молей K -ого элемента в смеси.

Уравнения равновесия устанавливают зависимость N концентраций и двух термодинамических величин от N_e параметров $\tilde{\mu}_K$. Задача расчета равновесного состава при заданных двух термодинамических величинах может быть сведена к решению системы из N_e уравнений, в которой γ_i рассматриваются как неявные функции $\tilde{\mu}_K$. В качестве независимых переменных могут выступать химические потенциалы произвольных веществ, входящих в смесь.

В состоянии термодинамического равновесия $W_i = 0$. Значит, скорости химических реакций не могут быть выбраны произвольно, а должны рассчитываться с учетом обеспечения перехода системы в равновесное состояние.

Термодинамические свойства отдельного вещества описываются следующими параметрами [31]:

- $\Delta_f H^0(T_0)$ - энтальпия образования вещества при стандартных условиях из простых веществ;
- $S(T_0, P_0)$ - энтропия вещества в стандартном состоянии;
- $C_P(T) = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_P$ - зависимость изобарной теплоемкости от температуры;
- Термическое уравнение состояния $PV = RT$, где P -давление, V -объем, R -универсальная газовая постоянная, равная $8.3144 \frac{\text{Дж}}{\text{моль}\cdot\text{К}}$.

Энтальпия совершенного газа является функцией температуры и может быть представлена в виде

$$H(T) = \Delta_f H^0(T_0) + \int_{T_0}^T C_P dT = \Delta_f H^0(T_0) + [H(T) - (T_0)]. \quad (1.21)$$

Энтальпия любого вещества при температуре T равна количеству теплоты, которое необходимо подвести в изобарном процессе, чтобы из стандартного набора веществ, энтальпии образования которых полагаются равными нулю [31], при температуре T_0 получить данное вещество и нагреть его до температуры T . $H^0(T_0)$ - температура образования вещества при $T_0 = 298.15 \text{ K}$ [31].

Избыточная энтальпия $[H(T) - H^0(T_0)]$ может быть рассчитана как:

$$[H(T) - H^0(T_0)] = [H(T) - H^0(0)] - [H(T_0) - H^0(0)] \quad (1.22)$$

Из первого начала термодинамики между энтропией и теплоемкостью при постоянном давлении может быть получена связь. Так как

$$TS = H - G, \text{ то}$$

$$(TS)'_T|_P = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_P - \left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_P,$$

$$S + T \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_P = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_P + S,$$

$$\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_P = \frac{1}{T} \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_P = \frac{C_P}{T},$$

$$S(T_0, P_0) = \int_0^{T_0} \frac{C_P}{T} dT. \quad (1.23)$$

Для потенциала Гиббса в случае модели совершенного газа:

$$PV = RT,$$

$$-\left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_T = \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P = \frac{R}{P},$$

$$dS(P, T) = \frac{\partial S}{\partial P} dP + \frac{\partial S}{\partial T} dT,$$

$$\begin{aligned} S(P, T) &= S(P_0, T_0) + \int_{T_0}^T \frac{C_P}{T} dT - \int_{P_0}^P \frac{R}{P} dP = S(P_0, T_0) + S(P_0, T) - \\ S(P_0, T_0) - R \ln P + R \ln P_0 &= S(P_0, T) - R \ln \frac{P}{P_0}, \end{aligned} \quad (1.24)$$

где P_0 – нормальное атмосферное давление, можно получить выражение:

$$G(P, T) = H(T) - TS(P, T) = H(T) - TS^0(T) + RT \ln \frac{P}{P_0}. \quad (1.25)$$

Если обозначить

$$G^0(T) = H(T) - TS^0(T), \quad (1.26)$$

то потенциал Гиббса для отдельного компонента может быть записан как

$$G(P, T) = G^0(T) + RT \ln \frac{P}{P_0}. \quad (1.27)$$

$G^0(T)$ может быть рассчитан [31] с помощью полиномиальных аппроксимационных формул для приведенного стандартного потенциала $\Phi^0(T)$, с которым он связан соотношением

$$\begin{aligned} G^0(T) &= \Delta_f H^0(T_0) - [H^0(T_0) - H^0(0)] - T\Phi^0(T), \\ \Phi^0(x) &= \phi_0 + \phi_{\ln} \ln(x) + \phi_{-2} x^{-2} + \phi_{-1} x^{-1} + \phi_1 x + \phi_2 x^2 + \phi_3 x^3, \\ x &= 10^{-4} T, \end{aligned} \quad (1.28)$$

где коэффициенты ϕ индивидуальны для каждого вещества и могут быть рассчитаны, если известны зависимость теплоемкости от температуры, энтальпия образования и стандартная энтропия.

С использованием (1.28) могут быть получены выражения для $H(T)$, $S^0(T)$, $C_p(T)$:

$$\frac{dG^0(T)}{dT} = \frac{dH(T)}{dT} - T \frac{dS^0(T)}{dT} - S^0(T) = -S^0(T). \quad (1.29)$$

1. Энтальпия

$$\begin{aligned} H(T) &= G^0(T) - T \frac{dG^0(T)}{dT} = G^0(T) + T \left[\Phi^0(T) + T \frac{d\Phi^0(T)}{dT} \right] = \\ &= G^0(T) + T\Phi^0(T) + T^2 \frac{d\Phi^0(T)}{dT} = \Delta_f H^0(T_0) - [H^0(T_0) - H^0(0)] + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +T^2 \times [\phi_{ln} \frac{1}{T} - 2\phi_{-2}(10^{-4})^{-2}T^{-3} - \phi_{-1}(10^{-4})^{-1}T^{-2} + \phi_1 10^{-4} + \\
& + 2\phi_2(10^{-4})^2T + 3\phi_3(10^{-4})^3T^2] = \\
& = \Delta_f H^0(T_0) - [H^0(T_0) - H^0(0)] + \phi_{ln}T - 2\phi_{-2}(10^{-4})^{-2}T^{-1} - \\
& - \phi_{-1}(10^{-4})^{-1} + \phi_1 10^{-4}T^2 + 2\phi_2(10^{-4})^2T^3 + 3\phi_3(10^{-4})^3T^4 = |T = x \cdot \\
& 10^4| = \\
& = \Delta_f H^0(T_0) - [H^0(T_0) - H^0(0)] + \phi_{ln} 10^4 x - \\
& - 2\phi_{-2}(10^4)x^{-1} - \phi_{-1}10^4 + \phi_1 10^4 x^2 + 2\phi_2 10^4 x^3 + 3\phi_3 10^4 x^4; \quad (1.30)
\end{aligned}$$

2. Энтропия

$$\begin{aligned}
S^0(T) &= -\frac{dG^0(T)}{dT} = \Phi^0(T) + T \frac{d\Phi^0(T)}{dT} = \Phi^0(T) + T \times \\
& \times \left[\phi_{ln} \frac{1}{T} - 2\phi_{-2}(10^{-4})^{-2}T^{-3} - \phi_{-1}(10^{-4})^{-1}T^{-2} + \phi_1 10^{-4} + 2\phi_2(10^{-4})^2T \right. \\
& \left. + 3\phi_3(10^{-4})^3T^2 \right] = \\
& = \phi_0 + \phi_{ln} \ln(10^{-4}T) + \phi_{-2}(10^{-4})T^{-2} + \phi_{-1}(10^{-4})^{-1} + \phi_1(10^{-4}T) + \\
& + \phi_2(10^{-4}T)^2 + \phi_3(10^{-4}T)^3 + \\
& + \phi_{ln} - 2\phi_{-2}(10^{-4})^{-2}T^{-2} - \phi_{-1}(10^{-4})^{-1} + \phi_1 10^{-4}T + 2\phi_2(10^{-4})^2T^2 + \\
& + 3\phi_3(10^{-4})^3T^3 = \\
& = |T = x \cdot 10^4| = \phi_{ln}(1 + \ln(x)) - \phi_{-2}x^{-2} + \phi_0 + 2\phi_1 x^1 + 3\phi_2 x^2 + \\
& + 4\phi_3 x^3; \quad (1.31)
\end{aligned}$$

3. Изобарная теплоемкость

$$\begin{aligned}
C_P(T) &= \frac{dH(T)}{dT} = \\
& = \frac{\partial}{\partial T} (\Delta_f H^0(T_0) - [H^0(T_0) - H^0(0)] + \phi_{ln}T - 2\phi_{-2}(10^{-4})^{-2}T^{-1} - \\
& - \phi_{-1}(10^{-4})^{-1} + \phi_1 10^{-4}T^2 + 2\phi_2(10^{-4})^2T^3 + 3\phi_3(10^{-4})^3T^4) =
\end{aligned}$$

$$= |T = x \cdot 10^4| = \phi_{ln} + 2\phi_{-2}x^{-2} + 2\phi_1x + 6\phi_2x^2 + 12\phi_3x^3. \quad (1.32)$$

В [31] для веществ приводятся таблицы величин в интервале температур от 100 К до 20000 К, значения для коэффициентов ϕ - в интервале от 500 К до 6000 К. В диапазоне от 100 К до 500 К значения коэффициентов необходимо восстанавливать по табличным данным. При выходе температуры за диапазон от 100 К до 6000 К в работе предполагается, что теплоемкость остается постоянной. Тогда энтальпия и энтропия могут быть получены следующим образом:

$$H(T) = H(T_\Gamma) + \int_{T_\Gamma}^T C_P dT = H(T_\Gamma) + C_P(T_\Gamma)[T - T_\Gamma], \quad (1.33)$$

$$S^0(T) = S^0(T_\Gamma) + \int_{T_\Gamma}^T \frac{C_P}{T} dT = S^0(T_\Gamma) + C_P(T_\Gamma) \ln \frac{T}{T_\Gamma}, \quad (1.34)$$

где T_Γ – обобщенное значение температуры на границе диапазона (верхней или нижней).

Для смеси совершенных газов давление равно сумме парциальных давлений:

$$P_i = P x_i, \quad (1.35)$$

где $x_i = \frac{\gamma_i}{\sum_{j=1}^N \gamma_j}$ - мольная доля i -того компонента.

Молярный потенциал Гиббса отдельного компонента может быть записан как

$$G_i(P_i, T) = G_i^0(T) + RT \ln \frac{P_i}{P_0},$$

а удельный потенциал Гиббса -

$$G(P, T, \bar{\gamma}) = \sum_{i=1}^N \gamma_i \left(G_i^0(T) + RT \ln \frac{P_i}{P_0} \right). \quad (1.36)$$

Термическое уравнение состояния смеси совершенных газов имеет вид:

$$PV = RT \sum_{i=1}^N \gamma_i. \quad (1.37)$$

Термодинамические величины могут быть выражены через потенциал Гиббса и его производные:

1. Энтропия

$$\begin{aligned} S(P, T, \bar{\gamma}) &= - \frac{\partial G(P, T, \bar{\gamma})}{\partial T} \Big|_{P, \bar{\gamma}} \Rightarrow \\ \Rightarrow S(P, T, \bar{\gamma}) &= \sum_{i=1}^N \gamma_i \left[S_i^0(T) - R \ln \left(\frac{P \gamma_i}{P_0 \sum_{j=1}^N \gamma_j} \right) \right]; \end{aligned} \quad (1.38)$$

2. Энтальпия

$$\begin{aligned} H_i(T) &= G_i^0(T) + T S_i^0(T) = G_i^0(T) - T \frac{dG_i^0(T)}{dT}, \\ H(T, \bar{\gamma}) &= G(P, T, \bar{\gamma}) - T \frac{\partial G(P, T, \bar{\gamma})}{\partial T} \Big|_{P, \bar{\gamma}} \Rightarrow \\ \Rightarrow H(T, \bar{\gamma}) &= \sum_{i=1}^N \gamma_i H_i(T); \end{aligned} \quad (1.39)$$

3. Изобарная теплоемкость

$$C_p(T, \bar{\gamma}) = \frac{\partial H(T, \bar{\gamma})}{\partial T} = \sum_{i=1}^N \gamma_i \frac{dH_i(T)}{dT}; \quad (1.40)$$

4. Химический потенциал

$$\begin{aligned} \mu_k(P, T, \bar{\gamma}) &= \left(\frac{\partial G}{\partial \gamma_k} \right)_{P, T, \gamma_j, k \neq j} = G_k^0 + RT \ln \left| \frac{P \gamma_k}{P_0 \sum_{j=1}^N \gamma_j} \right| + \\ &\gamma_k RT \left(\ln \left| \frac{P \gamma_k}{P_0 \sum_{j=1}^N \gamma_j} \right| \right)_{\gamma_k} + \\ &+ \left(\sum_{i=1, i \neq k}^N \gamma_i \left(G_i^0(T) + RT \ln \left| \frac{P \gamma_i}{P_0 \sum_{j=1}^N \gamma_j} \right| \right) \right)_{\gamma_k} = G_k^0(T) + RT \ln \left| \frac{P \gamma_k}{P_0 \sum_{j=1}^N \gamma_j} \right| + \\ &+ \gamma_k RT \left(\frac{1}{\gamma_k} - \frac{1}{\sum_{j=1}^N \gamma_j} \right) - \sum_{i=1, i \neq k}^N \frac{\gamma_i RT}{\sum_{j=1}^N \gamma_j} = \\ &= G_k^0(T) + RT \ln \left| \frac{P \gamma_k}{P_0 \sum_{j=1}^N \gamma_j} \right| + RT - \frac{\gamma_k RT}{\sum_{j=1}^N \gamma_j} - \sum_{i=1, i \neq k}^N \frac{\gamma_i RT}{\sum_{j=1}^N \gamma_j} \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \mu_k(P, T, \bar{\gamma}) = G_k^0(T) + RT \ln \left| \frac{P\gamma_k}{P_0 \sum_{j=1}^N \gamma_j} \right|, k = 1, \dots, N. \quad (1.41)$$

В состоянии термодинамического равновесия концентрации компонентов не изменяются, и, как следствие, должно выполняться условие

$$W_i(P, T, \bar{\gamma}) = \sum_{(r)} (\bar{v}_i^{(r)} - \bar{v}_i^{(r)}) (\bar{W}^{(r)} - \bar{W}^{(r)}) = 0, i = 1, \dots, N.$$

В состоянии термодинамического равновесия $\bar{W}^{(r)} = \bar{W}^{(r)}$, значит

$$\bar{K}^{(r)}(T) \prod_{i=1}^N (\rho\gamma_i)^{\bar{v}_i^{(r)}} = \bar{K}^{(r)}(T) \prod_{i=1}^N (\rho\gamma_i)^{\bar{v}_i^{(r)}}, r = 1, \dots, N_R,$$

$$\frac{\bar{K}^{(r)}}{\bar{K}^{(r)}} = \prod_{i=1}^N (\rho\gamma_i)^{(\bar{v}_i^{(r)} - \bar{v}_i^{(r)})}, r = 1, \dots, N_R. \quad (1.42)$$

Подставляя выражение для химического потенциала в запись условия химического равновесия, получим:

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^N (\bar{v}_i^{(r)} - \bar{v}_i^{(r)}) \left[RT \ln \left(\frac{P\gamma_i}{P_0 \sum_{j=1}^N \gamma_j} \right) + G_i^0(T) \right] = \\ & \sum_{i=1}^N \left[\ln \left(\frac{\rho RT \gamma_i}{P_0} \right)^{(\bar{v}_i^{(r)} - \bar{v}_i^{(r)})} + (\bar{v}_i^{(r)} - \bar{v}_i^{(r)}) \frac{G_i^0(T)}{RT} \right] = \\ & = \sum_{i=1}^N \left[\ln(\rho\gamma_i)^{\bar{v}_i^{(r)} - \bar{v}_i^{(r)}} + \ln \left(\frac{RT}{P_0} \right)^{\bar{v}_i^{(r)} - \bar{v}_i^{(r)}} + (\bar{v}_i^{(r)} - \bar{v}_i^{(r)}) \frac{G_i^0(T)}{RT} \right] = 0, \\ & \prod_{i=1}^N (\rho\gamma_i)^{(\bar{v}_i^{(r)} - \bar{v}_i^{(r)})} = \exp \left[\sum_{i=1}^N (\bar{v}_i^{(r)} - \bar{v}_i^{(r)}) \left(\frac{G_i^0(T)}{RT} + \ln \frac{RT}{P_0} \right) \right], r = 1, \dots, N_R. \end{aligned}$$

Связь между скоростями прямых и обратных реакций:

$$\frac{\bar{K}^{(r)}}{\bar{K}^{(r)}} = \exp \left[\sum_{i=1}^N (\bar{v}_i^{(r)} - \bar{v}_i^{(r)}) \left(\frac{G_i^0(T)}{RT} \right) + \ln \frac{RT}{P_0} \right], r = 1, \dots, N_R. \quad (1.43)$$

Данное соотношение гарантирует неотрицательность вклада в производство энтропии для каждой пары реакций, то есть исключается возможность существования в модели каких-либо нефизических свойств.

1.3 Численные методы и вычислительные алгоритмы

Исходная система уравнений может быть записана в компактной форме:

$$\frac{\partial \vec{q}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{f}}{\partial x} = 0, \quad (1.44)$$

где:

$$\vec{q} - \text{вектор консервативных переменных, } \vec{q} = \begin{pmatrix} \rho F \\ \rho u F \\ \rho \left(U + \frac{u^2}{2} \right) F \\ \rho F \gamma_i \end{pmatrix}$$

$$\vec{f} - \text{вектор потоков, } \vec{f} = \begin{pmatrix} \rho u F \\ (\rho u^2 + P) F \\ \rho u F \left(U + \frac{P}{\rho} + \frac{u^2}{2} \right) \\ \rho u F \gamma_i \end{pmatrix}.$$

Для всей системы уравнений справедливо соотношение в интегральной форме:

$$\iint_{\Omega} \left(\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} \right) dx dt = 0 \Leftrightarrow \oint_{\partial \Omega} (q dx - f dt) = 0 \quad (1.45)$$

по некоторому контрольному объему Ω .

Контурный интеграл может быть представлен в виде суммы интегралов по участкам (интервалам) 1-2, 2-3, 3-4, 4-1 контрольного объёма (рис. 1) и на каждом участке аппроксимирован с использованием метода прямоугольников как произведение подынтегрального выражения в центре интервала на длину интервала интегрирования. Таким образом, может быть получено значение вектора консервативных переменных на новом слое:

$$\vec{q}_{43} = \vec{q}_{12} - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\vec{f}_{23} - \vec{f}_{14}) \Rightarrow \vec{q}_j^{n+1} = \vec{q}_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\vec{f}_{j+\frac{1}{2}} - \vec{f}_{j-\frac{1}{2}}) \quad (1.46)$$

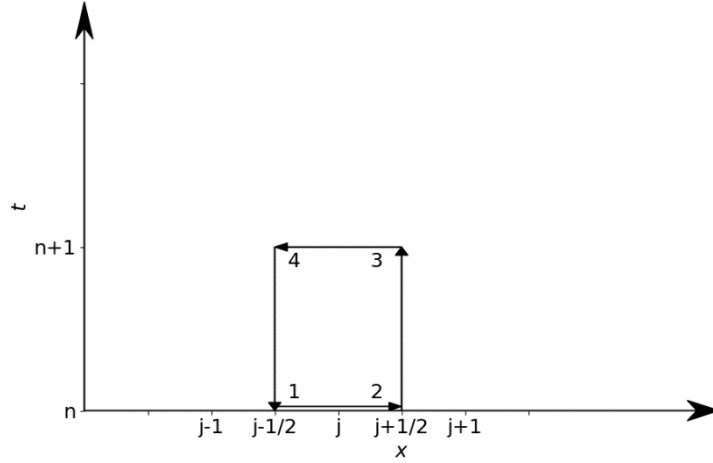


Рис. 1.1. Разностная ячейка

Потоки через боковые грани находятся из решения задачи Римана при помощи применения HLL-решателя [105]:

$$S_R = \min(u_L - a_L, u_R - a_R), \quad S_L = \max(u_L + a_L, u_R + a_R),$$

$$F_{j+\frac{1}{2}}^{HLL} = \begin{cases} F_L, & \text{если } S_L \geq 0, \\ \frac{S_R F_L - S_L F_R + S_L S_R (Q_R - Q_L)}{S_R - S_L}, & \text{если } S_L \leq 0 \leq S_R, \\ F_R, & \text{если } S_R \leq 0. \end{cases} \quad (1.47)$$

Шаг по времени определялся как:

$$\Delta t = \min_j 0.5 \times \frac{\Delta x_j}{\max(|u_j + a_j|, |u_j - a_j|)}. \quad (1.48)$$

Решение всей системы уравнений осуществлялось в 2 этапа: сначала она интегрировалась методом Годунова с шагом Δt , затем с шагом Δt методом, описанным далее, в каждой расчетной точке делалась попытка разрешить кинетические уравнения. Если с данным шагом сходимость отсутствовала, то он уменьшался, и осуществлялось несколько шагов до достижения размера суммарного шага Δt . Если какой-либо уменьшенный шаг становился совсем малым, происходил полный пересчет всего временного слоя с новым временным шагом $\Delta t/2$.

Особенностью постановки и реализации граничных условий в методах контрольного объёма (в том числе и в методе Годунова) является необходимость задания или расчета потоков через грань контрольного объёма. Для первой и последней ячеек расчётного слоя требуется определить потоки массы, импульса и энергии через грани. Для решения данной задачи используются виртуальные расчетные ячейки слева от первой и справа от последней ячеек расчетной области.

В работе были использованы следующие типы граничных условий:

- Неподвижная жесткая стенка – отсутствие протекания массы через границу, что соответствует нулевой скорости потока на грани. Параметры виртуальной ячейки в этом случае имеют вид:

$$\begin{cases} u_w = -u_1, \\ p_w = p_1, \\ \rho_w = \rho_1. \end{cases} \quad (1.49)$$

- Вытекающий сверхзвуковой поток – параметры виртуальной ячейки задаются как

$$\begin{cases} u_w = u_N, \\ p_w = p_N, \\ \rho_w = \rho_N. \end{cases} \quad (1.50)$$

- Втекающий сверхзвуковой поток – параметры виртуальной ячейки задаются как

$$\begin{cases} u_w = u_1, \\ p_w = p_1, \\ \rho_w = \rho_1. \end{cases} \quad (1.51)$$

Индексом «w» обозначены параметры виртуальной ячейки, а индексами «1», «N» – параметры реальной ячейки расчетной области.

Основным расчетным методом для уравнений химической кинетики был выбран оригинальный метод из [74]. Преимуществом данного метода

является его ориентация на разрешение жестких систем дифференциальных уравнений [98, 100] с ориентацией на решение задач химических превращений. Схема расчета согласно ему может быть представлена следующим образом:

1. Подготовка

1.1 Вычисляем $U(T)|_{T=T^0} = H(T^0) - R \sum_{i=1}^N \gamma_i \cdot T^0$;

1.2 Принимаем $U(T)|_{T=T^0}$ и ρ за константу, больше она пересчитываться не будет;

1.3 Инициализировать $m = 0, T = T^0$;

2. Термодинамический блок

2.1 Инициализировать $n = 0, T^0 = T$;

2.2 Находим $T^{n+1} = T^n - \frac{F(T^n)}{F'(T^n)}$, $F(T) = \sum_{i=1}^N \gamma_i^m U_i(T) - U(T)|_{T=T^0}$,
 $F'(T) = \sum_{i=1}^N \gamma_i^m (C_{P_i} - R)$;

2.3 Если $|T^{n+1} - T^n| < \varepsilon$ или $n = 100$, положить $T = T^{n+1}$ и перейти в блок (2.), иначе увеличить n на 1 и перейти в (1.2);

Химический блок

3.1 Нулевое приближение $k = 0, \gamma_{n+1,i}^k = \gamma_{n,i}$;

3.2 Вычисление невязки

$$\varphi_{n,i} = \frac{1}{\rho} \sum_{(r)} (\vec{v}_i^{(r)} \overleftarrow{W}_{n,i}^{(r)} + \hat{v}_i^{(r)} \overrightarrow{W}_{n,i}^{(r)})$$

$$\Phi_{n,i} = \frac{1}{\rho} \sum_{(r)} (\vec{v}_i^{(r)} \overrightarrow{W}_{n,i}^{(r)} + \hat{v}_i^{(r)} \overleftarrow{W}_{n,i}^{(r)})$$

$$\varphi_{n+1,i}^k = \frac{1}{\rho} \sum_{(r)} (\vec{v}_i^{(r)} \overleftarrow{W}_{n+1,i}^{(r)} + \hat{v}_i^{(r)} \overrightarrow{W}_{n+1,i}^{(r)})$$

$$\Phi_{n+1,i}^k = \frac{1}{\rho} \sum_{(r)} (\vec{v}_i^{(r)} \overrightarrow{W}_{n+1,i}^{(r),k} + \hat{v}_i^{(r)} \overleftarrow{W}_{n+1,i}^{(r),k})$$

$$D_i^k = \gamma_{n+1,i}^k - \gamma_{n,i} - \sigma h(\varphi_{n,i} - \Phi_{n,i}) - (1 - \sigma)h(\varphi_{n+1,i}^k - \Phi_{n+1,i}^k)$$

3.3 Если $|D_i^k| \leq \varepsilon_1$, выполнить следующий шаг интегрирования по времени, иначе перейти к [3.4];

3.4 Промежуточный шаг

3.4.1 Расчет коэффициента приращения

$$\beta = \frac{1}{\max_i(1+h(1-\sigma)(\Phi_{n+1,i}^k/\gamma_{n+1,i}^k))}, \forall \gamma_{n+1,i}^k \geq \varepsilon_2$$

3.4.2 Расчет промежуточных концентраций

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

3.4.3. Проверка

Если $\gamma_{n+1,i}^{k+\frac{1}{2}} < 0$, то $\forall i \gamma_{n+1,i}^{k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(\gamma_{n+1,i}^{k+\frac{1}{2}} + \gamma_{n+1,i}^k)$, повторять до ложности условия отрицательности;

3.5 Вычисление $\xi_{\text{опт}}$

$$H_i^{k+\frac{1}{2}} = -\frac{\gamma_{n,i} - \sigma\Phi_{n,i}h}{\gamma_{n+1,i}^{k+\frac{1}{2}} + (1-\sigma)\Phi_{n+1,i}^{k+\frac{1}{2}}h} - \frac{(\sigma\varphi_{n,i} + (1-\sigma)\varphi_{n+1,i}^{k+\frac{1}{2}})h}{\gamma_{n+1,i}^{k+\frac{1}{2}} + (1-\sigma)\Phi_{n+1,i}^{k+\frac{1}{2}}h} + 1, \forall \gamma_{n+1,i}^{k+\frac{1}{2}} > \varepsilon_2$$

$$H_i^{k+\frac{1}{2}} = \gamma_{n+1,i}^{k+\frac{1}{2}} - \gamma_{n+1,i} - \sigma h(\varphi_{n,i} - \Phi_{n,i}) - (1 - \sigma)h\left(\varphi_{n+1,i}^{k+\frac{1}{2}} - \Phi_{n+1,i}^{k+\frac{1}{2}}\right),$$

$$\forall \gamma_{n+1,i}^{k+\frac{1}{2}} \leq \varepsilon_2$$

$$H_i^k = -\frac{\gamma_{n,i} - \sigma\Phi_{n,i}h}{\gamma_{n+1,i}^k + (1-\sigma)\Phi_{n+1,i}^k h} - \frac{(\sigma\varphi_{n,i} + (1-\sigma)\varphi_{n+1,i}^k)h}{\gamma_{n+1,i}^k + (1-\sigma)\Phi_{n+1,i}^k h} + 1, \forall \gamma_{n+1,i}^k > \varepsilon_2$$

$$H_i^k = \gamma_{n+1,i}^k - \gamma_{n+1,i} - \sigma h(\varphi_{n,i} - \Phi_{n,i}) - (1 - \sigma)h(\varphi_{n+1,i}^k - \Phi_{n+1,i}^k),$$

$$\forall \gamma_{n+1,i}^k \leq \varepsilon_2$$

$$a = (\bar{H}^k - \bar{H}^{k+\frac{1}{2}}, \bar{H}^k - \bar{H}^{k+\frac{1}{2}})$$

$$b = 2(\bar{H}^k - \bar{H}^{k+\frac{1}{2}}, \bar{H}^{k+\frac{1}{2}})$$

$$\xi_{\text{опт}} = -\frac{b}{2a}$$

3.6 Вычисление новых концентраций

$$\gamma_{n+1,i}^{k+1} = \xi_{\text{опт}} \gamma_{n+1,i}^k + (1 - \xi_{\text{опт}}) \gamma_{n+1,i}^{k+\frac{1}{2}}$$

3.7 Проверка на неотрицательность компонент. Вычисление нормы

НЕВЯЗОК

$$s_1 = \sqrt{\sum_i (H_i^k)^2}$$

$$s_2 = \sqrt{\sum_i (H_i^{k+\frac{1}{2}})^2}$$

Если $s_1 < s_2$, то $\gamma_{\text{лучшее},i} = \gamma_{n+1,i}^k$, иначе $\gamma_{\text{лучшее},i} = \gamma_{n+1,i}^{k+\frac{1}{2}}$

Пока $\gamma_{n+1,i}^{k+1} < 0$ делать следующее: $\forall i \gamma_{n+1,i}^{k+1} = \frac{1}{2}(\gamma_{n+1,i}^{k+1} + \gamma_{\text{лучшее},i})$

3.8 Проверка на сходимость

$$H_i^{k+1} = -\frac{\gamma_{n,i} - \sigma \Phi_{n,i} h}{\gamma_{n+1,i}^{k+1} + (1-\sigma) \Phi_{n+1,i}^{k+1} h} - \frac{(\sigma \varphi_{n,i} + (1-\sigma) \varphi_{n+1,i}^{k+1}) h}{\gamma_{n+1,i}^{k+1} + (1-\sigma) \Phi_{n+1,i}^{k+1} h} + 1, \forall \gamma_{n+1,i}^{k+1} > \varepsilon_2$$

$$H_i^{k+1} = \gamma_{n+1,i}^{k+1} - \gamma_{n+1,i} - \sigma h(\varphi_{n,i} - \Phi_{n,i}) - (1-\sigma)h(\varphi_{n+1,i}^{k+1} - \Phi_{n+1,i}^{k+1}),$$

$$\forall \gamma_{n+1,i}^{k+1} \leq \varepsilon_2$$

Если $\forall i H_i^{k+1} < \varepsilon_1$, то перейти на следующий шаг интегрирования, иначе $k = k + 1$ и перейти на шаг (2.2).

1.4 Тестирование

Для тестирования численного метода интегрирования уравнений химической кинетики была реализована тестовая модель адиабатической реакции при постоянной плотности из [74]:

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

$$\rho \frac{d\gamma_i}{dt} = W_i(\rho, T, \gamma_1, \dots, \gamma_N), \gamma_i(0) = \gamma_i^0, i = 1, \dots, N, \quad (1.52)$$

$$\rho = const, U = const.$$

Кинетический механизм для данного теста состоял из 19 обратимых стадий с участием 8 компонент [75]. Начальная температура была положена $T_0 = 950\text{K}$; 1000K ; 1100K ; 1200K , начальная плотность $\rho_0 = 0.1 \text{ кг/м}^3$, в качестве реагирующего газа была взята стехиометрическая смесь водорода и кислорода. Была получена характерная задержка воспламенения в момент времени $t \approx 50\text{мкс}$, установление температуры продуктов сгорания на уровне $\sim 3300\text{K}$ (рис. 1.2) и изменение концентраций компонент смеси при воспламенении (рис. 1.3) аналогично результатам в [74].

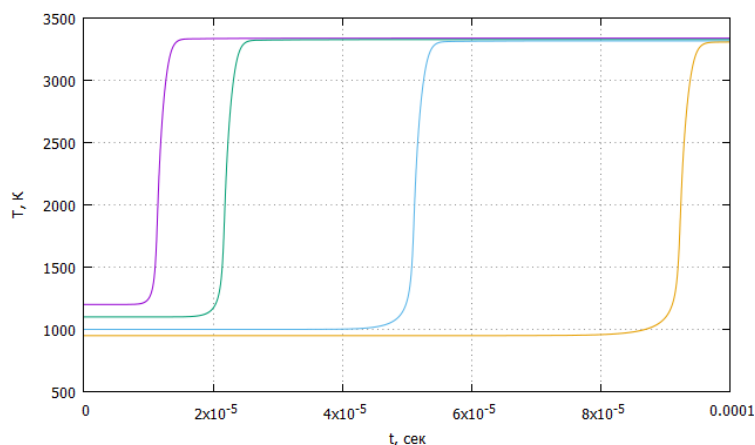


Рис. 1.2. Распределение температуры в модели адиабатической реакции при постоянной плотности

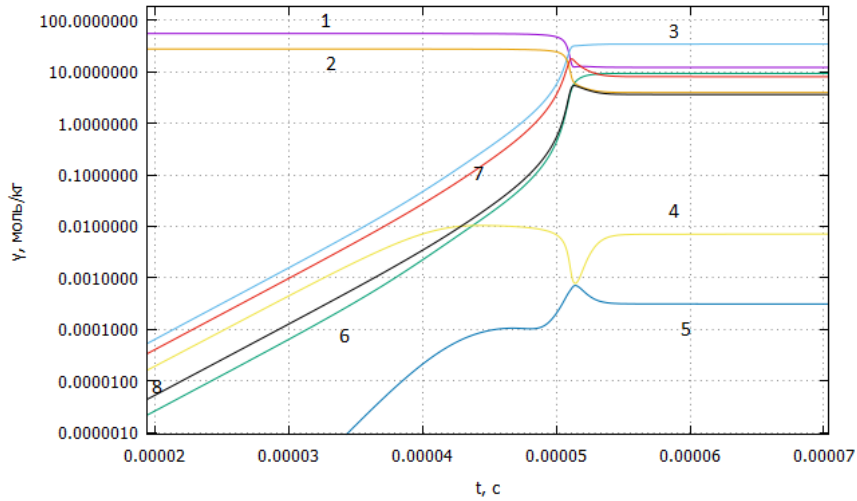


Рис. 1.3. Распределение концентраций компонент смеси в модели адиабатической реакции при постоянной плотности при $T_0 = 1000$ К. 1 - H_2 , 2 - O_2 , 3 - H_2O , 4 - NO_2 , 5 - H_2O_2 , 6 - OH , 7 - H , 8 - O

В качестве теста для проверки методики численного моделирования нестационарных течений была взята задача о движении изолированной ударной волны, распространяющейся в канале, заполненном нереагирующим идеальным газом с показателем адиабаты $\kappa = 1.4$ с синусоидальным распределением плотности перед ударной волной. Постановка задачи взята из [76]. В ней рассматривается распад произвольного разрыва в точке $x = 0.2$ со следующим заданием безразмерных начальных параметров:

$$\rho = \begin{cases} 3,857143, & x < 0,2, \\ 1 + 0.2 \sin(50(0.2 - x)), & x > 0,2, \end{cases} \quad (1.53)$$

$$u = \begin{cases} 3.857143, & x < 0,2, \\ 1 + 0.2 \sin(50(0.2 - x)), & x > 0,2, \end{cases} \quad P = \begin{cases} 10.333333, & x < 0,2, \\ 1, & x > 0,2. \end{cases}$$

Расчет проводился до момента времени $t = 0.18$ с. При отсутствии аналитического решения в качестве точного бралось численное решение, полученное на такой подробной сетке, что увеличение числа точек разбиения не влияет на вид решения. В данной работе такое число точек равно 15000 (рис. 1.4). Область за ударной волной разделилась на подобласти

высокочастотных, низкочастотных колебаний и невозмущенных параметров, что хорошо согласуется с результатами, приведенными в [76].

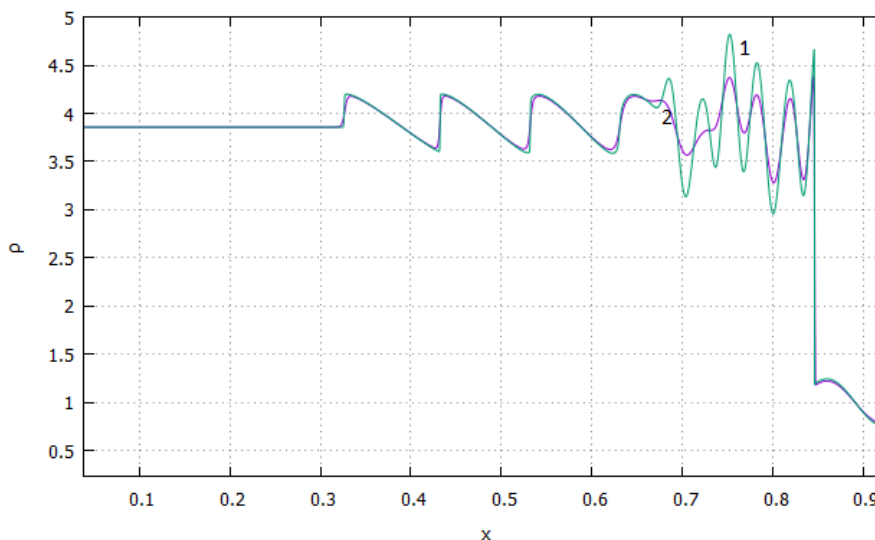


Рис. 1.4 Распределение плотности в момент времени $t = 0.18$ с. 1 – решение, полученное при разбиении расчетной области на 15000 точек, 2 – решение, полученное при разбиении расчетной области на 3000 точек

Тестирование методики моделирования неравновесного течения осуществлялось путем моделирования стационарного течения стехиометрической смеси водорода с кислородом ($H_2 + 0,5O_2$) в канале постоянного сечения с наличием ударной волны во входном сечении канала и без нее [74] с начальной температурой смеси 1000К и начальным давлением 1 атм.

Табл. 1.1 Кинетический механизм

Реакция	A, моль, м ³ , с, К	n	E, К
$H_2 + M = H + H + M$	5,5 E18	-1	51987
$O_2 + M = O + O + M$	7,2 E18	-1	59340
$H_2O + M = OH + H + M$	5,2 E21	-1,5	59386
$OH + M = O + H + M$	8,5 E18	-1	50830
$H_2O + O = OH + OH$	5,8 E13	0	9059
$H_2O + H = OH + H_2$	8,4 E13	0	10116
$O_2 + H = OH + O$	2,2 E13	0	8455
$H_2 + O = OH + H$	7,5 E13	0	5586

Химические превращения моделировались 8 обратимыми стадиями (Табл. 1.1) [75], в реакциях принимали участие 6 компонентов (H, O, H_2, O_2, H_2O, OH) и смесь водород-воздух ($H_2 + 0.5O_2 + 1.881N_2$) с 7 компонентами ($H, O, H_2, O_2, N_2, H_2O, OH$)

Течение на входе в канал полагалось сверхзвуковым. Было проведено несколько численных экспериментов, в которых варьировалась только начальная скорость потока, с постановкой ударной волны на входе в канал и без нее. После уменьшения скорости входного потока до определенных значений наблюдается отсутствие решения (режим запираия потока). Минимально возможная скорость входного потока с постановкой ударной волны соответствует режиму Чепмена-Жуге и на PV -диаграмме соответствует касательной к равновесной ударной (детонационной) адиабате (кривая 5 рис. 1.5). Течение без постановки ударной волны на входе при уменьшении начальной скорости потока тоже стремится к точке на равновесной ударной адиабате [кривая 8, рис.1.5], при этом, минимально возможные скорости в этих двух конфигурациях будут отличаться [74].

Полученные результаты представлены на PV -диаграмме в виде прямых Рэля-Михельсона (ПРМ) (рис. 1.5). Каждая из ПРМ ограничена ударной и детонационной адиабатами (УА и ДА соответственно), что свидетельствует о высокоточном выполнении законов сохранения. Расчетным путем получен режим Чепмена-Жуге ($v_0 = 2661.3$ м/с), в котором наблюдается касание ПРМ ДА (кривая 5), при уменьшении скорости решение отсутствует. Получены безударные режимы течения (кривые 6-8). Необходимо отметить, что в этом случае минимальная скорость потока, при которой существует решение: $v_0 = 2664.7$ м/с, что несколько больше скорости Чепмена-Жуге. Результаты расчетов хорошо согласуются с данными [74].

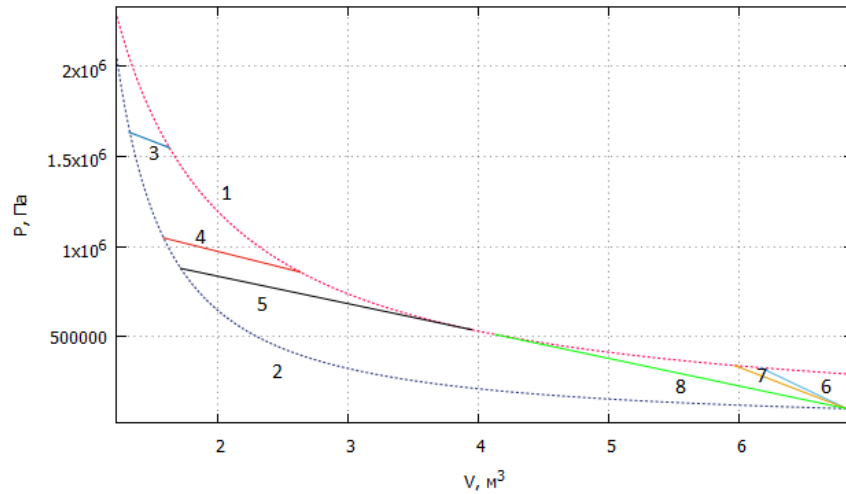


Рис. 1.5. PV-диаграмма стационарного неравновесного течения в канале постоянной формы. 1- равновесная детонационная адиабата, 2 - ударная адиабата 3-ПРМ для течения с $v_0 = 3600$ м/с за УВ, 4-ПРМ для течения с $v_0 = 2900$ м/с за УВ, 5-ПРМ для течения с $v_0 = 2661,3$ м/с за УВ, 6-ПРМ для течения с $v_0 = 4000$ м/с, 7-ПРМ для течения с $v_0 = 3600$ м/с за УВ, 8-ПРМ для течения с $v_0 = 2664,7$ м/с за УВ

В качестве тестовой задачи также было рассмотрено автомодельное течение, задача «о распаде произвольного разрыва», в литературе именуемая как «тест Сода» [85]. 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. Начальное распределение параметров задавалось как

$$\rho = \begin{cases} 1,0, & x < 0,5, \\ 0,125, & x > 0,5, \end{cases} \quad (1.54)$$

$$u = 0, \gamma = 1.4, P = \begin{cases} 1,0, & x < 0,5, \\ 0,1, & x > 0,5. \end{cases}$$

На рис. 1.6 представлены распределения контрольных параметров, полученных при решении данной задачи с использованием разработанного программного комплекса.

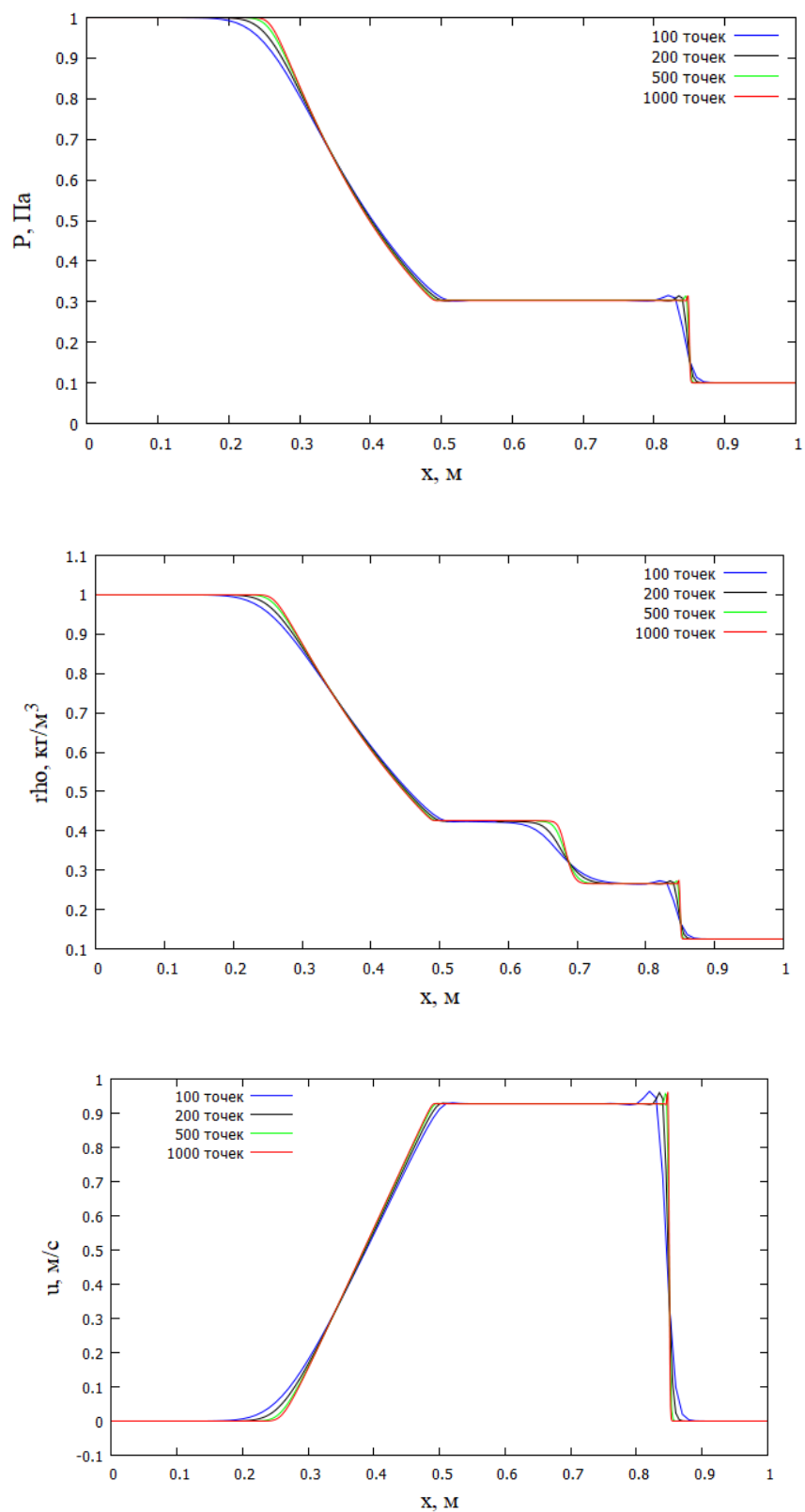


Рис. 1.6. Тест Сода, распределение параметров течения в момент времени $t = 0.2$ в зависимости от количества узлов в расчетной области

Выводы

В данной главе приведено описание используемой в работе физико-математической модели течения газовой смеси, включающей законы сохранения массы, импульса, энергии и подмоделей термодинамики и химических превращений. Приведены базовые вычислительные алгоритмы. Даны результаты, полученные при решении тестовых задач, показывающее корректность математической и численной моделей (задача о получении эволюции параметров в модели адиабатической реакции при постоянной плотности, задача о движении изолированной ударной волны с синусоидальным распределением значений плотности перед волной, численное построение прямых Релея-Михельсона на P - V диаграмме, тест Сода).

ГЛАВА 2. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СТАЦИОНАРНОГО ТЕЧЕНИЯ С ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНОЙ В КАНАЛЕ ПЕРЕМЕННОГО СЕЧЕНИЯ СО СВЕРХЗВУКОВЫМ ПОТОКОМ НА ВХОДЕ И ВЫХОДЕ

Введение

Исследования по стабилизации детонационного горения различных горючих смесей в прямоточных камерах сгорания в настоящее время являются актуальными [110] в связи с разработкой перспективных двигательных установок. Необходимым начальным этапом таких исследований является проведение математического моделирования в одномерной стационарной постановке, для случая, когда продукты сгорания являются смесью совершенных газов при учете равновесного и неравновесного протекания химических превращений. В настоящей главе приводится методика расчета таких течений в канале переменного сечения для случая, когда предварительно перемешанная горючая смесь втекает в канал со сверхзвуковой скоростью, сжигается в детонационной волне и затем разгоняется до сверхзвуковых скоростей.

2.1 Физико-математическая модель течения

Рассматривается случай сжигания топлива в канале переменного сечения, который заканчивается соплом Лавалья, в стационарной детонационной волне с последующим разгоном продуктов сгорания до сверхзвуковых скоростей [34, 77]. При численном моделировании предполагается, что течение одномерное, эффекты вязкости, теплопроводности и диффузии не учитываются. Система уравнений, описывающая квазиодномерные стационарные течения реагирующего газа в канале переменного сечения в областях непрерывности течения, при сделанных выше предположениях имеет вид [34, 74, 77, 88]:

$$\frac{d}{dx} \rho u F = 0, \quad (2.1)$$

$$\frac{d}{dx} (\rho u^2 + P) F = P \frac{dF}{dx}, \quad (2.2)$$

$$\frac{d}{dx} \rho u \left(h + \frac{u^2}{2} \right) F = 0, \quad (2.3)$$

$$P = P(\rho, T, \vec{\gamma}) \quad (2.4)$$

$$h = h(\rho, T, \gamma) \quad (2.5)$$

На входе в канал считаются заданными:

$$u(x_0) = u_0 > a_0, \quad P(x_0) = P_0, \quad T(x_0) = T_0 < T_B, \quad \gamma_i(x_0) = \gamma_{i0}, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (2.6)$$

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 (2.1) - (2.3) выражают законы сохранения массы, импульса и энергии, (2.4), (2.5) - термическое и калорическое уравнение состояния соответственно.

В случае «замороженного» (химический состав не меняется) течения, система уравнений (2.1)-(2.3) дополняется условиями:

$$\gamma_i(x) = \gamma_{i0} \quad (2.7)$$

В «равновесном» (состав продуктов сгорания удовлетворяет условиям термодинамического равновесия [34, 74, 77-79]) случае мольно-массовые концентрации γ_i находятся из условий химического равновесия (2.8) и уравнений сохранения элементного состава (2.9).

$$\mu_i(\rho, T, \vec{\gamma}) = \sum_{K=1}^{N_e} A_i^k z_K, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (2.8)$$

$$\sum_{i=1}^N A_i^k \gamma_i = \sum_{i=1}^N A_i^k \gamma_{i0} = \gamma_k^0, \quad k = 1, 2, \dots, N_e. \quad (2.9)$$

Здесь N_e - число элементов, N - количество рассматриваемых компонент, 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 (2.8) - (2.9) задают концентрации γ_i в состоянии термодинамического равновесия, как неявно-заданные функции плотности, температуры и элементного состава смеси:

$$\gamma_i = \gamma_i(\rho, T, \vec{\gamma}^0) \quad (2.10)$$

Из системы обыкновенных дифференциальных уравнений (2.1) - (2.6) путем эквивалентных преобразований, с использованием первого начала термодинамики (2.11):

$$dG = -SdT + Vdp + \sum_{i=1}^N \mu_i d\gamma_i, \quad (2.11)$$

могут быть получены уравнения для прироста энтропии:

$$\rho u T dS = 0 \quad (2.12)$$

и изменения скорости потока:

$$(M^2 - 1)du = u \frac{F'_x}{F} dx, \quad (2.13)$$

здесь G – потенциал Гиббса, S – энтропия, $V = \frac{1}{\rho}$, M - число Маха ($M = \frac{u}{a}$), a

- скорость звука:

$$a^2 = \frac{h_T P_\rho - h_\rho P_T}{h_T - P_T / \rho}, \quad (2.14)$$

нижние индексы « T », « ρ », « x » - обозначают дифференцирование по соответствующему параметру (в равновесном случае, с учетом зависимостей (2.10) [34, 74, 77-79]). Из (2.1) следует уравнение сохранения расхода:

$$\rho u F = \rho_0 u_0 F_0 = Q_0 \quad (2.15)$$

Из (1) и (3) уравнение сохранения полной энтальпии:

$$h + \frac{u^2}{2} = h_0 + \frac{u_0^2}{2} = H_0 \quad (2.16)$$

Из (2.11) следует, условие сохранения энтропии:

$$S = S_0 \quad (2.17)$$

Таким образом, в «замороженном» и «равновесном» случаях в областях непрерывности течения сохраняются расход, полная энтальпия и энтропия. Из (2.13) 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:

$$M^2 = 1 \text{ и } F'_x = 0. \quad (2.18)$$

Если рассчитывается течение с переходом через скорость звука, то в минимальном сечении канала необходимо задавать условие равенства скорости потока скорости звука, а значение расхода Q_0 считать неизвестным.

В сечениях сопла, в которых находятся линии разрыва параметров, выполняются соотношения Ренкина-Гюгонио [34], являющиеся следствием интегральных законов сохранения, индексом «Л» помечены параметры доволны, индексом «П» — за волной.

$$\rho_L u_L = \rho_P u_P, \quad (2.19)$$

$$P_L + \rho_L u_L^2 = P_P + \rho_P u_P^2, \quad (2.20)$$

$$h_L + \frac{u_L^2}{2} = h_P + \frac{u_P^2}{2}. \quad (2.21)$$

В случае ударной волны соотношения (2.19) - (2.21) дополняются условиями неизменности концентраций при переходе через ударную волну:

$$\gamma_{iL} = \gamma_{iP}. \quad (2.22)$$

При наличии равновесной детонационной волны [77], концентрации за волной удовлетворяют условиям химического равновесия (2.8) - (2.9):

$$\gamma_{iL} = \gamma_{i0}, \quad \gamma_{iP} = \gamma_i(\rho_P, T_P, \vec{\gamma}^0). \quad (2.23)$$

В этом случае, существует минимальная скорость u_L (скорость Чепмена-Жуге), при которой система (2.19)-(2.21), (2.23) имеет решение.

Отметим некоторые свойства невырожденных ударных и детонационных волн, удовлетворяющих соотношениям (2.19) - (2.23) [34]. На

УВ (ДВ) возрастают плотность (ρ), давление (P), температура (T), скорость потока перед УВ (ДВ) ($u_{Л}$) сверхзвуковая за ($u_{П}$)– дозвуковая, энтропия (S) на УВ (ДВ) возрастает: $S_{П} > S_{Л}$. Причем перепад данных параметров на УВ (ДВ) является монотонно возрастающей функцией $u_{Л}$.

Таким образом, течение в канале переменного сечения в «замороженном» и «равновесном» случаях состоит из участков непрерывного течения, на которых энтропия постоянна, и ударных (детонационных) волн, на которых энтропия скачкообразно возрастает. Из уравнений (2.15) - (2.23) также следует, что в рассматриваемых случаях параметры течения в канале зависят от соотношения площадей канала в текущем, начальном, критическом и выходном сечениях и не зависят от продольной координаты.

Соотношения (2.1) - (2.23) справедливы для произвольных термодинамически допустимых уравнений состояния. В работе рассматривается течение, в котором продукты сгорания являются смесью совершенных газов [34, 74, 77-81]. В рассматриваемом случае выражение для потенциала Гиббса смеси [31] имеет вид:

$$G(P, T, \gamma) = \sum_{i=1}^N \gamma_i [RT \ln(P\gamma_i / P_0 \sum_{j=1}^N \gamma_j) + G_i^0(T)]. \quad (2.24)$$

Здесь $G_i^0(T)$ - известные для каждого вещества зависимости [8], $R = 8.3144$ Дж/моль/К– универсальная газовая постоянная; $P_0 = 101325$ Па.

Соответствующие (2.24) термическое и калорическое уравнения состояния имеют вид:

$$P = \rho R \sum_{i=1}^N \gamma_i T \text{ и } h = \sum_{i=1}^N \gamma_i H_i^0(T), \quad (2.25)$$

где $H_i^0(T) = G_i^0(T) + TS_i^0(T)$, $S_i^0(T) = -\frac{dG_i^0(T)}{dT}$.

Для смеси совершенных газов система уравнений (2.15)-(2.17) может быть записана в следующем виде:

$$\rho u F = \rho_0 u_0 F_0 = Q_0 \quad (2.26)$$

$$\sum_{i=1}^N \gamma_i H_i^0(T) + \frac{u^2}{2} = \sum_{i=1}^N \gamma_{i0} H_i^0(T_0) + \frac{u_0^2}{2} = H_0 \quad (2.27)$$

$$\sum_{i=1}^N \gamma_i \left(-R \ln \left(\frac{\rho R T \gamma_i}{P_0} \right) + S_i^0(T) \right) = \sum_{i=1}^N \gamma_{i0} \left(-R \ln \left(\frac{\rho_0 R T_0 \gamma_{i0}}{P_0} \right) + S_i^0(T_0) \right) = S_0 \quad (2.28)$$

Соотношения (2.26), (2.27) выполняются не только в областях непрерывности течения, но и на ударных и детонационных волнах. 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 (2.28) необходимо использовать связь между давлением и плотностью, которая является следствием (2.19) - (2.21) и носит название – прямая Релея (или Михельсона).

$$P - P_0 - \rho_0^2 u_0^2 \left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho} \right) = 0 \quad (2.29)$$

Система (2.26) - (2.28) в случае замороженного течения дополняется условиями неизменности концентраций (7), в «равновесном» случае из (2.8), (2.9), (2.17), (2.22) могут быть получены N_e нелинейных алгебраических уравнений (2.30)

$$\sum_{i=1}^N A_i^k \exp \left[\left(\sum_{K=1}^{N_e} A_i^k z_K - G_i^0(T) \right) / RT \right] = \gamma_k^0, \quad k = 1, 2, \dots, N_e, \quad (2.30)$$

из которых могут быть найдены параметры z_K , а концентрации γ_i рассчитаны из (2.31):

$$\gamma_i = \frac{P_0}{\rho R T} \sum_{i=1}^N A_i^k \exp \left[\left(\sum_{K=1}^{N_e} A_i^k z_K - G_i^0(T) \right) / RT \right], \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (2.31)$$

2.2 Постановка задачи

В работе рассматривается одномерное стационарное течение, реализующееся в канале, схематично изображенном на рис. 2.1 [34, 80, 81]. Канал характеризуется начальным радиусом R_0 , радиусом минимального сечения R_* и радиусом выходного R_K , как правило, $R_K > R_0$. Форма канала слева от минимального сечения произвольная, причем $R_0 > R > R_*$.

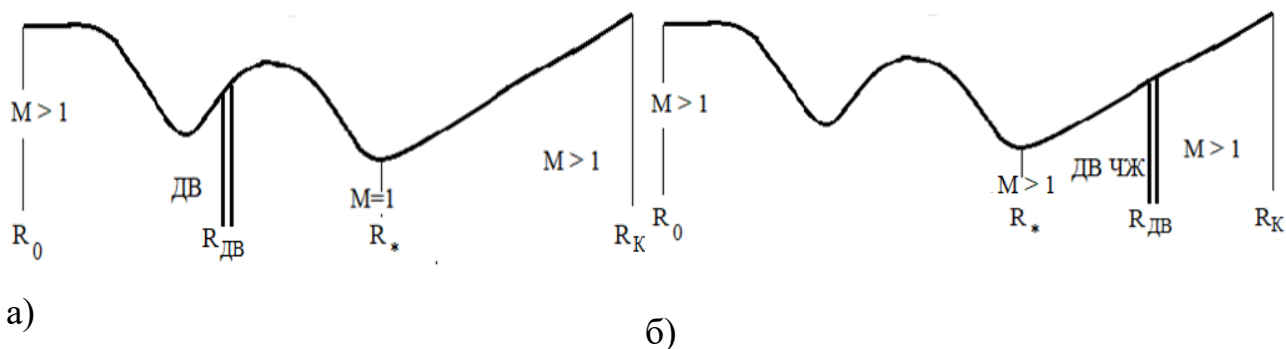


Рис. 2.1. Канал переменного сечения с детонационной волной со сверхзвуковым потоком на входе и выходе (R_0 - начальный радиус канала, R_* - радиус критического сечения, R_K -выходного сечения канала, $R_{ДВ}$ - радиус при котором реализуется стационарная детонационная волна.

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

Течение газа на входе в канал задается сверхзвуковым, до детонационной волны (ДВ) течение считается «замороженным», а за детонационной волной – «равновесным» [77]. В том случае, если ДВ реализуется слева от минимального сечения (рис. 2.1), она является пересжатой, координата ДВ определяется из условия равенства энтропии за ней энтропии в минимальном сечении, рассчитанной в предположении о термодинамическом равновесии и равенстве скорости продуктов сгорания равновесной скорости звука. В случае, если ДВ реализуется в критическом сечении или в расширяющейся части сопла, то для обеспечения последующего ускорения потока до сверхзвуковых скоростей она должна соответствовать режиму Чепмена-Жуге (ЧЖ). В этом случае, координата ДВ ЧЖ определяется из равенства скорости газа при замороженном течении, скорости потока перед ДВ ЧЖ.

2.3 Глобальный вычислительный алгоритм

Приведем укрупненный алгоритм расчета течения в канале, представленном на рис. 2.1.

Заданными считаются параметры на входе в канал, контур канала, входной, критический и выходной радиусы.

1. Проверим, реализуется или нет режим запираия (равенство скорости газа скорости звука слева от минимального сечения) в рассматриваемом канале.

Для этого решается система уравнений (2.26) - (2.27), дополненная условием равенства скорости газа скорости звука: $u = a$ и условиями замороженности течения (2.22). Далее с использованием (2.26) определяется радиус канала, при котором происходит запираие потока $R_3 = \sqrt{Q_0 / (\pi \rho u)}$. Если $R_3 < R^*$, то запираие потока не происходит.

2. Определяем, реализуется или нет детонационная волна в рассматриваемом канале.

Рассчитаем параметры звукового равновесного течения для случая, если оно реализуется в начальном сечении канала. Для этого решается система уравнений (2.26) - (2.27), дополненная условием равенства скорости газа равновесной скорости звука (условие Чепмена-Жуге): $u = a$ и условиями термодинамического равновесия (2.30) - (2.31). Из соотношений Ренкина-Гюгонио (2.19)-(2.21) находим скорость потока перед ДВ :

$$u_{л} = \sqrt{\frac{(P_{п} - P_{л}) \rho_{п}}{(\rho_{п} - \rho_{л}) \rho_{л}}} \quad (2.32)$$

Если заданная скорость потока в начальном сечении меньше $u_{л}$, то может реализоваться ДВ ЧЖ в сверхзвуковой части сопла при $F > F_0$. Переходим к пункту 4.

Если заданная скорость потока в начальном сечении больше $u_{л}$, то может реализоваться пересжатая ДВ слева от минимального сечения. Рассчитываются параметры детонационной волны, помещенной в начальное сечение канала. Для этого решаются уравнения (2.26), (2.27), (2.29)- (2.31) и определяется энтропия за ДВ S_{0p} . Переходим к пункту 3.

3. Определяем возможность наличия детонационной волны слева от минимального сечения. Рассчитывается «равновесное» течение в минимальном сечении сопла. Для этого решается система уравнений (2.26) - (2.27), дополненная условием равенства скорости газа равновесной скорости звука: $u=a$, и условиями термодинамического равновесия (2.30) - (2.31). Находим значение энтропии в минимальном сечении S_{*p} .

Если $S_{0p} < S_{*p}$, то это свидетельствует о том, что ДВ слева от минимального сечения не реализуется, так как энтропия за ДВ уменьшается при торможении сверхзвукового входного потока и, соответственно, энтропия S_{*p} не достигается. Поток во всем канале остается сверхзвуковым «замороженным».

Если $S_{0p} \geq S_{*p}$, то ДВ расположена между входным и минимальным сечением. Радиус сечения $R_{ДВ}$, в котором находится ДВ, может быть определен методом деления отрезка пополам. Если контур канала слева от минимального сечения не монотонный, то с позиций одномерной теории ДВ может реализоваться в любом сечении канала, в котором $R = R_{ДВ}$. Для определения того, будет ли ДВ устойчива или нет, необходимо проведение дополнительных исследований. Переходим к пункту 5.

4. ДВ располагается справа от минимального сечения в расширяющейся части сопла и, чтобы обеспечить последующее ускорение потока до сверхзвуковых скоростей, она должна являться детонационной волной Чепмена-Жуге (ДВ ЧЖ). Рассчитываем параметры замороженного течения в минимальном и выходном сечении, в частности, скорости потока: u_{*3} и $u_{к3}$. Рассчитываем параметры ДВ ЧЖ, помещенной в конечное сечение канала, вычисляем скорость потока перед ней по формуле (2.32). Если $u_{*3} < u < u_{к3}$, то ДВ ЧЖ может находиться между минимальным и конечным сечением канала. Иначе течение в сопле считается замороженным, и ДВ в сопле отсутствует.

5. В случае наличия в окружающей канал среде противодавления, необходимо проанализировать возможность захода ударной волны в канал.

Для этого необходимо, чтобы давление в конечном сечении канала было меньше атмосферного ($p_K < p_a$). Если данное условие выполнено, то рассчитываются параметры дозвукового течения в конечном сечении канала (решаются уравнения (2.26)-(2.27)) в предположении, что в нем давление равно атмосферному ($p = p_a$). Какой вид течения рассматривается в конечном сечении канала, «замороженный» или «равновесный», определяется по результатам выполнения пп. 1-3. Определяется энтропия (S), если $S > S_K$, то в канал заходит УВ. Координата УВ определяется методом деления отрезка пополам из решения системы нелинейных уравнений (2.26), (2.27), (2.29) из условия, что энтропия за УВ равна S_K .

2.4 Вычислительные алгоритмы

В большинстве задач, описанных выше, известны расход и полная энтальпия, входящие в выражения концентрации считаются постоянными при расчете «замороженного» течения и неявно-заданными функциями удельного объема, температуры и элементного состава в случае равновесного течения. Для вычисления равновесных концентраций разработана специальная процедура, которая будет описана ниже, позволяющая рассчитывать концентрации и их производные по удельному объему и температуре.

$$\rho u F = \rho_0 u_0 F_0 = Q_0$$

$$\sum_{i=1}^N \gamma_i H_i^0(T) + \frac{u^2}{2} = \sum_{i=1}^N \gamma_{i0} H_i^0(T_0) + \frac{u_0^2}{2} = H_0$$

Из первого уравнения выражается скорость потока и подставляется во второе уравнение.

$$F_1(V, T) = \sum_{i=1}^N \gamma_i(V, T) H_i^0(T) + \frac{Q_0^2 V^2}{2 F^2} - H_0 = 0$$

Выражения для производных по удельному объему и температуре имеют вид:

$$\frac{\partial F_1(V, T)}{\partial V} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial \gamma_i(V, T)}{\partial V} H_i^0(T) + \frac{Q_0^2 V}{F^2}$$

$$\frac{\partial F_1(V, T)}{\partial T} = \sum_{i=1}^N \left(\gamma_i(V, T) \frac{dH_i^0(T)}{dT} + \frac{\partial \gamma_i(V, T)}{\partial T} H_i^0(T) \right)$$

При расчете изоэнтропического течения считается известной энтропия и второе уравнение имеет вид:

$$F_2(V, T) = \sum_{i=1}^N \gamma_i(V, T) \left(-R \ln \left(\frac{RT \gamma_i(V, T)}{VP_0} \right) + S_i^0(T) \right) - S_0 = 0$$

$$\frac{\partial F_2(V, T)}{\partial V} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \gamma_i(V, T)}{\partial V} \left(-R \ln \left(\frac{RT \gamma_i(V, T)}{VP_0} \right) + S_i^0(T) \right) + R \gamma_i(V, T) \left(\frac{1}{V} - \frac{\partial \gamma_i(V, T)}{\gamma_i(V, T) \partial V} \right) \right)$$

$$\frac{\partial F_2(V, T)}{\partial T} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{d\gamma_i(V, T)}{dT} \left(-R \ln \left(\frac{RT \gamma_i(V, T)}{VP_0} \right) + S_i^0(T) \right) + \gamma_i(V, T) \left(-\frac{R}{T} - \frac{R \partial \gamma_i(V, T)}{\gamma_i(V, T) \partial T} + \frac{dS_i^0(T)}{dT} \right) \right)$$

При расчете течения за УВ или пересжатой ДВ задается прямая Михельсона, которая с использованием термического уравнения состояния смеси совершенных газов может быть записана в виде:

$$F_2(V, T) = \frac{RT \sum_{i=1}^N \gamma_i(V, T)}{V} - P_0 - \rho_0^2 u_0^2 (V_0 - V) = 0$$

$$\frac{\partial F_2(V, T)}{\partial V} = \frac{RT}{V} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \gamma_i(V, T)}{\partial V} - \frac{\gamma_i(V, T)}{V} \right) + \rho_0^2 u_0^2$$

$$\frac{\partial F_2(V, T)}{\partial T} = \frac{R}{V} \sum_{i=1}^N \left(T \frac{\partial \gamma_i(V, T)}{\partial T} + \gamma_i(V, T) \right)$$

При расчете течения за ДВ ЧЖ или в минимальном сечении сопла при переходе от звукового к сверхзвуковому режиму истечения ставится условие равенства скорости потока скорости звука.

$$F_2(V, T) = \frac{Q_0 V}{F} - a(V, T) = 0,$$

$$a(V, T) = V \sqrt{\frac{\frac{\partial \sum_{i=1}^N \gamma_i(V, T) H_i^0(T)}{\partial T} \frac{\partial RT \sum_{i=1}^N \gamma_i(V, T) / V}{\partial V} - \frac{\partial \sum_{i=1}^N \gamma_i(V, T) H_i^0(T)}{\partial V} \frac{\partial RT \sum_{i=1}^N \gamma_i(V, T) / V}{\partial T}}{\frac{\partial RT \sum_{i=1}^N \gamma_i(V, T) / V}{V \partial T} - \frac{\partial \sum_{i=1}^N \gamma_i(V, T) H_i^0(T)}{\partial T}}}$$

При вычислении производных от $F_2(V, T)$ по удельному объему и температуре дифференцировать $a(V, T)$ не целесообразно. Достаточно

ограничиться приближенным выражением. В случае замороженного течения выражение для скорости звука имеет вид:

$$a(V, T) = \sqrt{\kappa R T \sum_{i=1}^N \gamma_i}, \quad \kappa = \frac{\frac{dh}{dT}}{d(h - pV)/dT}.$$

При дифференцировании $a(V, T)$ предлагается считать, что κ не зависит от V и T , тогда:

$$\frac{\partial F_2(V, T)}{\partial V} = \frac{Q_0}{F} - \frac{\kappa R T \sum_{i=1}^N \frac{\partial \gamma_i(V, T)}{\partial V}}{2a(V, T)}$$

$$\frac{\partial F_2(V, T)}{\partial T} = - \frac{\kappa R \sum_{i=1}^N \left(T \frac{\partial \gamma_i(V, T)}{\partial T} + \gamma_i(V, T) \right)}{2a(V, T)}$$

При заданном давлении P_a .

$$F_2(V, T) = \frac{RT \sum_{i=1}^N \gamma_i(V, T)}{V} - P_a = 0$$

$$\frac{\partial F_2(V, T)}{\partial V} = \frac{RT}{V} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \gamma_i(V, T)}{\partial V} - \frac{\gamma_i(V, T)}{V} \right)$$

$$\frac{\partial F_2(V, T)}{\partial T} = \frac{R}{V} \sum_{i=1}^N \left(T \frac{\partial \gamma_i(V, T)}{\partial T} + \gamma_i(V, T) \right)$$

В том случае, если необходимо найти радиус канала, в котором скорость потока при изоэнтропическом течении равна скорости звука.

$$F_1(V, T) = \sum_{i=1}^N \gamma_i(V, T) H_i^0(T) + \frac{a^2(V, T)}{2} - H_0 = 0$$

Выражения для производных по удельному объему и температуре имеют вид:

$$\frac{\partial F_1(V, T)}{\partial V} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial \gamma_i(V, T)}{\partial V} H_i^0(T) + a^2(V, T) \frac{\sum_{i=1}^N \frac{\partial \gamma_i(V, T)}{\partial V}}{\sum_{i=1}^N \gamma_i}$$

$$\frac{\partial F_1(V, T)}{\partial T} = \sum_{i=1}^N \left(\gamma_i(V, T) \frac{dH_i^0(T)}{dT} + \frac{\partial \gamma_i(V, T)}{\partial T} H_i^0(T) \right) + a^2(V, T) \left(\frac{\sum_{i=1}^N \frac{\partial \gamma_i(V, T)}{\partial T}}{\sum_{i=1}^N \gamma_i} + \frac{1}{T} \right)$$

$$F_2(V, T) = \sum_{i=1}^N \gamma_i(V, T) \left(-R \ln \left(\frac{RT \gamma_i(V, T)}{VP_0} \right) + S_i^0(T) \right) - S_0 = 0$$

$$\frac{\partial F_2(V, T)}{\partial V} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \gamma_i(V, T)}{\partial V} \left(-R \ln \left(\frac{RT \gamma_i(V, T)}{VP_0} \right) + S_i^0(T) \right) + R \gamma_i(V, T) \left(\frac{1}{V} - \frac{\partial \gamma_i(V, T)}{\gamma_i(V, T) \partial V} \right) \right)$$

$$\frac{\partial F_2(V, T)}{\partial T} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \gamma_i(V, T)}{\partial T} \left(-R \ln \left(\frac{RT \gamma_i(V, T)}{VP_0} \right) + S_i^0(T) \right) + \gamma_i(V, T) \left(-\frac{R}{T} - \frac{R \partial \gamma_i(V, T)}{\gamma_i(V, T) \partial T} + \frac{dS_i^0(T)}{dT} \right) \right)$$

Площадь сечения находится из расхода:

$$F = \frac{Q_0 V}{a}, \text{ соответственно, } r = \sqrt{\frac{F}{\pi}}.$$

Таким образом, все рассмотренные задачи сводятся к решению нелинейной системы из двух алгебраических уравнений, которая решается методом Ньютона [102]. В случае равновесного течения на каждой итерации с высокой точностью решается задача расчета равновесного состава при заданных удельном объеме и температуре (алгоритм ее решения будет приведен ниже). В замороженном случае концентрации γ_i остаются неизменными, соответственно производные концентраций по удельному объему и температуре равны нулю.

Задача расчета термодинамически равновесного состояния среды при заданных удельном объеме и температуре может быть сформулирована в виде закона сохранения элементного состава (2.33) и условия равенства химических потенциалов веществ химическим потенциалам элементов, из которых они состоят (2.34) [74].

$$\sum_{i=1}^{N_e} A_k^i \gamma_i = \gamma_k^0, k = 1, \dots, N_e \quad (2.33)$$

Условия химического равновесия

$$\mu_i = \sum_{K=1}^{N_e} A_K^i \mu_K, \quad i=1, \dots, N, \quad (2.34)$$

Здесь N_e - число элементов, A_K^i - матрица состава, $\gamma_K^0, k=1, \dots, N_e$ [моль/кг] - содержание элементов в системе.

В работе рассматривается многокомпонентная смесь совершенных газов, с известными термодинамическими свойствами [31]. В этом случае выражение для химического потенциала μ_i .

$$\mu_i(V, T, \vec{\gamma}) = RT \ln(RT \gamma_i / (V p_0)) + G_i^0(T) \quad (2.35)$$

Введем новые обозначения

$$Z_K = \mu_K / RT, \quad \mu_i^0 = G_i^0(T) / RT \quad (2.36)$$

и выразим γ_i из (2.34), (2.35):

$$\gamma_i = \frac{P_0 V}{RT} \exp\left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i Z_K - \mu_i^0\right), \quad (2.37)$$

Подставим (2.37) в (2.33), получим законы сохранения элементного состава в виде системы N_e нелинейных алгебраических уравнений относительно Z_k :

$$\frac{P_0 V}{RT} \sum_{i=1}^N A_K^i \exp\left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i Z_K - \mu_i^0\right) = \gamma_K^0, \quad k=1, \dots, N_e \quad (2.38)$$

Система (2.38) может быть решена, например, методом Ньютона [102, 108]. Мольно-массовые концентрации γ_i находятся после решения (2.38) по формулам (2.33). Отметим, что решение системы (2.38) эквивалентно нахождению точки безусловного экстремума всюду выпуклого функционала [108].

$$f(Z) = \frac{p_0 V}{RT} \sum_{i=1}^{N_e} \exp\left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i Z_K - \mu_i^0\right) - \sum_{K=1}^{N_e} \gamma_K^0 Z_K \quad (2.39)$$

Для вычисления равновесных теплоемкостей и скорости звука, необходимо рассчитать производные равновесного состава по удельному объему и температуре в состоянии термодинамического равновесия [74]. Продифференцируем (2.37):

$$\left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial V}\right)_T = \gamma_i \left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i \frac{\partial Z_K}{\partial V} + \frac{1}{V} \right) \quad (2.40)$$

$$\left(\frac{\partial \gamma_i}{\partial T}\right)_V = \gamma_i \left(\sum_{K=1}^{N_e} A_K^i \frac{\partial Z_K}{\partial T} + \frac{U_i^0}{RT^2} \right) \quad (2.41)$$

Для нахождения $\frac{\partial Z_K}{\partial V}$ и $\frac{\partial Z_K}{\partial T}$ запишем полный дифференциал от законов сохранения элементного состава (2.33) [74]:

$$d\left[\sum_{i=1}^N A_K^i \gamma_i(V, T, \vec{Z})\right] = \sum_{i=1}^N A_K^i \gamma_i \frac{dV}{V} + \sum_{i=1}^N A_K^i \gamma_i U_i^0(T) \frac{dT}{RT^2} + \sum_{L=1}^{N_e} \sum_{i=1}^N A_K^i A_L^i \gamma_i dZ_L = 0, K = 1, \dots, N_e \quad (2.42)$$

или в матричной форме:

$$b_V dV + b_T dT + \hat{A} dZ = 0, \quad (2.43)$$

Здесь $U_i^0(T)$ - стандартная мольная внутренняя энергия i -ого компонента ($U_i^0(T) = H_i^0(T) - RT$), $b_V^K = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^N A_K^i \gamma_i$, $b_T^K = \frac{1}{RT^2} \sum_{i=1}^N A_K^i \gamma_i U_i^0(T)$, $\hat{A}_K^L = \sum_{i=1}^N A_K^i A_L^i \gamma_i$.

Из (2.43) следует, что

$$\left(\frac{\partial Z}{\partial V}\right)_T = -\hat{A}^{-1} b_V, \quad \left(\frac{\partial Z}{\partial T}\right)_V = -\hat{A}^{-1} b_T. \quad (2.44)$$

Выражения (2.40) - (2.44) используются в работе для расчета производных равновесного состава по удельному объему и температуре.

Приведем вычислительный алгоритм минимизации всюду выпуклого функционала (2.39). Будем использовать метод наискорейшего градиентного спуска [82].

Шаг 1. Зададим начальное приближение $Z=0$, $\varepsilon_1>0$, $\varepsilon_2>0$, предельное число итераций M . Положим счетчик итераций $n=0$.

Шаг 2. Вычислим $\nabla f(Z^n) = \left(\sum_{i=1}^N A_1^i \gamma_i(Z^n) - \gamma_1^0, \dots, \sum_{i=1}^N A_{N_e}^i \gamma_i(Z^n) - \gamma_{N_e}^0 \right)$.

Шаг 3. Проверим выполнение критерия окончания $\|\nabla f(Z^n)\| < \varepsilon_1$:

- а) если критерий выполнен, то $Z^* = Z^n$;
- б) если критерий не выполнен, то переходим к шагу 4.

Шаг 4. Проверим выполнение неравенства $n \geq M$:

- а) если неравенство выполнено, то алгоритм завершается с кодом “ошибка”;
- б) если неравенство не выполнено, то переходим к шагу 5.

Шаг 5. Вычислим величину шага t_n^* из условия:

$$\varphi(t_n) = f(Z^n - t_n \nabla f(Z^n)) \longrightarrow \min_{t_k}$$

Для этого разложим (2.39) в ряд в окрестности некоторого приближения Z^n .

$$f(\bar{Z}^n + \Delta \bar{Z}^n) \approx f(\bar{Z}^n) + \sum_{k=1}^{N_e} \left(\frac{\partial f}{\partial Z_k} \right)_{Z=Z_k^n} \Delta Z_k + \frac{1}{2} \sum_{l=1}^{N_e} \sum_{k=1}^{N_e} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial Z_k \partial Z_l} \right)_{Z=Z_k^n} \Delta Z_k \Delta Z_l,$$

$$\text{где } \left(\frac{\partial f}{\partial Z_k} \right)_{Z=Z^n} = \sum_{i=1}^N A_k^i \gamma_i(Z^n) - \gamma_k^0; \quad \left(\frac{\partial^2 f}{\partial Z_k \partial Z_l} \right)_{Z=Z^n} = \sum_{i=1}^N A_k^i A_l^i \gamma_i(Z^n).$$

Подставим $\Delta Z_k = -t_n \left(\frac{\partial f}{\partial Z_k} \right)_{Z=Z^n}$, продифференцируем по t_n и приравняем производную к нулю, получим:

$$t_n^* = \frac{\sum_{k=1}^{N_e} \left(\sum_{i=1}^N A_k^i \gamma_i(Z^n) - \gamma_k^0 \right)^2}{\sum_{l=1}^{N_e} \sum_{k=1}^{N_e} \sum_{i=1}^N A_k^i A_l^i \gamma_i(Z^n) \left(\sum_{i=1}^N A_k^i \gamma_i(Z^n) - \gamma_k^0 \right) \left(\sum_{i=1}^N A_l^i \gamma_i(Z^n) - \gamma_l^0 \right)}$$

Шаг 6. Вычислим $Z^{n+1} = Z^n - t_n^* \nabla f(Z^n)$.

Шаг 7. Проверяем выполнение условий

$$\|Z^{n+1} - Z^n\| < \varepsilon_2, \quad \|f(Z^{n+1}) - f(Z^n)\| < \varepsilon_2;$$

- а) если оба условия выполнены, то расчет окончен $Z^* = Z^n$;
- б) если хотя бы одно из условий не выполнено, то $k=k+1$ и переходим к шагу 2.

2.5 Результаты численного моделирования течения с детонационной волной в канале переменного сечения

Рассмотрим стационарное течение с детонационной волной стехиометрической смеси метана с воздухом в канале переменного сечения, представленного на рис. 2.2. Продукты сгорания включают 16 компонентов: CH_4 , O_2 , CO , CO_2 , H_2O , H_2 , N_2 , OH , H_2O_2 , HO_2 , CH_3 , C_2H_6 , NO , H , O ; N , термодинамические свойства которых заимствованы из справочника [31]. Начальная скорость потока $u_0 = 2700$ м/с, давление $P_0=101325$ Па, температура $T_0=300$ К, начальные мольные доли топлива $x_{\text{CH}_4}=0.095$, $x_{\text{O}_2}=0.19$, $x_{\text{N}_2}=0.715$. Как уже отмечалось выше, параметры, характеризующие стационарные равновесные и замороженные течения в канале переменного сечения, не зависят от продольной координаты (X), а зависят от соотношения площадей (радиусов) на входе в канал и в текущем сечении. Для определенности примем радиус входного сечения рассматриваемого канала (рис. 2.2) за единицу ($R_0=1$), тогда радиус минимального сечения канала (R^*) равен 0.4932 , конечного сечения $R_K=5$, радиус, соответствующий точке минимума слева от минимального сечения, $R_i=0.56$, радиус точки максимума слева от минимального сечения - $R_m=0.6938$. Разметка на оси абсцисс (X) используется для более наглядной визуализации течения. В рассматриваемом контуре выделим четыре секции. Первая – сужающаяся, участок контура от R_0 до R_i . Вторая – расширяющаяся - от R_i до R_m . Третья – сужающаяся - от R_m до R^* . Четвертая - расширяющаяся - от R^* до R_K .

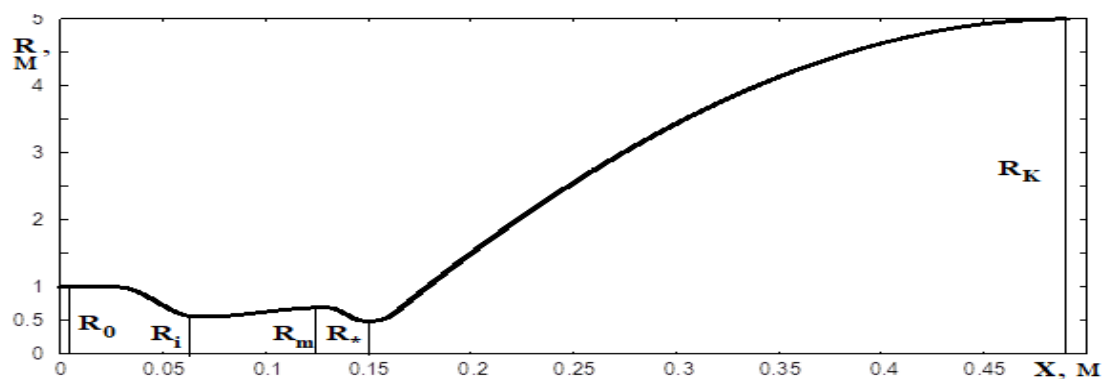


Рис. 2.2. Контур канала.

В соответствии с вышеприведенным алгоритмом, в начале вычислим радиус канала, при котором происходит закиривание потока: $R_3 \approx 0.046$, $R_3 < R^*$, следовательно, закиривания потока не происходит. Далее рассчитаем скорость потока перед детонационной волной Чепмена-Жуге, если она помещена в начальное сечение канала: $u_L \approx 2080.6$ м/с, $u_0 > u_L$, следовательно, в рассматриваемом канале может реализоваться пересжатая ДВ слева от минимального сечения. Отметим, что, если слева от минимального сечения канала находится пересжатая ДВ, то в минимальном сечении канала скорость потока должна быть равна равновесной скорости, т.е. выполняется условие Чепмена-Жуге. Т.е. расчет параметров течения в минимальном сечении эквиваленте расчету параметров за ДВ ЧЖ, помещенной в данное сечение. Рассчитаем энтропию и скорость потока перед ДВ ЧЖ в минимальном сечении канала при условиях термодинамического равновесия и равенства в нем скорости потока скорости звука: $S_{*p} \approx 9445$ Дж/кг/К, $u_{*L} \approx 2081$ м/с. Рассчитаем энтропию за ДВ, помещенной в начальное сечение канала: $S_{0ДВ} \approx 9781$ Дж/кг/К, скорость замороженного потока в минимальном сечении канала: $u_{*3} \approx 2610$ м/с и энтропию за пересжатой ДВ (такая волна может быть рассчитана так как $u_{*3} > u_{*L}$), помещенной в минимальное сечение $S_{*ДВ} = 9337$ Дж/кг/К. Так как $S_{0ДВ} > S_{*p} > S_{*ДВ}$, то между начальным и минимальным сечением существует пересжатая ДВ, энтропия за которой равна энтропии в минимальном сечении $S_{*ДВ}$. Необходимо отметить, что, если в точку, в которой находится пересжатая ДВ (энтропия за которой - $S_{FDВ}$) поместить ДВ ЧЖ (энтропия за которой - $S_{FЧЖ}$), то выполняется неравенство $S_{FЧЖ} > S_{FDВ}$. Местоположение пересжатой детонационной волны может быть найдено методом деления отрезка пополам. В рассматриваемом случае $R_{ДВ} \approx 0.5865$, скорость замороженного потока перед ДВ: $u_{ЛЗ} \approx 2637$ м/с. В контуре канала точек с $R = 0.5865$ три, по одной в первой, второй и третьей секции. В соответствии с одномерной теорией ДВ может находиться в любой из них, вопросы устойчивости положения детонационной волны будут рассмотрены в главе 3.

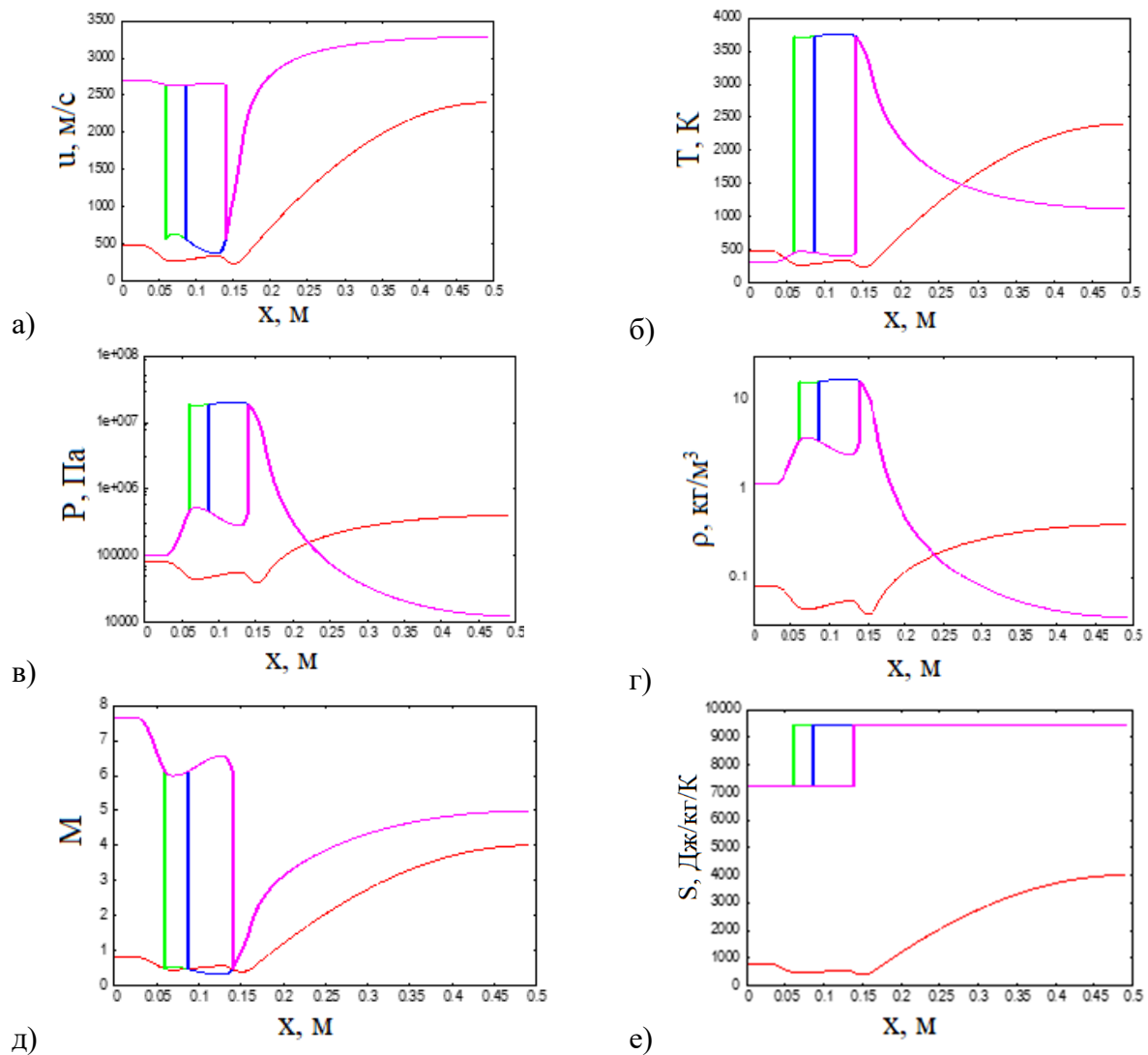


Рис. 2.3. Распределение параметров в канале (а) – скорость потока, б) температура, в) – давление, г) плотность, д) – число Маха, е) – энтропия. Зеленая кривая – ДВ в первой секции, синяя – во второй, фиолетовая – в третьей, красная – схематичное изображение контура канала.

На рис. 2.3 представлены объединенные для данных трех случаев распределения параметров течения. Распределения параметров полностью совпадают слева от ДВ, расположенной в первой секции и справа от ДВ, расположенной в третьей секции. На всех рисунках схематично показан контур канала. Будем рассматривать течение от начального сечения к конечному. Из рис. 2.3 видно, что в сужающемся канале сверхзвуковой поток тормозится, при этом давление, плотность и температура растут. За детонационной волной поток становится дозвуковым и соответственно в сужающемся канале он разгоняется, при этом плотность и давление падает.

Такой режим реализуется в случае, когда ДВ находится либо в первой, либо в третьей секции. В расширяющемся канале дозвуковой поток тормозится, температура и плотность растут. Данный режим реализуется в случае, когда ДВ находится во второй секции. В минимальном сечении канала скорость потока равна равновесной скорости звука, в четвертой секции реализуется сверхзвуковой поток. Отметим, что, как и следует из приведенных выше уравнений, энтропия потока рис. 2.3е является кусочно-постоянной функцией, значение которой скачком возрастает при переходе через ДВ.

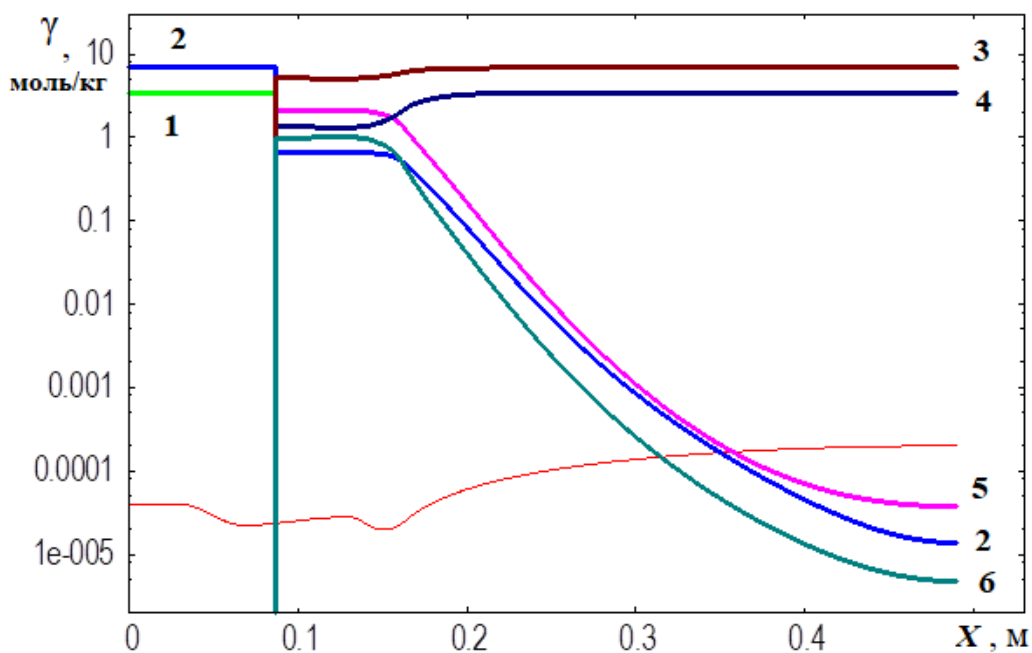


Рис. 2.4. Распределение мольно-массовых концентраций в канале с ДВ во второй секции. 1- метан, 2 – молекулярный кислород, 3 – вода, 4 – углекислый газ, 5 – угарный газ, 6 – нитрид азота.

На рис. 2.4 приведены рассчитанные распределения некоторых концентраций в канале для случая нахождения детонационной волны во второй секции. Из графиков видно, что до детонационной волны течение замороженное, концентрации метана (кривая 1) и кислорода (кривая 2) остаются неизменными. В детонационной волне происходит сгорание горючей смеси, концентрации исходных компонентов скачком уменьшаются и образуются продукты сгорания. На рисунке приведены рассчитанные

равновесные значения мольно-массовых концентраций CH_4 (кривая 1), O_2 (2), H_2O (3), CO_2 (4), CO (5), NO (6). Полка на графиках концентраций непосредственно за детонационной волной соответствует высокотемпературной области (рис. 2.3б). Далее за минимальным сечением температура потока уменьшается, соответственно уменьшаются и концентрации промежуточных продуктов реакций. К выходному сечению канала в продуктах сгорания остаются углекислый газ, вода и молекулярный азот (не представлен на графиках).

2.6 *RR* – диаграмма течения в канале с детонационной волной со сверхзвуковым потоком во входном и выходном сечениях

С использованием вышеописанных алгоритмов по заданным параметрам входного потока можно провести анализ рассматриваемого течения в канале с произвольным радиусом минимального сечения – построить *RR*-диаграмму [77] и получить поля параметров течения. Случай захода из атмосферы УВ в канал не рассматривается. Приведем уточненный по сравнению с [77] алгоритм построения *RR*-диаграммы. Варьируются параметры на входе в канал и отношение радиуса критического сечения к начальному, определяется отношение радиуса канала, в котором находится ДВ к начальному.

1. Анализируются начальные значения параметров течения.

Находится радиус, при котором поток запирается. Для этого решается система уравнений (2.27) - (2.28), дополненная условиями равенства скорости газа скорости звука: $u = a$ и замороженности течения (2.22). Далее с использованием (2.26) определяется радиус канала, при котором происходит запираение потока $R_3 = \sqrt{Q_0 / (\pi \rho u)}$. Если $R_3 < R^*$, то запираение потока не происходит.

Определяется, какой тип течения может реализоваться: с пересжатой детонационной волной слева от минимального сечения; с детонационной

волной Чепмена-Жуге в минимальном сечении канала и справа от него; сверхзвуковое замороженное течение без ДВ.

Для этого рассчитываются параметры детонационной волны Чепмена-Жуге для случая, если бы она находилась в сечении канала с радиусом, равным радиусу канала в начальном сечении, в частности, определим скорость потока перед волной ($u_{л}$) и энтропию за ней ($S_{л}$).

Если скорость потока перед ДВ ЧЖ меньше начальной скорости, то может реализоваться режим с детонационной волной Чепмена-Жуге в минимальном сечении канала и справа от него.

Если скорость потока перед ДВ ЧЖ больше начальной скорости, то могут реализоваться режимы с пересжатой детонационной волной слева от минимального сечения и сверхзвуковое замороженное течение без ДВ. Для определения, какой из двух режимов реализуется, рассчитаем параметры за ДВ для случая, если бы она находилась в начальном сечении канала (в частности, энтропию $S_{дв}$) и параметры звукового равновесного течения ($u=a$) при начальных значениях полной энтальпии и энтропии, равной $S_{дв}$. Из равенства расхода начальному найдем радиус минимального сечения канала (R_1), при котором реализуется течение с детонационной волной слева от минимального сечения: $R_{дв}^0 = \sqrt{Q_0 / (\pi r u)}$. Если радиус критического сечения $R_* > R_{дв}^0$, то течение во всем канале остается сверхзвуковым.

2. Определим радиус минимального сечения, который соответствует заданному положению детонации.

Зададим радиус канала ($R_{дв} : R_3 \leq R_{дв} \leq R_{дв}^0$), в котором находится детонационная волна. Вычислим параметры замороженного потока, при известных из начальных данных значениях расхода, полной энтальпии и энтропии, в частности, скорость u . Рассчитаем параметры детонационной волны Чепмена-Жуге для случая, если бы она находилась в сечении канала с

радиусом, равным $R_{ДВ}$, в частности, определим скорость потока перед волной (u_L).

Если $u > u_L$, то в данном сечении реализуется детонационная волна, параметры которой могут быть рассчитаны при известных параметрах замороженного течения из соотношений (2.19)-(2.21), (2.23), в частности, рассчитывается энтропия за ДВ ($S_{ДВ}$). Радиус критического сечения R_* , соответствующий положению ДВ ($R_{ДВ}$), определяется из расчета равновесного звукового течения ($u=a$) при заданных полной энтальпии и энтропии $S = S_{ДВ}$ и известном расходе Q_0 : $R_* = \sqrt{Q_0 / (\pi \rho u)}$.

Если $u < u_L$, то это означает, что детонационная волна при данном радиусе канала существовать не может. Минимальный радиус канала ($R_{ДВ\text{мин}}$), при котором существует детонационная волна (детонационная волна Чепмена-Жуге), может быть найден методом деления отрезка пополам из условия равенства скорости замороженного потока (u) скорости перед детонационной волной Чепмена-Жуге (u_L).

3. При радиусах минимального сечения канала меньших $R_* : R_{ДВ\text{мин}} > R_* > R_3$ реализуется детонационная волна Чепмена-Жуге справа от минимального сечения при $R_{ДВ} = R_{ДВ\text{мин}}$.

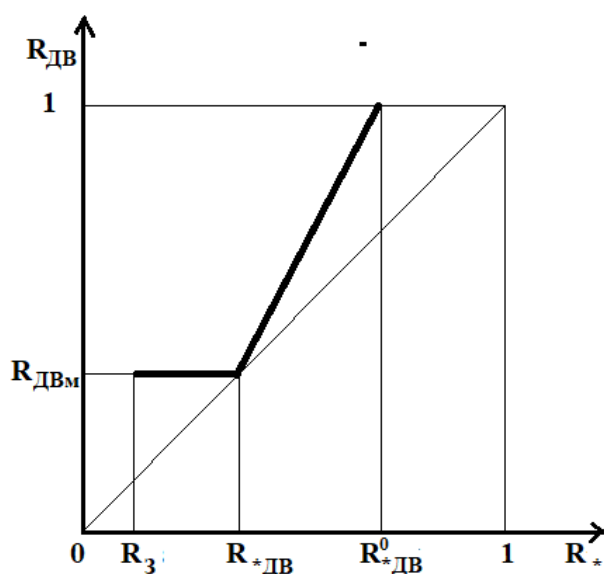


Рис. 2.5. Качественная RR-диаграмма течения для фиксированных начальных параметров на входе в канал для случая существования пересжатой ДВ слева от минимального сечения.

Схематично RR – диаграмма для фиксированного набора начальных параметров на входе в канал: $u_0, p_0, T_0, \gamma_i^0, i=1,2,\dots,N$, показана на рис. 2.5. По осям X и Y отложены радиус минимального сечения канала и радиус канала, в котором находится детонационная волна, отнесенные к начальному.

Будем рассматривать RR-диаграмму течения справа налево. Точка с координатой (1,1) соответствует равенству радиуса минимального сечения канала радиусу входного сечения. В ней может существовать ДВ Чепмена-Жуге только в том случае, если скорость входного потока равна скорости ДВ Чепмена-Жуге, в этом случае ДВ Чепмена-Жуге реализуется при относительных радиусах критического сечения от 1 до радиуса, при котором происходит запираание потока. Если скорость потока выше скорости, при которой реализуется ДВ ЧЖ, то существует диапазон радиусов минимального сечения $(R_{*ДВ}^0, 1)$, при котором ДВ слева от него отсутствует. Это связано с тем, что энтропия за детонационной волной является монотонно возрастающей функцией скорости потока перед волной и, как следствие, торможения сверхзвукового потока в сужающемся канале, ее значение максимально, если ДВ находится в начальном сечении канала. Соответственно, если данная энтропия меньше энтропии в минимальном сечении, рассчитанной при предположениях о термодинамически равновесном течении и равенстве скорости потока равновесной скорости звука, то решение с ДВ слева от минимального сечения отсутствует. При $R_* = R_{*ДВ}^0$ достигается равенство энтропий за ДВ, расположенной в начальном сечении и в минимальном сечении, т.е. пересжатая ДВ находится в точке, соответствующей радиусу начального сечения (точка $(R_{*ДВ}^0, 1)$ на рис. 2.5). При дальнейшем уменьшении радиуса минимального сечения ДВ находится слева от него, причем радиус канала, в котором находится ДВ, тоже уменьшается. При этом интенсивность ДВ уменьшается, и при радиусе минимального сечения, равного $R_{*ДВ}$, ДВ переходит к режиму Чепмена-Жуге, при котором скорость потока перед ней минимальная из возможных (при

этом поток перед волной остается сверхзвуковым). Данному режиму соответствует точка $(R_{*ДВ}, R_{ДВМ})$ на RR-диаграмме (рис. 2.5), соответственно, в канале с радиусом минимального сечения, равным $R_{*ДВ}$, детонационная волна находится в критическом сечении и $R_{ДВМ}=R_{*ДВ}$. При дальнейшем уменьшении радиуса критического сечения ДВ ЧЖ «перемещается» в область справа от минимального сечения, при этом, не зависимо от радиуса минимального сечения, она находится при продольной координате, соответствующей $R = R_{ДВМ}$. Данный режим сохраняется до достижения минимальным сечением радиуса, равного радиусу запирания потока (R_3 , точка $(R_3, R_{ДВМ})$, рис. 2.5), при радиусах $R < R_3$ решение стационарных уравнений, описывающих замороженное течение, отсутствует.

Необходимо отметить, что график решения на RR-диаграмме можно представить в виде отрезков прямых. Для случая, когда пересжатая детонационная волна расположена слева от минимального сечения:

$$R_{ДВ} = \begin{cases} R_{*ДВ} + \frac{1 - R_{*ДВ}}{R_{*ДВ}^0 - R_{*ДВ}} (R_* - R_{*ДВ}), & R_{*ДВ}^0 \geq R_* \geq R_{*ДВ} \\ R_{*ДВ}, & R_{*ДВ} \geq R_* \geq R_3 \end{cases} \quad (2.45)$$

2.7 Результаты численного моделирования течения метано-воздушной горючей смеси в канале

Приведем в качестве примера RR-диаграмму, построенную для начальных данных рассмотренного выше течения в канале: $u_0 = 2700$ м/с, $P_0 = 101325$ Па, $T_0 = 300$ К, $x_{CH_4} = 0.095$, $x_{O_2} = 0.19$, $x_{N_2} = 0.715$.

При начальной скорости потока 2700 м/с минимальный относительный радиус канала, при котором возможна пересжатая стационарная детонационная волна, составляет 0.8273. При $R > 0.8273$ реализуется либо замороженное сверхзвуковое течение, либо поток тормозится до дозвуковой скорости в ДВ и остается дозвуковым и слева, и справа от минимального сечения. Т.е. решение с переходом через скорость звука и последующим

разгоном потока до сверхзвуковой скорости в рассматриваемой постановке не существует.

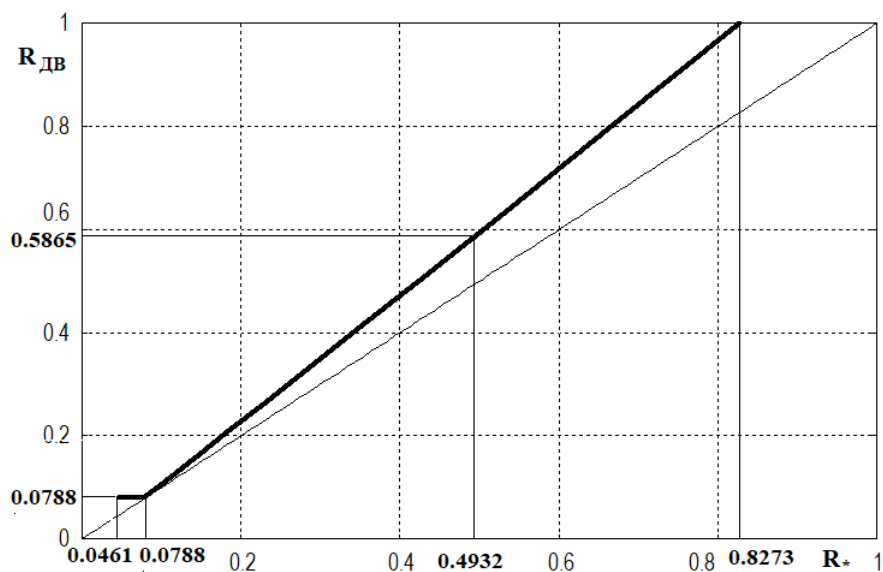


Рис. 2.6. RR-диаграмма течения метано-воздушной смеси ($u_0 = 2700$ м/с, $P_0=101325$ Па, $T_0=300$ К, $x_{CH_4}=0.095$, $x_{O_2}=0.19$, $x_{N_2}=0.715$)

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

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

Рассмотренному выше контуру канала (рис. 2.2) на RR-диаграмме соответствует точка с координатами (0.4932, 0.5865). Так как радиус контура в точке минимума, расположенной слева от минимального сечения,

составляет 0.56 (меньше, чем 0.5865), то из RR-диаграммы течения можно сделать вывод, что в данном контуре возможны три точки положения пересжатой детонационной волны.

На рис. 2.7 представлены зависимости параметров течения перед- и задетонационной волной от минимального сечения канала, соответствующие RR-диаграмме, приведенной на рис. 2.6. За пересжатой детонационной волной скорость потока (зеленая кривая рис. 2.7а) остается дозвуковой и становится равной скорости звука (фиолетовая кривая), когда детонационная волна переходит в режим Чепмена-Жуге. Необходимо отметить, что рассматриваемая постановка задачи справедлива [77] до тех пор, пока температура горючей смеси перед детонационной волной не превысит температуру самовоспламенения (точнее время пребывания горючей смеси при температуре выше температуры самовоспламенения не превышает время задержки воспламенения). На рис. 2.7б показано, что температура самовоспламенения метано-воздушной горючей смеси (синяя кривая, $T_B \approx 835$ К при нормальных условиях) превышает в случае, если радиус минимального сечения меньше 0.21 м. Графики температуры (рис. 2.7б), давления и плотности (рис. 2.7в) содержат точки максимума. Это объясняется тем, что с одной стороны, поток перед детонационной волной тормозится (красная кривая рис. 2.7а), что должно приводить к снижению перепада рассматриваемых параметров в ДВ; с другой стороны, торможение потока приводит к росту абсолютных величин параметров перед ДВ (рис. 2.7бв), а, следовательно, и за ней. Также отметим, что перепад энтропии на ДВ уменьшается по мере приближения ДВ к режиму Чепмена-Жуге (рис. 2.7д).

На рис. 2.8 представлены зависимости мольно-массовых концентраций основных продуктов сгорания (график изменения концентрации молекулярного азота не приводится, так как изменение его концентрации в логарифмическом масштабе малозаметно) за детонационной волной от

минимального сечения канала. Основными компонентами в составе продуктов сгорания являются пары воды (кривая 6), углекислый газ (кривая 3), угарный газ (кривая 2). В заметных концентрациях также присутствуют радикал ОН, молекулярные водород и кислород (кривые 5, 4, 1).

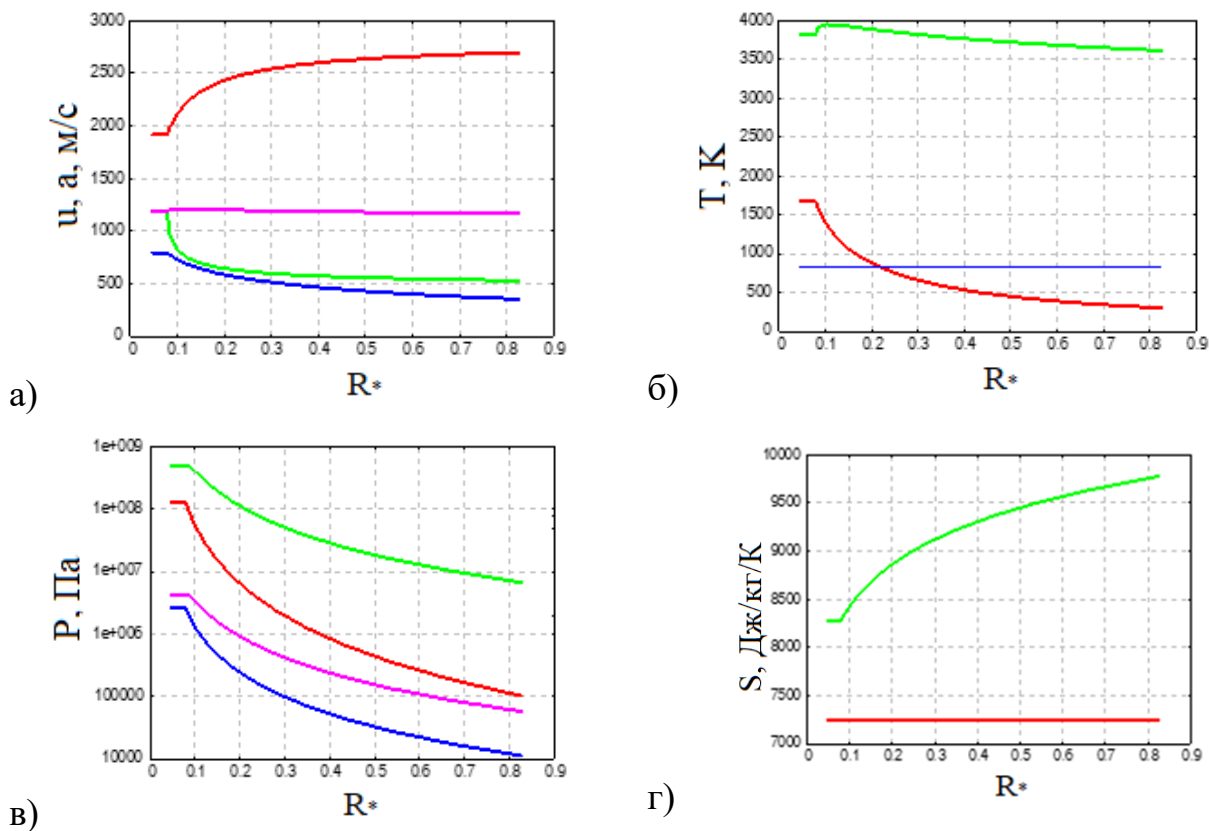


Рис. 2.7. Зависимости параметров течения перед- и за- детонационной волной от радиуса минимального сечения; а) – скорость (1,2) и скорость звука (3,4); б) – температура (1, 2), 3 – температура самовоспламенения смеси при 1 атм; в) – давление (1, 2) и плотность (3, 4); г) – энтропия (1, 2).

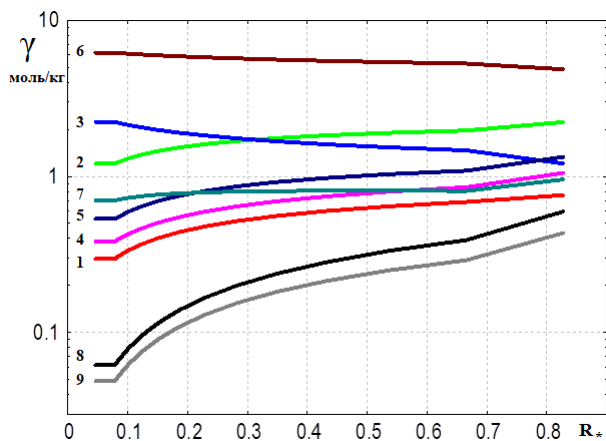


Рис. 2.8. Зависимости мольно-массовых концентраций продуктов сгорания за- детонационной волной от радиуса минимального сечения; 1 – O_2 , 2 – CO , 3 – CO_2 , 4 – H_2 , 5 – OH , 6 – H_2O , 7 – NO , 8 – H , 9 – O .

На рисунке 2.9 приведены RR-диаграмма и зависимость температуры перед детонационной волной от радиуса минимального сечения. Из анализа (рис. 2.9) можно сделать вывод о возможности существования стационарных волн при различных скоростях потока на входе в канал. В частности, если $R^*/R_0=0.4$, то в канале стационарная пересжатая ДВ может находиться при скоростях потока на входе в канал более чем 2070 м/с, температура перед ДВ при этом не превосходит 600 К.

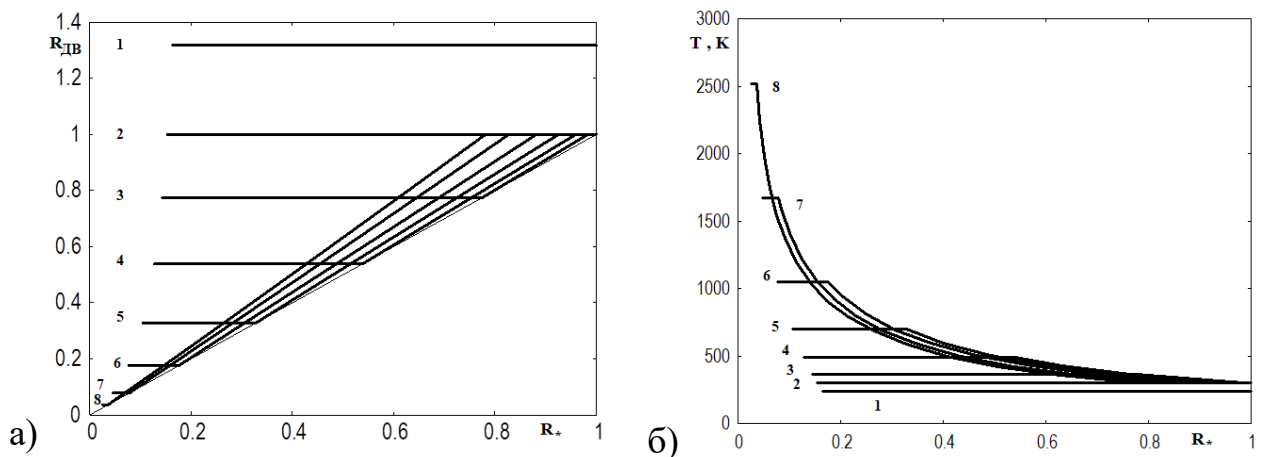


Рис. 2.9. RR-диаграмма (а) и температура перед ДВ (б) для стехиометрической смеси метан-воздух при нормальных условиях (1 – $u_0 = 1760$ м/с, 2 – 1803.5 (скорость Чепмена-Жуге), 3 – 1850, 4 – 1930, 5 – 2070, 6 – 2300, 7 – 2700, 8 – 3200)

Расчетным путем получено, что график решения на RR-диаграмме [78] складывается из отрезков линий, близких к прямым, причем радиус канала ($R_{ДВ}$), в котором находится детонационная волна, определяется следующим выражением:

$$R_{ДВ} = \begin{cases} u_0 \leq u_{0ЧЖ} : R_{МДД}, 1 \geq R_* \geq R_3 \\ u_0 \leq u_{0ЧЖ} : \begin{cases} R_{*ДВ} + \beta(R_* - R_{*ДВ}), & R_{*ДВ}^0 \geq R_* \geq R_{*ДВ} \\ R_{*ДВ}, & R_{*ДВ} \geq R_* \geq R_3 \end{cases} \end{cases} ; \quad \beta = \frac{1 - R_{*ДВ}}{R_{*ДВ}^0 - R_{*ДВ}} \quad (2.46)$$

В работе исследовано расположение и параметры ДВ в канале при различных значениях температуры (T_0), давления (P_0), скорости потока (u_0) и состава горючей смеси на входе в канал. Результаты расчетов приведены в таблицах 2.1-2.18. В частности, для стехиометрической метано-воздушной

смеси, втекающей в канал при стандартных условиях, параметры, входящие в формулу для радиуса расположения ДВ, представлены в таблице 1. В данном случае скорость потока перед волной Чепмена-Жуге в начальном сечении составляет $u_{0ЧЖ}=1803.473$ м/с (помечена в таблицах «*»). Максимальная скорость течения, при которой можно рассматривать полученную в расчете волну как детонационную (максимальная скорость ДВ), равна $u_{мДВ}=3520.628$ м/с (помечена в таблицах «**»). При данной скорости потока рассчитанные значения температуры за головной УВ и при достижении термодинамического равновесия в ДВ совпадают. Получено, что:

- Скорость ДВ ЧЖ и максимальная скорость ДВ являются возрастающими функциями начального давления и убывающими функциями начальной температуры;
- Повышение начальной температуры приводит к уменьшению отрезка минимальных радиусов, при которых существует пересжатая ДВ;
- При коэффициентах избытка окислителя 0.5 и 2 зависимость скорости ДВ ЧЖ от давления и температуры существенно слабее, чем при стехиометрическом соотношении;
- При коэффициенте избытка окислителя 0.5 максимальная скорость ДВ на 10% выше, а при – 2.0 – на 10% ниже, чем при стехиометрическом соотношении.

Отметим также, что при скорости входного потока 2000 м/с и температуре 300 К во всех рассмотренных вариантах пересжатая ДВ реализуется при $R_* \in [0.460; 0.875]$, при $T = 600$ К – $R_* \in [0.610; 0.880]$. При скорости входного потока 2500 м/с и температуре 300 К пересжатая ДВ реализуется при $R_* \in [0.121; 0.811]$, при $T = 600$ К – $R_* \in [0.223; 0.811]$.

Таблица 2.1. $T_0=300$ К, $P_0=101325$ Па, $\alpha=1$

u_0	$u_0/D_{чж}$	u_0/a_0	R_3	$R_{*ДВ}$	$R^{0*ДВ}$	$R_{мДВ}$	β
1600.0	0.8872	4.5229	0.2070	1.0000	1.0000	6.3419	0.0000
1700.0	0.9426	4.8056	0.1786	1.0000	1.0000	2.1022	0.0000
1800.0	0.9981	5.0883	0.1544	1.0000	1.0000	1.0208	0.0000
*1803.5	1.0000	5.0981	0.1536	0.9999	1.0000	1.0000	1.0765
1850.0	1.0258	5.2296	0.1437	0.7758	0.9833	1.0000	1.0803
1900.0	1.0535	5.3709	0.1337	0.6125	0.9679	1.0000	1.0903
1950.0	1.0812	5.5123	0.1246	0.4975	0.9541	1.0000	1.1006
2000.0	1.1090	5.6536	0.1161	0.4131	0.9414	1.0000	1.1108
2100.0	1.1644	5.9363	0.1010	0.2987	0.9189	1.0000	1.1308
2200.0	1.2199	6.2190	0.0881	0.2259	0.8992	1.0000	1.1497
2300.0	1.2753	6.5017	0.0771	0.1762	0.8817	1.0000	1.1677
2400.0	1.3308	6.7843	0.0675	0.1407	0.8660	1.0000	1.1847
2500.0	1.3862	7.0670	0.0593	0.1144	0.8519	1.0000	1.2008
2600.0	1.4417	7.3497	0.0522	0.0944	0.8390	1.0000	1.2162
2700.0	1.4971	7.6324	0.0461	0.0788	0.8273	1.0000	1.2308
2800.0	1.5526	7.9151	0.0408	0.0664	0.8165	1.0000	1.2446
2900.0	1.6080	8.1977	0.0362	0.0565	0.8066	1.0000	1.2578
3000.0	1.6635	8.4804	0.0321	0.0484	0.7975	1.0000	1.2703
3100.0	1.7189	8.7631	0.0286	0.0417	0.7891	1.0000	1.2822
3200.0	1.7744	9.0458	0.0255	0.0362	0.7813	1.0000	1.2935
**3520.6	1.9521	9.9522	0.0179	0.0237	0.7600	1.0000	1.3259

Таблица 2.2. $T_0=300$ К, $P_0=10132.5$ Па, $\alpha=1$

u_0	$u_0/D_{чж}$	u_0/a_0	R_3	$R_{*ДВ}$	$R^{0*ДВ}$	$R_{мДВ}$	β
1600.0	0.9078	4.5229	0.2070	1.0000	1.0000	3.5587	0.0000
1700.0	0.9645	4.8056	0.1786	1.0000	1.0000	1.4895	0.0000
*1762.5	1.0000	4.9823	0.1630	0.9999	1.0000	1.0000	1.0825
1800.0	1.0213	5.0883	0.1544	0.8166	0.9857	1.0000	1.0844
1850.0	1.0496	5.2296	0.1437	0.6433	0.9693	1.0000	1.0942
1900.0	1.0780	5.3709	0.1337	0.5214	0.9546	1.0000	1.1048
1950.0	1.1064	5.5123	0.1246	0.4320	0.9412	1.0000	1.1155
2000.0	1.1347	5.6536	0.1161	0.3641	0.9288	1.0000	1.1260
2100.0	1.1915	5.9363	0.1010	0.2689	0.9066	1.0000	1.1464
2200.0	1.2482	6.2190	0.0881	0.2062	0.8871	1.0000	1.1658
2300.0	1.3050	6.5017	0.0771	0.1625	0.8697	1.0000	1.1843
2400.0	1.3617	6.7843	0.0675	0.1307	0.8540	1.0000	1.2019
2500.0	1.4184	7.0670	0.0593	0.1069	0.8398	1.0000	1.2186
2600.0	1.4752	7.3497	0.0522	0.0886	0.8268	1.0000	1.2346
2700.0	1.5319	7.6324	0.0461	0.0742	0.8150	1.0000	1.2498
2800.0	1.5886	7.9151	0.0408	0.0628	0.8041	1.0000	1.2643
2900.0	1.6454	8.1977	0.0362	0.0536	0.7940	1.0000	1.2781
3000.0	1.7021	8.4804	0.0321	0.0460	0.7848	1.0000	1.2913
3100.0	1.7589	8.7631	0.0286	0.0398	0.7762	1.0000	1.3039
**3184.4	1.8067	9.0016	0.0260	0.0353	0.7695	1.0000	1.3140
3200.0	1.8156	9.0458	0.0255	0.0346	0.7683	1.0000	1.3159

Таблица 2.3. $T_0=300$ К, $P_0=1013250$ Па, $\alpha=1$

u_0	$u_0/D_{чж}$	u_0/a_0	R_3	$R_{*ДВ}$	$R^0_{*ДВ}$	$R_{мДВ}$	β
1600.0	0.8712	4.5229	0.2070	1.0000	1.0000	12.7788	0.0000
1700.0	0.9256	4.8056	0.1786	1.0000	1.0000	3.0728	0.0000
1800.0	0.9801	5.0883	0.1544	1.0000	1.0000	1.2689	0.0000
*1836.6	1.0000	5.1917	0.1464	0.9999	1.0000	1.0000	1.0709
1850.0	1.0073	5.2296	0.1437	0.9236	0.9950	1.0000	1.0698
1900.0	1.0345	5.3709	0.1337	0.7078	0.9788	1.0000	1.0784
1950.0	1.0618	5.5123	0.1246	0.5629	0.9645	1.0000	1.0884
2000.0	1.0890	5.6536	0.1161	0.4601	0.9516	1.0000	1.0985
2100.0	1.1434	5.9363	0.1010	0.3258	0.9288	1.0000	1.1181
2200.0	1.1979	6.2190	0.0881	0.2432	0.9090	1.0000	1.1366
2300.0	1.2523	6.5017	0.0771	0.1881	0.8916	1.0000	1.1541
2400.0	1.3068	6.7843	0.0675	0.1492	0.8760	1.0000	1.1707
2500.0	1.3612	7.0670	0.0593	0.1207	0.8619	1.0000	1.1863
2600.0	1.4157	7.3497	0.0522	0.0992	0.8492	1.0000	1.2011
2700.0	1.4701	7.6324	0.0461	0.0825	0.8376	1.0000	1.2151
2800.0	1.5246	7.9151	0.0408	0.0694	0.8270	1.0000	1.2284
2900.0	1.5790	8.1977	0.0362	0.0588	0.8172	1.0000	1.2410
3000.0	1.6335	8.4804	0.0321	0.0503	0.8083	1.0000	1.2529
3100.0	1.6879	8.7631	0.0286	0.0433	0.8001	1.0000	1.2642
3200.0	1.7424	9.0458	0.0255	0.0375	0.7925	1.0000	1.2749
**3983.6	2.1690	11.2609	0.0111	0.0141	0.7497	1.0000	1.3403

Таблица 2.4. $T_0=600$ К, $P_0=101325$ Па, $\alpha=1$

u_0	$u_0/D_{чж}$	u_0/a_0	R_3	$R_{*ДВ}$	$R^0_{*ДВ}$	$R_{мДВ}$	β
1600.0	0.8988	3.2505	0.3745	1.0000	1.0000	1.9385	0.0000
1700.0	0.9550	3.4537	0.3313	1.0000	1.0000	1.3050	0.0000
*1780.2	1.0000	3.6166	0.3002	1.0000	1.0000	1.0000	1.1498
1800.0	1.0111	3.6569	0.2929	0.9413	0.9927	1.0000	1.1418
1850.0	1.0392	3.7584	0.2754	0.8141	0.9765	1.0000	1.1443
1900.0	1.0673	3.8600	0.2590	0.7107	0.9622	1.0000	1.1502
1950.0	1.0954	3.9616	0.2436	0.6253	0.9492	1.0000	1.1569
2000.0	1.1235	4.0632	0.2291	0.5539	0.9372	1.0000	1.1640
2100.0	1.1796	4.2663	0.2027	0.4419	0.9155	1.0000	1.1784
2200.0	1.2358	4.4695	0.1796	0.3589	0.8965	1.0000	1.1926
2300.0	1.2920	4.6726	0.1592	0.2957	0.8794	1.0000	1.2066
2400.0	1.3482	4.8758	0.1413	0.2466	0.8641	1.0000	1.2201
2500.0	1.4043	5.0790	0.1256	0.2077	0.8501	1.0000	1.2332
2600.0	1.4605	5.2821	0.1118	0.1764	0.8374	1.0000	1.2459
2700.0	1.5167	5.4853	0.0997	0.1510	0.8258	1.0000	1.2581
2800.0	1.5729	5.6884	0.0890	0.1300	0.8151	1.0000	1.2698
2900.0	1.6290	5.8916	0.0795	0.1127	0.8053	1.0000	1.2811
3000.0	1.6852	6.0948	0.0712	0.0982	0.7962	1.0000	1.2920
3100.0	1.7414	6.2979	0.0639	0.0859	0.7878	1.0000	1.3023
3200.0	1.7976	6.5011	0.0574	0.0755	0.7800	1.0000	1.3123
**3300.8	1.8542	6.7059	0.0515	0.0666	0.7727	1.0000	1.3218

Таблица 2.5. $T_0=600$ К, $P_0=10132.5$ Па, $\alpha=1$

u_0	$u_0/D_{чж}$	u_0/a_0	R_3	$R_{*дв}$	$R^0_{*дв}$	$R_{мдв}$	β
1600.0	0.9248	3.2505	0.3745	1.0000	1.0000	1.5592	0.0000
1700.0	0.9826	3.4537	0.3313	1.0000	1.0000	1.0989	0.0000
*1730.2	1.0000	3.5150	0.3192	1.0000	1.0000	1.0000	1.1606
1800.0	1.0404	3.6569	0.2929	0.8163	0.9755	1.0000	1.1539
1850.0	1.0693	3.7584	0.2754	0.7136	0.9605	1.0000	1.1598
1900.0	1.0982	3.8600	0.2590	0.6286	0.9469	1.0000	1.1667
1950.0	1.1271	3.9616	0.2436	0.5574	0.9344	1.0000	1.1740
2000.0	1.1560	4.0632	0.2291	0.4969	0.9227	1.0000	1.1815
2100.0	1.2138	4.2663	0.2027	0.4006	0.9016	1.0000	1.1965
2200.0	1.2716	4.4695	0.1796	0.3281	0.8828	1.0000	1.2113
2300.0	1.3294	4.6726	0.1592	0.2721	0.8659	1.0000	1.2258
2400.0	1.3872	4.8758	0.1413	0.2281	0.8506	1.0000	1.2399
2500.0	1.4450	5.0790	0.1256	0.1930	0.8367	1.0000	1.2536
2600.0	1.5027	5.2821	0.1118	0.1645	0.8240	1.0000	1.2668
2700.0	1.5605	5.4853	0.0997	0.1413	0.8124	1.0000	1.2796
2800.0	1.6183	5.6884	0.0890	0.1221	0.8016	1.0000	1.2920
2900.0	1.6761	5.8916	0.0795	0.1060	0.7917	1.0000	1.3039
**2980.3	1.7226	6.0548	0.0728	0.0950	0.7842	1.0000	1.3131
3000.0	1.7339	6.0948	0.0712	0.0926	0.7825	1.0000	1.3153
3100.0	1.7917	6.2979	0.0639	0.0812	0.7740	1.0000	1.3263
3200.0	1.8495	6.5011	0.0574	0.0715	0.7660	1.0000	1.3368

Таблица 2.6. $T_0=600$ К, $P_0=1013250$ Па, $\alpha=1$

u_0	$u_0/D_{чж}$	u_0/a_0	R_3	$R_{*дв}$	$R^0_{*дв}$	$R_{мдв}$	β
1600.0	0.8778	3.2505	0.3745	1.0000	1.0000	2.4257	0.0000
1700.0	0.9326	3.4537	0.3313	1.0000	1.0000	1.5432	0.0000
1800.0	0.9875	3.6569	0.2929	1.0000	1.0000	1.0760	0.0000
*1822.8	1.0000	3.7032	0.2848	1.0000	1.0000	1.0000	1.1403
1850.0	1.0149	3.7584	0.2754	0.9195	0.9906	1.0000	1.1331
1900.0	1.0423	3.8600	0.2590	0.7950	0.9754	1.0000	1.1367
1950.0	1.0698	3.9616	0.2436	0.6939	0.9618	1.0000	1.1426
2000.0	1.0972	4.0632	0.2291	0.6106	0.9494	1.0000	1.1493
2100.0	1.1521	4.2663	0.2027	0.4820	0.9274	1.0000	1.1631
2200.0	1.2069	4.4695	0.1796	0.3883	0.9081	1.0000	1.1769
2300.0	1.2618	4.6726	0.1592	0.3180	0.8909	1.0000	1.1903
2400.0	1.3166	4.8758	0.1413	0.2638	0.8756	1.0000	1.2034
2500.0	1.3715	5.0790	0.1256	0.2212	0.8617	1.0000	1.2160
2600.0	1.4264	5.2821	0.1118	0.1872	0.8490	1.0000	1.2281
2700.0	1.4812	5.4853	0.0997	0.1597	0.8375	1.0000	1.2398
2800.0	1.5361	5.6884	0.0890	0.1372	0.8269	1.0000	1.2510
2900.0	1.5910	5.8916	0.0795	0.1186	0.8172	1.0000	1.2617
3000.0	1.6458	6.0948	0.0712	0.1031	0.8082	1.0000	1.2719
3100.0	1.7007	6.2979	0.0639	0.0900	0.8000	1.0000	1.2818
3200.0	1.7555	6.5011	0.0574	0.0790	0.7923	1.0000	1.2911
**3726.0	2.0441	7.5696	0.0334	0.0422	0.7606	1.0000	1.3333

Таблица 2.7. $T_0=300$ К, $P_0=101325$ Па, $\alpha=0.5$

u_0	$u_0/D_{чж}$	u_0/a_0	R_3	$R^*_{дв}$	$R^0_{дв}$	$R_{мдв}$	β
1600.0	0.9200	4.4548	0.2024	1.0000	1.0000	3.0660	0.0000
1700.0	0.9775	4.7333	0.1732	1.0000	1.0000	1.2651	0.0000
*1739.1	1.0000	4.8422	0.1631	0.9999	1.0000	1.0000	1.0734
1800.0	1.0350	5.0117	0.1485	0.7377	0.9808	1.0000	1.0790
1850.0	1.0638	5.1509	0.1376	0.3438	0.9675	1.0000	1.0522
1900.0	1.0925	5.2901	0.1275	0.4951	0.9555	1.0000	1.0966
1950.0	1.1213	5.4293	0.1182	0.4180	0.9446	1.0000	1.1051
2000.0	1.1500	5.5685	0.1097	0.3578	0.9346	1.0000	1.1134
2100.0	1.2075	5.8470	0.0945	0.2706	0.9166	1.0000	1.1291
2200.0	1.2650	6.1254	0.0816	0.2109	0.9008	1.0000	1.1437
2300.0	1.3225	6.4038	0.0707	0.1679	0.8867	1.0000	1.1575
2400.0	1.3800	6.6823	0.0613	0.1359	0.8740	1.0000	1.1707
2500.0	1.4375	6.9607	0.0533	0.1114	0.8624	1.0000	1.1833
2600.0	1.4950	7.2391	0.0464	0.0923	0.8516	1.0000	1.1954
2700.0	1.5525	7.5175	0.0405	0.0772	0.8416	1.0000	1.2072
2800.0	1.6100	7.7960	0.0354	0.0650	0.8322	1.0000	1.2187
2900.0	1.6675	8.0744	0.0310	0.0551	0.8233	1.0000	1.2300
3000.0	1.7250	8.3528	0.0272	0.0470	0.8149	1.0000	1.2410
3100.0	1.7825	8.6312	0.0240	0.0403	0.8070	1.0000	1.2518
3200.0	1.8400	8.9097	0.0211	0.0347	0.7994	1.0000	1.2623
**3835.5	2.2054	10.6791	0.0099	0.0145	0.7601	1.0000	1.3217

Таблица 2.8. $T_0=300$ К, $P_0=10132.5$ Па, $\alpha=0.5$

u_0	$u_0/D_{чж}$	u_0/a_0	R_3	$R^*_{дв}$	$R^0_{дв}$	$R_{мдв}$	β
1500.0	0.8641	4.1764	0.2367	1.0000	1.0000	18.1848	0.0000
1600.0	0.9217	4.4548	0.2024	1.0000	1.0000	2.8862	0.0000
1700.0	0.9793	4.7333	0.1732	1.0000	1.0000	1.2374	0.0000
*1735.9	1.0000	4.8332	0.1639	0.9999	1.0000	1.0000	1.0746
1800.0	1.0369	5.0117	0.1485	0.7275	0.9796	1.0000	1.0808
1850.0	1.0657	5.1509	0.1376	0.5898	0.9662	1.0000	1.0897
1900.0	1.0946	5.2901	0.1275	0.4896	0.9541	1.0000	1.0987
1950.0	1.1234	5.4293	0.1182	0.4136	0.9431	1.0000	1.1075
2000.0	1.1522	5.5685	0.1097	0.3542	0.9328	1.0000	1.1161
2100.0	1.2098	5.8470	0.0945	0.2679	0.9144	1.0000	1.1324
2200.0	1.2674	6.1254	0.0816	0.2088	0.8980	1.0000	1.1480
2300.0	1.3250	6.4038	0.0707	0.1662	0.8831	1.0000	1.1630
2400.0	1.3826	6.6823	0.0613	0.1344	0.8696	1.0000	1.1774
2500.0	1.4402	6.9607	0.0533	0.1101	0.8570	1.0000	1.1915
2600.0	1.4978	7.2391	0.0464	0.0912	0.8452	1.0000	1.2053
2700.0	1.5554	7.5175	0.0405	0.0762	0.8342	1.0000	1.2187
2800.0	1.6130	7.7960	0.0354	0.0641	0.8239	1.0000	1.2318
2900.0	1.6706	8.0744	0.0310	0.0543	0.8141	1.0000	1.2447
3000.0	1.7282	8.3528	0.0272	0.0463	0.8049	1.0000	1.2572
3100.0	1.7858	8.6312	0.0240	0.0397	0.7962	1.0000	1.2694
3200.0	1.8435	8.9097	0.0211	0.0342	0.7880	1.0000	1.2812
**3435.9	1.9794	9.5665	0.0158	0.0244	0.7705	1.0000	1.3075

Таблица 2.9. $T_0=300$ К, $P_0=1013250$ Па, $\alpha=0.5$

u_0	$u_0/D_{чж}$	u_0/a_0	R_3	$R^*_{ДВ}$	$R^0_{*ДВ}$	$R_{МДВ}$	β
1500.0	0.8620	4.1764	0.2367	1.0000	1.0000	58.4973	0.0000
1600.0	0.9194	4.4548	0.2024	1.0000	1.0000	3.1366	0.0000
1700.0	0.9769	4.7333	0.1732	1.0000	1.0000	1.2748	0.0000
*1740.2	1.0000	4.8452	0.1628	0.9999	1.0000	1.0000	1.0730
1800.0	1.0344	5.0117	0.1485	0.7412	0.9812	1.0000	1.0784
1850.0	1.0631	5.1509	0.1376	0.5995	0.9679	1.0000	1.0872
1900.0	1.0918	5.2901	0.1275	0.4969	0.9560	1.0000	1.0959
1950.0	1.1206	5.4293	0.1182	0.4195	0.9451	1.0000	1.1043
2000.0	1.1493	5.5685	0.1097	0.3591	0.9352	1.0000	1.1125
2100.0	1.2068	5.8470	0.0945	0.2715	0.9174	1.0000	1.1279
2200.0	1.2642	6.1254	0.0816	0.2116	0.9019	1.0000	1.1422
2300.0	1.3217	6.4038	0.0707	0.1685	0.8881	1.0000	1.1555
2400.0	1.3792	6.6823	0.0613	0.1363	0.8758	1.0000	1.1679
2500.0	1.4366	6.9607	0.0533	0.1117	0.8647	1.0000	1.1797
2600.0	1.4941	7.2391	0.0464	0.0925	0.8546	1.0000	1.1909
2700.0	1.5516	7.5175	0.0405	0.0773	0.8452	1.0000	1.2015
2800.0	1.6090	7.7960	0.0354	0.0650	0.8366	1.0000	1.2117
2900.0	1.6665	8.0744	0.0310	0.0549	0.8286	1.0000	1.2216
3000.0	1.7240	8.3528	0.0272	0.0467	0.8210	1.0000	1.2312
3100.0	1.7814	8.6312	0.0240	0.0398	0.8139	1.0000	1.2404
3200.0	1.8389	8.9097	0.0211	0.0341	0.8071	1.0000	1.2495
**4418.3	2.5390	12.3019	0.0053	0.0066	0.7484	1.0000	1.3391

Таблица 2.10. $T_0=600$ К, $P_0=101325$ Па, $\alpha=0.5$

u_0	$u_0/D_{чж}$	u_0/a_0	R_3	$R^*_{ДВ}$	$R^0_{*ДВ}$	$R_{МДВ}$	β
1400.0	0.7905	2.8158	0.4721	1.0000	1.0000	4.7978	0.0000
1500.0	0.8470	3.0170	0.4167	1.0000	1.0000	2.6446	0.0000
1600.0	0.9034	3.2181	0.3669	1.0000	1.0000	1.7269	0.0000
1700.0	0.9599	3.4192	0.3225	1.0000	1.0000	1.2308	0.0000
*1771.0	1.0000	3.5621	0.2941	1.0000	1.0000	1.0000	1.1472
1800.0	1.0164	3.6204	0.2832	0.9240	0.9908	1.0000	1.1378
1850.0	1.0446	3.7209	0.2653	0.8114	0.9770	1.0000	1.1391
1900.0	1.0728	3.8215	0.2485	0.7174	0.9646	1.0000	1.1430
1950.0	1.1011	3.9221	0.2328	0.6380	0.9534	1.0000	1.1477
2000.0	1.1293	4.0226	0.2181	0.5702	0.9431	1.0000	1.1527
2100.0	1.1858	4.2238	0.1914	0.4610	0.9244	1.0000	1.1631
2200.0	1.2422	4.4249	0.1681	0.3777	0.9079	1.0000	1.1737
2300.0	1.2987	4.6260	0.1477	0.3127	0.8930	1.0000	1.1843
2400.0	1.3552	4.8271	0.1299	0.2612	0.8795	1.0000	1.1949
2500.0	1.4116	5.0283	0.1144	0.2199	0.8670	1.0000	1.2055
2600.0	1.4681	5.2294	0.1008	0.1863	0.8554	1.0000	1.2161
2700.0	1.5246	5.4305	0.0889	0.1587	0.8446	1.0000	1.2266
2800.0	1.5810	5.6317	0.0786	0.1359	0.8345	1.0000	1.2370
2900.0	1.6375	5.8328	0.0695	0.1169	0.8249	1.0000	1.2473
3000.0	1.6939	6.0339	0.0616	0.1010	0.8160	1.0000	1.2574
3100.0	1.7504	6.2351	0.0546	0.0877	0.8075	1.0000	1.2674
3200.0	1.8069	6.4362	0.0485	0.0763	0.7995	1.0000	1.2772
**3592.8	2.0287	7.2263	0.0309	0.0457	0.7725	1.0000	1.3131

Таблица 2.11. $T_0=600$ К, $P_0=10132.5$ Па, $\alpha=0.5$

u_0	$u_0/D_{чж}$	u_0/a_0	R_3	$R^*_{ДВ}$	$R^0_{*ДВ}$	$R_{МДВ}$	β
1400.0	0.7957	2.8158	0.4721	1.0000	1.0000	4.3523	0.0000
1500.0	0.8525	3.0170	0.4167	1.0000	1.0000	2.5002	0.0000
1600.0	0.9093	3.2181	0.3669	1.0000	1.0000	1.6576	0.0000
1700.0	0.9662	3.4192	0.3225	1.0000	1.0000	1.1893	0.0000
*1759.5	1.0000	3.5389	0.2985	1.0000	1.0000	1.0000	1.1516
1800.0	1.0230	3.6204	0.2832	0.8955	0.9870	1.0000	1.1417
1850.0	1.0514	3.7209	0.2653	0.7870	0.9731	1.0000	1.1442
1900.0	1.0798	3.8215	0.2485	0.6961	0.9607	1.0000	1.1488
1950.0	1.1083	3.9221	0.2328	0.6192	0.9492	1.0000	1.1540
2000.0	1.1367	4.0226	0.2181	0.5534	0.9385	1.0000	1.1596
2100.0	1.1935	4.2238	0.1914	0.4472	0.9192	1.0000	1.1713
2200.0	1.2503	4.4249	0.1681	0.3661	0.9018	1.0000	1.1833
2300.0	1.3072	4.6260	0.1477	0.3028	0.8861	1.0000	1.1953
2400.0	1.3640	4.8271	0.1299	0.2526	0.8716	1.0000	1.2074
2500.0	1.4209	5.0283	0.1144	0.2123	0.8582	1.0000	1.2195
2600.0	1.4777	5.2294	0.1008	0.1797	0.8458	1.0000	1.2315
2700.0	1.5345	5.4305	0.0889	0.1529	0.8342	1.0000	1.2434
2800.0	1.5914	5.6317	0.0786	0.1308	0.8233	1.0000	1.2551
2900.0	1.6482	5.8328	0.0695	0.1124	0.8132	1.0000	1.2666
3000.0	1.7050	6.0339	0.0616	0.0970	0.8037	1.0000	1.2778
3100.0	1.7619	6.2351	0.0546	0.0841	0.7947	1.0000	1.2889
3200.0	1.8187	6.4362	0.0485	0.0731	0.7863	1.0000	1.2996
**3216.5	1.8281	6.4694	0.0476	0.0715	0.7850	1.0000	1.3013

Таблица 2.12. $T_0=600$ К, $P_0=1013250$ Па, $\alpha=0.5$

u_0	$u_0/D_{чж}$	u_0/a_0	R_3	$R^*_{ДВ}$	$R^0_{*ДВ}$	$R_{МДВ}$	β
1400.0	0.7886	2.8158	0.4721	1.0000	1.0000	5.0085	0.0000
1500.0	0.8449	3.0170	0.4167	1.0000	1.0000	2.7046	0.0000
1600.0	0.9012	3.2181	0.3669	1.0000	1.0000	1.7544	0.0000
1700.0	0.9575	3.4192	0.3225	1.0000	1.0000	1.2471	0.0000
*1775.4	1.0000	3.5709	0.2924	1.0000	1.0000	1.0000	1.1456
1800.0	1.0139	3.6204	0.2832	0.9351	0.9922	1.0000	1.1364
1850.0	1.0420	3.7209	0.2653	0.8209	0.9784	1.0000	1.1371
1900.0	1.0702	3.8215	0.2485	0.7257	0.9662	1.0000	1.1407
1950.0	1.0983	3.9221	0.2328	0.6454	0.9551	1.0000	1.1451
2000.0	1.1265	4.0226	0.2181	0.5768	0.9449	1.0000	1.1498
2100.0	1.1828	4.2238	0.1914	0.4666	0.9266	1.0000	1.1596
2200.0	1.2392	4.4249	0.1681	0.3824	0.9106	1.0000	1.1694
2300.0	1.2955	4.6260	0.1477	0.3169	0.8963	1.0000	1.1790
2400.0	1.3518	4.8271	0.1299	0.2649	0.8834	1.0000	1.1885
2500.0	1.4081	5.0283	0.1144	0.2232	0.8717	1.0000	1.1979
2600.0	1.4645	5.2294	0.1008	0.1892	0.8609	1.0000	1.2071
2700.0	1.5208	5.4305	0.0889	0.1614	0.8509	1.0000	1.2162
2800.0	1.5771	5.6317	0.0786	0.1383	0.8416	1.0000	1.2252
2900.0	1.6334	5.8328	0.0695	0.1191	0.8329	1.0000	1.2341
3000.0	1.6898	6.0339	0.0616	0.1030	0.8247	1.0000	1.2429
3100.0	1.7461	6.2351	0.0546	0.0894	0.8170	1.0000	1.2516
3200.0	1.8024	6.4362	0.0485	0.0778	0.8097	1.0000	1.2601
**4113.4	2.3169	8.2733	0.0176	0.0244	0.7591	1.0000	1.3279

Таблица 2.13. $T_0=300$ К, $P_0=101325$ Па, $\alpha=2$

u_0	$u_0/D_{чж}$	u_0/a_0	R_3	$R^*_{ДВ}$	$R^0_{ДВ}$	$R_{МДВ}$	β
1400.0	0.9393	3.9907	0.2823	1.0000	1.0000	1.7508	0.0000
*1490.4	1.0000	4.2484	0.2473	0.9999	1.0000	1.0000	1.0947
1500.0	1.0064	4.2757	0.2438	0.9529	0.9961	1.0000	1.0915
1600.0	1.0735	4.5608	0.2110	0.6225	0.9632	1.0000	1.1081
1700.0	1.1406	4.8458	0.1830	0.4457	0.9374	1.0000	1.1273
1800.0	1.2077	5.1309	0.1591	0.3368	0.9158	1.0000	1.1453
1850.0	1.2413	5.2734	0.1484	0.2969	0.9062	1.0000	1.1539
1900.0	1.2748	5.4159	0.1386	0.2636	0.8972	1.0000	1.1622
1950.0	1.3084	5.5585	0.1295	0.2355	0.8887	1.0000	1.1703
2000.0	1.3419	5.7010	0.1211	0.2114	0.8808	1.0000	1.1781
2100.0	1.4090	5.9860	0.1061	0.1727	0.8660	1.0000	1.1932
2200.0	1.4761	6.2711	0.0931	0.1430	0.8527	1.0000	1.2076
2300.0	1.5432	6.5561	0.0820	0.1199	0.8404	1.0000	1.2215
2400.0	1.6103	6.8412	0.0723	0.1014	0.8291	1.0000	1.2349
2500.0	1.6774	7.1262	0.0640	0.0866	0.8185	1.0000	1.2479
2600.0	1.7445	7.4113	0.0568	0.0744	0.8087	1.0000	1.2604
2700.0	1.8116	7.6963	0.0505	0.0643	0.7996	1.0000	1.2725
2800.0	1.8787	7.9814	0.0450	0.0560	0.7911	1.0000	1.2842
2900.0	1.9458	8.2664	0.0401	0.0489	0.7832	1.0000	1.2953
3000.0	2.0129	8.5515	0.0359	0.0430	0.7758	1.0000	1.3060
3100.0	2.0800	8.8365	0.0322	0.0379	0.7689	1.0000	1.3162
3200.0	2.1471	9.1216	0.0290	0.0336	0.7625	1.0000	1.3258
**3214.5	2.1568	9.1629	0.0285	0.0330	0.7616	1.0000	1.3272

Таблица 2.14. $T_0=300$ К, $P_0=10132.5$ Па, $\alpha=2$

u_0	$u_0/D_{чж}$	u_0/a_0	R_3	$R^*_{ДВ}$	$R^0_{ДВ}$	$R_{МДВ}$	β
1400.0	0.9409	3.9907	0.2823	1.0000	1.0000	1.7187	0.0000
*1488.0	1.0000	4.2414	0.2481	0.9999	1.0000	1.0000	1.0955
1500.0	1.0081	4.2757	0.2438	0.9415	0.9950	1.0000	1.0924
1600.0	1.0753	4.5608	0.2110	0.6162	0.9621	1.0000	1.1096
1700.0	1.1425	4.8458	0.1830	0.4414	0.9360	1.0000	1.1293
1800.0	1.2097	5.1309	0.1591	0.3335	0.9140	1.0000	1.1481
1850.0	1.2433	5.2734	0.1484	0.2939	0.9041	1.0000	1.1571
1900.0	1.2769	5.4159	0.1386	0.2609	0.8948	1.0000	1.1660
1950.0	1.3105	5.5585	0.1295	0.2329	0.8860	1.0000	1.1746
2000.0	1.3441	5.7010	0.1211	0.2091	0.8777	1.0000	1.1830
2100.0	1.4113	5.9860	0.1061	0.1706	0.8621	1.0000	1.1994
2200.0	1.4785	6.2711	0.0931	0.1412	0.8479	1.0000	1.2153
2300.0	1.5457	6.5561	0.0820	0.1182	0.8347	1.0000	1.2306
2400.0	1.6130	6.8412	0.0723	0.0999	0.8226	1.0000	1.2455
2500.0	1.6802	7.1262	0.0640	0.0852	0.8113	1.0000	1.2599
2600.0	1.7474	7.4113	0.0568	0.0731	0.8008	1.0000	1.2737
2700.0	1.8146	7.6963	0.0505	0.0632	0.7911	1.0000	1.2870
2800.0	1.8818	7.9814	0.0450	0.0549	0.7820	1.0000	1.2998
2900.0	1.9490	8.2664	0.0401	0.0480	0.7736	1.0000	1.3120
**2946.2	1.9800	8.3982	0.0381	0.0452	0.7699	1.0000	1.3175
3000.0	2.0162	8.5515	0.0359	0.0422	0.7658	1.0000	1.3237
3100.0	2.0834	8.8365	0.0322	0.0372	0.7585	1.0000	1.3348
3200.0	2.1506	9.1216	0.0290	0.0329	0.7517	1.0000	1.3454

Таблица 2.15. $T_0=300$ К, $P_0=1013250$ Па, $\alpha=2$

u_0	$u_0/D_{чж}$	u_0/a_0	R_3	$R^*_{ДВ}$	$R^0_{*ДВ}$	$R_{МДВ}$	β
1400.0	0.9386	3.9907	0.2823	1.0000	1.0000	1.7663	0.0000
*1491.6	1.0000	4.2517	0.2468	0.9999	1.0000	1.0000	1.0943
1500.0	1.0057	4.2757	0.2438	0.9584	0.9965	1.0000	1.0912
1600.0	1.0727	4.5608	0.2110	0.6255	0.9637	1.0000	1.1074
1700.0	1.1398	4.8458	0.1830	0.4478	0.9381	1.0000	1.1263
1800.0	1.2068	5.1309	0.1591	0.3384	0.9167	1.0000	1.1441
1850.0	1.2403	5.2734	0.1484	0.2983	0.9072	1.0000	1.1525
1900.0	1.2738	5.4159	0.1386	0.2649	0.8983	1.0000	1.1606
1950.0	1.3074	5.5585	0.1295	0.2366	0.8900	1.0000	1.1684
2000.0	1.3409	5.7010	0.1211	0.2125	0.8822	1.0000	1.1759
2100.0	1.4079	5.9860	0.1061	0.1736	0.8679	1.0000	1.1902
2200.0	1.4750	6.2711	0.0931	0.1439	0.8551	1.0000	1.2037
2300.0	1.5420	6.5561	0.0820	0.1207	0.8435	1.0000	1.2166
2400.0	1.6091	6.8412	0.0723	0.1022	0.8328	1.0000	1.2288
2500.0	1.6761	7.1262	0.0640	0.0872	0.8230	1.0000	1.2406
2600.0	1.7432	7.4113	0.0568	0.0750	0.8139	1.0000	1.2518
2700.0	1.8102	7.6963	0.0505	0.0649	0.8054	1.0000	1.2627
2800.0	1.8772	7.9814	0.0450	0.0564	0.7975	1.0000	1.2732
2900.0	1.9443	8.2664	0.0401	0.0494	0.7902	1.0000	1.2833
3000.0	2.0113	8.5515	0.0359	0.0434	0.7833	1.0000	1.2929
3100.0	2.0784	8.8365	0.0322	0.0383	0.7769	1.0000	1.3021
3200.0	2.1454	9.1216	0.0290	0.0339	0.7709	1.0000	1.3109
**3557.9	2.3854	10.1417	0.0201	0.0226	0.7528	1.0000	1.3386

Таблица 2.16. $T_0=600$ К, $P_0=101325$ Па, $\alpha=2$

u_0	$u_0/D_{чж}$	u_0/a_0	R_3	$R^*_{ДВ}$	$R^0_{*ДВ}$	$R_{МДВ}$	β
1400.0	0.9265	2.8584	0.4815	1.0000	1.0000	1.3591	0.0000
1500.0	0.9926	3.0626	0.4287	1.0000	1.0000	1.0289	0.0000
*1511.1	1.0000	3.0853	0.4231	1.0000	1.0000	1.0000	1.1930
1600.0	1.0588	3.2667	0.3811	0.8069	0.9709	1.0000	1.1778
1700.0	1.1250	3.4709	0.3386	0.6485	0.9448	1.0000	1.1862
1800.0	1.1912	3.6751	0.3009	0.5305	0.9228	1.0000	1.1969
1850.0	1.2243	3.7772	0.2836	0.4824	0.9128	1.0000	1.2025
1900.0	1.2573	3.8792	0.2674	0.4400	0.9035	1.0000	1.2082
1950.0	1.2904	3.9813	0.2521	0.4024	0.8947	1.0000	1.2139
2000.0	1.3235	4.0834	0.2377	0.3689	0.8864	1.0000	1.2196
2100.0	1.3897	4.2876	0.2116	0.3121	0.8709	1.0000	1.2311
2200.0	1.4559	4.4917	0.1885	0.2662	0.8567	1.0000	1.2426
2300.0	1.5220	4.6959	0.1682	0.2285	0.8438	1.0000	1.2539
2400.0	1.5882	4.9001	0.1502	0.1974	0.8318	1.0000	1.2651
2500.0	1.6544	5.1043	0.1344	0.1714	0.8207	1.0000	1.2761
2600.0	1.7206	5.3084	0.1204	0.1496	0.8105	1.0000	1.2867
2700.0	1.7868	5.5126	0.1080	0.1312	0.8010	1.0000	1.2971
2800.0	1.8529	5.7168	0.0971	0.1155	0.7921	1.0000	1.3072
2900.0	1.9191	5.9209	0.0874	0.1021	0.7839	1.0000	1.3169
3000.0	1.9853	6.1251	0.0788	0.0906	0.7763	1.0000	1.3262
**3015.3	1.9954	6.1563	0.0776	0.0889	0.7752	1.0000	1.3276
3100.0	2.0515	6.3293	0.0712	0.0806	0.7692	1.0000	1.3351
3200.0	2.1176	6.5334	0.0644	0.0720	0.7627	1.0000	1.3436

Таблица 2.17. $T_0=600$ К, $P_0=10132.5$ Па, $\alpha=2$

u_0	$u_0/D_{чж}$	u_0/a_0	R_3	$R^*_{ДВ}$	$R^0_{*ДВ}$	$R_{МДВ}$	β
1400.0	0.9318	2.8584	0.4815	1.0000	1.0000	1.3281	0.0000
1500.0	0.9983	3.0626	0.4287	1.0000	1.0000	1.0064	0.0000
*1502.5	1.0000	3.0676	0.4274	1.0000	1.0000	1.0000	1.1965
1600.0	1.0649	3.2667	0.3811	0.7892	0.9675	1.0000	1.1821
1700.0	1.1315	3.4709	0.3386	0.6338	0.9410	1.0000	1.1920
1800.0	1.1980	3.6751	0.3009	0.5180	0.9183	1.0000	1.2040
1850.0	1.2313	3.7772	0.2836	0.4707	0.9080	1.0000	1.2103
1900.0	1.2646	3.8792	0.2674	0.4291	0.8983	1.0000	1.2167
1950.0	1.2979	3.9813	0.2521	0.3922	0.8891	1.0000	1.2231
2000.0	1.3311	4.0834	0.2377	0.3593	0.8804	1.0000	1.2296
2100.0	1.3977	4.2876	0.2116	0.3037	0.8641	1.0000	1.2425
2200.0	1.4642	4.4917	0.1885	0.2587	0.8492	1.0000	1.2553
2300.0	1.5308	4.6959	0.1682	0.2219	0.8356	1.0000	1.2679
2400.0	1.5974	4.9001	0.1502	0.1915	0.8230	1.0000	1.2803
2500.0	1.6639	5.1043	0.1344	0.1662	0.8114	1.0000	1.2923
2600.0	1.7305	5.3084	0.1204	0.1450	0.8007	1.0000	1.3040
2700.0	1.7970	5.5126	0.1080	0.1271	0.7907	1.0000	1.3154
**2754.6	1.8334	5.6241	0.1019	0.1185	0.7856	1.0000	1.3214
2800.0	1.8636	5.7168	0.0971	0.1119	0.7815	1.0000	1.3264
2900.0	1.9301	5.9209	0.0874	0.0989	0.7729	1.0000	1.3369
3000.0	1.9967	6.1251	0.0788	0.0878	0.7649	1.0000	1.3471
3100.0	2.0633	6.3293	0.0712	0.0782	0.7575	1.0000	1.3569
3200.0	2.1298	6.5334	0.0644	0.0698	0.7507	1.0000	1.3662

Таблица 2.18. $T_0=600$ К, $P_0=1013250$ Па, $\alpha=2$

u_0	$u_0/D_{чж}$	u_0/a_0	R_3	$R^*_{ДВ}$	$R^0_{*ДВ}$	$R_{МДВ}$	β
1400.0	0.9240	2.8584	0.4815	1.0000	1.0000	1.3739	0.0000
1500.0	0.9899	3.0626	0.4287	1.0000	1.0000	1.0397	0.0000
*1515.2	1.0000	3.0937	0.4211	1.0000	1.0000	1.0000	1.1914
1600.0	1.0559	3.2667	0.3811	0.8155	0.9724	1.0000	1.1758
1700.0	1.1219	3.4709	0.3386	0.6557	0.9466	1.0000	1.1835
1800.0	1.1879	3.6751	0.3009	0.5368	0.9249	1.0000	1.1934
1850.0	1.2209	3.7772	0.2836	0.4883	0.9152	1.0000	1.1985
1900.0	1.2539	3.8792	0.2674	0.4456	0.9062	1.0000	1.2037
1950.0	1.2869	3.9813	0.2521	0.4077	0.8976	1.0000	1.2090
2000.0	1.3199	4.0834	0.2377	0.3739	0.8896	1.0000	1.2142
2100.0	1.3859	4.2876	0.2116	0.3167	0.8747	1.0000	1.2245
2200.0	1.4519	4.4917	0.1885	0.2703	0.8613	1.0000	1.2347
2300.0	1.5179	4.6959	0.1682	0.2323	0.8490	1.0000	1.2448
2400.0	1.5839	4.9001	0.1502	0.2008	0.8377	1.0000	1.2548
2500.0	1.6499	5.1043	0.1344	0.1746	0.8273	1.0000	1.2645
2600.0	1.7159	5.3084	0.1204	0.1524	0.8177	1.0000	1.2741
2700.0	1.7819	5.5126	0.1080	0.1337	0.8087	1.0000	1.2834
2800.0	1.8479	5.7168	0.0971	0.1178	0.8004	1.0000	1.2925
2900.0	1.9139	5.9209	0.0874	0.1042	0.7926	1.0000	1.3012
3000.0	1.9799	6.1251	0.0788	0.0924	0.7854	1.0000	1.3097
3100.0	2.0459	6.3293	0.0712	0.0823	0.7787	1.0000	1.3178
3200.0	2.1119	6.5334	0.0644	0.0735	0.7725	1.0000	1.3255
**3341.1	2.2050	6.8215	0.0560	0.0630	0.7645	1.0000	1.3358

Выводы

В главе проведен термодинамический анализ невязкого одномерного течения со стационарной детонационной в канале переменного сечения, заканчивающимся соплом Лавалья. Рассмотрен случай, когда поток на входе и выходе из канала является сверхзвуковым.

Разработаны вычислительные алгоритмы и компьютерные программы для определения диапазонов относительных минимальных радиусов канала (RR -диаграммы), при которых при заданных параметрах на входе в канал одномерная теория допускает существование стационарных детонационных волн.

Проведено моделирование течения метано-воздушной горючей смеси в широком диапазоне начальных данных (начальная скорость потока, температура, давление, состав горючей смеси). Определены местоположение и параметры стационарных детонационных волн, допускаемых одномерной теорией. Показано, что зависимость радиуса канала, при котором расположена ДВ, от минимального радиуса канала может быть аппроксимирована линейной функцией, параметры которой получены в широком диапазоне начальных данных.

Получено, что в метано-воздушной горючей смеси:

- Скорость ДВ ЧЖ и максимальная скорость ДВ являются возрастающими функциями начального давления и убывающими функциями начальной температуры;
- Повышение начальной температуры приводит к уменьшению отрезка минимальных радиусов, при которых существует пересжатая ДВ;
- При коэффициенте избытка окислителя 0.5 и 2 зависимость скорости ДВ ЧЖ от давления и температуры существенно слабее, чем при стехиометрическом соотношении;
- При коэффициенте избытка окислителя 0.5 максимальная скорость ДВ на 10% выше, а при 2.0 – на 10% ниже, чем при стехиометрическом соотношении.

ГЛАВА 3. ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТАБИЛИЗАЦИИ ТЕЧЕНИЯ С ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНОЙ В КАНАЛЕ ПЕРЕМЕННОГО СЕЧЕНИЯ СО СВЕРХЗВУКОВЫМ ПОТОКОМ НА ВХОДЕ И ВЫХОДЕ

Введение

Задача исследования стабилизации течения с детонационной волной в канале переменного сечения вызывает определенный исследовательский интерес, что продемонстрировано в ряде работ [36, 37, 38, 106, 107]. Во второй главе было рассмотрено стационарное течение с детонационной волной в канале, имеющем две сужающиеся и две расширяющиеся области. Получены решения, удовлетворяющие уравнениям физической газовой динамики. В настоящей главе численно методом установления исследуется вопрос об устойчивости стационарных течений с детонационной волной в канале. Предложен алгоритм прохождения особой точки в канале переменного сечения при наличии неравновесных химических превращений.

3.1 Физико-математическая модель течения

Рассматривается случай сжигания топлива в канале переменного сечения, который заканчивается соплом Лавалья, в детонационной волне с последующим разгоном продуктов сгорания в сопле до сверхзвуковых скоростей [34, 77]. При численном моделировании предполагается, что течение одномерное, эффекты вязкости, теплопроводности и диффузии не учитываются. Система уравнений, описывающая нестационарные течения реагирующего газа в канале переменного сечения в областях непрерывности течения, при сделанных выше предположениях имеет вид [34, 74, 77, 88]:

$$\frac{\partial \rho F}{\partial t} + \frac{\partial \rho u F}{\partial x} = 0, \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial \rho u F}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u^2 + P) F}{\partial x} = P \frac{\partial F}{\partial x}, \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial \rho \left(U + \frac{u^2}{2} \right) F}{\partial t} + \frac{\partial \rho u F \left(U + \frac{P}{\rho} + \frac{u^2}{2} \right)}{\partial x} = 0, \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial \rho F \gamma_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u F \gamma_i}{\partial x} = F W_i, i = 1..N, \quad (3.4)$$

$$P = \rho R T \sum_{i=1}^N \gamma_i, \quad (3.5)$$

$$U = \sum_{i=1}^N \gamma_i U_i^0(T). \quad (3.6)$$

Здесь x – продольная координата, t – время, ρ – плотность, u – скорость смеси, P – давление, T – температура, H – энтальпия, $U_i^0(T)$ – заданная функция [31] – внутренняя энергия и γ_i – и концентрация i -ого компонента в смеси, $\bar{\gamma}$ – вектор мольно-массовых концентраций компонентов смеси, $F = F(x)$ – зависимость площади поперечного сечения канала от продольной координаты.

В случае рассмотрения задачи (3.1)-(3.6) в стационарной постановке комплексы $\frac{\partial(\cdot)}{\partial t}$ полагались равными нулю.

3.2 Равновесный анализ течения в канале

В главе анализируется одномерное течение в канале переменного сечения, оканчивающегося соплом Лавалья (рис. 3.1), в стационарной и нестационарной постановках. Рассматривается горючая смесь водорода с воздухом, для описания продуктов сгорания которой используется кинетический механизм, содержащий 8 обратимых стадий и 7 взаимодействующих компонентов $H, O, H_2, O_2, N_2, H_2O, OH$ (табл. 3.1).

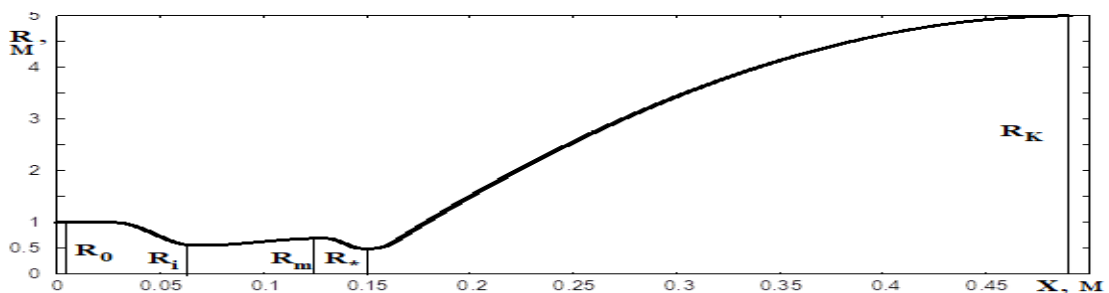


Рис. 3.1. Контур канала.

Таблица 3.1. Кинетический механизм горения водорода

Реакция	A, моль, м ³ , с, К	n	E, К
$H_2 + M = H + H + M$	5,5 E18	-1	51987
$O_2 + M = O + O + M$	7,2 E18	-1	59340
$H_2O + M = OH + H + M$	5,2 E21	-1,5	59386
$OH + M = O + H + M$	8,5 E18	-1	50830
$H_2O + O = OH + OH$	5,8 E13	0	9059
$H_2O + H = OH + H_2$	8,4 E13	0	10116
$O_2 + H = OH + O$	2,2 E13	0	8455
$H_2 + O = OH + H$	7,5 E13	0	5586

По методике, приведенной в главе 2, для химически равновесной смеси водород-воздух в рассмотренном контуре ($R_1/R_0 = 0.56$, $R_2/R_0 = 0.493$) может быть построена RR-диаграмма, согласно которой детонационная волна в данной задаче может находиться во второй сужающейся части рассматриваемого канала при входной скорости потока более 2200 м/с, в первой сужающейся и в первой расширяющейся частях рассматриваемого канала при входной скорости потока более 2700 м/с (рис. 3.2).

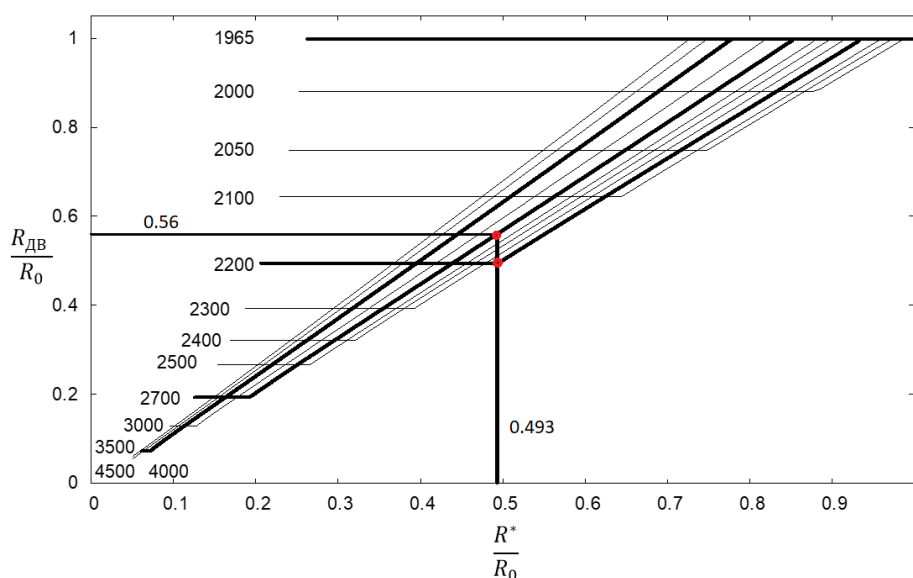


Рис. 3.2. RR-диаграмма для химически равновесной водородо-воздушной смеси при $T_0 = 400$ К.

Из равновесного стационарного моделирования из главы 2 следует, что для рассматриваемой конфигурации канала возможно рассчитать 3 положения стационарной ударной волны (рис. 3.3).

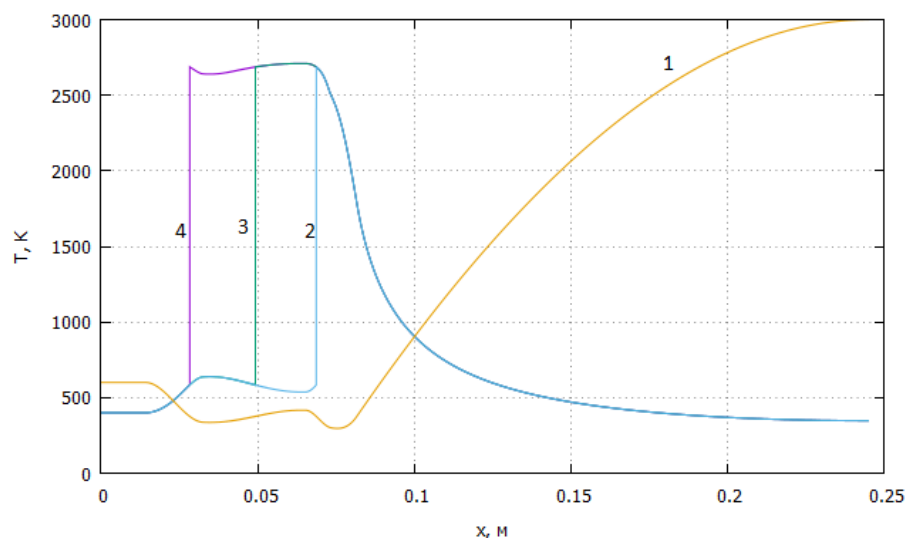


Рис. 3.3. Решения со стационарной УВ для химически равновесной водородо-воздушной смеси с начальной скоростью потока 2750 м/с при $R/R_0 = 0.57$, R – радиус сечения, в котором реализована УВ. 1 – форма контура, 2 – решение со стационарной УВ во 2ой сужающейся части, 3 - решение со стационарной УВ в расширяющейся части, 4 – решение со стационарной УВ в 1-ой сужающейся части.

В случае неравновесного течения химических реакций их скорости $W_i(P, Y, \bar{\nu}) \neq 0$ и конечны, из уравнения скорости потока $\frac{1}{\rho^2 H_T} \sum_{i=1}^N (H_T \rho_{\gamma_i} - \rho_T H_{\gamma_i}) W_i + \frac{u}{F} \frac{dF}{dx} = (M^2 - 1) \frac{du}{dx}$ следует, что координата перехода скорости потока через скорость звука заранее точно неизвестна. Далее в главе представлен алгоритм нахождения распределения параметров в канале с детонационной волной в стационарной постановке, приводится анализ устойчивости найденных решений.

3.3 Задача о нахождении стационарного химически неравновесного течения с переходом через скорость звука в канале с заданным контуром

Задача нахождения стационарного решения в сопле с заданным контуром является классической задачей (прямой задачей) теории сопла [34, 109]. Ее решение сводится к нахождению сепаратрисы на множестве интегральных кривых. В настоящей работе данная задача рассматривается для случая, когда на входе в канал задается холодный сверхзвуковой поток горючей смеси, который тормозится и нагревается в ударной волне, размещенной слева от минимального сечения канала. За ударной волной достигается температура самовоспламенения, смесь сгорает, и образуются продукты сгорания, которые истекают через сопло, причем в окрестности минимального сечения происходит переход через скорость звука. Для моделирования горючей смеси и продуктов сгорания используется модель смеси совершенных газов, химические превращения в которой описываются с использованием многостадийных кинетических механизмов. Данную задачу также можно рассматривать в качестве теста для алгоритмов расчета квазиодномерного нестационарного течения методом установления.

Стационарное неравновесное течение описывается системой дифференциально-алгебраических уравнений:

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho u F = Q_0, \end{array} \right. \quad (3.7)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} H + \frac{u^2}{2} = H_0, \end{array} \right. \quad (3.8)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\rho} \frac{dP}{dx} + u \frac{du}{dx} = 0, \end{array} \right. \quad (3.9)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\gamma_i}{dx} = \frac{W_i}{\rho u}, i = 1..N, \end{array} \right. \quad (3.10)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} P = \rho T R \sum_{i=1}^N \gamma_i, \end{array} \right. \quad (3.11)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} H = \sum_{i=1}^N \gamma_i H_i^0(T). \end{array} \right. \quad (3.12)$$

Для разгона потока от дозвукового до сверхзвукового течения при наличии неравновесных химических превращений требуется одновременное выполнение условий [74]:

$$\begin{cases} M^2 = 1, \\ \frac{1}{\rho^2 H_T} \sum_{i=1}^N (H_T \rho \gamma_i - \rho_T H \gamma_i) W_i + \frac{u}{F} \frac{dF}{dx} = 0. \end{cases}$$

Двухточечная разностная аппроксимация данной системы имеет следующий вид:

$$\begin{cases} \rho_2 u_2 F_2 = \rho_1 u_1 F_1 = Q, & (3.13) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \frac{1}{2} (\rho_2 u_2 + \rho_1 u_1) (u_2 - u_1) + P_2 - P_1 = 0, & (3.14) \end{cases}$$

$$\begin{cases} H(T_2) + \frac{u_2^2}{2} = H_0, & (3.15) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \gamma_{i2} - \gamma_{i1} - s \Delta x \frac{W_{i2}}{\rho_2 u_2} - (1-s) \Delta x \frac{W_{i1}}{\rho_1 u_1} = 0, i = 1..N, & (3.16) \end{cases}$$

$$\begin{cases} P = \rho T R \sum_{i=1}^N \gamma_i, & (3.17) \end{cases}$$

$$\begin{cases} H = \sum_{i=1}^N \gamma_i H_i^0(T), & (3.18) \end{cases}$$

где s – параметр неявной схемы.

Преобразуем (3.14):

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} (\rho_2 u_2 + \rho_1 u_1) (u_2 - u_1) + P_2 - P_1 = \\ & = \frac{1}{2} (\rho_2 u_2 + \rho_1 u_1) (u_2 - u_1) + \rho_2 R T_2 \sum_{i=1}^N \gamma_{i2} - \rho_1 R T_1 \sum_{i=1}^N \gamma_{i1} = \\ & = \left[\sum_{i=1}^N \gamma_i = S, \rho = \frac{Q}{uF} \right] = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \left(\frac{Q}{F_2} + \frac{Q}{F_1} \right) (u_2 - u_1) + \frac{RS_2 T_2 Q}{u_2 F_2} - \frac{RS_1 T_1 Q}{u_1 F_1} = \\
&= \frac{Q(F_1 + F_2)(u_2 - u_1)}{2F_1 F_2} + \frac{RS_2 T_2 Q}{u_2 F_2} - \frac{RS_1 T_1 Q}{u_1 F_1} = 0, \\
&\frac{(F_1 + F_2)(u_2 - u_1)}{2F_1 F_2} + \frac{RS_2 T_2}{u_2 F_2} - \frac{RS_1 T_1}{u_1 F_1} = 0.
\end{aligned} \tag{3.19}$$

Выразим T_2 и $\frac{dT_2}{du_2}$:

$$T_2 = \frac{S_1 T_1 u_2 F_2}{u_1 F_1 S_2} - \frac{(F_1 + F_2)(u_2 - u_1) u_2}{2F_1 S_2 R}, \tag{3.20}$$

$$\frac{dT_2}{du_2} = \frac{S_1 T_1 F_2}{u_1 F_1 S_2} - \frac{(F_1 + F_2)(2u_2 - u_1)}{2F_1 S_2 R}. \tag{3.21}$$

Так как $H(T_2) + \frac{u_2^2}{2} = H_0$, то получим нелинейное уравнение относительно u_2 :

$$\Phi(u_2) = \frac{u_2^2}{2} + H(T_2(u_2)) - H_0 = 0, \tag{3.22}$$

$$\frac{d\Phi}{du_2} = u_2 + H_T \frac{dT_2}{du_2} = u_2 + H_T \left(\frac{T_2}{u_2} - \frac{u_2(F_1 + F_2)}{2F_1 S_2 R} \right), \tag{3.23}$$

так как

$$\begin{aligned}
&\frac{dT_2}{du_2} = \frac{S_1 T_1 F_2}{u_1 F_1 S_2} - \frac{(F_1 + F_2)(2u_2 - u_1)}{2F_1 S_2 R} = \\
&= \frac{S_1 T_1 F_2}{u_1 F_1 S_2} - \frac{(F_1 + F_2)(u_2 - u_1)}{2F_1 S_2 R} - \frac{u_2(F_1 + F_2)}{2F_1 S_2 R} = \frac{T_2}{u_2} - \frac{u_2(F_1 + F_2)}{2F_1 S_2 R}.
\end{aligned}$$

Преобразуем выражение для скорости звука:

$$\begin{aligned}
&\frac{\rho H_T \rho_P + \rho_T (1 - \rho H_P)}{\rho H_T} = \frac{1}{a^2}, \\
&a_2^2 = \frac{\rho_2 H_T}{\rho_2 H_T \rho_P + \rho_T (1 - \rho_2 H_P)}, \left[\rho = \frac{P}{RST} \right],
\end{aligned}$$

$$a_2^2 = \frac{H_T \frac{P_2}{RS_2 T_2}}{H_T \frac{P_2}{RS_2 T_2} \frac{1}{RS_2 T_2} - \frac{P_2}{RS_2 T_2^2}} = \frac{H_T}{H_T \frac{1}{RS_2 T_2} - \frac{1}{T_2}} = \frac{H_T RS_2 T_2}{H_T - RS_2}. \quad (3.24)$$

Следует отметить, что при решении уравнения для получения значения u_2 $\Phi(u_2) = \frac{u_2^2}{2} + H(T_2(u_2)) - H_0 = 0$ при уменьшении шага интегрирования значение u_2 стремится к a_2 . При $u_2 < a_2$ значение $\frac{d\Phi}{du_2} > 0$, при $u_2 > a_2$ $\frac{d\Phi}{du_2} < 0$, и уравнение имеет два корня: «дозвуковой» и «сверхзвуковой», если $\Phi(a_2) > 0$, и не имеет корней, если $\Phi(a_2) < 0$.

В качестве начальных данных для данной задачи задаются значения давления, скорости потока, температуры смеси, концентрации веществ и координата стационарной ударной волны (рис. 3.4), которые берутся из расчетов, выполненных по методике, описанной в главе 2.

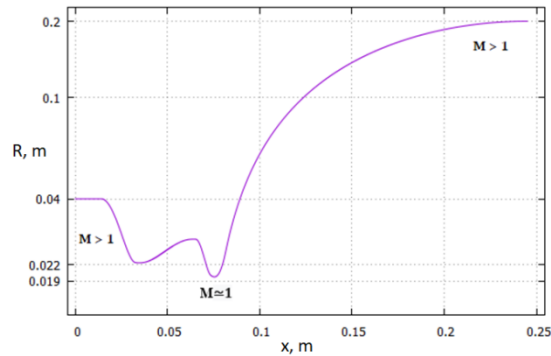


Рис. 3.4. Постановка задачи о прохождении особой точки течением с неравновесными химическими превращениями.

На ударной волне разрешаются соотношения Ренкина-Гюгонио:

$$\rho_1 v_1 = \rho_2 v_2, \quad (3.25)$$

$$P_1 + \rho_1 v_1^2 = P_2 + \rho_2 v_2^2, \quad (3.26)$$

$$U_1 + \frac{P_1}{\rho_1} + \frac{v_1^2}{2} = U_2 + \frac{P_2}{\rho_2} + \frac{v_2^2}{2}, \quad (3.27)$$

$$\bar{\gamma}_1 = \bar{\gamma}_2. \quad (3.28)$$

Решая прямую задачу теории сопла, в зависимости от положения ударной волны может быть получен как дозвуковой режим течения, так и режим запирания потока (отсутствие стационарного решения). Таким образом, можно подобрать такие две координаты стационарной детонационной волны, которые отличаются друг от друга на некоторое малое значение, но при этом, соответствуют двум различным конфигурациям течения потока, между которыми существует режим течения с прохождением особой точки (рис. 3.5)

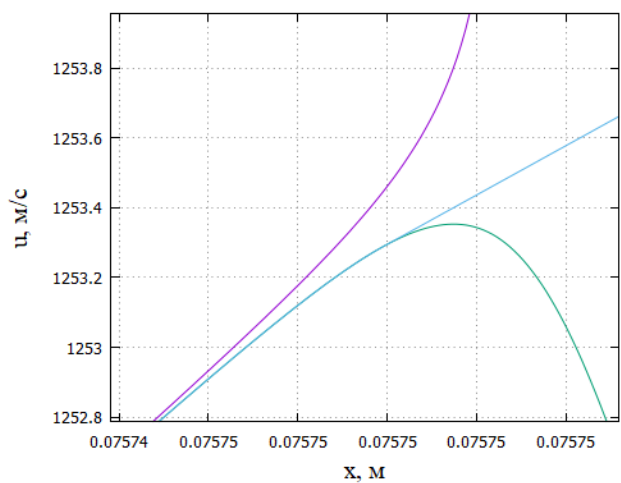


Рис. 3.5 Возможные зависимости скорости потока от продольной координаты канала

На основании данных положений может быть сформулирован алгоритм, который позволяет получить квазиодномерное стационарное решение со стоячей детонационной волной в продольной координате x контура с заданными составом смеси и базисными термодинамическими параметрами путем варьирования координаты постановки детонационной волны:

1. Поиск квазиодномерного стационарного решения со стоячей детонационной волной в продольной координате x контура без перехода скорости потока через скорость звука (координату постановки детонационной волны x_1 рекомендуется задавать такой, чтобы детонационная волна находилась ближе к началу

расширяющейся части канала или ближе к концу сужающейся части канала) (Рис. 3.3).

2. Поиск такой продольной координаты детонационной волны x_2 , при которой стационарное решение с детонационной волной отсутствует, т.н. «режим запираания потока» (координату постановки детонационной волны x_2 рекомендуется задавать такой, чтобы детонационная волна находилась ближе к концу расширяющейся части канала или ближе к началу сужающейся части канала) (Рис. 3.6).
3. Поиск в цикле новых x_1 и x_2 методом дихотомии, пока $|x_1 - x_2| > \varepsilon$.
4. Проводится поиск стационарного дозвукового решения с продольной координатой постановки детонационной волны до продольной координаты контура $x_{\text{ОСДЗ}}$, в которой $\frac{u}{a} = 0,99$.
5. Проводится моделирование течения с продольной координаты контура $x_{\text{ОСДЗ}}$, с предположением $\frac{du}{dx} = \text{const} = u'_1(x)$ и расчетом
$$u(x) = \sqrt{u_1^2(x) + 2u'_1(x)(x - x_{\text{ОСДЗ}})}$$
 до продольной координаты $x_{\text{ОССЗ}}$ контура, в которой выполняются оба условия $M^2 - 1 > 0$ и
$$\frac{1}{\rho^2 H_T} \sum_{i=1}^N (H_T \rho_{\gamma_i} - \rho_T H_{\gamma_i}) W_i + \frac{u}{F} \frac{dF}{dx} > 0.$$
6. Проводится поиск сверхзвукового стационарного решения с продольной координаты $x_{\text{ОССЗ}}$ контура.

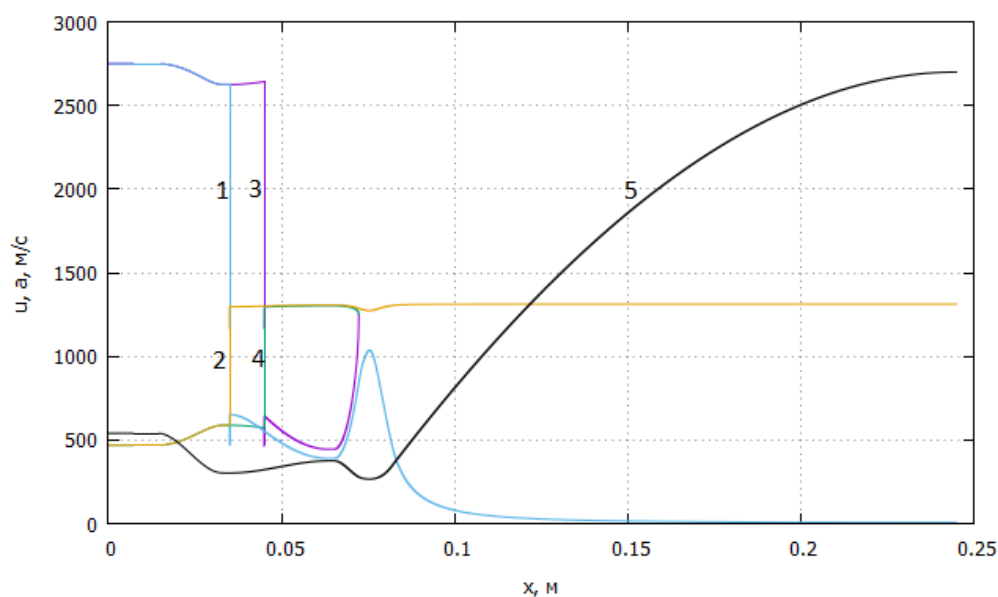


Рис. 3.6. Варьирование координаты стоячей детонационной волны. 1 – скорость потока, дозвуковое стационарное решение за детонационной волной, 2 – скорость звука, дозвуковое стационарное решение за детонационной волной, 3 – скорость потока, отсутствие стационарного решения за детонационной волной (запирание), 4 – скорость звука, отсутствие стационарного решения за детонационной волной (запирание), 5 – форма канала.

При попытке получить стационарные неравновесные решения с начальной скоростью потока $v_0 = 2650$ м/с и начальной температурой $T_0 = 400$ К наблюдается наличие только одного вида решений с детонационной волной в первой сужающейся и расширяющейся частях рассматриваемого канала (только дозвуковые), что указывает на отсутствие решений с переходом скорости потока через скорость звука (рис. 3.7). При этом, стационарное неравновесное решение с переходом скорости потока через скорость звука при данных начальных скорости и температуре имеет место быть при наличии детонационной волны во второй сужающейся части рассматриваемого канала (рис. 3.8).

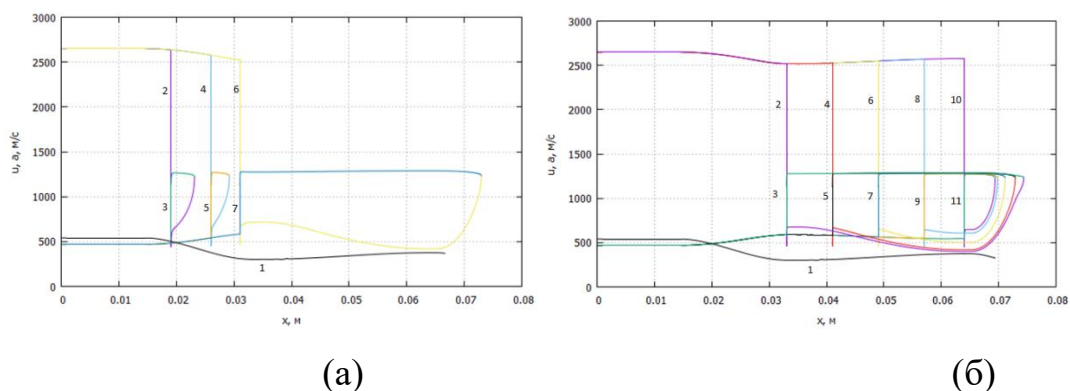


Рис. 3.7. Распределения скоростей потока и звука при различных положениях детонационной волны в части «b» (а) и «с» (б) контура для химически неравновесной водородо-воздушной смеси при $T_0 = 400$ К, $v_0 = 2650$ м/с. 1 – форма рассматриваемого канала, 2, 4, 6, 8, 10 – скорости потока, 3, 5, 7, 9, 11 – скорости звука.

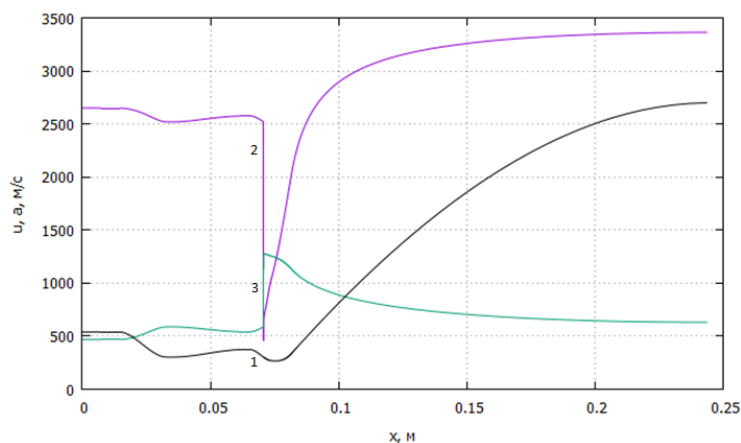


Рис. 3.8. Распределения скорости потока и звука при постановке детонационной волны во второй сужающейся части контура для химически неравновесной водородо-воздушной смеси при $T_0 = 400$ К, $v_0 = 2650$ м/с. 1 – форма рассматриваемого канала, 2 – скорость потока, 3 – скорость звука.

Отметим, что факты наличия и отсутствия решений согласуются с результатами расчетов, представленными на RR-диаграмме (рис. 3.2).

При реализации алгоритма прохождения особой точки также можно варьировать скорость потока на входе в канал, считая, что координата стационарной детонационной волны фиксирована. В этом случае путем задания координат детонационных волн на границах сужающихся и

расширяющихся областей рассматриваемого канала могут быть получены диапазоны скоростей, при которых реализуется неравновесное течение со стоячей детонационной волной (рис. 3.9). Так, в рассматриваемом контуре в первой расширяющейся области возможно стационарное решение при начальной скорости потока от 2680 до 5250 м/с.

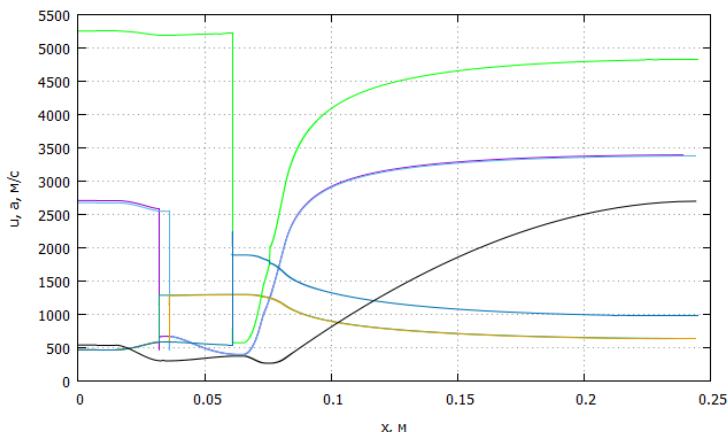


Рис. 3.9. Распределения скоростей потока стационарных неравновесных квазиодномерных решений с переходом через скорость звука.

3.4 Применение метода установления для моделирования течения со стационарной детонационной волной. Анализ устойчивости полученных решений

Для анализа устойчивости решения в нестационарной постановке задачи (3.1)-(3.6) применялся метод Годунова второго порядка точности. Изначально решалась задача моделирования замороженного течения в контуре. В качестве начального приближения решения было положено, что во всей расчетной области $u_0 = 4297 \frac{M}{c}$, $T_0 = 400$ К, $P_0 = 1$ атм течет стехиометрическая смесь водорода и кислорода. Решалась задача получения установившегося течения, после чего в расширяющейся части моделировалось возникновение УВ и снова осуществлялся поиск установившегося решения. Методом установления было получено решение со стационарной УВ в первой расширяющейся части рассматриваемого контура (3.10).

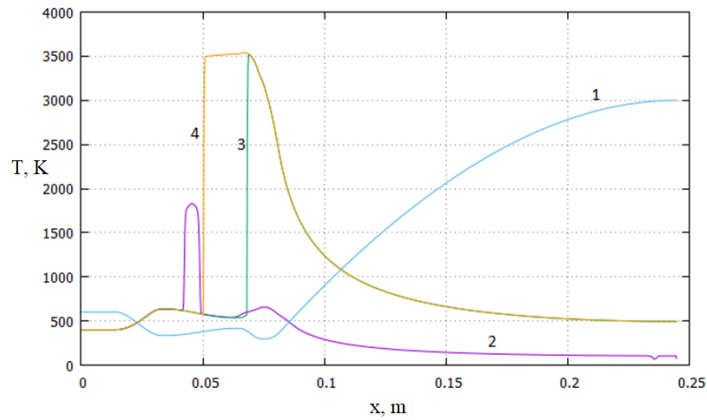


Рис 3.10. Распределение температуры по временным слоям, замороженная стехиометрическая смесь водорода с кислородом, $u_0 = 4297 \text{ м/с}$. 1 – форма контура канала, 2-начало распространения реализованной УВ, $t=0,000255\text{с}$, 3-положение УВ в момент времени $t=0,000375\text{с}$, 4-положение УВ в момент времени $t=0,02\text{с}$ (установившееся положение)

Далее был проведен анализ устойчивости решений, полученных при помощи алгоритма прохождения особой точки. Задав в качестве начального распределения параметров значения, полученные при проведении стационарного расчета поиска решений с детонационной волной в первой сужающейся, первой расширяющейся и второй сужающейся областях рассматриваемого канала, были получены следующие результаты.

Распределение параметров стационарного решения с детонационной волной в первой сужающейся области является неустойчивым. Детонационная волна уходит из расчетной области, двигаясь против потока (рис. 3.11).

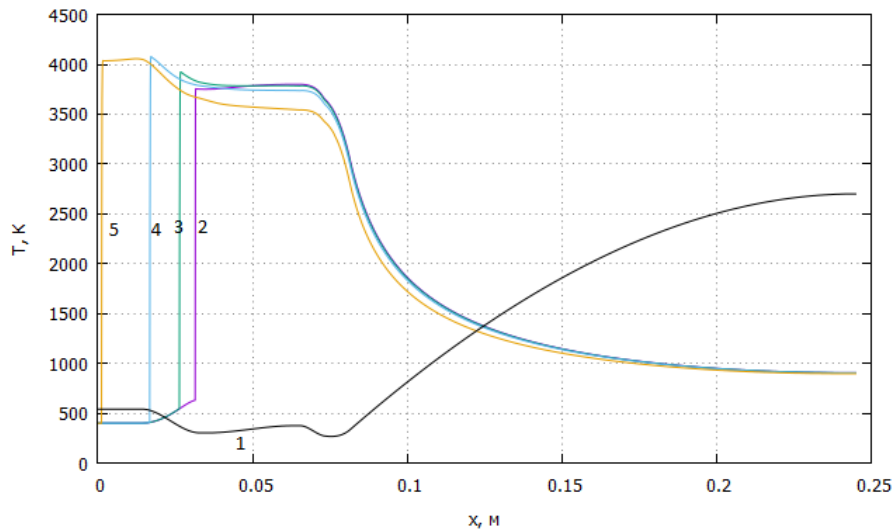


Рис. 3.11. Распределения температуры при постановке детонационной волны в первой расширяющейся части контура для химически неравновесной водородо-воздушной смеси при $T_0 = 400$ К, $v_0 = 2750$ м/с. 1 – форма контура, 2 – начальное приближение, 3 – распределение температуры в момент времени $t=372$ мкс, 4 – распределение температуры в момент времени $t=418$ мкс, 5 – распределение температуры в момент времени $t=443$ мкс.

Неустойчивым является стационарное решение с детонационной волной во второй расширяющейся части канала. Детонационная волна, двигаясь против потока, устанавливается в области первого расширения (рис. 3.12) или, перемещаясь по потоку (рис. 3.13), покидает расчетную область.

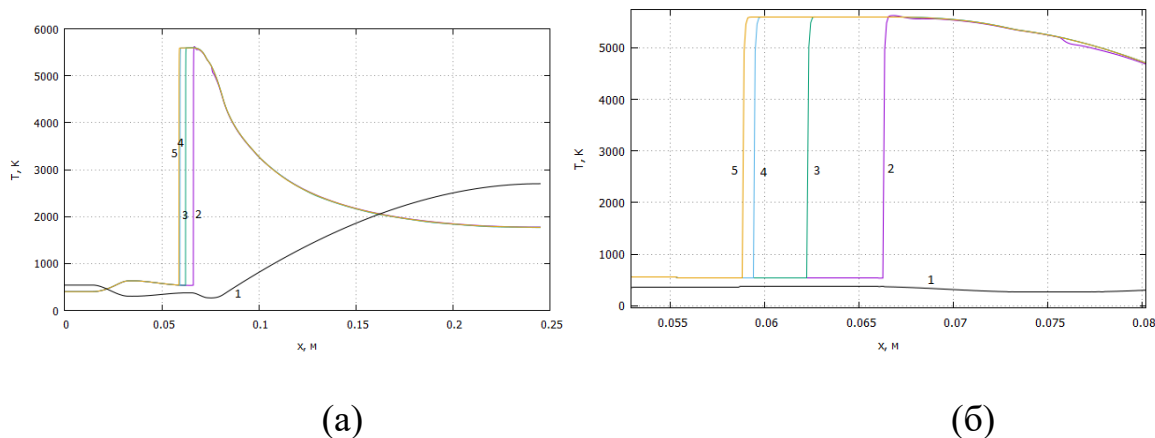


Рис. 3.12. Распределения температуры при постановке детонационной волны во второй сужающейся части контура для химически неравновесной водородо-воздушной смеси при $T_0 = 400$ К, $v_0 = 5000$ м/с, расчетная область целиком (а) и окрестность распространения детонационной волны (б). 1 – форма контура, 2 – начальное приближение, 3 – распределение температуры в момент времени $t=512$ мкс, 4 – распределение температуры в момент времени $t=1025$ мкс, 5 – распределение температуры в момент времени $t=1571$ мкс.

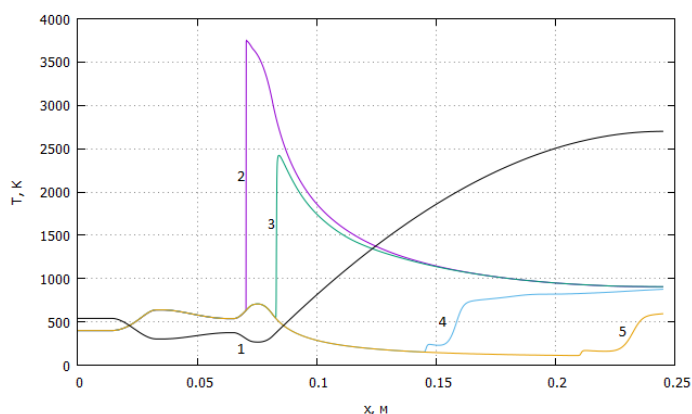


Рис. 3.13. Распределения температуры при постановке детонационной волны во второй сужающейся части контура для химически неравновесной водородо-воздушной смеси при $T_0 = 400$ К, $v_0 = 2750$ м/с. 1 – форма контура, 2 – начальное приближение, 3 – распределение температуры в момент времени $t=136$ мкс, 4 – распределение температуры в момент времени $t=168$ мкс, 5 – распределение температуры в момент времени $t=195$ мкс.

Стационарное решение с детонационной волной в первой расширяющейся части контура является устойчивым (рис. 3.14). Детонационная волна только лишь несколько смещается вправо.

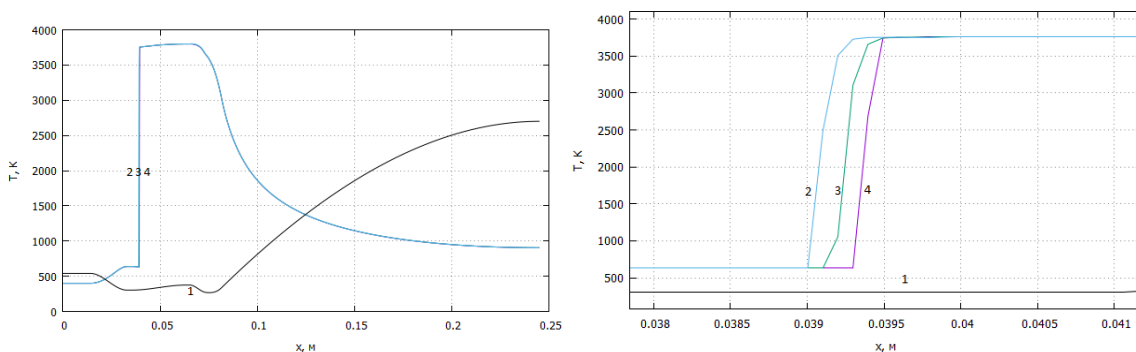


Рис. 3.14. Распределения температуры при постановке детонационной волны в первой расширяющейся части контура для химически неравновесной водородо-воздушной смеси при $T_0 = 400$ K, $v_0 = 2750$ м/с. 1 – форма контура, 2 – начальное приближение, 3 – распределение температуры в момент времени $t=136$ мкс, 4 – распределение температуры в моменты времени $t=289$ мкс и $t=2888$ мкс.

Аналогичным образом была проанализирована устойчивость решения, полученного в стационарной равновесной постановке (рис. 3.3).

При задании начального равновесного приближения с ударной волной в первой сужающейся части канала с входной скоростью смеси 2750 м/с, детонационная волна оказывалась неустойчивой и, двигаясь влево, против направления движения потока, покидала расчетную область (рис. 3.15). Данный факт согласуется с RR диаграммой на рис. 3.2.

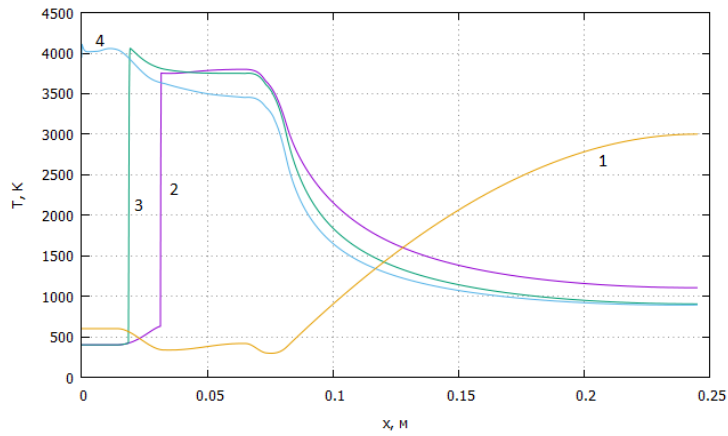


Рис. 3.15. Неравновесный нестационарный расчет течения водородо-воздушной смеси с детонационной волной в 1ой сужающейся области. 1- форма контура, 2-начальное приближение, 3-распределение температуры в момент времени $t= 0.000684\text{с}$, 4-распределение температуры в момент времени $t= 0.000776\text{с}$.

При задании начального равновесного приближения с ударной волной в первой расширяющейся части канала с входной скоростью смеси 2750 м/с, детонационная волна оказывалась устойчивой и только немного смещается влево относительно начального приближения (рис. 3.16).

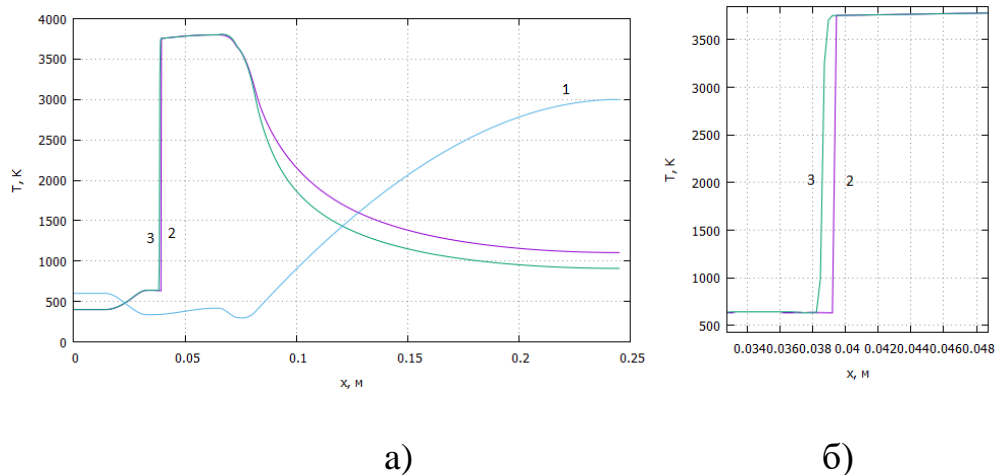


Рис. 3.16. Неравновесный нестационарный расчет течения водородо-воздушной смеси с детонационной волной в 1ой расширяющейся области, распределение температуры в канале (а) и в окрестности установления детонационной волны (б). 1– форма контура, 2 – начальное приближение, 3 – установившееся решение.

При задании начального равновесного приближения с ударной волной во второй сужающейся части рассматриваемого канала с входной скоростью смеси 2750 м/с, детонационная волна является неустойчивой в этом положении. Она начинает двигаться влево против направления движения потока и стабилизируется при той же площади поперечного сечения канала, что и в выше рассмотренном случае (рис. 3.17).

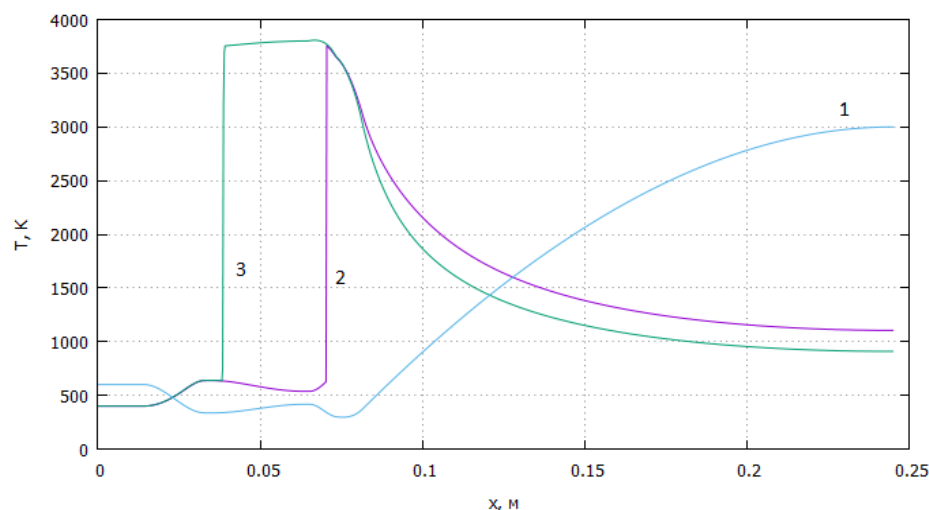


Рис. 3.17. Неравновесный нестационарный расчет течения водородо-воздушной смеси с детонационной волной во 2ой сужающейся области. 1-форма контура, 2-начальное приближение, 3 – установившееся распределение температуры.

При задании начального равновесного приближения с ударной волной во второй сужающейся части канала с входной скоростью смеси 2650 м/с, детонационная волна является так же неустойчивой, но при этом, в отличие от предыдущего случая, полностью уходит за пределы расчетной области (рис. 3.18).

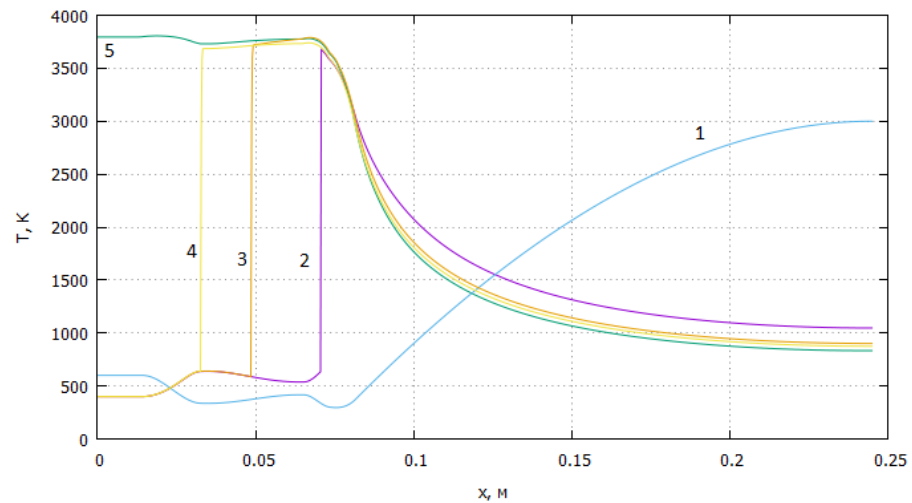
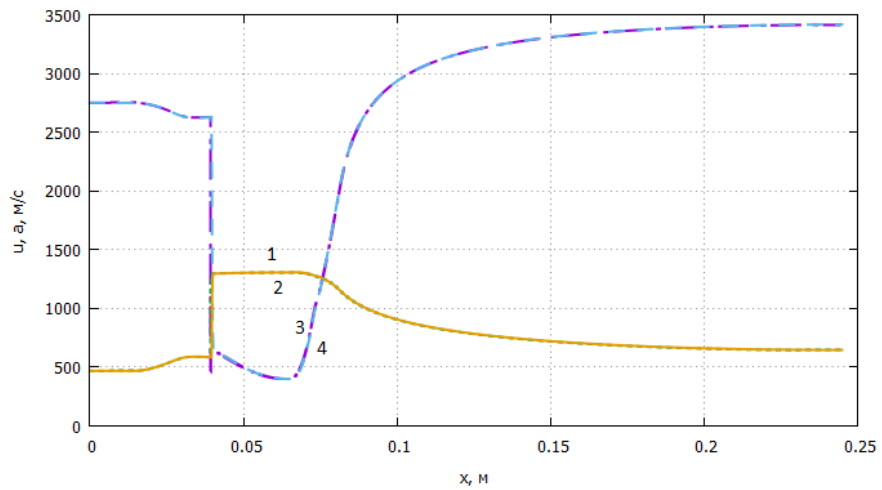
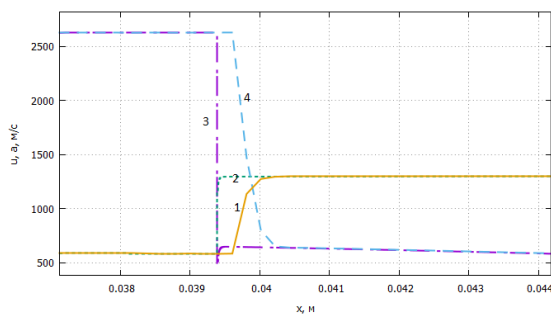


Рис. 3.18. Неравновесный нестационарный расчет течения водородо-воздушной смеси с детонационной волной во 2ой расширяющейся области. 1-форма контура, 2-начальное приближение, 3-распределение температуры в момент времени $t = 0,000811\text{с}$, 4-распределение температуры в момент времени $t = 0,004928\text{с}$, 5-распределение температуры в момент времени $t = 0,007188\text{с}$.

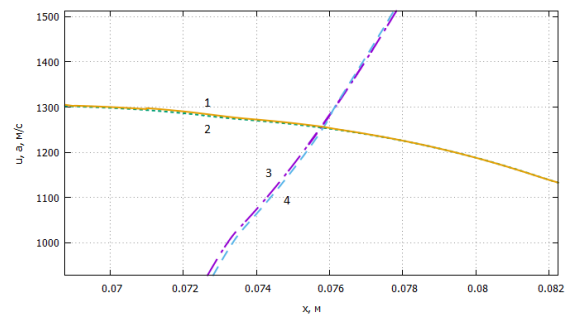
Решения, полученные методом установления, были сравнены с решениями, полученными при решении прямой задачи теории сопла с прохождением особой точки в окрестности критического сечения (Рис. 3.19) с использованием алгоритма прохождения особой точки. Полученные результаты хорошо согласуются во всех расчетных областях, за исключением окрестности детонационной волны. Данное различие может быть объяснено тем, что для моделирования тонкой структуры детонационной волны требуется очень мелкая дискретизация расчетной области, которая и была реализована при решении задачи в стационарной постановке. При решении задачи в нестационарной постановке мелкая дискретизация в окрестности детонационной волны сделана не была.



а)



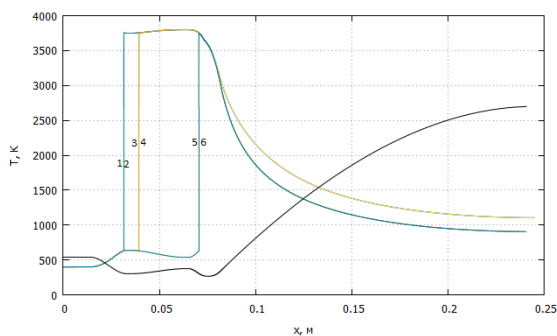
б)



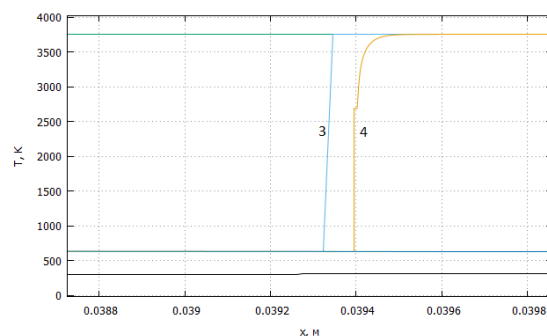
в)

Рис. 3.19. Химически неравновесная смесь водород-воздух, входная скорость потока 2750 м/с, распределения скорости (3,4) и скорости звука (1,2) в канале (а), в окрестности детонационной волны (б) и в окрестности критического сечения (в). 1, 4 – метод установления, 2,3 – прямая задача теории сопла.

Так же следует отметить, что положения детонационной волны в равновесном и неравновесном течениях хорошо согласуются друг с другом. Заметное отличие в распределении параметров наблюдается во втором расширяющемся сечении (рис. 3.20). На данном рисунке можно отметить наличие «ступенчатой структуры» в окрестностях стационарной детонационной волны.



(a)



(б)

Рис. 3.20. Сравнение распределения температур в контуре для химически равновесной (1, 3, 5) и неравновесной (2, 4, 6) водородо-воздушной смеси при $T_0 = 400$ K, $v_0 = 2750$ м/с в рассматриваемом канале (а) и в области «с» (б) при наличии стационарной детонационной волны и перехода скорости потока через скорость звука.

Выводы

В данной главе проанализирована устойчивость неравновесного нестационарного течения с детонационной волной в контуре. В качестве начального распределения параметров взяты результаты равновесного стационарного моделирования. Показано существование устойчивых и неустойчивых положений детонационной волны в каналах переменного сечения. Описан алгоритм, позволяющий с помощью наименьшего количества расчетных операций предсказать координату стационарной детонационной волны.

ГЛАВА 4. МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЯ В ДЕТонирующем газе за отраженной ударной волной

Введение. Задача об отраженной ударной волне.

При моделировании высокоскоростных высокотемпературных течений горючих смесей актуальной становится задача подбора тестовых примеров, позволяющих судить о достоверности разработанных вычислительных алгоритмов и программных комплексов. В качестве одной из таких задач может быть использована задача об отражении плоской ударной волны от стенки в канале, заполненном горючей смесью [116, 117, 119, 122, 123, 127]. В случае химически не реагирующего газа, когда на стенку приходит ударная волна, за которой реализуется равномерный поток, параметры отраженной ударной волны могут быть найдены из соотношений Ренкина-Гюгонио, дополненных условием равенства нулю скорости на отражающей стенке.

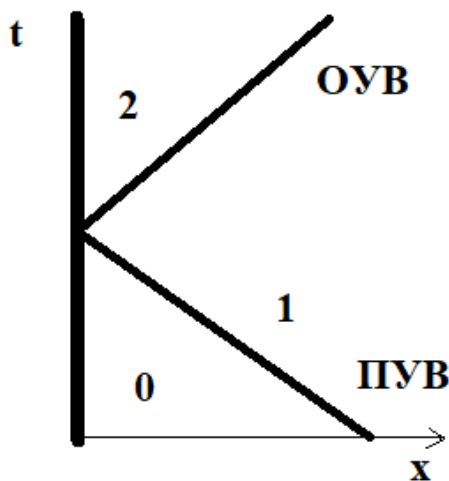


Рис. 4.1. Отражение ударной волны от стенки. ПУВ – падающая ударная волна; ОУВ – отраженная ударная волна; 0 – область перед ПУВ, 1 – область за ПУВ и перед ОУВ, 2 – область за ОУВ

Параметры течения перед- и за- ПУВ связаны соотношениями Ренкина-Гюгонио:

$$\begin{aligned}
 \rho_1(D_0 - u_1) &= \rho_0(D_0 - u_0), \\
 P_1 + \rho_1(D_0 - u_1)^2 &= P_0 + \rho_0(D_0 - u_0)^2, \\
 \rho_1(D_0 - u_1)\left(h_1 + \frac{(D_0 - u_1)^2}{2}\right) &= \rho_0(D_0 - u_0)\left(h_0 + \frac{(D_0 - u_0)^2}{2}\right) \\
 \gamma_{1,i} &= \gamma_{0,i} \quad , \quad i = 1, 2, \dots, N.
 \end{aligned}
 \tag{4.1}$$

Скорость ПУВ D_0 , а также параметры перед ПУВ заданы. Для замыкания системы здесь и в дальнейшем используются термическое и калорическое уравнения состояния. Параметры за ПУВ находятся из данной системы нелинейных алгебраических уравнений на этапе подготовки начальных данных.

Параметры течения перед- и за- ОУВ также связаны соотношениями Ренкина-Гюгонио:

$$\begin{aligned}
 \rho_2(D-u_2) &= \rho_1(D-u_1), \\
 P_2 + \rho_2(D-u_2)^2 &= P_1 + \rho_1(D-u_1)^2, \\
 \rho_2(D-u_2)\left(h_2 + \frac{(D-u_2)^2}{2}\right) &= \rho_1(D-u_1)\left(h_1 + \frac{(D-u_1)^2}{2}\right) \\
 \gamma_{2,i} &= \gamma_{1,i} \quad , \quad i=1,2,\dots,N.
 \end{aligned}
 \tag{4.2}$$

Скорость ОУВ D , а также параметры течения за ОУВ находятся из данной системы при дополнительном условии, что скорость за ОУВ равна нулю:

$$u_2 = 0.
 \tag{4.3}$$

Необходимо отметить, что данная задача является одним из тестов для отработки вычислительных алгоритмов решения многомерных уравнений газовой динамики. Полученное в ней ступенчатое решение должно сохраняться с течением времени при численном решении.

В случае детонирующей горючей смеси можно сформулировать задачу об отражении ударной волны от стенки следующим образом. Будем подбирать начальные данные так, что в областях «0» и «1» химические реакции протекали крайне медленно, и воспламенение горючей смеси не происходило. То есть выполняются соотношения Ренкина-Гюгонио (4.1). А в области 2 (рис. 4.1) за ОУВ температура превышала температуру самовоспламенения горючей смеси, протекали экзотермические химические реакции и достигалось состояние термодинамического равновесия. То есть

параметры течения в областях 1 и 2 связаны следующей системой соотношений:

$$\begin{aligned}
 \rho_2(D-u_2) &= \rho_1(D-u_1), \\
 P_2 + \rho_2(D-u_2)^2 &= P_1 + \rho_1(D-u_1)^2, \\
 \rho_2(D-u_2)\left(h_2 + \frac{(D-u_2)^2}{2}\right) &= \rho_1(D-u_1)\left(h_1 + \frac{(D-u_1)^2}{2}\right) \\
 \gamma_{2,i} &= \gamma_{2,i}(\rho_2, T_2) \quad , \quad i=1,2,\dots,N.
 \end{aligned}
 \tag{4.4}$$

Равновесные концентрации $\gamma_{2,i} = \gamma_{2,i}(\rho_2, T_2)$ находятся из решения задачи о расчете термодинамического равновесия по методике, описанной в главе 2. Необходимо отметить, что концентрации $\gamma_{1,i}, \gamma_{2,i}$ удовлетворяют условию сохранения элементного состава.

$$\sum_{i=1}^N A_K^i \gamma_{2,i} = \sum_{i=1}^N A_K^i \gamma_{1,i} = \gamma_K^0, \quad K=1,2,\dots,N_e$$

Здесь γ_K^0 - число молей К-ого атома, содержащееся в 1 кг исходной горючей смеси.

Аналогично вышеописанному, скорость ОУВ D , а также параметры течения за ОУВ находятся из решения системы (4.4) при дополнительном условии (4.3), что скорость продуктов сгорания за ОУВ равна нулю.

Данная задача в работе называется «задачей о равновесной отраженной ударной волне».

Также рассматривается задача расчета параметров детонации Чепмена-Жуге для области 1, решение которой ищется из системы (4.4), дополненной условием Чепмена-Жуге:

$$D = u_2 + a_{2e}
 \tag{4.5}$$

Здесь a_{2e} – равновесная скорость звука, которая вычисляется по методике, описанной в главе 2.

Для численного решения системы нелинейных алгебраических уравнений Ренкина-Гюгонио (4.2) или (4.4) с одним из замыкающих условий разработан вычислительный алгоритм, основанный на построении ударной адиабаты (замороженной или равновесной), выражение которой получается из соотношений Ренкина-Гюгонио путем алгебраических преобразований:

$$h_3(V_3, T_3) - h_D - \frac{1}{2}(V_D + V_3)(P_3 - P_D) = 0 \quad (4.6)$$

Индекс “Д” соответствует параметрам до УВ, индекс «3» – за УВ.

Приведем алгоритм решения.

1. Вычисляются все параметры на ударной адиабате, соответствующие $V=V_D$, и задается шаг изменения удельного объема ΔV .

2. Рассчитываются все параметры на ударной адиабате при $V=V - \Delta V$ (если решения нет, то ΔV уменьшается в 2 раза).

3. Если разность искомого и текущего значений замыкающего параметра не меняет знак, то повторяет шаг 2. Если знак меняется на противоположный, то переходим к пункту 4.

4. Методом деления отрезка пополам находим точку ударной адиабате, в которой значение замыкающего параметра равно заданному с требуемой точностью.

При вычислении параметров используется выражение для прямой Михельсона,

$$P_3 - P_D - \rho_D^2 (D - u_D)^2 (V_D - V_3) = 0 \quad (4.7)$$

термическое и калорическое уравнения состояния, а также, если необходимо, условия термодинамического равновесия и уравнения сохранения элементного состава (приводятся во второй главе).

На рис. 4.2 и 4.3 приведены результаты расчетов параметров за ОУВ, полученные при $p_0=10000$ Па, $T_0 = 300$ К для горючей смеси $0.091 \text{ CH}_4 + 0.182 \text{ O}_2 + 0.727 \text{ N}_2$. В состав продуктов сгорания входило 7 компонентов: CH_4 , O_2 , H_2O , CO_2 , CO , H_2 , N_2 , термодинамические свойства которых заимствовались из [22].

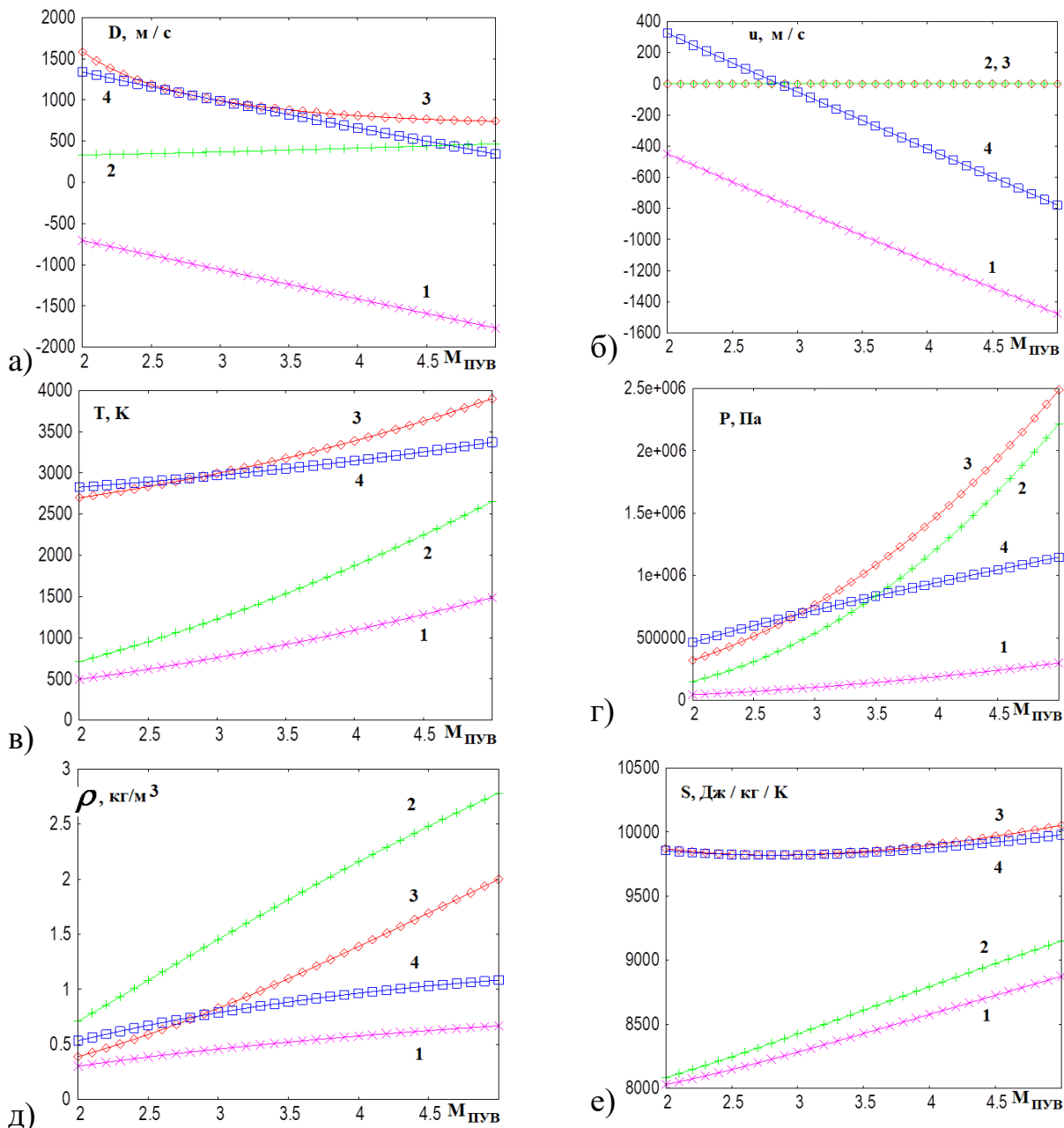


Рис. 4.2. Зависимости параметров ударных волн от числа Маха падающей УВ. 1 – ПУВ, 2- замороженная ОУВ, 3 – равновесная ОУВ, 4 – ДВ ЧЖ.

а) – скорость УВ, Параметры за УВ: б) – скорость, в) – температура, г) – давление, д) – плотность, е) – энтропия.

Отметим, что скорость равновесной ОУВ всегда превышает скорость детонации Чепмена-Жуге (рис. 4.2 а), и что существует число Маха ПУВ ($M_{пув} \approx 2.86$), при котором скорость продуктов сгорания за волной Чепмена-Жуге равна нулю (рис. 4.2б). При числе Маха ПУВ меньше 2.86 температура, давление и плотность (рис. 4.2 вгд) за равновесной ОУВ меньше, чем в волне Чепмена-Жуге, что соответствует слабой детонации. Энтропия в равновесной ОУВ, как и следовало ожидать, всегда превышает энтропию в волне Чепмена-Жуге (рис. 4.2 е). На рис. 4.3 приведены зависимости мольно-массовых концентраций за равновесной ОУВ от числа Маха ПУВ. Из графиков, в частности, видно, что суммы концентраций паров воды и водорода, а также угарного и углекислого газа не зависят от параметров падающей ударной волны, что естественно при используемом списке веществ, входящих в состав продуктов сгорания при условии полного сгорания метана.

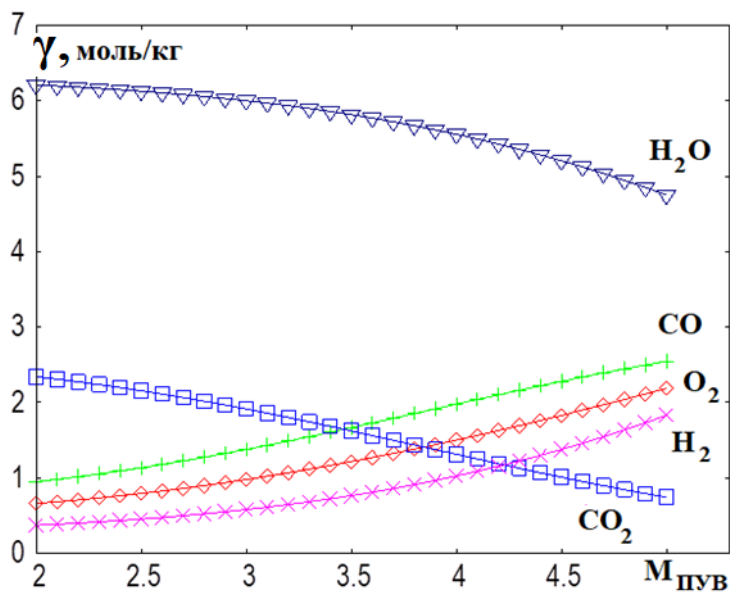


Рис. 4.3. Зависимости мольно-массовых концентраций продуктов сгорания за равновесной ОУВ от числа Маха ПУВ.

4.1 Моделирование течения реагирующей смеси за отраженной ударной волной в одномерной нестационарной постановке

Рассмотрим одномерное нестационарное течение в ударной трубе, заполненной горючей метано-воздушной смесью, возникающее после отражения ударной волны (УВ) от закрытого торца ударной трубы. Будем

считать, что параметры перед отраженной ударной волной неизменные, химические превращения не протекают. Газодинамическое течение между торцом трубы и ударной волной считается одномерным нестационарным, вязкость, теплопроводность и диффузия не учитывается, продукты сгорания являются смесью совершенных газов.

Для описания течения в областях непрерывности используются уравнения физической газовой динамики в дифференциальной форме:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho(U + \frac{u^2}{2}) \\ \rho \gamma_j \end{bmatrix} + \frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + P \\ \rho u(h + \frac{u^2}{2}) \\ \rho u \gamma_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ W_j, j=1, \dots, N \end{bmatrix}, \quad (4.8)$$

где ρ , u , P , U , h – плотность, скорость, давление, удельные внутренняя энергия и энтальпия газа соответственно, γ_i – мольно-массовые концентрации, N – число рассматриваемых компонентов, W_i – скорость образования i -ого компонента в единице объема в результате химических реакций. Система (4.8) замыкалась моделью термодинамики многокомпонентного совершенного газа, описываемой удельным термодинамическим потенциалом Гиббса [22]:

$$G(P, T, \vec{\gamma}) = \sum_{i=1}^N \gamma_i [RT \ln(P \gamma_i / P_0 \sum_{j=1}^N \gamma_j) + G_i^0(T)] \quad (4.9)$$

где R – универсальная газовая постоянная, T – температура, $P_0 = 101325 \text{ Па}$ – стандартное давление, $G_i^0(T)$ – температурная часть стандартных молярных потенциалов Гиббса отдельных компонент, известные функции [22]. Соответствующие (3.2) термическое и калорическое уравнения состояния имеют вид:

$$\frac{1}{\rho} = RT \sum_{i=1}^N \gamma_i / P, \quad h = \sum_{i=1}^N \gamma_i H_i^0(T), \quad (4.10)$$

$$H_i^0(T) = G_i^0(T) - T \frac{dG_i^0(T)}{dT}, \quad U = h - \frac{P}{\rho}.$$

В случае произвольного механизма из N_r химических реакций:

$$\sum_{i=1}^N \bar{v}_i^{(r)} M_i \rightleftharpoons \sum_{i=1}^N \bar{v}_i^{(r)} M_i, \quad r = 1, 2, \dots, N_r, \quad (4.11)$$

выражение для правой части уравнений (4.8) имеет вид:

$$W_i = \sum_{r=1}^{N_r} (\bar{v}_i^{(r)} - \bar{v}_i^{(r)}) (\bar{K}^{(r)} \prod_{j=1}^N (\rho \gamma_j)^{\bar{v}_j^{(r)}} - \bar{K}^{(r)} \prod_{j=1}^N (\rho \gamma_j)^{\bar{v}_j^{(r)}}) \quad (4.12)$$

здесь M_i - символ i -ого вещества, $\bar{v}_i^{(r)}$ - стехиометрические коэффициенты, константы скоростей прямых $\bar{K}^{(r)}$ и обратных $\bar{K}^{(r)}$ реакций зависят от температуры и давления и связаны через константу равновесия [22].

Для описания химических превращений в горючей смеси использовалась модификация упрощенного кинетического механизма, предложенного в [39]. В реакциях участвовали 7 компонентов CH_4 , O_2 , CO , CO_2 , H_2 , H_2O , N_2 , теплофизические свойства которых брались из [22]. Из термодинамических расчетов известно, что при горении и детонации метана образуется большое количество веществ, существенно превышающее количество рассматриваемых. Перед проведением ресурсоемких расчетов была проведена оценка того, насколько используемый список веществ меняет вычисляемые параметры детонационных волн. По разработанным алгоритмам были рассчитаны равновесные адиабаты. Решались соотношения типа Ренкина-Гюгонио, дополненные условиями химического равновесия и уравнениями состояния (4.10).

$$\begin{aligned} \rho(D-u) &= \rho_0(D-u_0), \\ P + \rho(D-u)^2 &= P_0 + \rho_0(D-u_0)^2, \\ \rho(D-u) \left(h + \frac{(D-u)^2}{2} \right) &= \rho_0(D-u_0) \left(h_0 + \frac{(D-u_0)^2}{2} \right). \end{aligned} \quad (4.13)$$

Индексом «0» отмечено начальное состояние. Здесь D – скорость детонационной волны (ДВ). Концентрации химических компонент в состоянии термодинамического равновесия удовлетворяют системе (4.14).

$$\sum_{i=1}^N A_K^i \gamma_i = \gamma_K^0, k = 1, 2, \dots, N_e, \quad \mu_i(p, T, \vec{\gamma}) = \sum_{K=1}^{N_e} A_K^i z_K, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (4.14)$$

Здесь N_e – число элементов в системе (в рассматриваемом случае $N_e=4$: С, Н, О, N), A_K^i – матрица состава, γ_K^0 – заданные значения мольно-массовых концентраций, μ_i – химический потенциал i -ого компонента, z_k – неизвестные параметры, число которых равно числу элементов. Точка на равновесной детонационной адиабате, в которой $D=u+a$, как уже отмечалось, называется точкой Чепмена-Жуге (a – скорость звука, $u_0=0$).

На рис. 4.4 приведены параметры в точке детонации Чепмена-Жуге, рассчитываемые по алгоритмам, приведенным в главах 1 и 2 для 18 веществ ($CH_4, O_2, CO, CO_2, H_2O, H_2, N_2, OH, H_2O_2, HO_2, CH_3, C_2H_6, NO, C^*(сажа), C, H, O, N$) и 7 ($CH_4, O_2, CO, CO_2, H_2, H_2O, N_2$), используемых в настоящей работе.

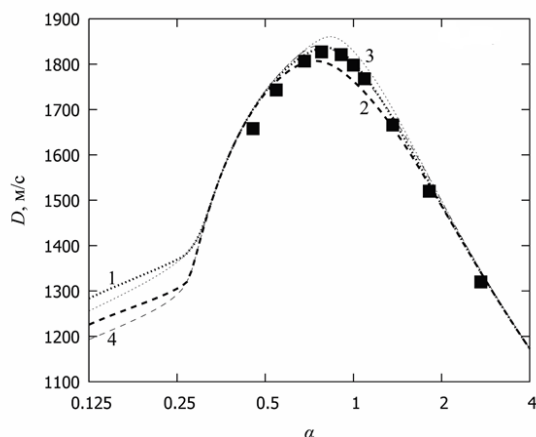


Рис. 4.4. Зависимость скорости детонации Чепмена-Жуге от коэффициента избытка окислителя ($T_0=298.15 K$; $P_0=101325 Pa$ - 1, 3, маркер данные [40]; $P_0=10132.5 Pa$ – 2, 4; 1,2- 18 веществ, 3,4 – 7 веществ.

Из рис. 4.4 видно, что при коэффициенте избытка окислителя, лежащем в диапазоне от 0.5 до 2, различие по скорости детонации Чепмена-Жуге составляет не более 3 %.

Для моделирования химических превращений использовался кинетический механизм, предложенный в [29]:

1. $\text{CH}_4 + 3/2\text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + 2\text{H}_2\text{O}$;
2. $\text{H}_2 + \text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O}$;
3. $\text{CO} + \text{CO} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + \text{CO}_2$;
4. $\text{CO}_2 + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$.

Для данного кинетического механизма было проведено сопоставление измеренных [84] и рассчитанных по механизму GRI-Mech 3.0 [84] времен задержек воспламенения в широком диапазоне давлений и продемонстрирована его корректность вплоть до значения величины давления, равной 500 атм. Таким образом, данный механизм может быть принят в качестве аппроксимации сложных механизмов горения метана.

В работе [29] первые три реакции считаются необратимыми. В настоящей работе все 4 реакции считаются обратимыми, константы скоростей прямых реакций заимствуются из [29], константы скоростей обратных реакций пересчитываются через константу равновесия. Используемый при численном моделировании брутто механизм химических реакций приведен в таблице 4.1.

Таблица 4.1

	Химическая реакция	A, м ³ ,моль,с	n	E, К
1	$\text{CH}_4 + \text{O}_2 \rightleftharpoons 2/3\text{CO} + 4/3\text{H}_2\text{O} + 1/3\text{CH}_4$	$6 \cdot 10^8$	-0.2264	22660
2	$\text{H}_2 + \text{H}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O}$	$7 \cdot 10^7$	-0.5	10575
3	$\text{CO} + \text{CO} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{CO}_2$	$8,5 \cdot 10^6$	-1.5	10575
4	$\text{CO}_2 + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$	$1 \cdot 10^9$	-1.0	20898

Чтобы соблюсти законы термодинамики, первая реакция переписывается в виде [83]: $\text{CH}_4 + \text{O}_2 \rightleftharpoons 2/3\text{CO} + 4/3\text{H}_2\text{O} + 1/3\text{CH}_4$. Скорость данной реакции определяет расход исходных веществ (метана и кислорода) и является ответственной за задержку воспламенения в горючей смеси. Для ее вычисления используется аппроксимация, предложенная в [29]:

$\bar{W}^1 = A(P/P_0)^n \exp(-E/T)(\rho\gamma_{\text{CH}_4})(\rho\gamma_{\text{O}_2})$, моль/м³/с. Здесь P – давление в паскалях, $P_0 = 101325$ Па, ρ – плотность, кг/м³, γ_i – мольно-массовая

концентрация, моль/кг, константа $A = 6 \times 10^8$ (в [10] $A = 4 \times 10^8$, для сохранения подобранного в [29] времени задержки воспламенения ее необходимо умножить на коэффициент, стоящий при O_2 в исходной реакции), $n = -0.2264$, $E = 22660$ К. Соответственно скорость обратной реакции рассчитывается по формуле:

$$\bar{W}^1 = A(P/P_0)^n \exp(-E/T)(\rho\gamma_{CO})^{2/3}(\rho\gamma_{H_2O})^{4/3}(\rho\gamma_{CH_4})^{1/3} K_R^1(T)$$

$$K_R^1(T) = \exp\left[\frac{1}{RT}\left(\frac{2}{3}G_{CH_4}^0(T) + G_{O_2}^0(T) - \frac{2}{3}G_{CO}^0(T) - \frac{4}{3}G_{H_2O}^0(T)\right) - \frac{1}{3}\ln\frac{RT}{P_0}\right]$$

Ввиду малости концентраций угарного газа и паров воды при начале сгорания скорость обратной реакции практически не влияет на время воспламенения горючей смеси, но является очень существенной при переходе системы к состоянию термодинамического равновесия.

В работе [84] были проведены экспериментальные исследования времени задержки воспламенения в бедной метано-воздушной горючей смеси (коэффициент избытка окислителя $\alpha = 2$) за отраженными ударными волнами.

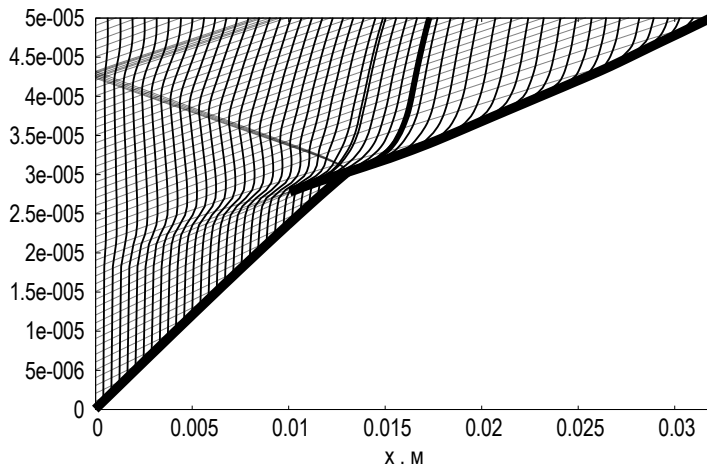


Рис. 4.5. Временная развертка течения за отраженной УВ (жирная сплошная УВ, толстая сплошная – КР, тонкие сплошные – траектории, пунктир – характеристики $C+$, $C-$).

Для моделирования условий эксперимента в настоящей работе рассчитывалось течение в области за отраженной ударной волной. Для анализа картины течения использовался сеточно-характеристический метод (компьютерный код разработан В.Ю. Гидасповым), позволяющий рассчитывать квазиодномерные нестационарные течения

многокомпонентного реагирующего газа с явным выделением произвольного числа взаимодействующих разрывов (ударных волн, контактных разрывов, характеристик семейств C^\pm) [91]. На рис. 4.5 приведена типичная картина течения, возникающая после отражения падающей УВ от стенки, если температура за отраженной УВ превышает температуру самовоспламенения горючей смеси. Воспламенение горючей смеси происходит на стенке, образуется волна воспламенения и сжатия (сгущение характеристик C^+ при $t > 2 \cdot 10^{-5}$ с и существенно ненулевая скорость течения), которая приводит к образованию УВ ($t = 2.7 \cdot 10^{-5}$ с, $x = 0.01$ м), которая догоняет отраженную УВ (при их взаимодействии отраженная УВ ускоряясь становится пересжатой детонационной волной, также образуются контактный разрыв (КР) и веер волн разрежения, состоящих из характеристик семейства C^- [91]).

Параметры газа перед отраженной УВ подбирались таким образом, чтобы параметры за отраженной УВ совпадали с используемыми в [84] (решалась система (4.13), дополненная термическим и калорическим уравнениями состояния, заданными считались $u=0$, P , T). Для этого строилась нижняя ветвь ударной адиабаты, проходящей через приведенные в [84] значения давления и температуры ($P_э$, $T_э$), при нулевой скорости потока. На данной адиабате находилась точка (P_2 , T_2 , u_2), такая, что если через нее провести ударную адиабату, то прямая Михельсона, проходящая через нее и точку на нижней ветви построенной адиабаты, в которой скорость потока равна нулю (P_1, T_1), соответствует скорости падающей УВ, наблюдаемой в экспериментах. Необходимо отметить, что в [84] не приводятся реализуемые в экспериментах параметры перед падающей УВ. Про скорость падающей УВ сказано, что она лежала в диапазоне от 1100 до 1300 м/с. Данное условие, а также то, что температура в камере низкого давления была выше 300 К (ударная труба перед экспериментами прогревалась [84]), использовались при выборе параметров перед падающей волной из множества возможных решений. С полученными параметрами рассчитывалось течение за отраженной УВ, и определялись зависимость от времени температуры в

«точке на стенке» [74]. По методике [29] (находилась точка пересечения касательных к графику температуры ($T(t)$) в начальный момент времени и в точке перегиба) определялась задержка воспламенения.

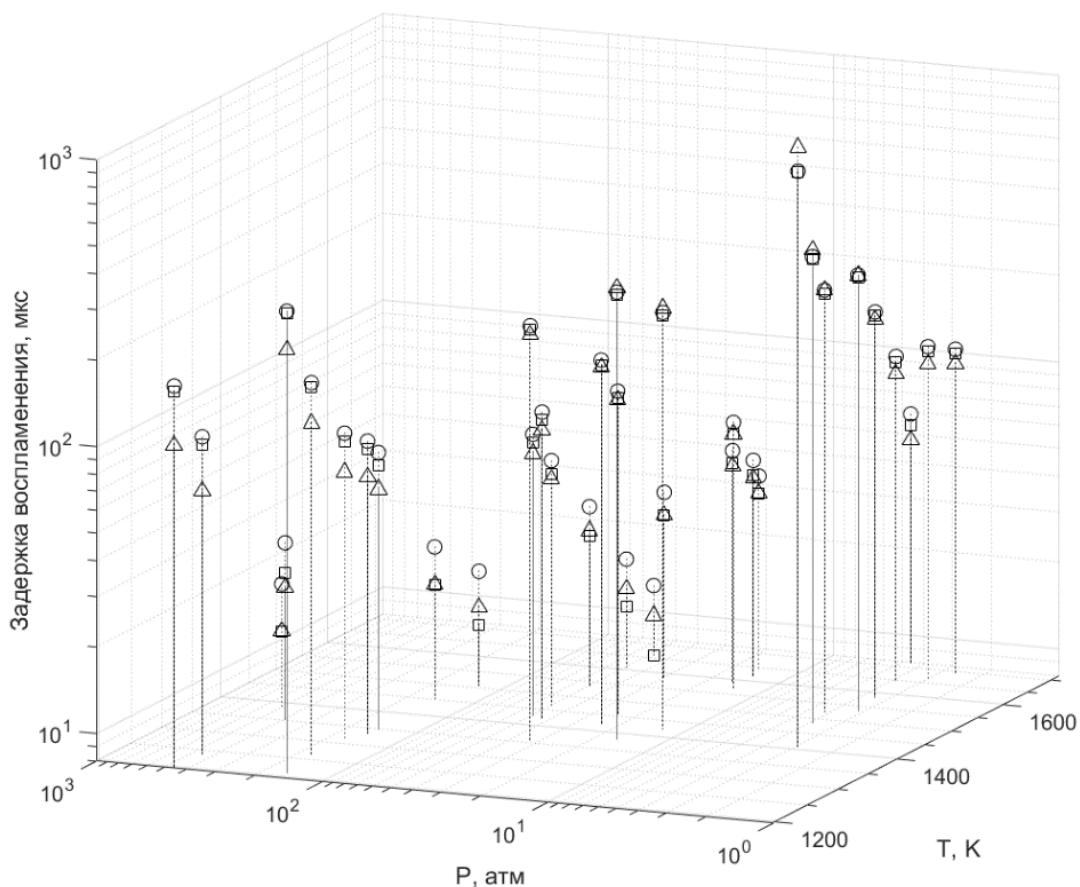


Рис. 4.6. Зависимость времени самовоспламенения за отраженной УВ от температуры и давления. Δ – эксперимент [3], \circ – расчет [3], \square – расчет, описанный в данной работе

На рис. 4.6 приведены результаты сравнения настоящих расчетов с экспериментальными данными и результатами расчетов по детальному кинетическому механизму, приводимыми в [84]. Во всей области экспериментальных данных наблюдается хорошее согласие настоящих расчетов с данными [84]. Максимальное расхождение наблюдается в области высоких давлений и низких температур ($T < 1320$ K). Данное отличие может быть существенно снижено, если при $T < 1320$ K использовать в первой

реакции условную приведенную энергию активации, равную 10^4 К, а константу A подбирать из условия совпадения с формулой [6] при 1320 К.

Далее рассчитывалось течение, возникающее в ударной трубе, заполненной метано-воздушной горючей смесью ($0.091CH_4+0.182O_2+0.727N_2$), за отраженной ударной волной. Варьировалось число Маха падающей ударной волны, распространяющейся по покоящемуся газу при температуре $T_0=300$ К и давлении $P_0=10000$ Па. Основным методом расчетных исследований был сеточно-характеристический метод с явным выделением отраженной ударной волны. Расчетная область располагалась между стенкой и отраженной ударной волной. Расчетные узлы – траектории газа – «подводились» с ударной волны через равные промежутки времени (Δt) с параметрами равными текущим рассчитанным параметрам газа за отраженной ударной волной. Когда число траекторий между стенкой и ударной волной достигало максимального заданного значения (N_{max}), то одновременно с подводом новой траектории одна траектория из расчетной области удалялась. Удалялась такая траектория, для которой, если заменить значения параметров течения в точке с координатами, где она находится, на значения, полученные в результате интерполяции по остальным траекториям, сумма квадратов невязок будет минимальная. В расчетах $\Delta t=10^{-6}-10^{-7}$ с, $N_{max}=1000-2000$, данные значения выбирались таким образом, чтобы при изменении их в 2 раза результаты расчетов заметно не менялись. Необходимо отметить, что расчеты носят модельный характер, так как параметры перед отраженной волной считаются неизменными.

На рис. 4.7 приведены распределения скорости и температуры за отраженной УВ в различные моменты времени, соответствующие числу Маха падающей УВ, равного $M_{II}=4$ (мы будем считать для простоты в работе M_{II} положительным, хотя ударная волна и скорость потока за ней направлены в сторону, противоположенную пространственной оси).

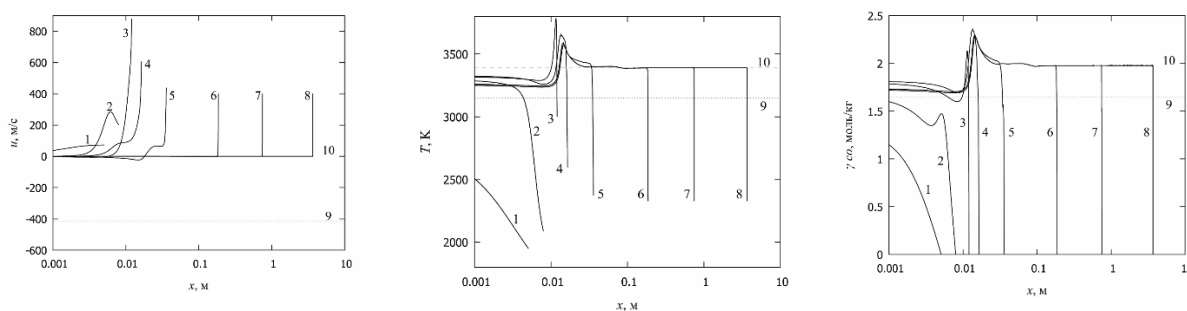
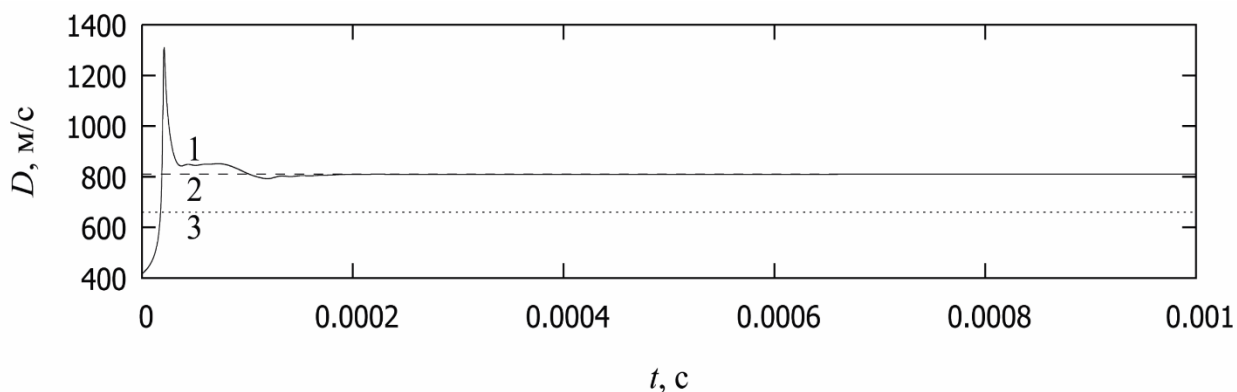


Рис. 4.7. Распределения скорости (а), температуры (б), мольно-массовых концентраций CO в различные моменты времени (1- 11, 2- 17, 3-21,4-25,5-48, 5-232, 7-924,8-4523 мкс), 9 – параметры детонации Чепмена-Жуге, 10 – Параметры за равновесной отраженной ДВ.

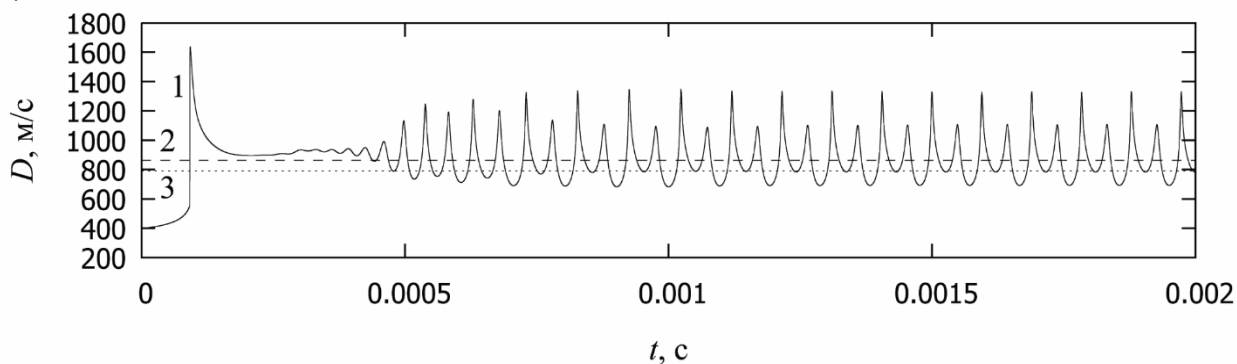
На рис. 4.8а дана зависимость скорости волны от времени. Крайняя правая точка (рис. 4.8) на кривых соответствует текущей координате отраженной волны и величине параметра за ней. Из рисунков видно, что вслед за релаксационной зоной за детонационной волной наблюдается протяженный неподвижный участок с постоянными параметрами. Получено, что значения параметров с высокой точностью совпадают с решением системы (4.4), дополненной уравнениями состояния, термодинамического равновесия и условием равенства нулю скорости за ударной волной ($u=0$ в (3.6)) – кривая 10 рис. 4.7б (данную задачу будем называть «задачей о равновесной отраженной ударной волне»), значения скорости волны также совпадают (рис. 4.7а). Кривая 9 рис. 4.7бв соответствует волне Чепмена-Жуге. Параметры Чепмена-Жуге заметно отличаются от решения, полученного численно. Необходимо отметить, что полученное численное решение может сохраняться сколь угодно долго и то, что стационарная детонационная волна является пересжатой.

Также были рассчитано течение за отраженной ударной волной, соответствующее значениям числа Маха падающей волны 3.6 и 3.2. В данных случаях наблюдаются существенные колебания скорости фронта детонационной волны, относительно некоторого стационарного значения,

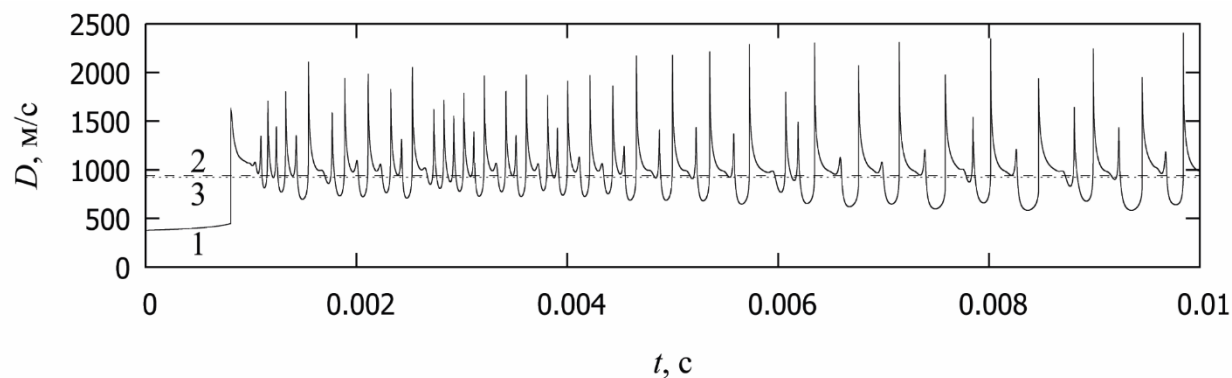
этим стационарным значением является скорость равновесной отраженной детонационной волны (рис. 4.8 бв).



а) $M=4.0$



б) $M=3.6$



в) $M=3.2$.

Рис. 4.8. Зависимость скорости УВ (1) от времени. 2 – скорость равновесной отраженной ДВ, 3 – скорость детонации Чепмена-Жуге

Так же были проведены расчеты методом Годунова второго порядка [44].

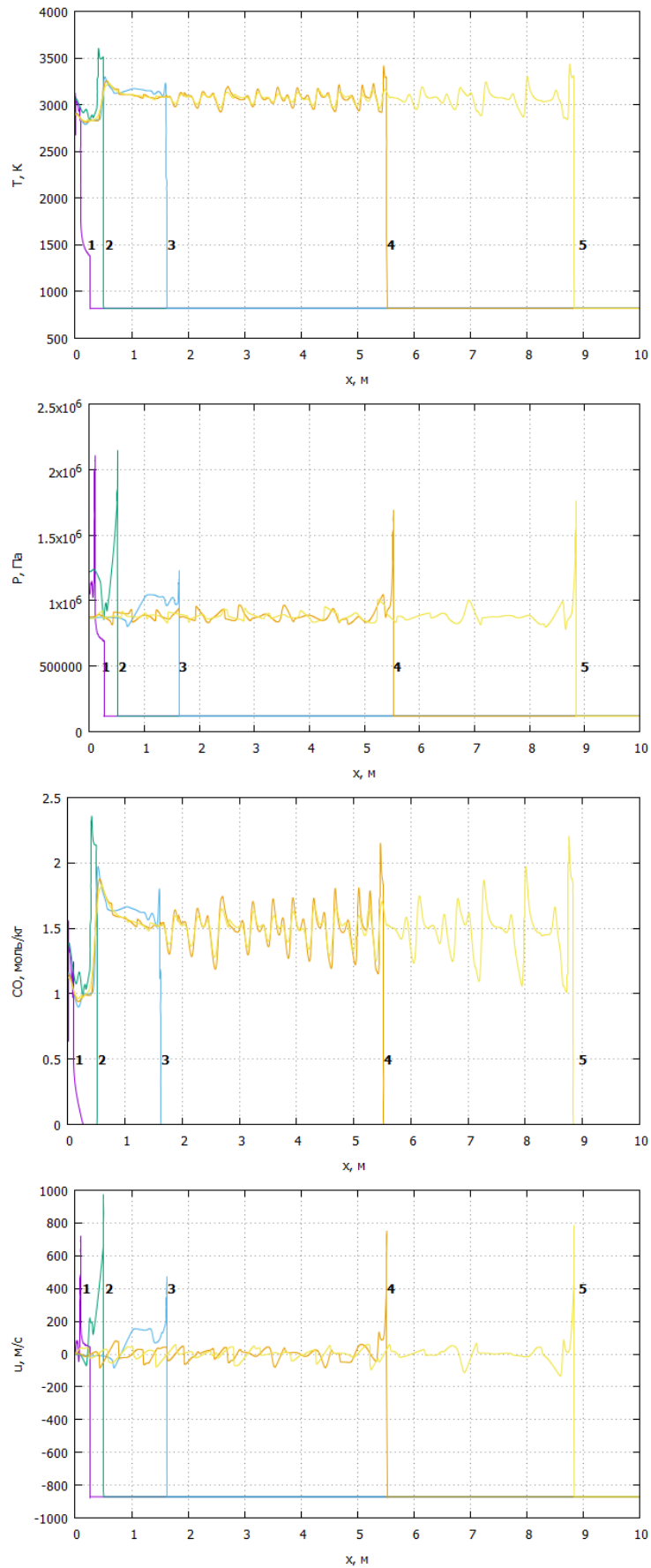


Рис. 4.9. Распределение параметров за ОУВ. $M_{\text{ДУВ}} = 3.2$. 1 – $t = 0.001029\text{с}$, 2 – $t = 0.001278\text{с}$, 3 – $t = 0.002309\text{с}$, 4 – $t = 0.006274\text{с}$, 5 – $t = 0.009763\text{с}$

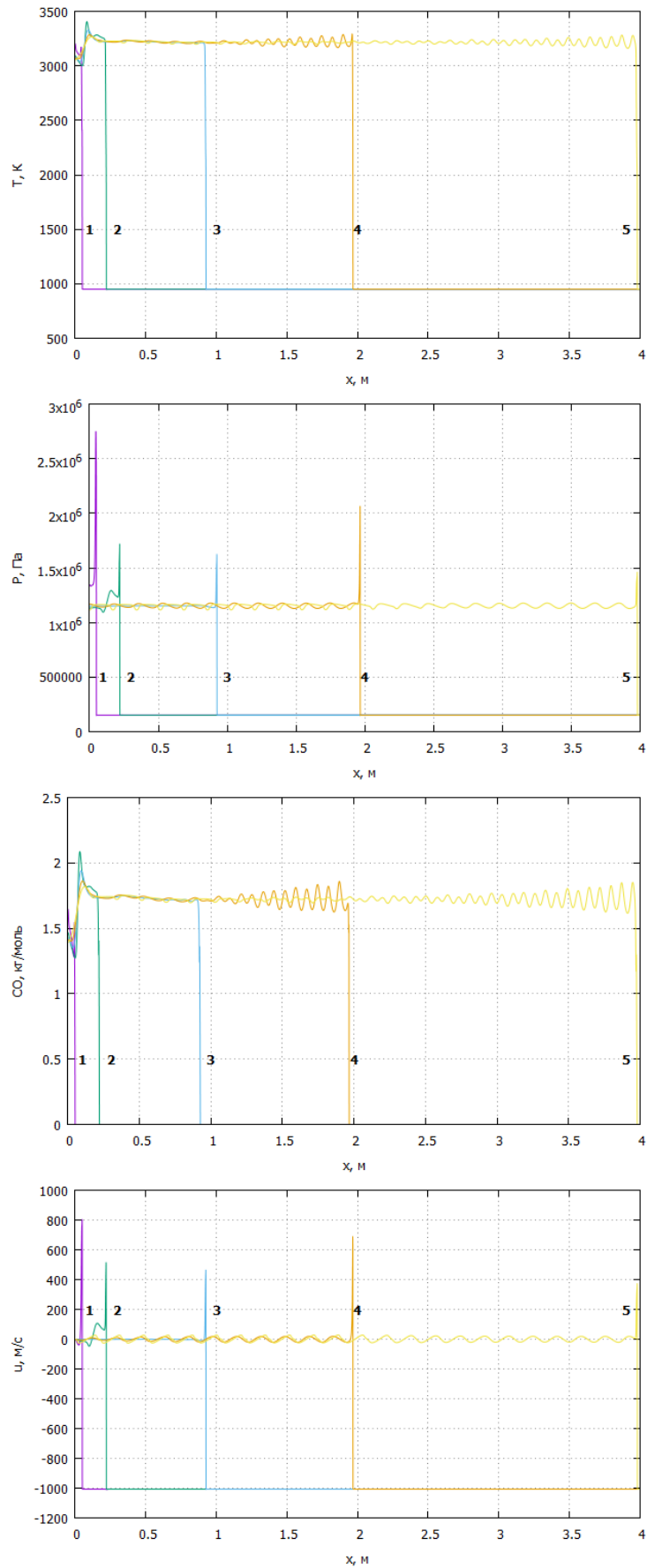


Рис. 4.10. Распределение параметров за ОУВ. $M_{\text{ПУВ}} = 3.6$. 1 – $t = 0.000423\text{с}$, 2 – $t = 0.000593\text{с}$, 3 – $t = 0.001398\text{с}$, 4 – $t = 0.002606\text{с}$, 5 – $t = 0.004941\text{с}$

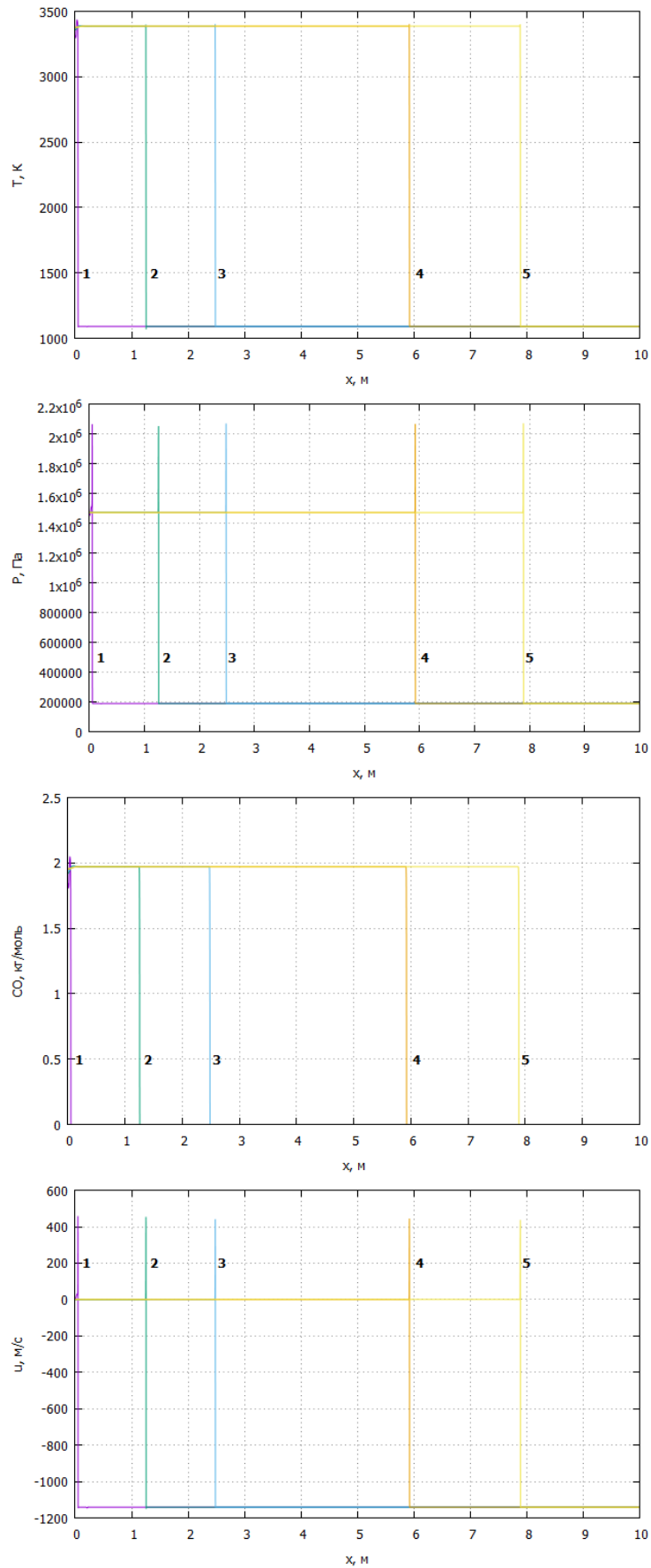


Рис. 4.11. Распределение параметров за ОУВ. $M_{\text{ПУВ}} = 4.0$. 1 – $t = 0.000356 \text{ с}$, 2 – $t = 0.001842 \text{ с}$, 3 – $t = 0.003359 \text{ с}$, 4 – $t = 0.007605 \text{ с}$, 5 – $t = 0.010031 \text{ с}$

Сравнительный анализ данного решения с результатами, полученными путем расчета сеточно-характеристическим методом [74, 76] показывает, что расчет методом Годунова в данной работе дает менее выраженную колебательную картину (рис. 4.12).

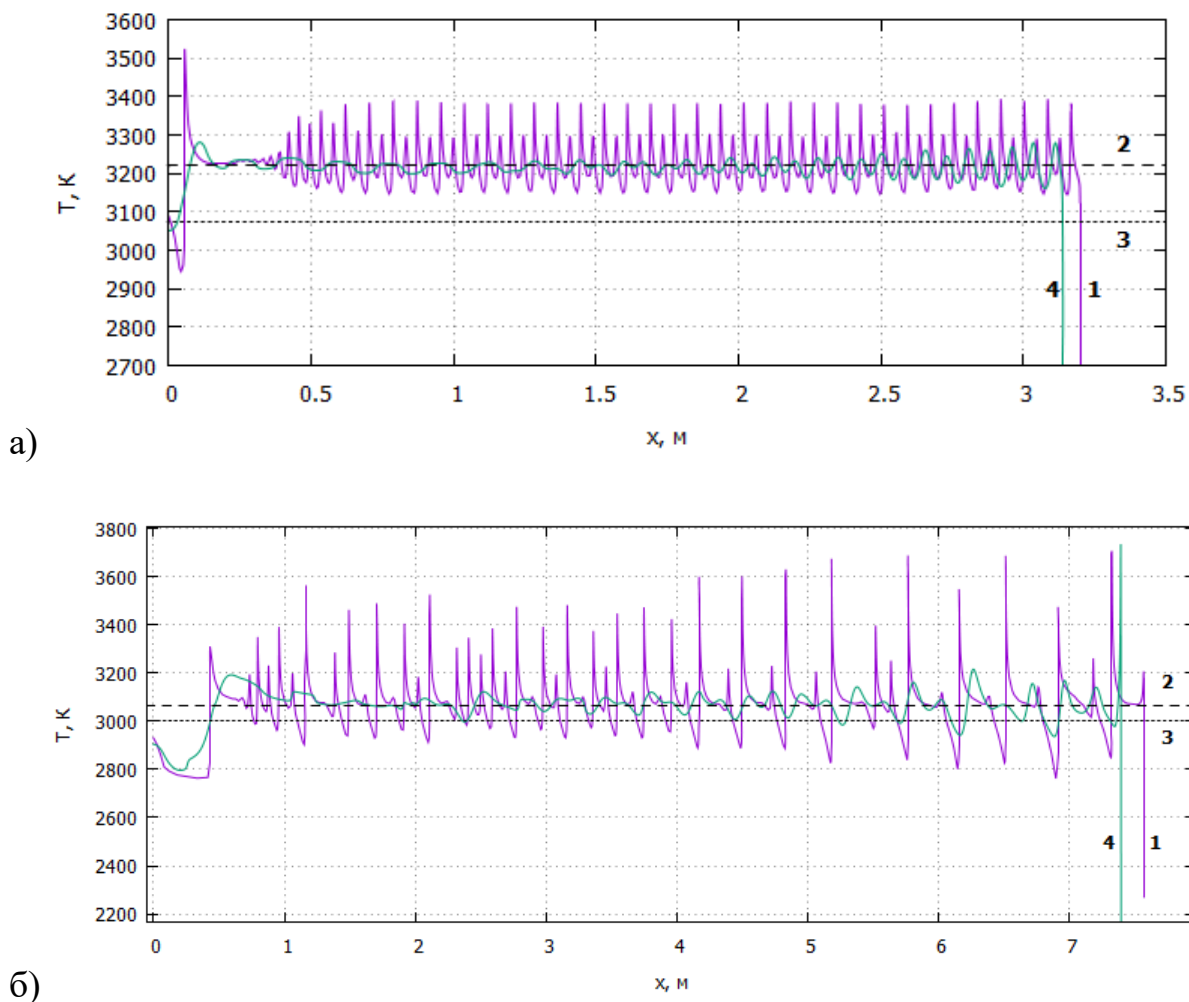


Рис. 4.12. Распределение температуры за ОУВ (1, 4). а) - $M_{ПУВ}= 3.6$, $t=4293$ мкс. б) - $M_{ПУВ}=3.2$, $t=8261$ мкс. 2 – температура в равновесной отраженной ударной волне, 3 – температура в волне Чепмена-Жуге; 1 – сеточно-характеристический метод, 4 – метод Годунова 2-ого порядка.

Необходимо отметить, что при уменьшении числа Маха падающей ударной волны скорости отраженной ДВ и ДВ Чепмена-Жуге сближаются (рис. 4.8). Так, при числе Маха 3.2 они составляют 940 и 923 м/с, разница температур на графиках более заметна (рис. 4.12б) – 3065 и 3002 К. За

фронтом волны наблюдаются существенные колебания температуры (рис. 4.12), а, соответственно, и плотности.

Переменная скорость отраженной УВ приводит к зоне переменной энтропии за ней, а, следовательно, и к колебаниям температуры, плотности и концентраций. Расстояние между точками максимума температуры (рис. 6) можно связать с продольными размерами детонационных ячеек (δ). При $M_{П}=3.6$ - $\delta \approx 9$ см, при приближении к параметрам Чепмена-Жуге $M_{П}=3.2$ - $\delta \approx 38$ см, что коррелирует с данными [24, 40, 101].

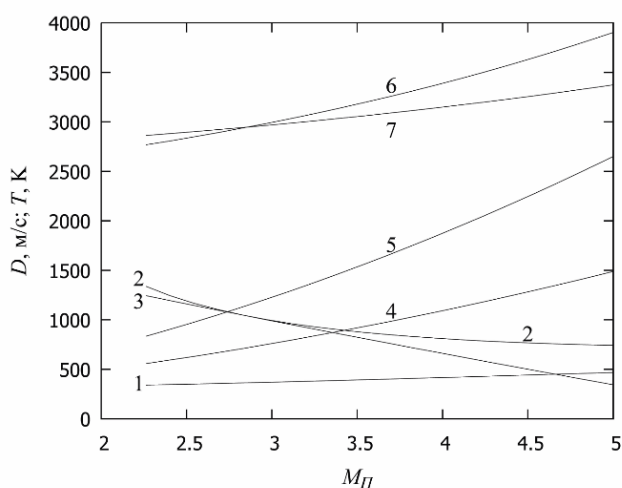


Рис. 4.13. Зависимость скорости волны (1-3) и температуры волны до- (4) и за- (5-7) от числа Маха ПУВ ($p_0=10^4$ Па, $T_0=300$ К. 1, 5 - замороженная ОУВ, 2, 6 - равновесная ОУВ, 3, 7 - ДВ Чепмена-Жуге)

На рис. 4.13 приведено решение соотношений типа Ренкина-Гюгонио с различными замыкающими условиями, описанными выше. Из графиков, в частности, видно, что скорости равновесной отраженной детонационной волны (кривая 2) и волны Чепмена-Жуге (кривая 3) близки при $M_{П}=2.6-3.2$. Также необходимо обратить внимание на то, что для того чтобы расчеты были корректными, время численного моделирования должно быть меньше, чем время самовоспламенения горючей смеси при параметрах течения перед отраженной волной (кривая 4).

Задача об отраженной ударной волне в одномерной нестационарной постановке была также решена при помощи решателя reactingPimpleCentralFoam [86] на базе вычислительного пакета OpenFOAM v1912 [87]. Для проведения численных экспериментов в нем потребовалась

доработка имеющейся кодовой базы (библиотеки пакета OpenFOAM изначально предоставляют модель химической кинетики, включающую в себя расчет константы скоростей прямых реакций по формуле Аррениуса без зависимости от давления) [126, 127]. Расширив имеющиеся возможности библиотеки, задав реакции в формате:

```

species
(
  CH4
  O2
  CO
  H2O
  H2
  CO2
  N2
);

reactions
{
  methaneReaction
  {
    type    reversibleArrheniusReaction;
    reaction "CH4 + O2 = 0.666666667CO + 1.333333333H2O +
0.333333333CH4";
    A      6.0e11;
    beta   0;
    Ta     1.88e5;
    g      -0.23;
  }
  reaction_01
  {
    type    reversibleArrheniusReaction;
    reaction "2H2 + O2 = 2H2O";
    A      7.0e13;
    beta   0;
    Ta     8.8e4;
    g      -0.5;
  }
  reaction_02
  {
    type    reversibleArrheniusReaction;
    reaction "2CO + O2 = 2CO2";
    A      8.5e12;
  }
}

```

```

    beta  0;
    Ta    8.8e4;
    g     -1.5;
  }
  reaction_03
  {
    type  reversibleArrheniusReaction;
    reaction "CO + H2O = CO2 + H2";
    A     1.0e12;
    beta  0;
    Ta    1.74e5;
    g     -1;
  }
}

```

Сначала было проведено сравнение получаемых распределений параметров на классической задаче моделирования течения химических реакций при постоянных давлении и энтальпии (OpenFOAM предоставляет для подобных задач стандартный решатель chemFOAM). Искомыми параметрами являются концентрации и температура, которые могут быть найдены из системы дифференциально-алгебраических уравнений

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

$$\rho(P, T, \bar{\gamma}) = \frac{P}{RT \sum_{i=1}^N \gamma_i}, \quad H = \sum_{i=1}^N \gamma_i H_i(T).$$

В качестве начальных данных брались $T = 1300$ К, $p = 1012857$ Па, смесь $0.091\text{CH}_4 + 0.182\text{O}_2 + 0.727\text{N}_2$. В chemFoam решателе разностная схема по времени бралась как Euler, шаг по времени принимался равным $1e-7$ секунд.

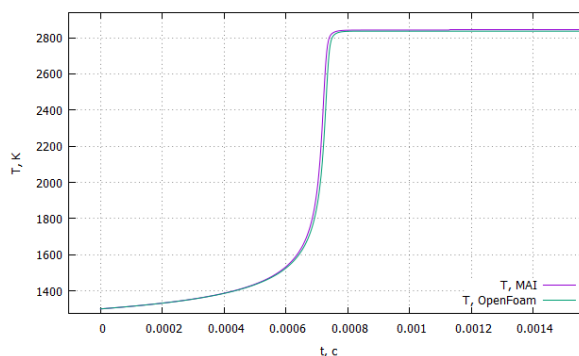


Рис. 4.14 Сравнение решателей.

Из рис. 4.14 видно согласование задержек воспламенения и выход на одинаковый уровень параметров при достижении состояния термодинамического равновесия. Сравнение результатов, полученных с помощью reactingPimpleCentralFoam, метода сеточных характеристик и метода Годунова также показало согласование структуры распределения параметров (рис. 4.15).

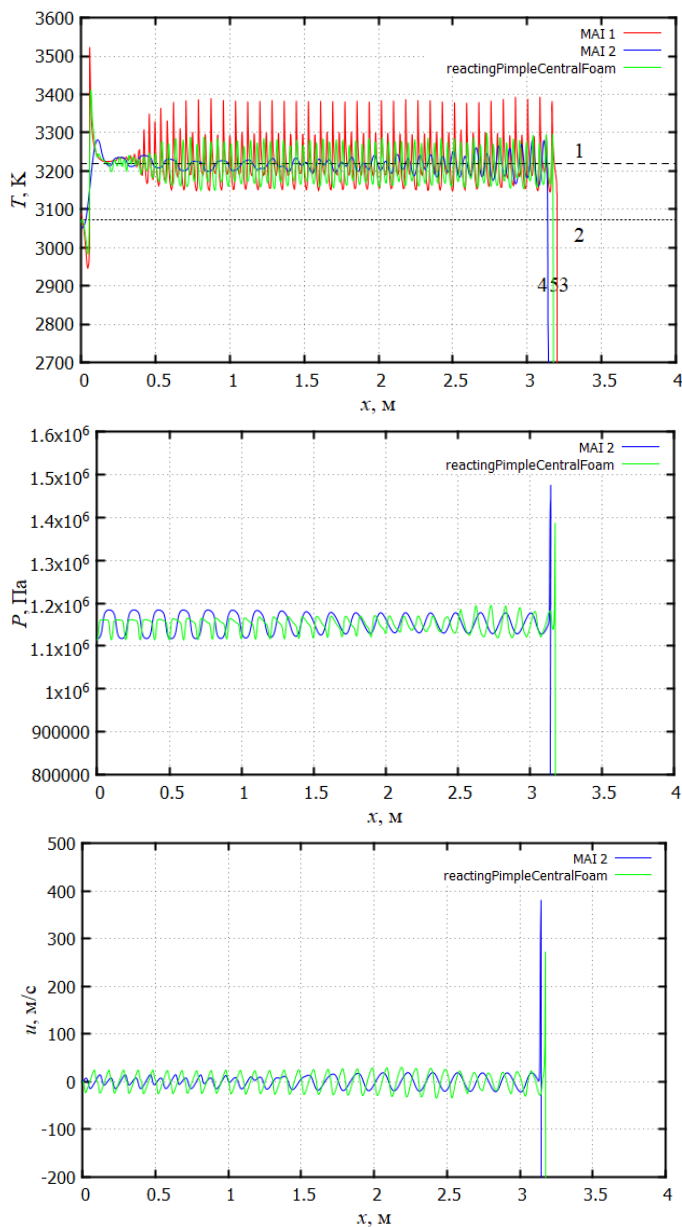


Рис. 4.15 1D распределение параметров при МП=3.6 при $t = 0,004$ с

4.2 Моделирование течения реагирующей смеси за отраженной ударной волной в двумерной нестационарной постановке

Рассмотрим течение за отраженной плоской ударной волной в двумерной нестационарной постановке. В качестве математической модели рассматриваемого течения использовалась система уравнений Эйлера для химически реагирующей смеси газов, которые для двухмерного, нестационарного сжимаемого течения невязких, совершенных газов записывается в следующем виде

$$q_t + f(q)_x + g(q)_y = \eta S, \quad (4.15)$$

$$q = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ E \end{bmatrix}, f(q) = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + P \\ \rho uv \\ (E + P)u \end{bmatrix}, g(q) = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + P \\ (E + P)v \end{bmatrix}, \quad (4.16)$$

где ρ , P , E - плотность, давление и полная энергия в единице объема соответственно, u , v - декартовы компоненты вектора скорости, S – вектор источниковых членов,

$$S = -\frac{\rho}{y} \begin{bmatrix} v \\ uv \\ v^2 \\ vh \end{bmatrix}; E = \rho(U + 0.5(u^2 + v^2)), h = U + P / \rho \quad (4.17)$$

η - коэффициент, равный 0 при рассмотрении системы в декартовых координатах.

Система уравнений (4.15)-(4.17) дополнялась уравнениями химической кинетики, записанными вдоль траекторий частиц газа:

$$\frac{d\gamma_i}{dt} = \frac{W_i}{\rho}, \quad i=1,2,\dots,N, \quad (4.18)$$

а также калорическим и термическим уравнениями состояния для смеси совершенных газов:

$$U = \sum_{i=1}^N \gamma_i U_i^0(T), \quad P = \rho RT \sum_{i=1}^N \gamma_i \quad (4.19)$$

Здесь γ_i , W_i - соответственно мольно-массовые концентрации химических компонент газовой смеси, объемные скорости газозависимых химических превращений; U - внутренняя энергия единицы массы смеси; h – энтальпия единицы массы смеси.

Для решения системы уравнений в частных производных (4.15)-(4.19) использовалась модификация метода, предложенного в [90, 95, 96], который являлся комбинацией метода Годунова и метода характеристик. Система уравнений (4.15)-(4.17) решалась вариантом метода Годунова, опубликованного в [95-96], в результате решения находились ρ , ρu , ρv , 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 (4.18) вариантом метода Пирумова, описанным в главе 2, при фиксированных на каждой итерации ρ , ρu , ρv , E . Значения газодинамических величин и концентрации химических компонентов в точке пересечения траекторией частицы газа рассчитанного слоя находились с помощью интерполяции, обеспечивающей сохранение элементного состава. Температура и давление в расчетной точке находились из (4.19), скорость звука и показатель адиабаты рассчитывались из термодинамических соотношений

$$a^2 = \frac{1}{\rho^2} \frac{\rho^2 \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_P - P \left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P}{\left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_T \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_P - \left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P \left(\frac{\partial U}{\partial P}\right)_T}, \quad \kappa = \frac{\rho a^2}{P}.$$

Число итераций в методе Пирумова использовалось как дополнительный ограничитель на шаг интегрирования уравнений газовой динамики.

При численном моделировании в работе использовался модифицированный программный код, разработанный И.А. Крюковым, И.Э. Ивановым и В.Ю. Гидасповым. Применяемые алгоритмы, методы решения и программный код были дополнены возможностью использовать в расчетах псевдовеществ (вещества, в матрице состава которых, используются нецелые элементы) и брутто- химических реакций (стехиометрические коэффициенты в которых могут быть нецелыми). Также модификация позволяет в рамках одного шага решения уравнений газовой динамики методом Годунова производить несколько шагов решения уравнений химической кинетики. При этом считалось, что на одном шаге метода Годунова вдоль траектории газа плотность и внутренняя энергия являются линейными функциями времени. Для визуализации результатов расчетов была разработана структура данных для хранения результатов и программы подготовки входных данных для системы построения графиков и поверхностей.

Стандартным условием на шаг интегрирования при численном решении задач газовой динамики является условие Куранта, заключающееся в том, 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 шагов и итераций при решении уравнений химической кинетики методом Пирумова.

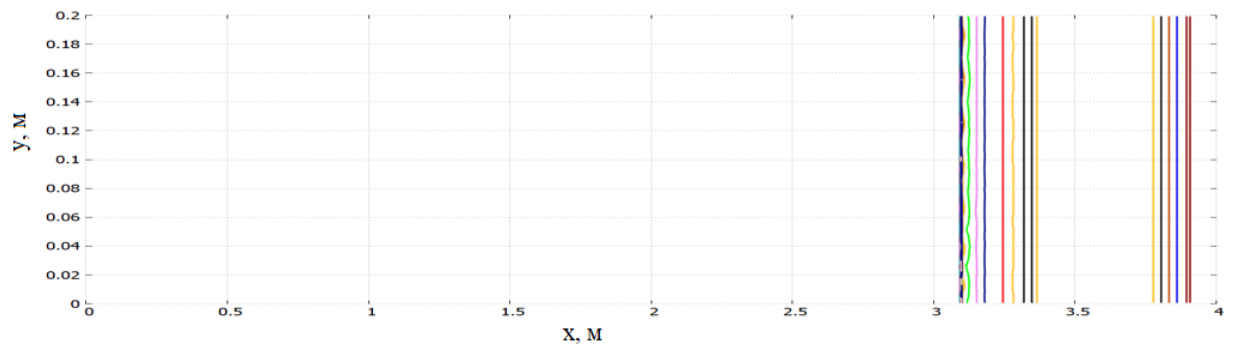
Рассмотрим картину течения, возникающую после прихода ударной волны на твердую стенку, расположенную справа рис. 3.8-3.10. В начальный момент времени по каналу, заполненному покоящейся стехиометрической смесью метана с воздухом, находящейся при температуре 300 К и давлении 10000 Па, в сторону закрытого торца распространяется ударная волна с

числом Маха, равным 3.2. Шкалы давления и температуры, используемые при построении изолиний, приведены на рис. 4.16. На рис. 4.17-4.18 приведены изолинии давления, на рис. 4.19-4.20 – изолинии температуры. Расчетная сетка содержала 2001 продольных ячеек и 101 поперечных.

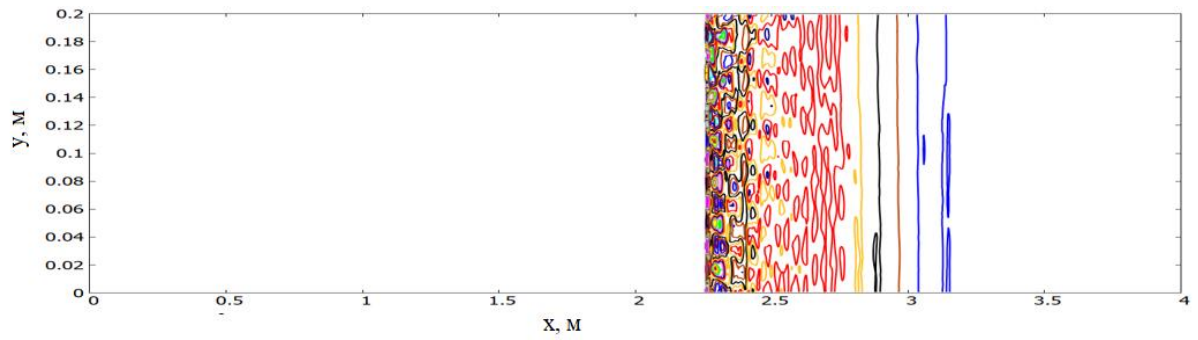
650000 - +	1200000 - +	2000 - +	3250 - +
700000 - ●	1250000 - +	2500 - ●	3300 - +
750000 - ○	1300000 - +	2800 - ○	3350 - +
800000 - ■	1350000 - +	2850 - ■	3400 - +
850000 - ▲	1400000 - +	2900 - ▲	3450 - +
900000 - ✖	1500000 - +	2950 - ✖	3500 - +
950000 - ▼	1600000 - +	3000 - ▼	3550 - +
1000000 - ▲	1700000 - +	3050 - ▲	3600 - +
1050000 - +	1800000 - +	3100 - +	3650 - +
1100000 - +	1900000 - +	3150 - +	3700 - +
а) 1150000 - +		б) 3200 - +	

Рис. 4.16. Цветовые обозначения для графиков изолиний. а) – давление в [Па]; б) – температура в [K].

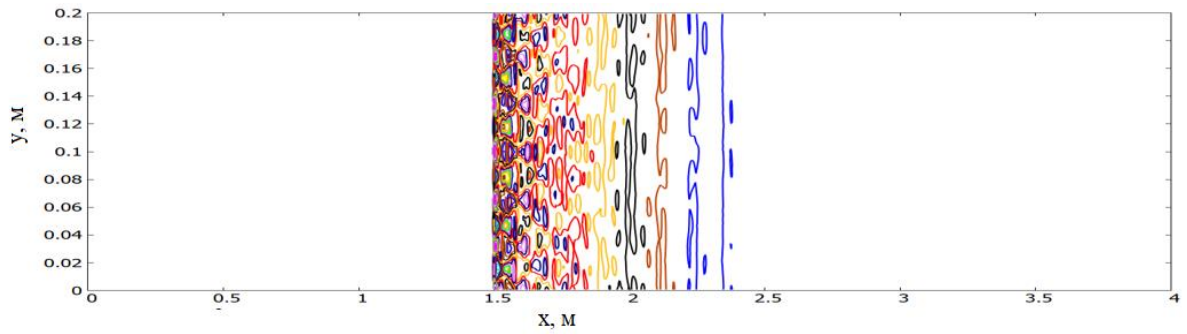
До момента времени $t = 1.4$ мс картина отражения остается одномерной. При $t = 1.4 - 2.0$ мс вблизи фронта отраженной волны начинают развиваться поперечные возмущения, которые приводят к неустойчивости фронта и образованию вблизи него зон с заметно отличающимися температурой и давлением (рис. 4.17 - 4.20). На момент времени достижения отраженной ударной волной левой границы расчетной области (рис. 4.18, 4.20) поперек расчетной области имеется шесть локальных зон неоднородности потока, в которых давление и температура продуктов сгорания меняются от 1.5 до 2 МПа и от 3000 до 3600 К соответственно. Распространение поперечных и продольных волн можно отследить на временных развертках течения, приведенных на рис. 4.21-4.22, на которых приводятся распределения параметров течения при движении ОУВ в 3 – 4 метрах от отражающего торца. На рисунках выделены 5 характерных сеточных линий $y = \text{const}$.



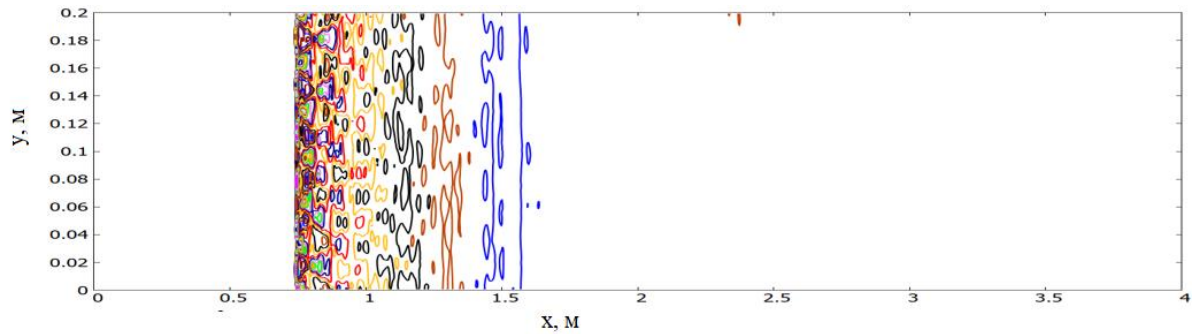
$t = 1.402 \cdot 10^{-3} \text{ c}$



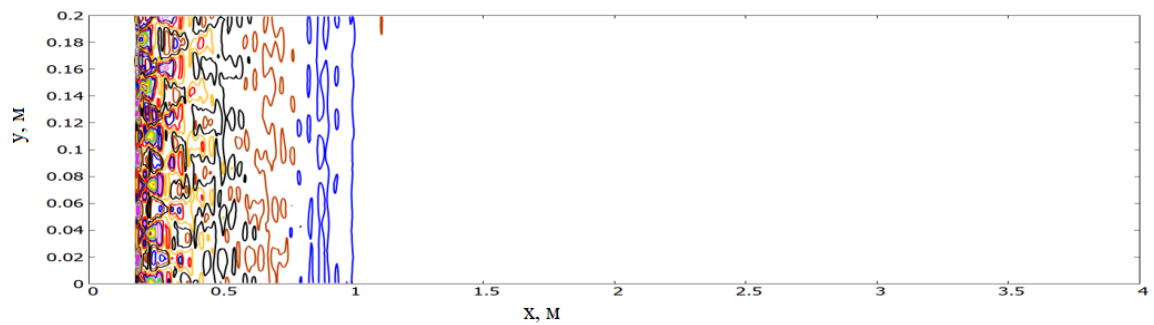
$t = 2.213 \cdot 10^{-3} \text{ c}$



$t = 2.992 \cdot 10^{-3} \text{ c}$

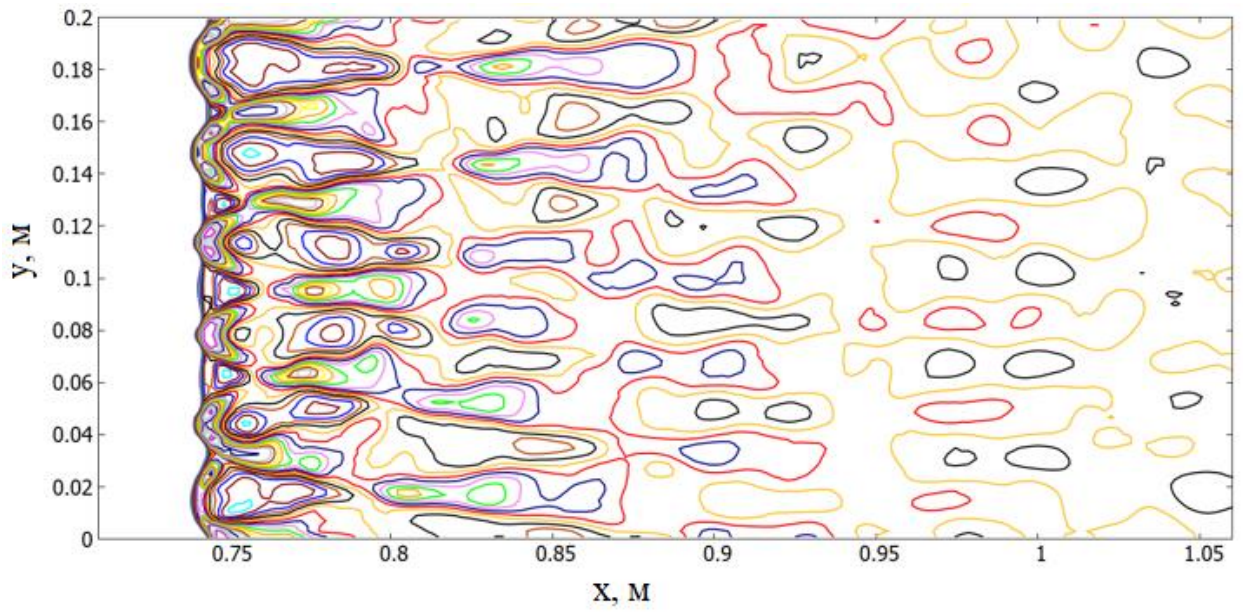


$t = 3.753 \cdot 10^{-3} \text{ c}$

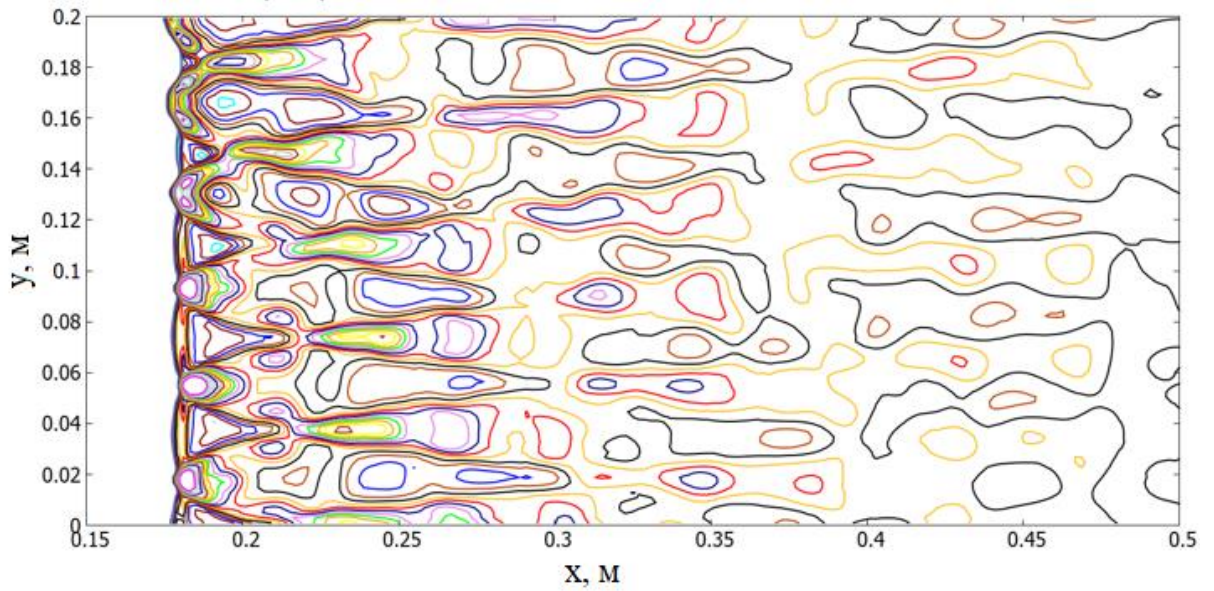


$t = 4.317 \cdot 10^{-3} \text{ c}$

Рис. 4.17. Изолинии давления в различные моменты времени. $M_{\text{ПУВ}}=3.2$.

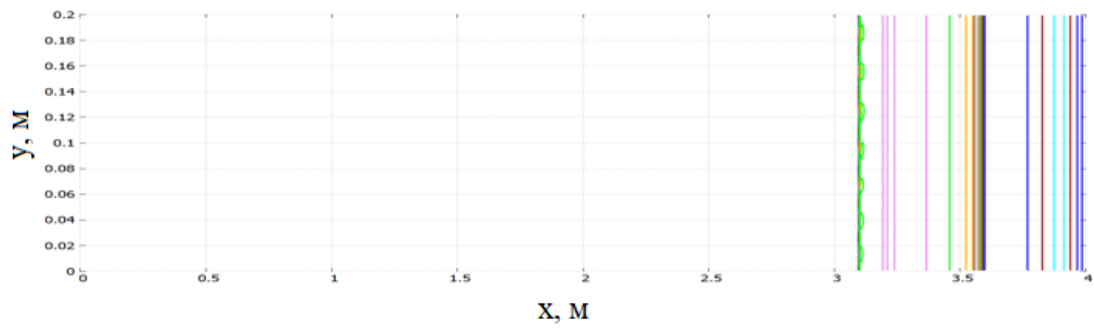


$t = 3.753 \cdot 10^{-3} \text{ c}$

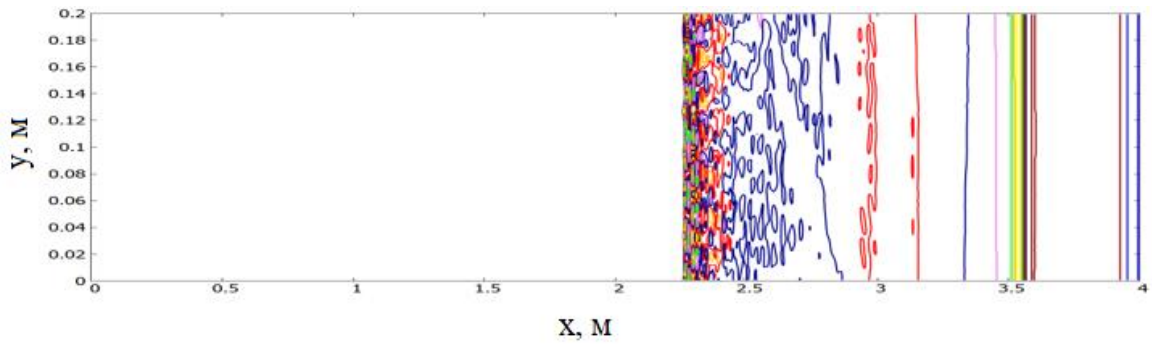


$t = 4.317 \cdot 10^{-3}$

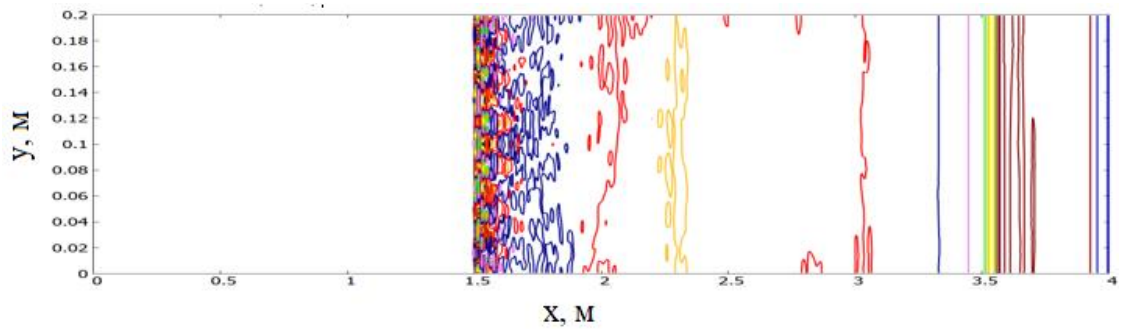
Рис. 4.18. Изолинии давления в окрестности ОУВ в различные моменты времени в увеличенном масштабе. $M_{\text{ДУВ}}=3.2$.



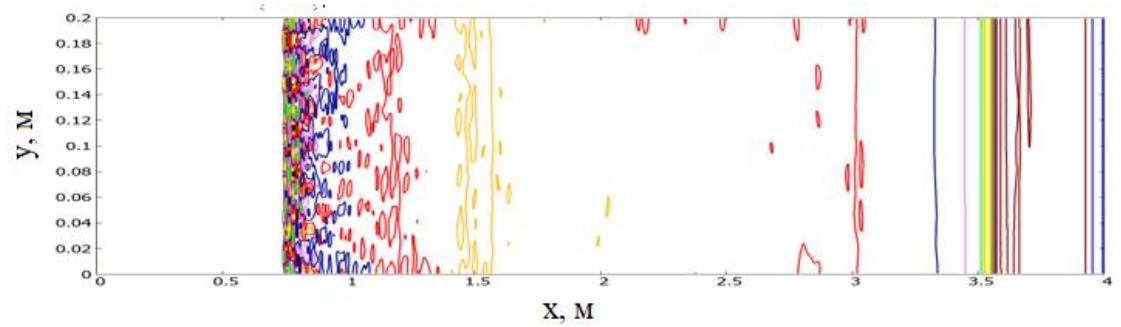
$t = 1.402 \cdot 10^{-3} \text{ c}$



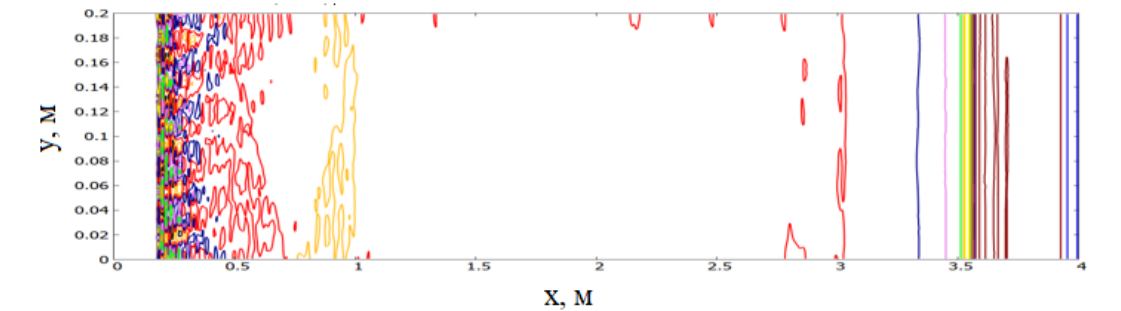
$t = 2.213 \cdot 10^{-3} \text{ c}$



$t = 2.992 \cdot 10^{-3} \text{ c}$



$t = 3.753 \cdot 10^{-3} \text{ c}$



$t = 4.317 \cdot 10^{-3} \text{ c}$

Рис. 4.19. Изолинии температуры в различные моменты времени. $M_{\text{ПУВ}}=3.2$.

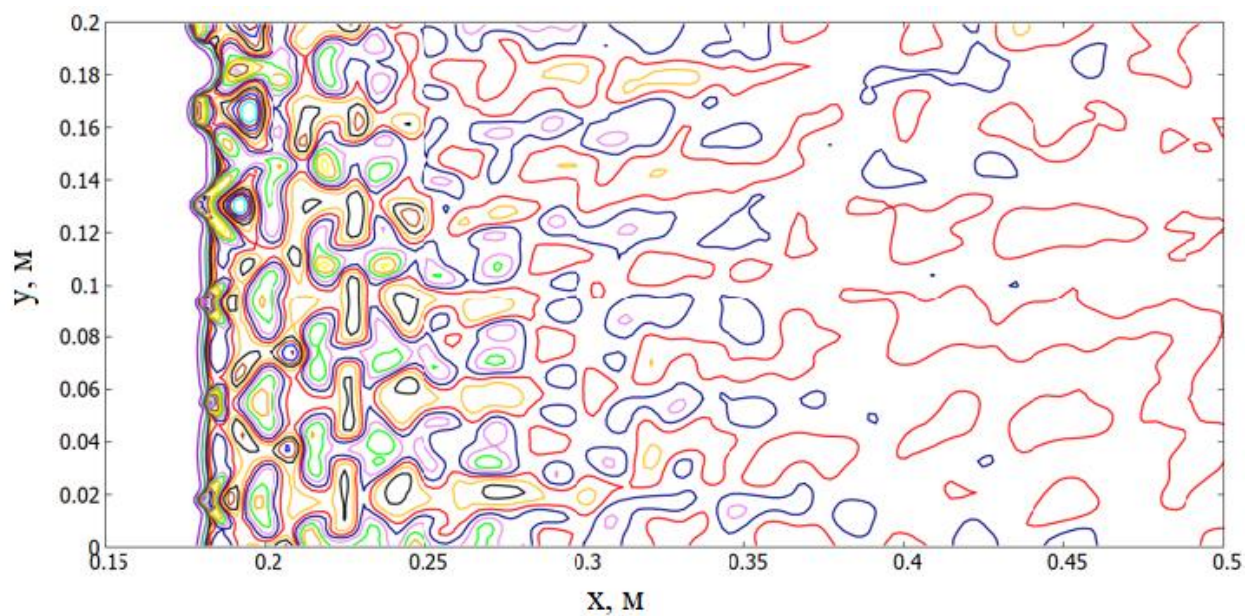
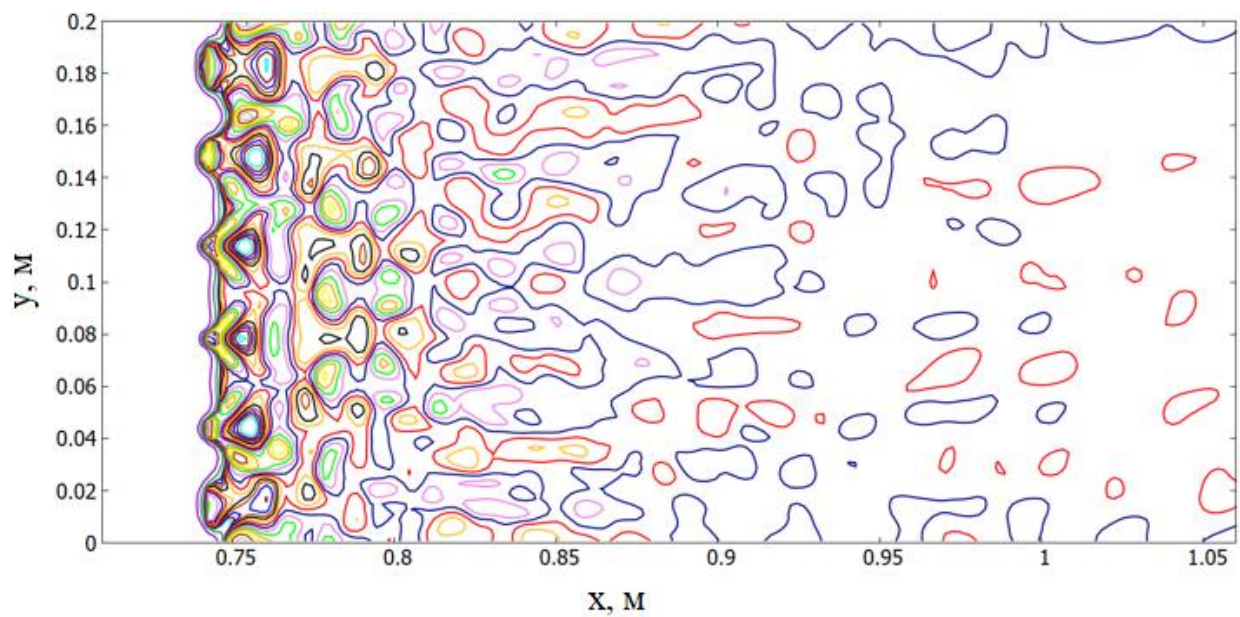
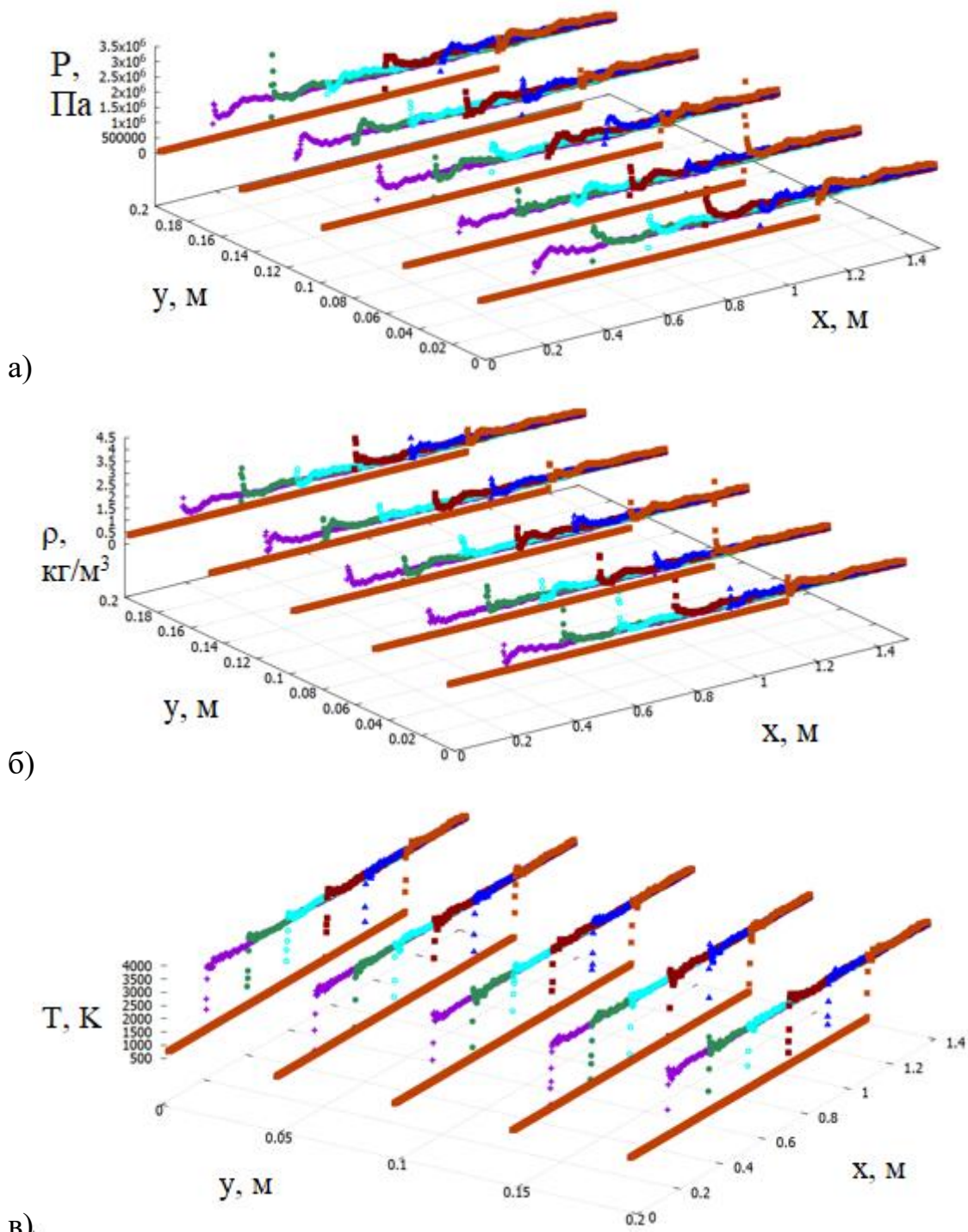
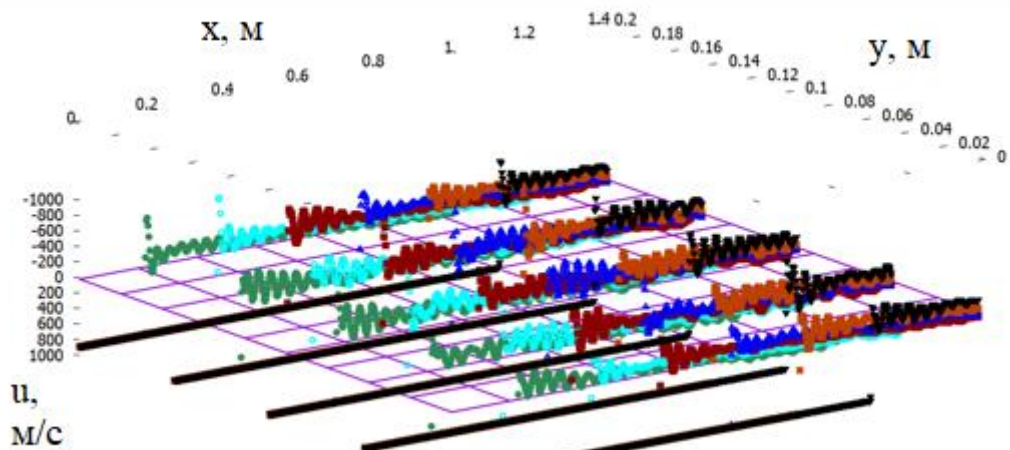


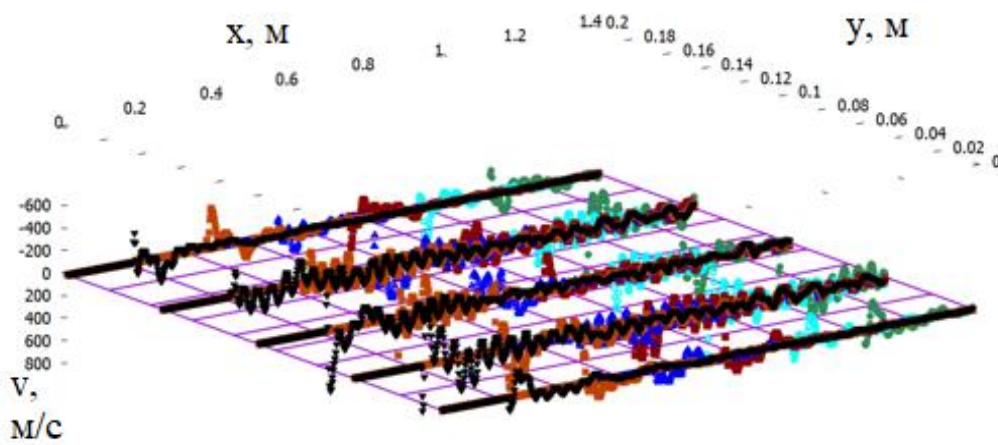
Рис. 4.20. Изолинии температуры в окрестности ОУВ в различные моменты времени в увеличенном масштабе. $M_{ПУВ}=3.2$.



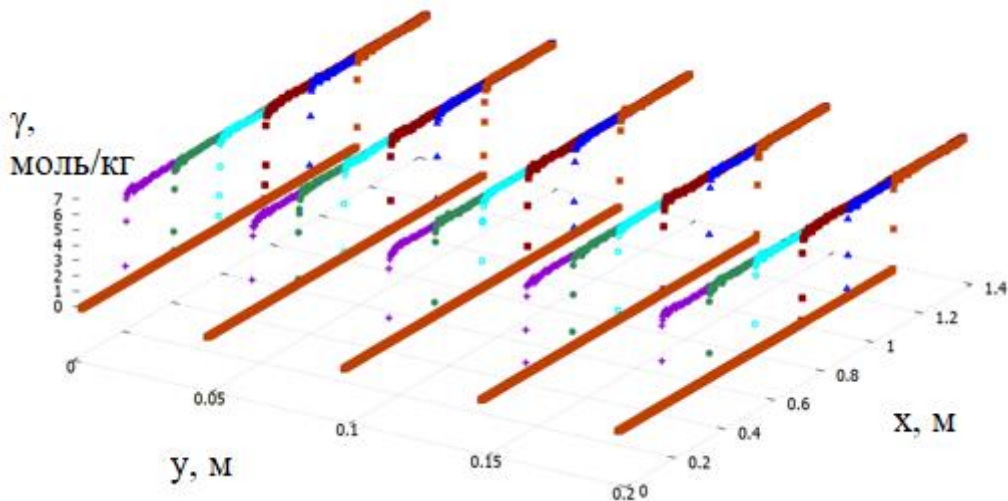
в).
 Рис. 4.21. Распределения а) - давления (Па), б) - плотности (кг/м³), в) - температуры (К) в различных сечениях в различные моменты времени. $M_{\text{ПУВ}}=3.2$.



а)



б)



в)

Рис. 4.22. Распределения а) – продольной компоненты вектора скорости (м/с), б) – поперечной компоненты вектора скорости (м/с), в) – мольно-массовой концентрации паров воды (моль/кг) в различных сечениях в различные моменты времени. $M_{\text{ДУВ}}=3.2$.

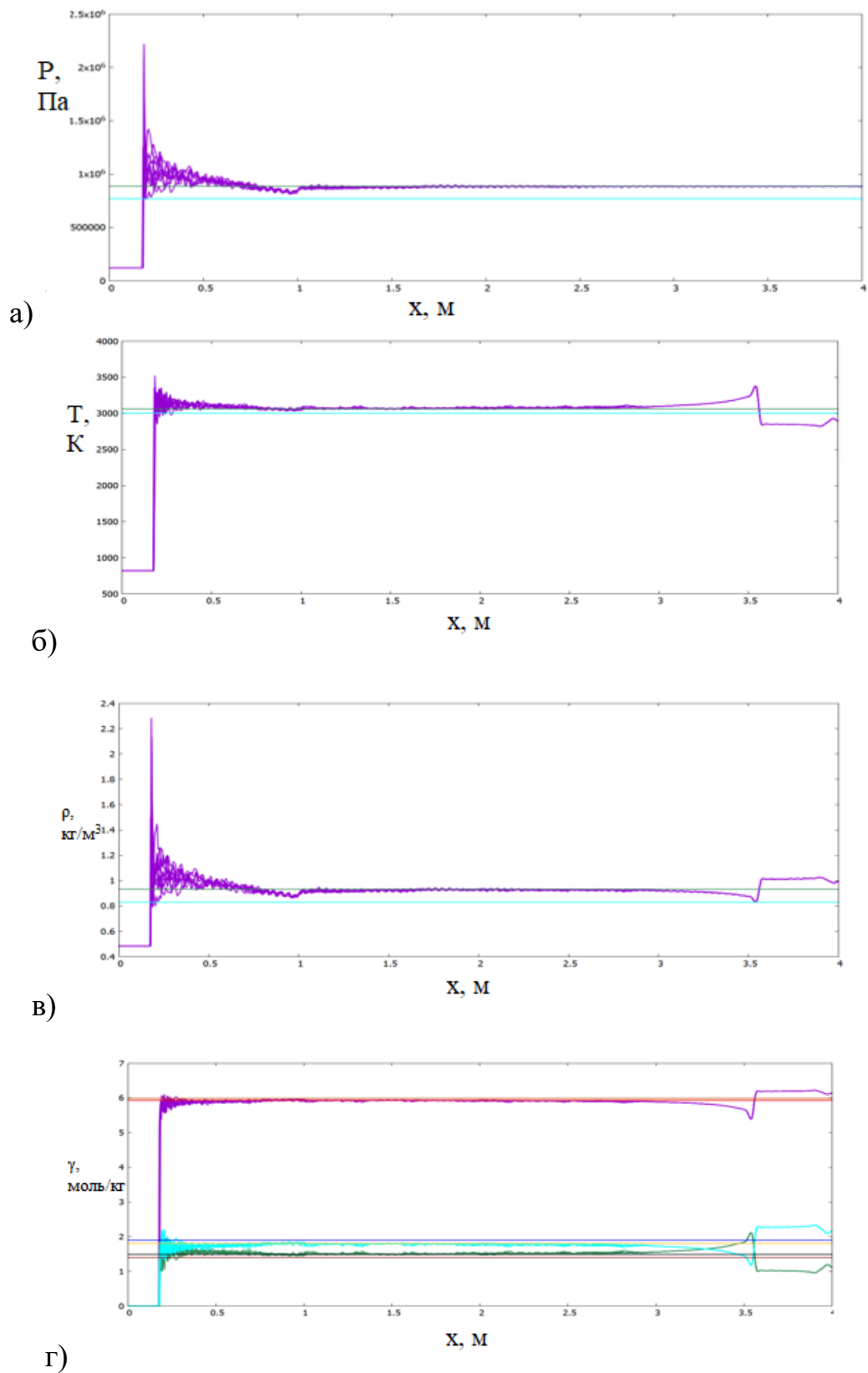
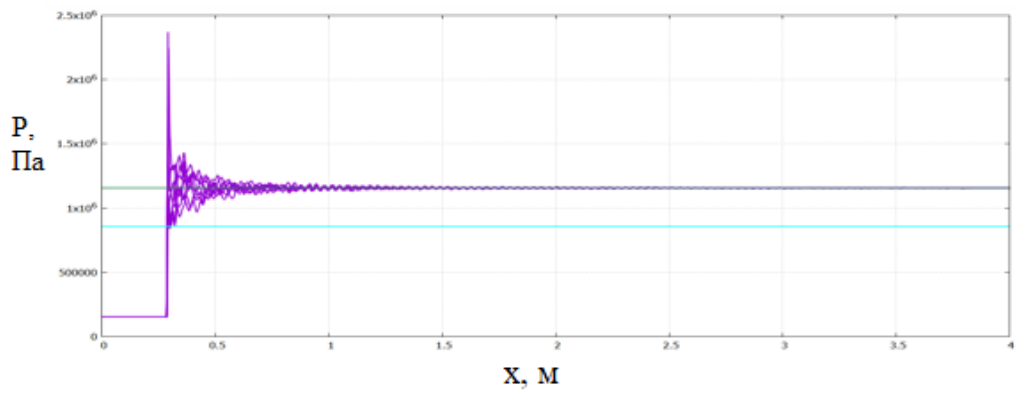
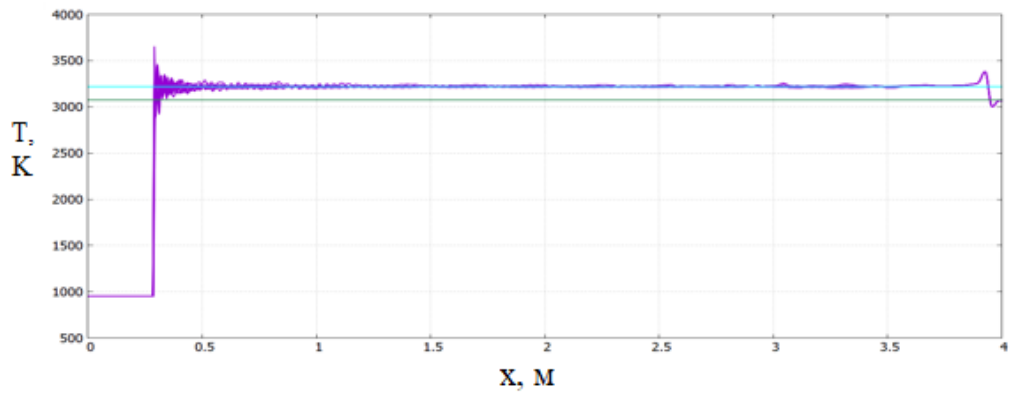


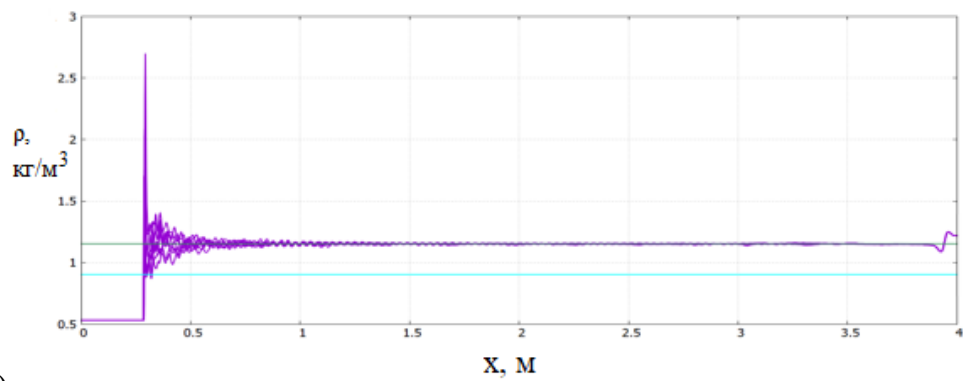
Рис. 4.23. Распределения давления (Па), температуры (К), плотности (кг/м³), мольно-массовых концентраций (моль/кг) паров воды, CO, CO₂. Сравнение с параметрами за равновесной ОУВ и в волне Чепмена-Жуге. $M_{ПУВ}=3.2$. $t=4.317 \cdot 10^{-3}$ с



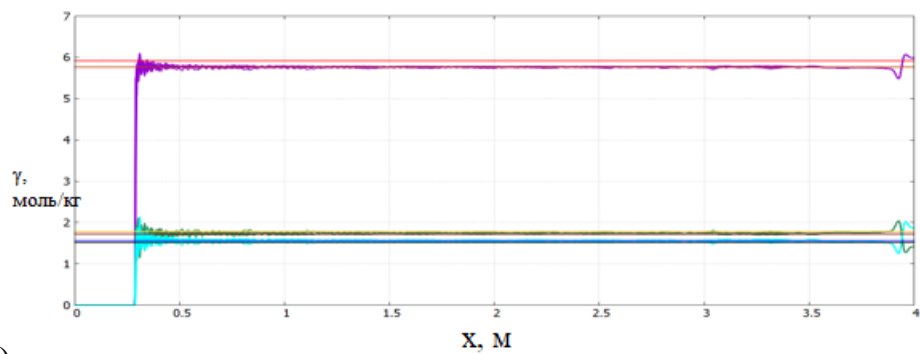
a)



б)



в)



г)

Рис. 4.24. Распределения давления (Па), температуры (К), плотности ($\text{кг}/\text{м}^3$), мольно-массовых концентраций (моль/кг) паров воды, CO , CO_2 . Сравнение с параметрами за равновесной ОУВ и в волне Чепмена-Жуге. $M_{\text{ПУВ}}=3.6$. $t=4.465 \cdot 10^{-3}\text{с}$

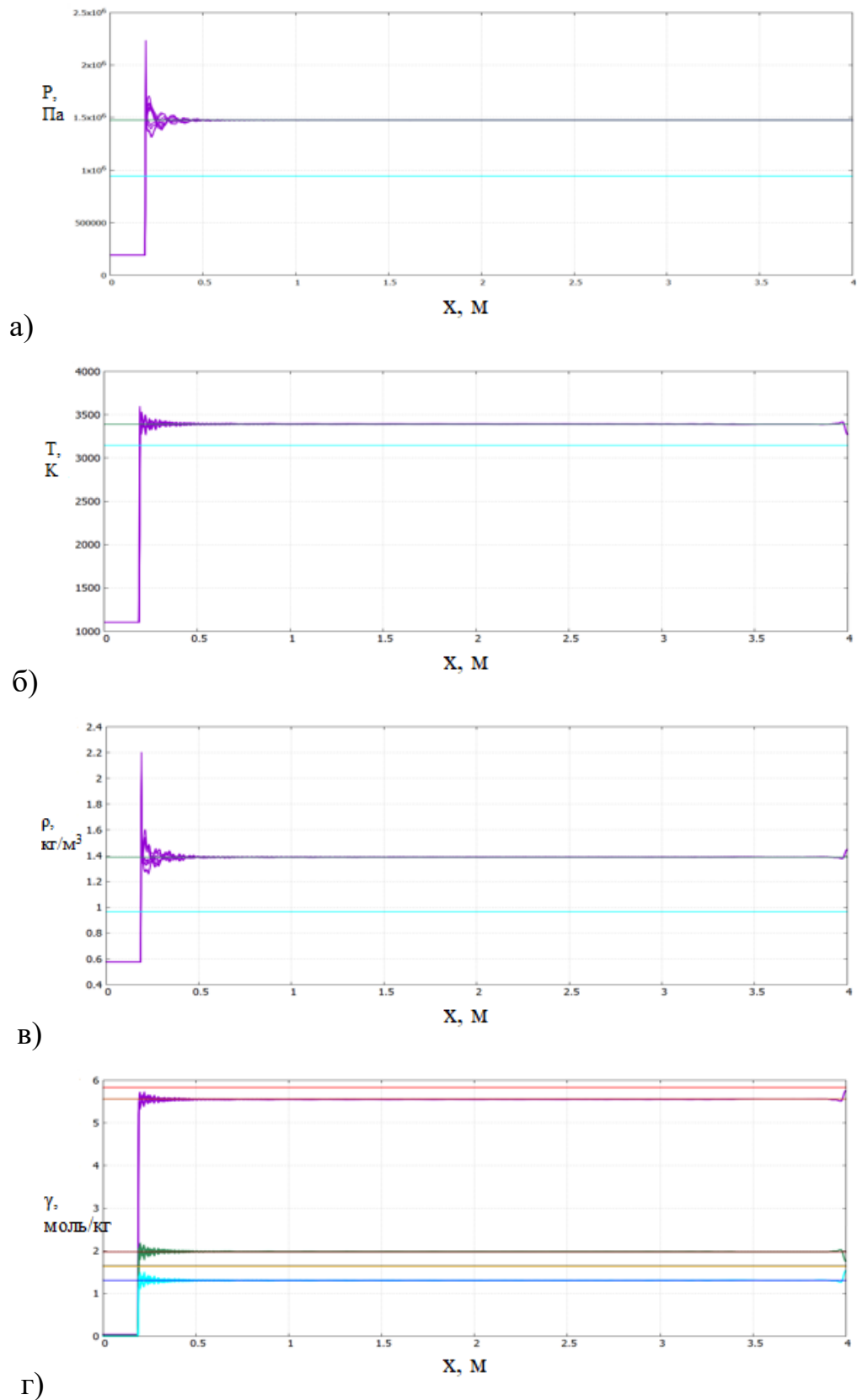


Рис. 4.25. Распределения давления (Па), температуры (К), плотности (кг/м³), мольно-массовых концентраций (моль/кг) паров воды, СО, СО₂. Сравнение с параметрами за равновесной ОУВ и в волне Чепмена-Жуге. $M_{\text{ПУВ}}=4.0$. $t=4.856 \cdot 10^{-3}\text{с}$

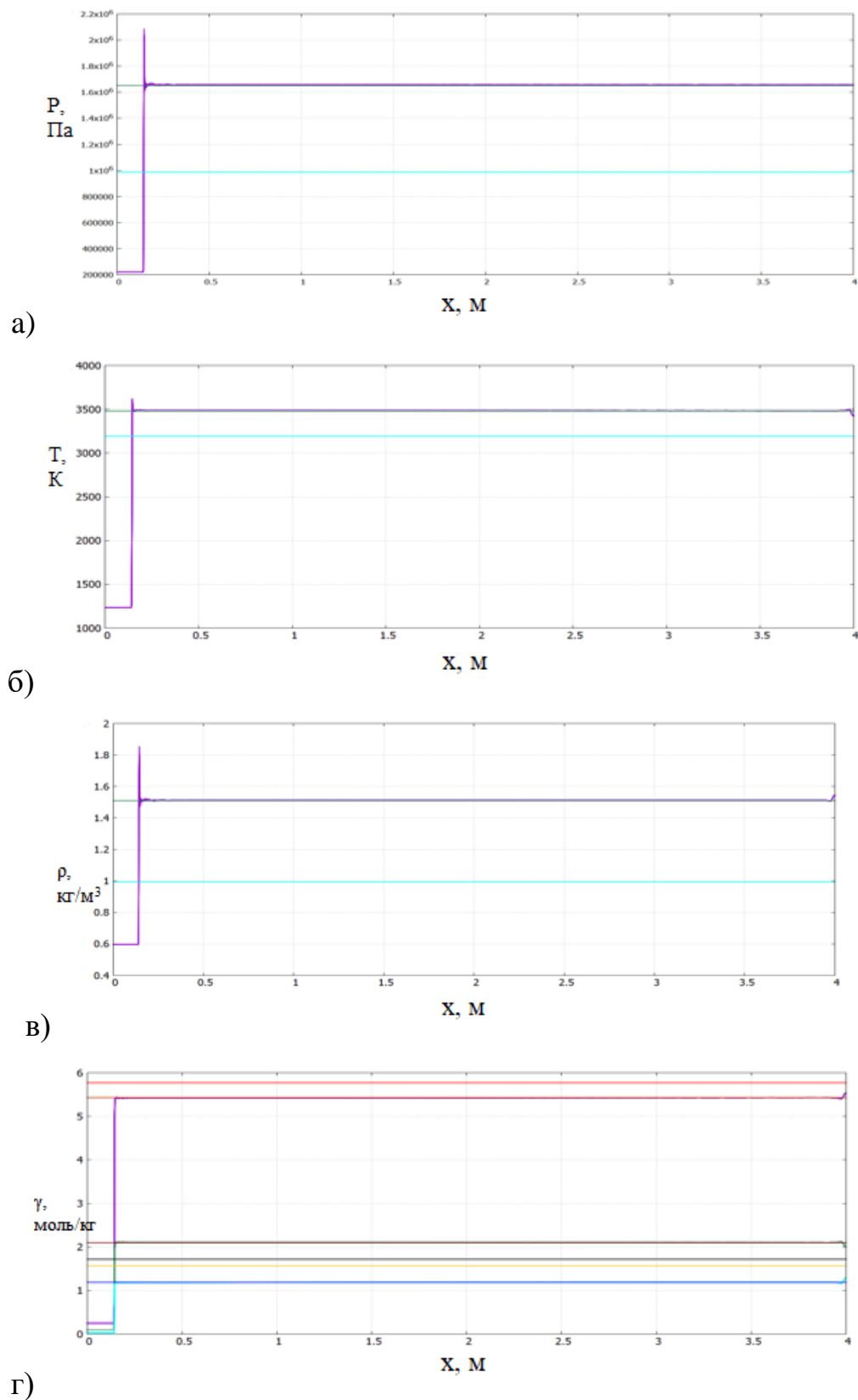


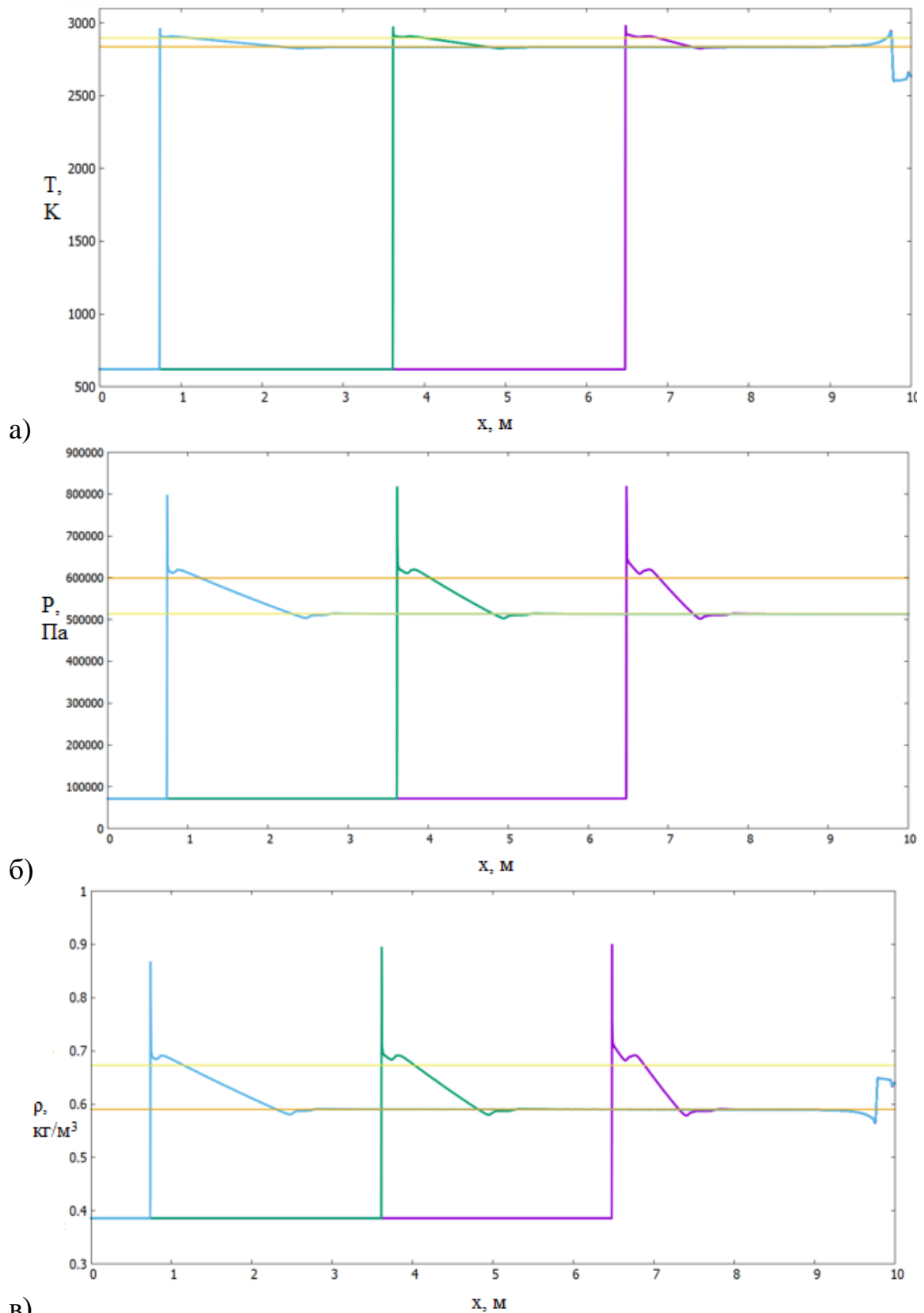
Рис. 4.26. Распределения давления (Па), температуры (К), плотности (кг/м³), мольно-массовых концентраций (моль/кг) паров воды, СО, СО₂. Сравнение с параметрами за равновесной ОУВ и в волне Чепмена-Жуге. $M_{ПУВ}=4.2$. $t=5.036 \cdot 10^{-3}c$

Если собрать распределения параметров течения вдоль девяти характерных сеточных линий $y=\text{const}$ на один график, то получится картина течения (рис. 4.23-4.25), включающая зону существенно переменных параметров, протяженностью 0.3 – 0.7 м за ОУВ и доминирующую зону параметров, близких к постоянным, на расстоянии 0.7 - 3 м за ОУВ. Из рисунков видно, что доминирующие параметры течения за ОУВ с высокой точностью соответствуют решению задачи о равновесной отраженной ударной волне и заметно отличаются от параметров детонации Чепмена-Жуге. Аналогичная картина наблюдается при изменении Числа Маха ПУВ, причем с увеличением числа Маха ПУВ отличие доминирующих параметров от параметров детонации Чепмена-Жуге существенно возрастает.

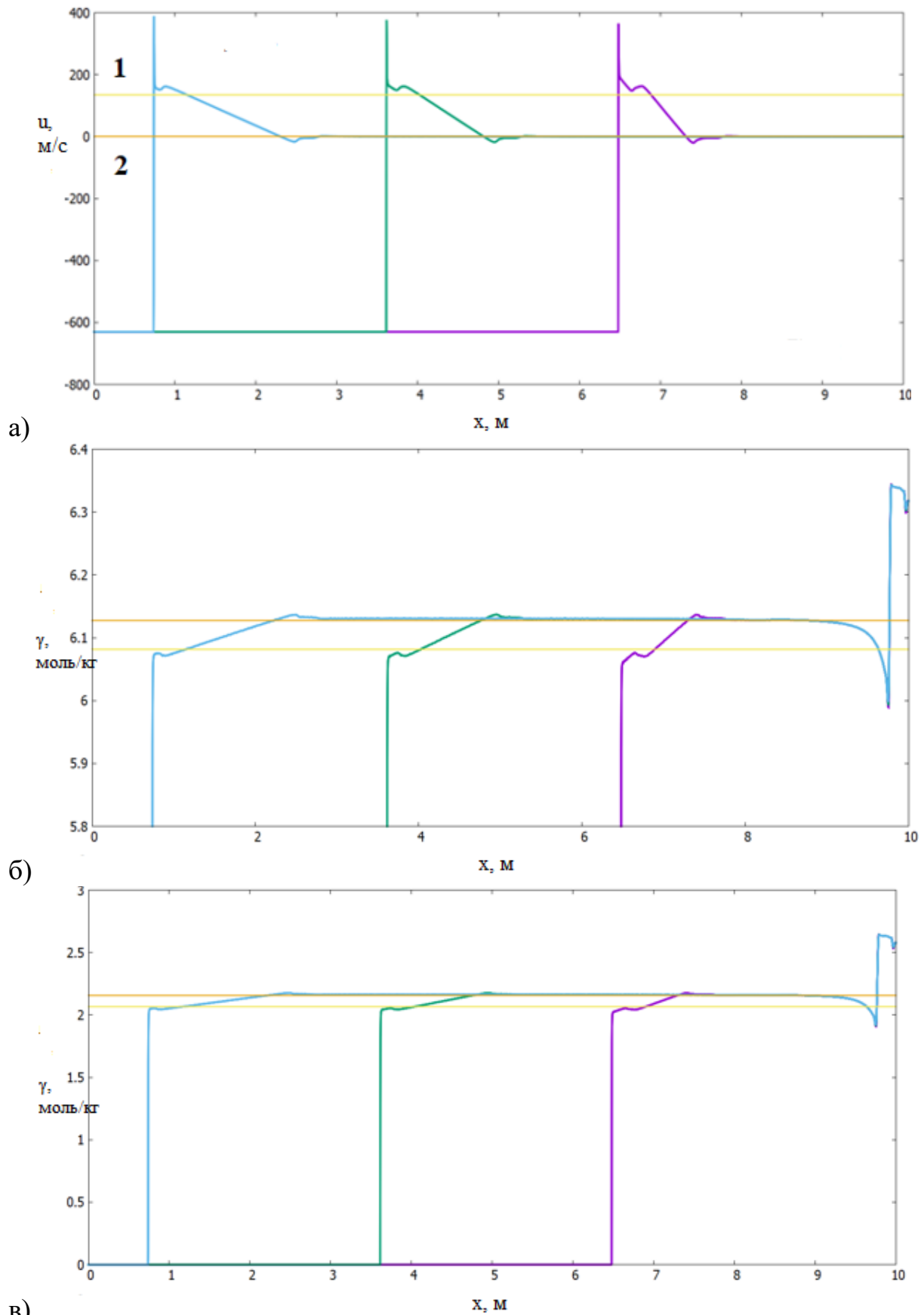
4.3 Режим Чепмена-Жуге при распространении детонации в канале, инициированной отраженной ударной волной

В разделах 4.1 и 4.2 приводятся результаты моделирования детонации в метано-воздушной горючей смеси отраженной ударной волной в одномерной и двухмерной нестационарной постановках. Рассмотренный диапазон чисел Маха падающей детонационной волны соответствует режимам отражения, при которых скорость равновесной детонационной волны превышает значения скорости детонации Чепмена-Жуге (рис. 4.2а). В рассмотренных режимах температура газа за ОУВ существенно превышает температуру самовоспламенения метано-воздушной смеси, и образующаяся детонационная волна успевает выйти на режим распространения, близкий к стационарному, на относительно небольших расстояниях от отражающего торца (менее 10 м). При уменьшении числа Маха при используемых константах скоростей химических реакций проведение высокоточных расчетов за допустимое время становится проблематичным. Как известно, средняя скорость распространения плоской ДВ на больших расстояниях не зависит от скоростей химической реакции, а зависит исключительно от термодинамических свойств продуктов сгорания. Поэтому, не ограничивая

общности получаемых результатов, для исследования вопроса о режимах распространения детонационной волны при числах Маха ПУВ в диапазоне 2.5-2.9 (рис. 4.2) проведем численное моделирование с увеличенной в 100 раз константой A в реакции 1 кинетического механизма (Табл. 4.1). Численное моделирование производилось на расчетной сетке, включающей 5001 узел по оси X и 11 узлов по оси Y . На рис. 4.27 – 4.28 представлены результаты расчетов при $M_{ПУВ}=2.5$. Из результатов расчетов следует, что непосредственно за детонационной волной реализуются параметры течения, соответствующие режиму Чепмена-Жуге, далее следует веер волн разрежения, который расширяется со временем (рис. 4.27-4.28) и область покоящегося газа. Вблизи отражающей правой стенки, на графиках температуры (рис. 4.27а), плотности (4.27в) и концентраций (4.28 бв) имеется область немонотонности, соответствующая контактному разрыву, образованному при взаимодействии волны горения с отраженной ударной волной.



в)
 Рис. 4.27. Распределения температуры (а), давления (б) и плотности (в) газа в различные моменты времени ($4.4565 \cdot 10^{-3}$, $5.9205 \cdot 10^{-3}$, $8.3950 \cdot 10^{-3}$ с). $M_{ПДВ}=2.5$.



в)
 Рис. 4.28. Распределения скорости газа (а), мольно-массовых концентраций H_2O (б) и CO (в) в различные моменты времени ($4.4565 \cdot 10^{-3}$, $5.9205 \cdot 10^{-3}$, $8.3950 \cdot 10^{-3}$ с). $M_{ПУВ}=2.5$.

Оценка средней скорости распространения детонационной волны вдали от отражающей стенки проводилась по графикам изменения температуры и давления, соответствующим трем моментам времени (приведены маркерами на рис. 4.29). Из графиков видно, что при числах Маха ПУВ более 3.2 скорость распространения ДВ соответствует скорости распространения равновесной ударной волны, а при $M_{ПУВ}=2.5$ скорости волны Чепмена-Жуге. В диапазоне чисел Маха ПУВ 2.7-2.9 скорости равновесной ОУВ и ДВ Чепмена-Жуге близки (кривые 1 и 2 рис. 4.29), поэтому при проведении многомерных расчетов без выделения ДВ режим распространения четко не определяется, и в ряде работ делается вывод, что ДВ распространяется в режиме Чепмена-Жуге.

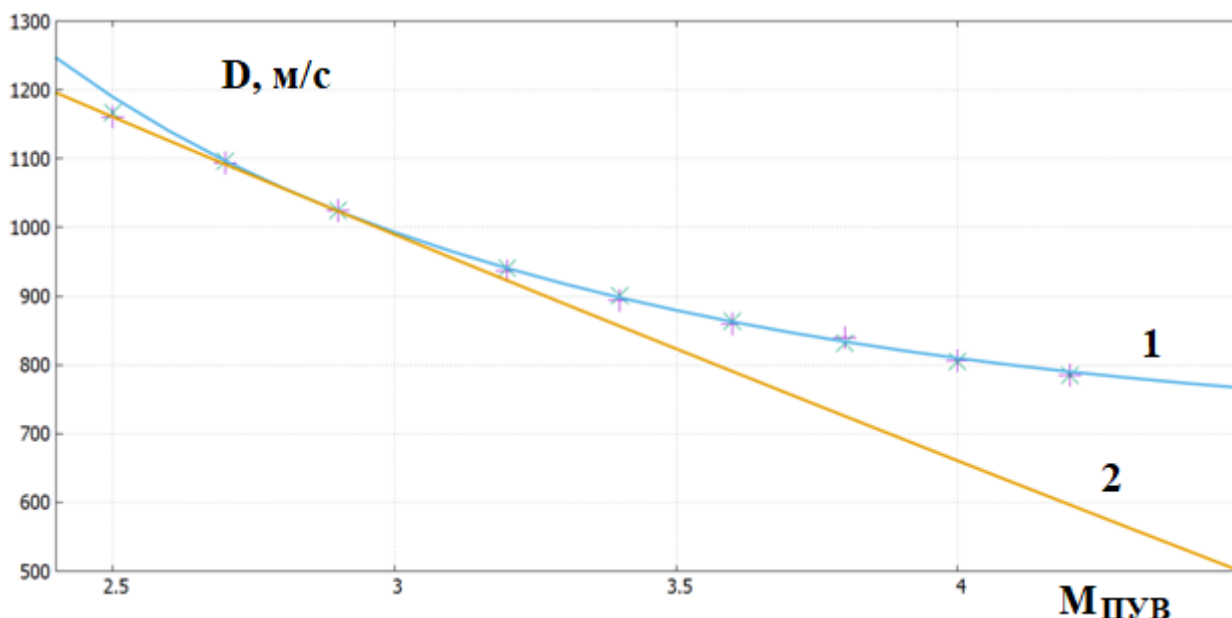


Рис. 4.29. Зависимости скорости детонационной волны от $M_{ПУВ}$. Маркеры – среднее значение рассчитанной скорости ДВ на большом расстоянии от отражающей стенки; 1 – скорость равновесной ОУВ, 2 – скорость волны Чепмена-Жуге.

Необходимо отметить, что при $M_{ПУВ}=2.86$ скорость продуктов сгорания за детонационной волной Чепмена-Жуге равна нулю и, соответственно, параметры, рассчитанные за равновесной ОУВ и в волне Чепмена-Жуге, совпадают. Режим распространению детонационной волны при $M_{ПУВ} < 2.86$ соответствует решению задачи о распространении плоской детонационной

волны Чепмена-Жуге, в соответствии с которым к детонационной волне присоединен веер волн разрежения, в котором скорость продуктов сгорания изменяется от своего значения за детонационной волной Чепмена-Жуге до нуля, а далее находится область с постоянными параметрами. Концентрации компонентов, входящих в состав продуктов сгорания, при этом находятся из решения уравнений, описывающих термодинамическое равновесие.

Зависимости скоростей равновесной ОУВ и волны Чепмена-Жуге от начальных давления, температуры и состава смеси приведены на рис. (4.30)-(4.32).

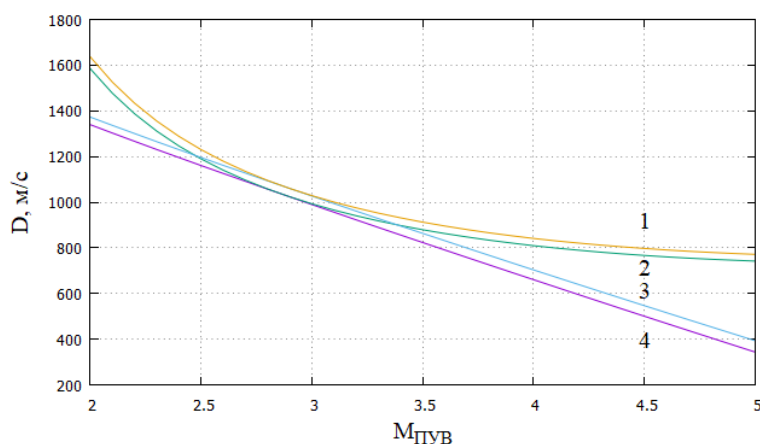


Рис. 4.30. Зависимости скорости детонационной волны от $M_{ПУВ}$, $T_0=300$ К.

1 – скорость равновесной ОУВ $P_0 = 10000$ Па, 2 – скорость равновесной ОУВ $P_0 = 10000$ Па, 3 – скорость волны Чепмена-Жуге $P_0 = 100000$ Па, 4 – скорость волны Чепмена-Жуге $P_0 = 100000$ Па

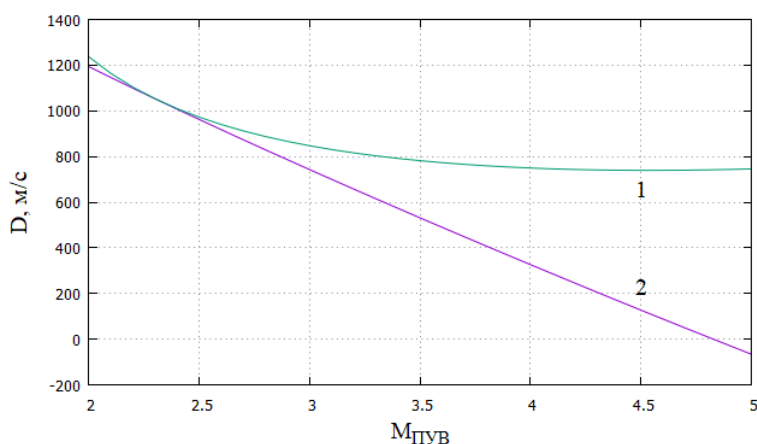


Рис. 4.31. Зависимость скорости детонационной волны от $M_{ПУВ}$, $T_0=500$ К. 1 – скорость равновесной ОУВ, 2 – скорость волны Чепмена-Жуге.

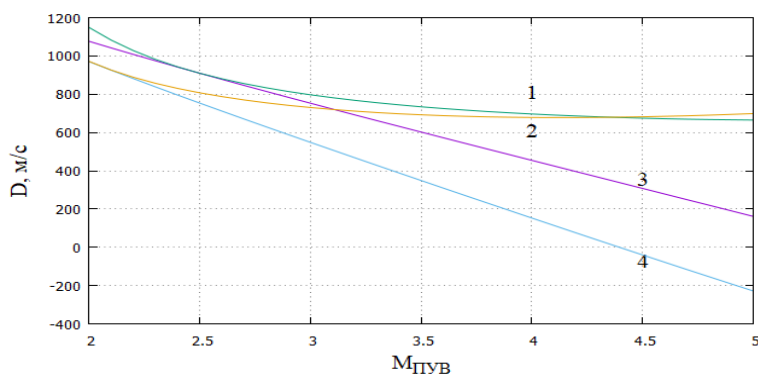


Рис. 4.32. Зависимость скорости детонационной волны от $M_{\text{ПУВ}}$ ($0.05\text{CH}_4+0.1995\text{O}_2+0.7505\text{N}_2$) 1 – скорость равновесной ОУВ, $T_0=500$ К; 2 – скорость равновесной ОУВ, $T_0=300$ К; 3 – скорость волны Чепмена-Жуге, $T_0=500$ К; 4 – скорость волны Чепмена-Жуге, $T_0=300$ К.

Выводы

В четвертой главе работы приводятся физико-математические модели, вычислительные алгоритмы и результаты численного моделирования детонации метано-воздушной горючей смеси за плоской отраженной ударной волной. Моделирование проводилось в одномерной и двумерной нестационарной постановках. Течение газовой смеси рассматривалось в рамках модели многокомпонентной смеси совершенных газов, химические превращения в котором описывались с помощью упрощенных многостадийных кинетических механизмов, которые допускали включение брутто реакций. Получено, что в зависимости от числа Маха падающей ударной волны возможны два режима распространения детонационной волны на больших расстояниях от отражающего торца. Первый, при числах Маха ПУВ выше порогового значения – в пересжатом режиме, близком к стационарному. При этом скорость распространения ДВ и доминирующие параметры за ДВ соответствуют с высокой точностью решению задачи о равновесной ОУВ. Второй, при числах Маха ПУВ ниже порогового значения – в режиме волны Чепмена-Жуге, соответствующему автомодельному решению, включающему детонационную волну, веер волн разрежения и неподвижную область постоянных параметров.

Заключение

В соответствии с поставленными задачами, были получены следующие научные результаты, содержащие новизну и выносимые на защиту данной работы:

1. Разработаны вычислительные алгоритмы расчета параметров течений с равновесными и неравновесными химическими реакциями. В них при неубывании значения энтропии осуществляется непрерывный переход к состоянию термодинамического равновесия от начального неравновесного состояния.
2. Решена задача прохождения особой точки в прямой задаче теории сопла в канале переменного сечения со сверхзвуковым потоком на входе и выходе в квазиодномерной постановке для многокомпонентного совершенного газа с химическими превращениями, описываемыми многостадийными кинетическими механизмами с наличием ударной (детонационной) волны в области перед критическим сечением.
3. Проанализирована устойчивость течения в канале переменного сечения со сверхзвуковым потоком на входе и выходе, в квазиодномерной нестационарной постановке численно получены устойчивые режимы течения с пересжатой детонационной волной в докритической области.
4. Численно решена задача о распространении пересжатой детонационной волны в канале постоянного сечения после отражения ударной волны от закрытого торца. Установлено, что параметры течения, которые реализуются на больших расстояниях от отражающей стенки, с высокой точностью соответствуют решению задачи о равновесной отраженной ударной волне. Предложен алгоритм определения значений числа Маха падающей

ударной волны, при которых детонационная волна выходит на режим Чепмена-Жуге.

Разработанные вычислительные алгоритмы и комплекс программ позволяют проводить экспресс-анализ течений многокомпонентного газа с химическими превращениями, описываемыми с помощью многостадийных кинетических механизмов. Данный анализ необходимо проводить перед проведением ресурсоемких численных расчетов многомерных течений, реализующихся в энергетических и технологических установках, применяемых в ракетно-космической и авиационной отраслях промышленности. Методики, предложенные в работе, позволяют определять тонкую структуру химически неравновесных течений от момента инициирования реакций до достижения состояния термодинамического равновесия.

Список использованной литературы

1. A. L. de Lavoisier. *Traité élémentaire de chimie*. — Paris. 1789.
2. Mallard E., Le Chatelier H. Sur la vitesse de propagation de l'inflammation dans les melanges explosifs // *Compt. Rend. Acad. Sci.* — 1881. — Vol. 93. — P. 145—148.
3. Berthelot M., Vieille P. Sur la vitesse de propagation des phenomenes explosifs dans les gaz // *Compt. Rend. Acad. Sci.* — 1882. — Vol. 92. — P. 101—108, 822—823.
4. Хитрин Л. Н. Глава IV. Процесс распространения пламени. Детонация // *Физика горения и взрыва*. — М.: Издательство Московского университета, 1957. — 452 с
5. Михельсон В. А. О нормальной скорости воспламенения гремучих газовых смесей // *Учен. записки Моск. ун-та, отд. физ.-мат.* — 1893. — Вып. 10. — С. 1—92.
6. Riemann, B. Über die Fortpflanzung ebener Luftwellen von endlicher Schwingungsweite // *Verlag der Dieterichschen Buchhandlung* — 1860
7. Hugoniot P.-H. Sur la propagation du mouvement dans les corps et spécialement dans les gaz parfaits. *J. École Polytechniqu* vol. CLVII, c. 3–98
8. W. J. M. Rankine On the Thermodynamic Theory of Waves of Finite Longitudinal Disturbance. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London* 160 pp. 277-288. 1870
9. Chapman D. L. On the rate of explosion in gases // *Philosophical Magazine*.— 1899. — Vol. 47. — P. 90—104.
10. Jouguet E. Sur la propagation des reactions chimiques dans les gaz // *Journal des Mathematiques Pures et Appliquees*. — 1905. — Т. 1. — С. 347—425.
11. Зельдович Я. Б. К теории распространения детонации в газообразных системах // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. — 1940. — Т. 10, вып. 5. — С. 542—568.
12. Neumann J. Theory of detonation waves // *Progress Report to the National Defense Research Committee Div. B, OSRD-549*. — 1942. — No. 549.
13. Doring W. Uber Detonationsvorgang in Gasen // *Annalen der Physik*. — 1943. — Vol. 435, issue 6/7. — P. 421—436.
14. Зельдович Я. Б. Об энергетическом использовании детонационного сгорания // *Журнал технической физики*. 1940. № 1(17). С. 1453-1461.
15. Коробейников В.П., Левин В.А. Сильный взрыв в горючей смеси газов // *Известия АН СССР. Механика жидкости и газа*. 1969. № 6. С. 48-51.
16. 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. No. 5-6. P. 529-537.

17. Campbell C., Woodhead D. // Journ. Chemical Society. — 1926. — Vol. 129. — P. 3010.
18. Левин В.А., Марков В.В. Исследование возникновения детонации при концентрированном подводе энергии // Физика горения и взрыва. 1975. Т. 2. № 4. С. 623-629.
19. В. А. Левин, В. В. Марков, С. Ф. Осинкин, Инициирование детонации поршнем в смеси водорода с воздухом, Докл. АН СССР, 1990, Т. 313, № 2, 288–291
20. Гриб А. А. О распространении плоской ударной волны при обыкновенном взрыве у твердой стенки // Прикладная математика и механика. — 1944. — Т. 8, № 3. — С. 160.
21. Димитров В.И. Простая кинетика. Новосибирск: Наука, 1982. 381 с.
22. Борисов А.А., Драгалова Е.В., Заманский В.М. Механизм и кинетика самовоспламенения метана // Химическая физика. 1982. № 4. С. 536-543.
23. Басевич В. Я., Беляев А. А., Медведев С. Н., Посвянский В. С., Фролов Ф. С., Фролов С. М. Моделирование самовоспламенения и горения капель н-гептана с использованием детального кинетического механизма // Химическая физика. 2010. Т. 29. № 12. С. 50-59.
24. Zhukov V.P, Sechenov V.A., Starikovskii A.Yu. Autoignition of n-decane at high pressure // Combustion and Flame.2008.Vol.153.N1. P.130-136.
25. Chen J.Y. Reduced reaction mechanisms for methanol-air diffusion flames // Comb. Sci. and Tech. 1991. Vol. 78. P. 127-145.
26. Басевич В.Я., Беляев А.А. Сокращенная кинетическая схема для моделирования самовоспламенения воздушных смесей изооктана и н-гептана в течение периода индукции применительно к двигателям внутреннего сгорания // Химическая физика. 1994. Т. 13. № 8-9. С. 146-156.
27. V Ya Basevich, "Detailed Kinetic Mechanism of the Combustion of Homogeneous Gaseous Mixtures with Participation of Oxygen-containing Oxidants", RUSS CHEM REV, 1987, 56 (5), 411–427
28. Reduced kinetic mechanisms for applications in combustion systems / Eds. Peters N., Rogg B. Berlin: Springer-Verlag, 1993
29. 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.
30. Варнатц Ю., Маас У., Диббл Р. Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ. М.: Физматлит, 2003. 352 с
31. Гурвич Л.В., Вейц И.В., Медведев В.А. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание: В 4-х т.- М.: Наука, 1979-1982

32. Марасанов А.М., Мусин В.Р., Пирумов У.Г., Прохоров М.Б. Пакет прикладных программ химической кинетики: архитектура и адаптация для ПЭВМ // Матер. Междунар. симпоз.: Сб. докл. Минск: Изд-во БелНИИТМ 1989. Т. 2. С. 672-678
33. Л. И. Седов, В. П. Коробейников, В. В. Марков, Теория распространения взрывных волн, Тр. МИАН СССР, 1986, Т. 175, 178–216
34. Черный Г. Г. Газовая динамика. — М.: Наука, 1988 — 424 с.: ил.
35. В. А. Левин, В. В. Марков, Т. А. Журавская, С. Ф. Осинкин, Нелинейные волновые процессы при иницировании и распространении газовой детонации, Труды МИАН, 2005, том 251, 200–214
36. Крайко А.Н., Широносков В.А. Исследование устойчивости течения в канале с замыкающим скачком уплотнения при околосвуковой скорости потока. Прикладная математика и механика. 1976. Т. 40. С. 579-586.
37. Гринь В.Т., Крайко А.Н., Тилляева Н.И., Широносков В.А. Анализ устойчивости одномерного течения в канале при произвольном изменении параметров стационарного потока между сечением замыкающего скачка и выходом из канала. Прикладная математика и механика. 1977. Т. 41. С. 637-645.
38. Х. Ф. Валиев, А. Н. Крайко, Н. И. Тилляева, “Устойчивость одномерных стационарных течений с детонационной волной в канале переменной площади”, Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 60:4 (2020), 711–724
39. В.А. Левин, И.С. Мануйлович, В.В. Марков. Иницирование и распространение многомерных волн детонации // Физика горения и взрыва, 51:1 (2015), 47–56
40. Денисов Ю. Н., Трошин Я. К. Пульсирующая и спиновая детонация газовых смесей в трубах // Доклады АН СССР. — 1959. — Т. 125, № 1. — С. 110—113.
41. Денисов Ю. Н., Трошин Я. К. Механизм детонационного сгорания // Прикладная механика и техническая физика. — 1960. — Т. 1, № 1. — С. 21—35.
42. Левин В.А., Смехов Г.Д., Тарасов А.И., Хмелевский А.Н. Расчетное и экспериментальное исследование пульсирующей детонации в модели двигателя // Препринт ИМ МГУ. 1998. № 42-98
43. Щелкин К.И. К теории возникновения детонации в газовых смесях в трубах // Доклады АН СССР. 1939.Т. 23.С. 636.
44. Борисов А.А., Гельфанд Б.Е., Лобань С.А., Маилков А.Е., Хомик С.В. Исследование пределов детонации топливно-воздушных смесей в гладких и шероховатых трубах // Хим. Физика. 1982. №6. С.848
45. Zerdovich Ya. B. Regime classification of an exothermic reaction with nonuniform initial conditions // Combustion and Flame.1980.Vol.39.Iss.2. P. 211-214.

46. Гельфанд Б.Е., Поленов А.Н., Фролов С.М., Цыганов С.А. К вопросу о возникновении детонации в неравномерно нагретой газовой смеси // Физика горения и взрыва. 1985. Т. 21. №4. С. 118-123
47. К. И. Щелкин, Я. К. Трошин, Газодинамика горения, М., Изд-во АН СССР, 1963
48. Щёлкин К.И. К теории детонационного спина. Доклады АН СССР. 1945. Т. 47. № 7. С. 501–503.
49. Зельдович Я.Б. К теории детонационного спина. Сб. Детонация конденсированных и газовых систем. 1986, М., Наука, 228-233. (ДАН СССР, 1946, т.52, 147-150).
50. Щёлкин К.И. Два случая неустойчивого горения. Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1959. – Т. 36. – № 2. – С. 600–606.
51. Зайдель Р. М. Об устойчивости детонационных волн в газовых смесях. Доклады АН СССР, 1960. – Т. 136. – № 5. – С. 1142–1145.
52. Пухначев В.В. Об устойчивости детонации Чепмена–Жуге. Доклады АН СССР, 1963. – Т. 149. – № 4. – С. 798–801.
53. Р. М. Зайдель, Я. Б. Зельдович. Одномерная неустойчивость и затухание детонации. Прикладная механика и техническая физика, 1963, № 6, С. 59-65
54. Ю. Н. Денисов, Я. К. Трошин, Журнал технической физики, 1960, Т. № 450
55. Б. В. Войцеховский, В. В. Митрофанов, М. Е. Топчийан Структура фронта детонации в газах, Новосибирск, Изд-во СО АН СССР, 1963
56. D. R. White, Phys. Fluids 4, 465 (1961)
57. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Механика сплошных сред, М., Гостехиздат, 1954, стр. 581
58. А. Н. Дремин, Г. А. Ададунов, О. К. Розанов. О детонации нитрометана вблизи предела. Доклады АН СССР, 1960, Т. 133, № 6
59. А. Н. Дремин, О. К. Розанов. О детонации смесей нитрометана с ацетоном Доклады АН СССР, 1961, Т. 139, № 1
60. Быковский Ф.А., Ждан С.А. Непрерывная спиновая детонация/ Рос.акад.наук, Сиб. отд-ние, Институт гидродинамики им.М.А.Лаврентьева.- Новосибирск:Изд-во СО РАН, 2013.-423 с.
61. Самарский А. А., Николаев Е. С. Методы решения сеточных уравнений. Главная редакция физико-математической литературы, М., 1978
62. Самарский А.А., Андреев В.Б. Разностные методы для эллиптических уравнений. - М.: Наука, 1976.
63. Годунов С. К., Забродин А. В., Иванов М. Я., Крайко А. Н., Прокопов Г. П. Численное решение многомерных задач газовой динамики. — М.: Наука, 1976. — 400 с.

64. Марков В.В. Численное моделирование образования многофронтной структуры детонационной волны // Доклады АН СССР. 1981. Т. 258. № 2. С. 158-163
65. Westbrook C.K., Dryer F.L. Chemical kinetic modeling of hydrocarbon combustion // Progress in Energy and Combustion Science. 1984. Vol. 10. No. 1. P. 1-57
66. Teodorczyk A., Lee J.H.S., Knystautas R. The structure of fast turbulent flames in very rough, obstacle-filled channels // International Symposium on Combustion. 1991. Vol. 23. No. 1. P. 735-741.
67. Markstein G. H. Nonsteady flame propagation. — Macmillan, New York, 1964. — P. 328.
68. Brown C. J., Thomas G. O. Experimental studies of shock-induced ignition and transition to detonation in ethylene and propane mixtures // Combustion and Flame. — 1999. — Vol. 117, no. 4. — P. 861—870.
69. Thomas G., Vambrey R., Brown C. Experimental observations of flame acceleration and transition to detonation following shock-flame interaction // Combustion Theory and Modelling. — 2001. — Vol. 5, no. 4. — P. 573—594.
70. Смирнов Н. Н., Никитин В. Ф., Шурехдели Ш. А. Переходные режимы распространения волн в метастабильных системах // Физика горения и взрыва. — 2008. — Т. 44, № 5. — С. 25—37.
71. Смирнов Н. Н., Никитин В. Ф. Влияние геометрии канала и температуры смеси на переход горения в детонацию в газах // Физика горения и взрыва. — 2004. — Т. 40, № 2. — С. 68—83.
72. <https://rostec.ru/news/rostekh-ispytal-demonstrator-dvigatelya-dlya-perspektivnykh-orbitalnykh-samoletov/>
73. Фролов С. М. Наука о горении и проблемы современной энергетики // Российский химический журнал. 2008. №6
74. Гидаспов В. Ю., Северина Н. С. Некоторые задачи физической газовой динамики. — М.: Изд-во МАИ, 2016. — 196 с.: ил.
75. Гардинер У. мл., Диксон-Льюис Г., Целнер Р., Трое Ю., Варнатц Ю., Хэнсон Р., Салимьян С, Френклах М., Буркат А. Пер. с англ. / Под ред. У. Гардинера, мл. - М.: Мир, 1988. - 464 с, ил.
76. Гидаспов В. Ю., Пирумов У. Г., Северина Н. С. Тестирование методики моделирования нестационарных течений газа с ударными и детонационными волнами 2011. Вестник Московского авиационного института, Т.18. №6
77. В.Ю.Гидаспов. Численное моделирование одномерного стационарного равновесного течения в детонационном двигателе. Электронный журнал “Труды МАИ”, 2015, № 83, 20 с.
78. 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.

79. В.Ю.Гидаспов. Вычислительный алгоритм решения задачи о распаде произвольного разрыва в равновесно-реагирующем газе// Математическое моделирование, 2006, т. 18, н. 8, стр. 64-76
80. В.Ю.Гидаспов, Д.С.Кононов. Численное моделирование сжигания топлива в стационарной детонационной волне в канале переменного сечения со сверхзвуковым потоком на входе и выходе. Труды МАИ. 2019. № 109.
81. Gidasпов V.Y., Kononov D.S. ON THE STABILITY OF A DETONATION WAVE IN A CHANNEL OF VARIABLE CROSS SECTION WITH SUPERSONIC INPUT AND OUTPUT FLOWS. Smart Innovation, Systems and Technologies. 2020. Т. 173. С. 91-106.
82. Пантелеев А.В., Летова Т.А. Методы оптимизации в примерах и задачах. М.: Высшая школа. 2008, с. 544.
83. Гидаспов В.Ю., Северина Н.С. Численное моделирование детонации пропано-воздушной горючей смеси с учетом необратимых химических реакций // ТВТ. 2017. Т. 55. № 5. С. 795.
84. Жуков В.П., Сеченов В.А., Стариковский А.Ю. Самовоспламенение метановоздушных смесей в широком диапазоне давлений // Физика горения и взрыва. 2003. Т. 39. № 5. С. 3.
85. Sod G. A Survey of Several Finite Difference Methods for Systems of Nonlinear Hyperbolic Conservation Laws // J. Comp. Phys. 1978. Vol. 27, pp. 1 – 31.
86. Kraposhin M. Bovtrikova A., Strijhak S. Adaptation of Kurganov-Tadmor Numerical Scheme for Applying in Combination with the PISO Method in Numerical Simulation of Flows in a Wide Range of Mach Numbers. Procedia Computer Science. vol. 66, 2015, pp. 43-52.
87. Weller H.G., Tabor, G., Jasak H., Fureby C. A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques. Comput. Phys., vol. 12, 1998, pp. 620–631.
88. 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.
89. Гардинер У. мл., Диксон-Льюис Г., Целнер Р. Химия горения. М.: Мир, 1988. 461 с.
90. 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.
91. 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.

92. Зельдович Я.Б. Теория горения и детонации газов. Москва: Изд-во АН СССР, 1944, 71 с.
93. Зельдович Я. Б. и др. Математическая теория горения и взрыва. - М, Наука, 1980.
94. Зельдович Я. Б., Компанеев А. С. Теория детонации. М.: ГИТТЛ, 1955. — 268 с.
95. 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.
96. 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.
97. Импульсные детонационные двигатели / Под ред. Фролова С.М. М.:Торус Пресс, 2006. 592 с.
98. Камзолов В. Н., Пирумов У. Г. Расчет неравновесных течений в соплах. Известия АН СССР. Механика жидкости и газа. — 1966. № 6. С. 25-33.
99. 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
100. Э. Оран, Дж. Борис. Численное моделирование реагирующих потоков. - М.: Мир, 1990, 661 с.
101. Физика взрыва / Под ред. Л. П. Орленко. М.: Физматлит, 2004. Т 1. — 832 с.: ил.
102. 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
103. Щелкин К.И. Неустойчивость горения и детонации газов. Успехи физических наук. – 1956. – Т. 87, № 2. – С. 273-302
104. Киреев В. И., Войновский А. С. Численное моделирование газодинамических течений. — М.: Изд-во МАИ, 1991. — 254 с.
105. A. Harten, P. D. Lax, and B. van Leer. On Upstream Differencing and Godunov–Type Schemes for Hyperbolic Conservation Laws. SIAM Review, 25(1):35–61, 1983
106. Х. Ф. Валиев, А. Д. Егорян, А. Н. Крайко. Устойчивость стационарных течений в каналах переменной площади с пересжатой детонационной волной и волной Чепмена-Жуге. Материалы XXX научно-технической конференции по аэродинамике: Материалы конференции, посвященной 150-летию со дня рождения С.А. Чаплыгина, п. Володарского, 25–26 апреля 2019 года. – п. Володарского: Центральный аэрогидродинамический институт им. профессора Н.Е. Жуковского, 2019. – С. 75-76.

107. Х. Ф. Валиев, А. Д. Егорян. Устойчивость одномерного стационарного течения с пересжатой детонационной волной в двигателеподобном канале. Модели и методы аэродинамики: Материалы Девятнадцатой международной школы-семинара, Евпатория, 04–11 июня 2019 года. – Евпатория: Центральный аэрогидродинамический институт им. профессора Н.Е. Жуковского, 2019. – С. 41-42.
108. Волков В.А., Мусин В.Р., Прохоров М.Б. Расчет температуры и равновесного состава продуктов сгорания при заданных плотности и внутренней энергии смеси. Сборник научных трудов. – М.: МАИ, 1983, с. 62-67
109. Пирумов У.Г. Математическое моделирование в проблемах охраны воздушного бассейна. - М.: Изд-во МАИ, 2001.340 с.
110. Ю. В. Туник, Г. Я. Герасимов, В. Ю. Левашов, М. С. Ассад, Эффективность детонационного горения паров керосина в соплах различной конфигурации, ТВТ, 2021, том 59, выпуск 4, 541–547
111. Троцюк А.В., Фомин П.А., Васильев А.А., Трубицын А.А. Двумерное моделирование структуры детонационной волны в метано-воздушных смесях. Вестник научного центра по безопасности работ в угольной промышленности, № 2, 2016, С. 72-81.
112. Фомин П.А., Троцюк А.В., Васильев А.А. Приведенная модель химической кинетики детонационного горения метана. Вестник научного центра по безопасности работ в угольной промышленности, №. 2, 2016, С. 45-56.
113. Васильев А.А. Ячеистые структуры многофронтной детонационной волны и инициирование (Обзор). Физика горения и взрыва, 2015, т. 51, № 1, с. 9-30
114. Быковский Ф.А., Ждан С.А., Ведерников Е.Ф. Параметры непрерывной детонации смесей метан/водород-воздух при добавлении воздуха в продукты сгорания. ФГВ. 2020. Т. 56, № 2. С. 83-94
115. Васильев А.А., Пинаев А.В., Фомин П.А., Троцюк А.В., Васильев В.А., Трубицын А.А., Трубицына Д.А. Оценки условий возбуждения и гашения взрывных волн при шахтных взрывах Вестник научного центра по безопасности работ в угольной промышленности, № 2, 2016, с. 91-105
116. Козлов П.В., Акимов Ю.В., Герасимов Г.Я., Левашов В.Ю. Воспламенение пропано-воздушной смеси за отраженной ударной волной при высоких давлениях. Теплофизика высоких температур, № 2, 2021, с 231-235.
117. Б. Е. Гельфанд, С. П. Медведев, С. В. Хомик, Г. Л. Агафонов, Самовоспламенение смесей водород-воздух за отраженными взрывными волнами, ТВТ, 2010, том 48, выпуск 3, 458–462

118. Егорян А.Д., Крайко А.Н. Сравнение воздушно-реактивных двигателей с медленным и детонационным горением. Изв. РАН. МЖГ. 2020. № 2. С. 123-137
119. Левин В.А., Туник Ю.В. Инициирование детонационного горения угольной пыли в метановоздушной смеси. Физика горения и взрыва. 1987. Т. 23, № 1. С.3-8.
120. Голуб В.В., Бакланов Д.И., Головастов С.В., Иванов К.В., Иванов М.Ф., Киверин А.Д., Володин В.В. Воздействие акустического поля на развитие пламени и переход в детонацию. Теплофизика высоких температур. 2010. Т. 48. № 6. С. 901-907.
121. 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. 258–263.
122. 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.
123. Ленкевич Д.А., Головастов С.В., Голуб В.В., Бочарников В.М., Бивол Г.Ю. Параметрическое исследование распространения детонации в узких каналах, заполненных смесью пропан-бутан-кислород. ТВТ. 2014. Т. 52. № 6. С. 916.
124. В. В. Власенко, А. А. Ширяева Проблемы оптимизации характеристик рабочего процесса в модельном импульсном детонационном двигателе бесклапанной схемы. Горение и взрыв. – 2011. – № 4. – С. 130-134.
125. Хмель Т.А., Лаврук С.А. Моделирование ячеистой детонации в двухфракционных нанодисперсных газозвесах частиц алюминия. Физика горения и взрыва. 2020. Т. 56. № 2. С. 73-82.
126. Кононов Д.С., Гидаспов В.Ю., Стрижак С.В. Реализация кинетических механизмов горения метана на примере расширения функциональных возможностей физико-химических библиотек совместно с решателем reactingPimpleCentralFoam. Труды ИСП РАН, том 33, вып. 6, 2021, стр. 271-280
127. Гидаспов В.Ю., Кононов Д.С., Северина Н.С. Моделирование воспламенения и детонации метано-воздушных смесей за отраженной ударной волной. Теплофизика высоких температур. 2020. Т. 58. № 6. С. 909-914.