

Лекция № 1

Введение в предмет. Краткое содержание курса.

Уткин Павел Сергеевич

к.ф.-м.н., доцент кафедры Вычислительной физики
с.н.с. Института автоматизации проектирования РАН

e-mail: utkin@icad.org.ru, pavel_utk@mail.ru

тел.: +7 (926) 2766560

Материалы по курсу находятся по адресу:
<http://fastproclab.16mb.com/Reactive-flows/>

Задачи горения в газовых и многофазных смесях



Газовая плита на кухне



Внутренняя баллистика



Объемно-детонирующие заряды взрывчатых веществ



Горение топлива в дизельном двигателе



Ракетные двигатели на твердом топливе



Взрывы на шахтах

Основные типы пламен

Горючее / окислитель	Движение потока	Примеры
Предварительно перемешанная смесь	Турбулентное	Двигатель внутреннего сгорания с искровым зажиганием; стационарные газовые турбины
	Ламинарное	Плоские пламена
Предварительно не перемешанная смесь	Турбулентное	Горение распыленного угля; двигатели самолетов; дизельные двигатели; (H ₂ /O ₂)-ракетные двигатели
	Ламинарное	Горение древесины; свечи

Варнатц Ю., Маас У., Диббл Р. Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ. – М.: Физматлит, 2006.

Классификация режимов горения по скорости распространения



- волны разрежения
- дозвуковая скорость распространения относительно исходной смеси (но возможно горение в сверхзвуковом потоке)
- механизм распространения связан с диффузией и теплопроводностью
- для воспламенения требуются доли мДж

- волны сжатия
- сверхзвуковая скорость распространения относительно исходной смеси
- самовоспламенение смеси вследствие адиабатического сжатия вещества за ударной волной
- для прямого инициирования требуются до кДж

Предпосылки открытия газовой детонации

Еще с пятнадцатого века людям было известно, что некоторые соединения, например, фульминат ртути или гремучая ртуть, способны подвергаться бурному химическому распаду при механическом воздействии, например, при ударе. Однако, долгое время не существовало соответствующего оборудования для наблюдения и определения скорости подобной быстрой волны горения. По-видимому, первым, кто определил скорость волны детонации в пироксилиновом порохе был Ф. Абель (1869).

Катастрофические явления в угольных шахтах

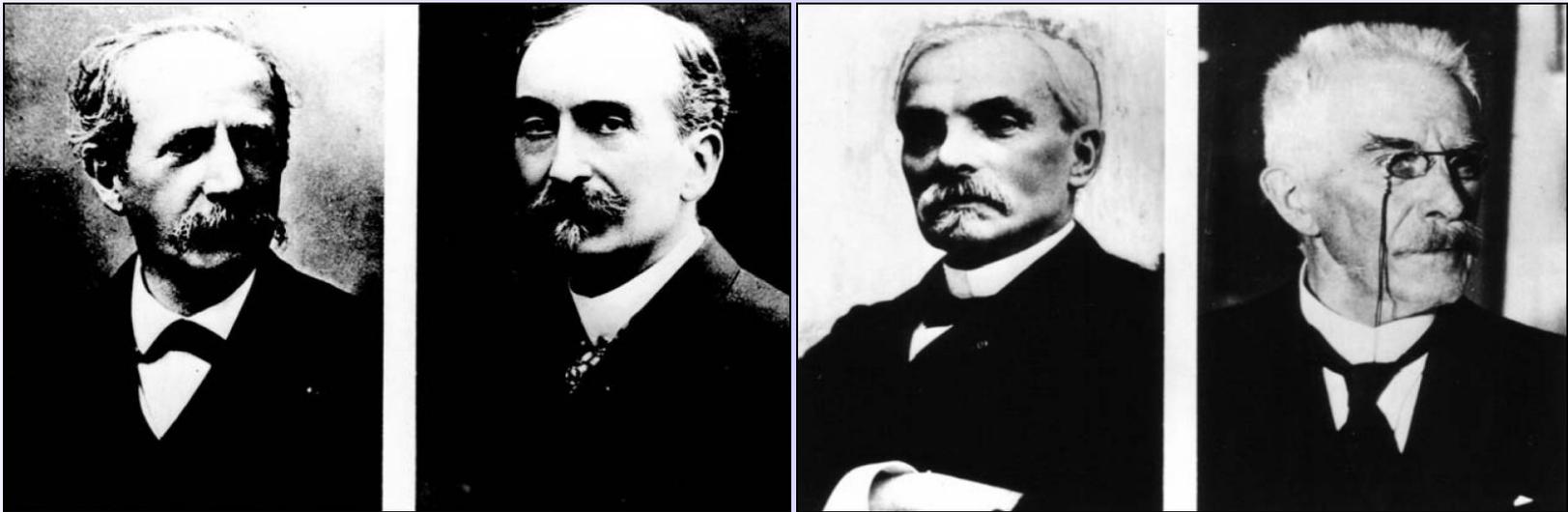


«Второй или Великий Взрыв на склоне». Опубликовано в *Canadian Illustrated News* 31 мая 1873 г., стр. 345. Взрывом на руднике Westville в Pictou Country 13 мая 1873 г. убило 60 человек. Обломки были разбросаны очень далеко, а взрывы и пожар продолжались несколько дней. (<http://www.gov.ns.ca/>)

Этап 1. Открытие газовой детонации.

1881 год – Маляр, Ле-Шателье, Бертло, Вьель (Франция) открыли явление детонации в газах.

Детонация (от франц. *détonner* – фальшивить, звучать не в тон) – распространение горения с равномерной, вполне определенной для каждого горючего состава, сверхзвуковой скоростью порядка 2 – 3 км/с (при атмосферном давлении).

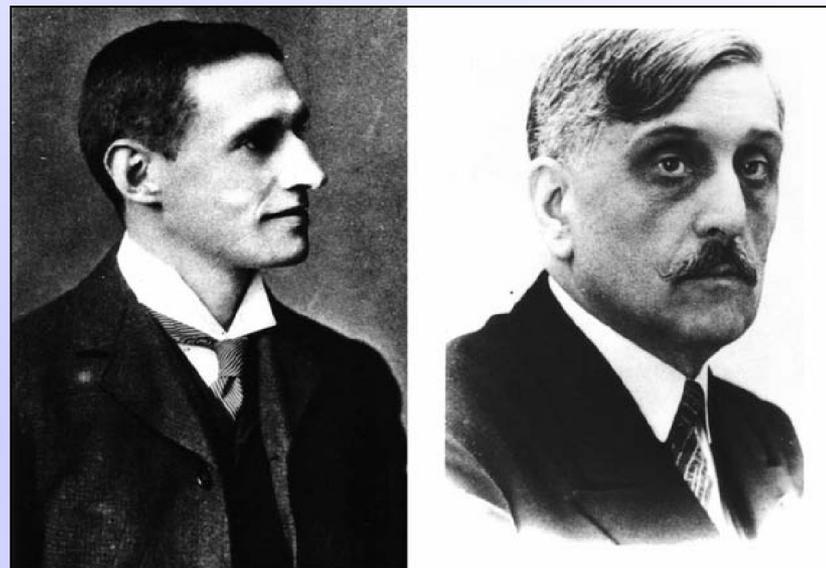
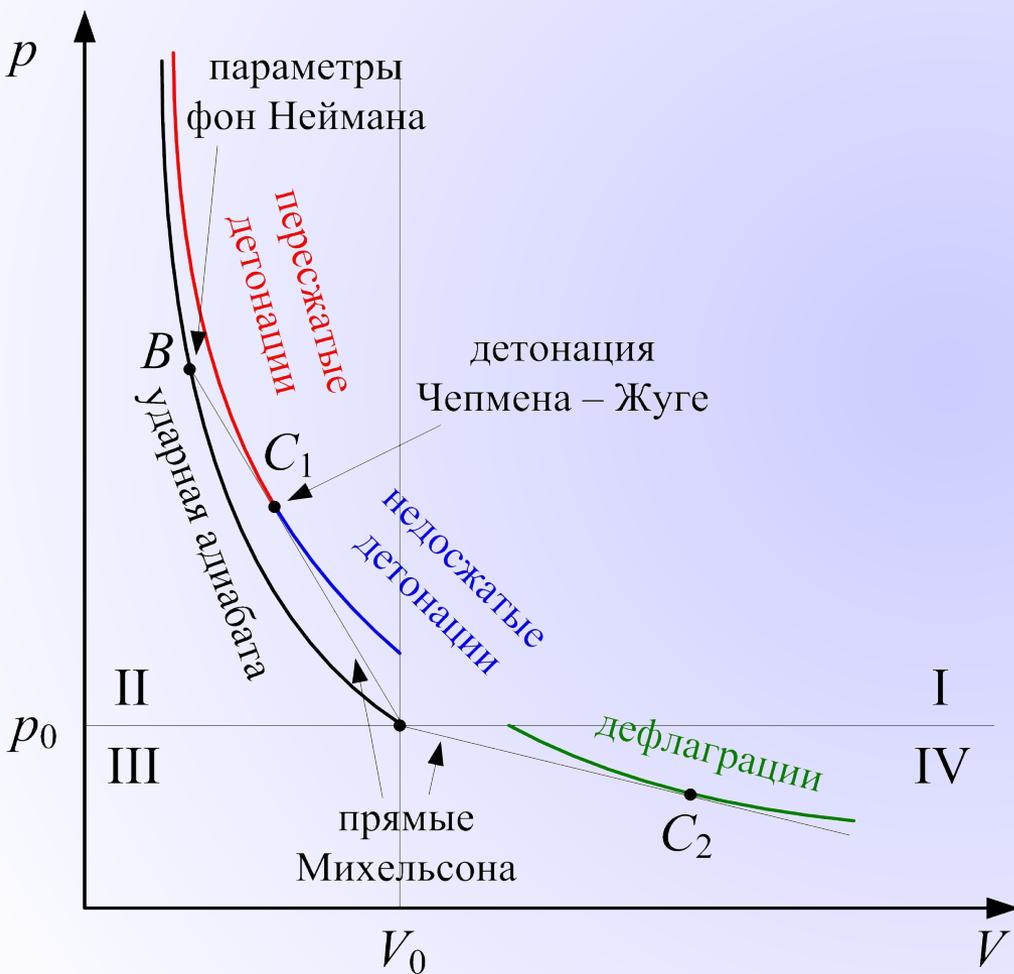


М. Бертло (1827 – 1907), П. Вьель (1854 – 1934), Э. Маляр (1833 – 1899), Г. Ле-Шателье (1850 – 1936)

Основной вопрос: какой физический процесс продвигает горение с такой большой скоростью?

Этап 2. Термодинамическая модель.

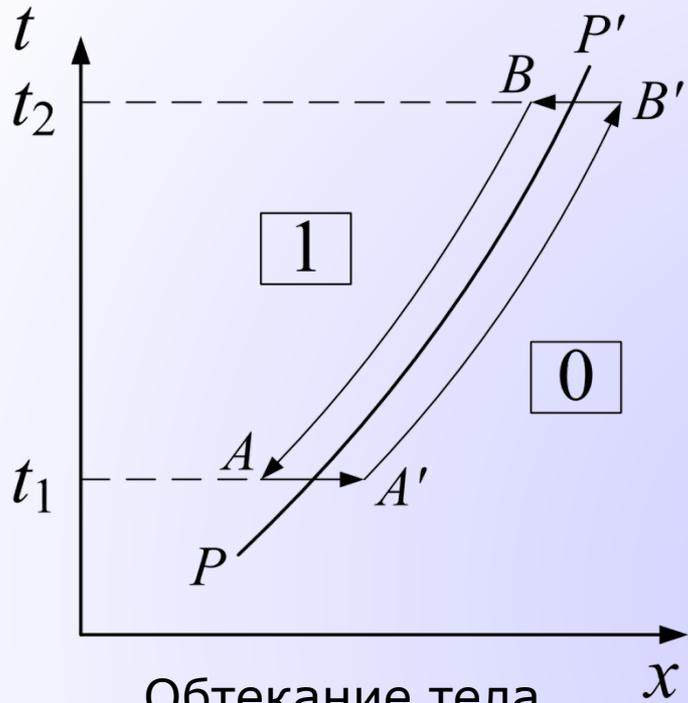
Конец XIX в. – начало XX в. – Михельсон, Чепмен, Жуге разрабатывают термодинамическую модель детонации, исходя из законов сохранения на сильном разрыве.



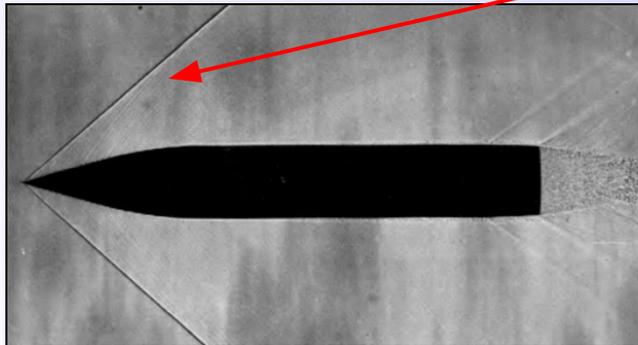
Д.Л. Чепмен (1869 – 1958) и Е. Жуге (1871 – 1943)

«По отношению к детонации мы имеем дело с чрезвычайно интересным случаем, в котором благодаря химическим и тепловым процессам условия постоянства скорости распространения в действительности выполняются» (Михельсон, 1893 г.)

Лекция № 2. Соотношения на разрыве.



Обтекание тела сверхзвуковым потоком



Ван-Дайк М. Альбом течений жидкости и газа. – М.: Мир, 1986.

Соотношения Ренкина – Гюгонио:

$$\rho_1(U_1 - D) = \rho_0(U_0 - D)$$

$$\rho_1(U_1 - D)^2 + p_1 = \rho_0(U_0 - D)^2 + p_0$$

$$\rho_1(U_1 - D) \left(e_1 + \frac{p_1}{\rho_1} + \frac{U_1^2}{2} \right) = \rho_0(U_0 - D) \left(e_0 + \frac{p_0}{\rho_0} + \frac{U_0^2}{2} \right)$$

Разрывы

Ударные волны

$$U_1 \neq U_0$$

$$p_1 \neq p_0$$

$$\rho_1 \neq \rho_0$$

Контактные – нет потока массы вещества через разрыв

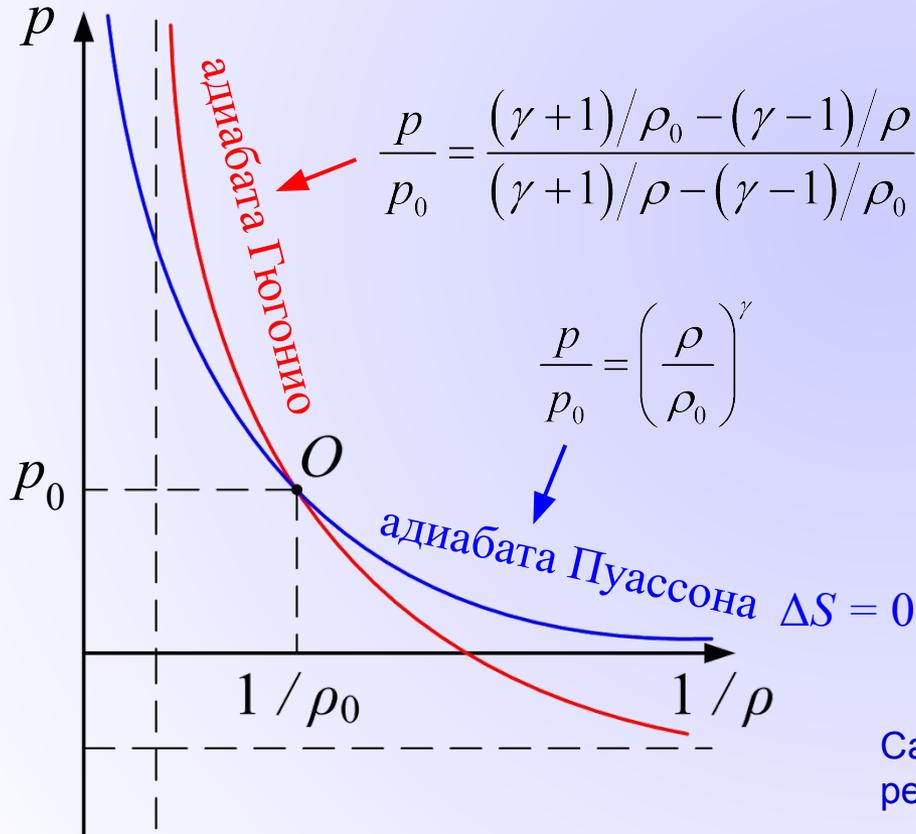
$$U_1 = U_0 = D$$

$$p_1 = p_0, \rho_1 \neq \rho_0$$

Лекция № 2. Элементарная теория ударных волн.

$$\left. \begin{aligned} \rho_1(U_1 - D) &= \rho_0(U_0 - D) \\ \rho_1(U_1 - D)^2 + p_1 &= \rho_0(U_0 - D)^2 + p_0 \\ \rho_1(U_1 - D) \left(e_1 + \frac{p_1}{\rho_1} + \frac{U_1^2}{2} \right) &= \rho_0(U_0 - D) \left(e_0 + \frac{p_0}{\rho_0} + \frac{U_0^2}{2} \right) \end{aligned} \right\} \rightarrow e_1(p_1, \rho_1) - e_0(p_0, \rho_0) = \frac{1}{2}(p_1 + p_0) \left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho_1} \right) + e = \frac{p}{\rho(\gamma - 1)}$$

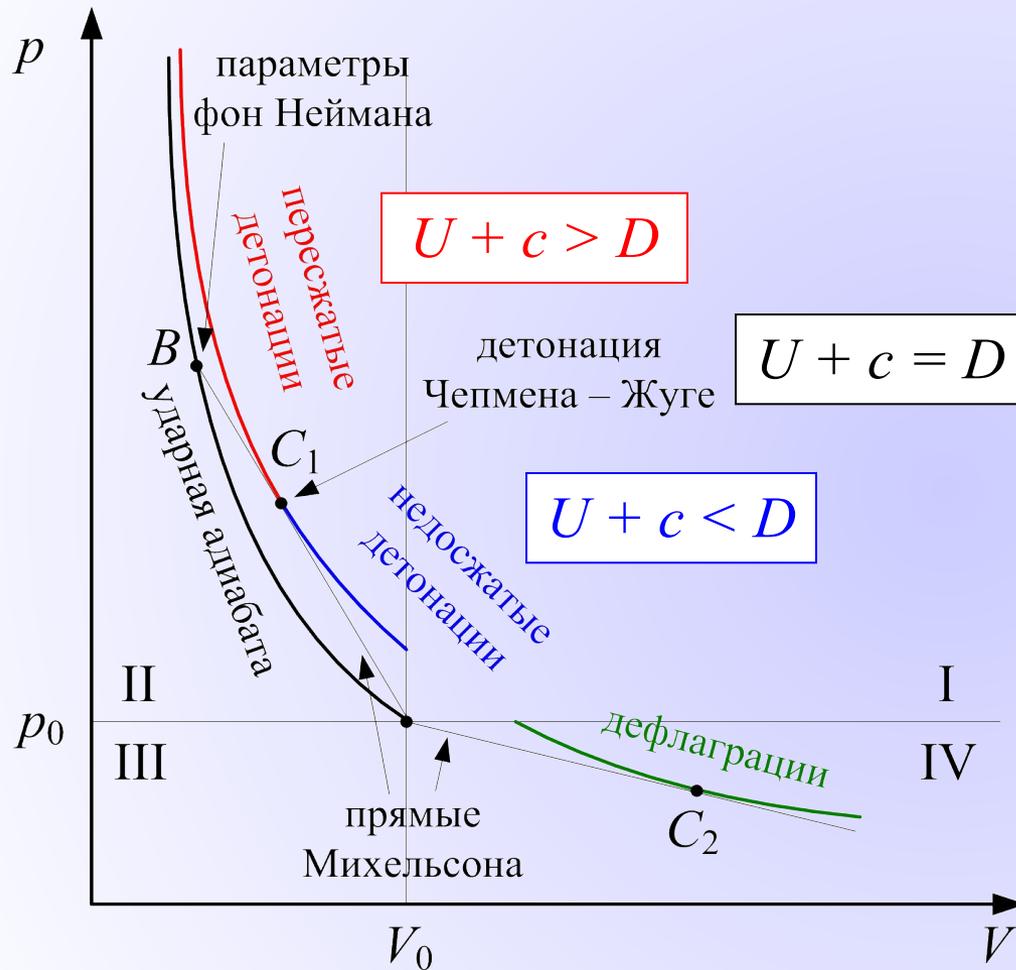
Адиабата Гюгонио



- В ударной волне газ нельзя сжать больше, чем в $(\gamma + 1) / (\gamma - 1)$ раз.
- Ударная волна бесконечно малой интенсивности распространяется относительно газа со скоростью звука.
- Фронт ударной волны распространяется относительно фона со сверхзвуковой скоростью.
- Теорема Цемплена: не существует ударных волн разрежения.

Самарский А.А., Попов Ю.И. Разностные методы решения задач газовой динамики. – М.: Наука, 1992.

Лекция № 3. Теория экзотермического скачка.



$$e^\circ(p, V) - e(p, V) = Q_{p, V} > 0$$

- Верхней точке касания прямой Михельсона в кривой Гюгонио C_1 соответствует минимальная скорость скачка для верхней ветви, а нижней точке касания C_2 – максимальная скорость скачка для нижней.
- Скорость скачка для всех точек верхней ветви кривой Гюгонио сверхзвуковая, а для нижней ветви – дозвуковая относительно исходного вещества.
- Приращение энтропии на фронте самоподдерживающейся детонационной волны всегда меньше, чем при сгорании в постоянном теплоизолированном объеме.

Митрофанов В.В. Детонация однородных и гетерогенных систем. – Новосибир.: Изд-во ИГиЛ СО РАН, 2003.

Лекция № 4. Расчет параметров Чепмена-Жуге.

Задание № 1

Продукты

Реагирующая

D смесь



p, η, T, ν

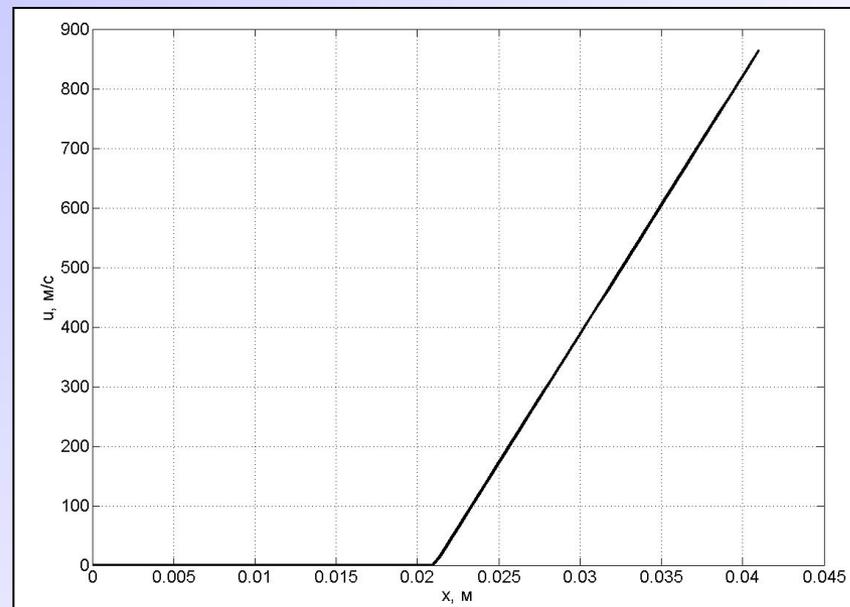
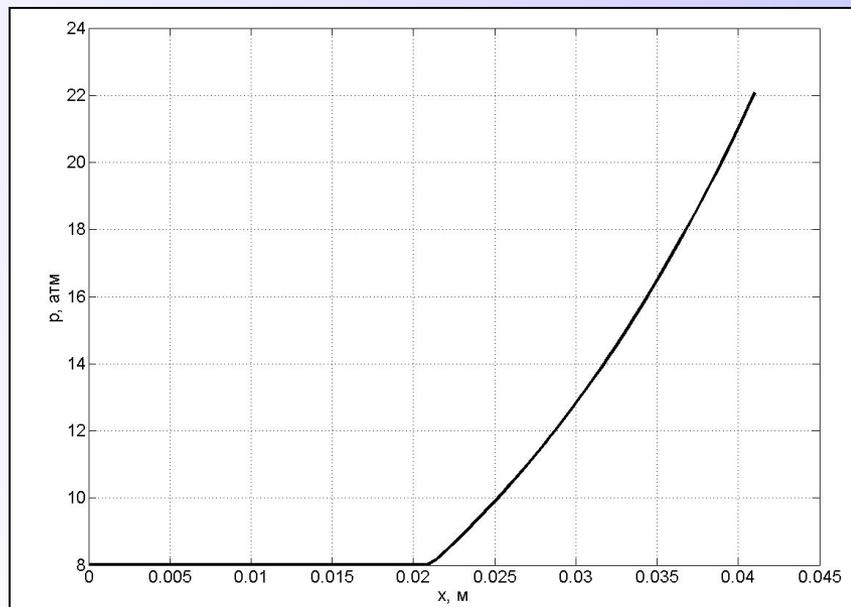
p_0, η_0, T_0

$$D \Big|_{p_0=0, \gamma=\gamma_0} = \sqrt{2Q(\gamma^2 - 1)}$$

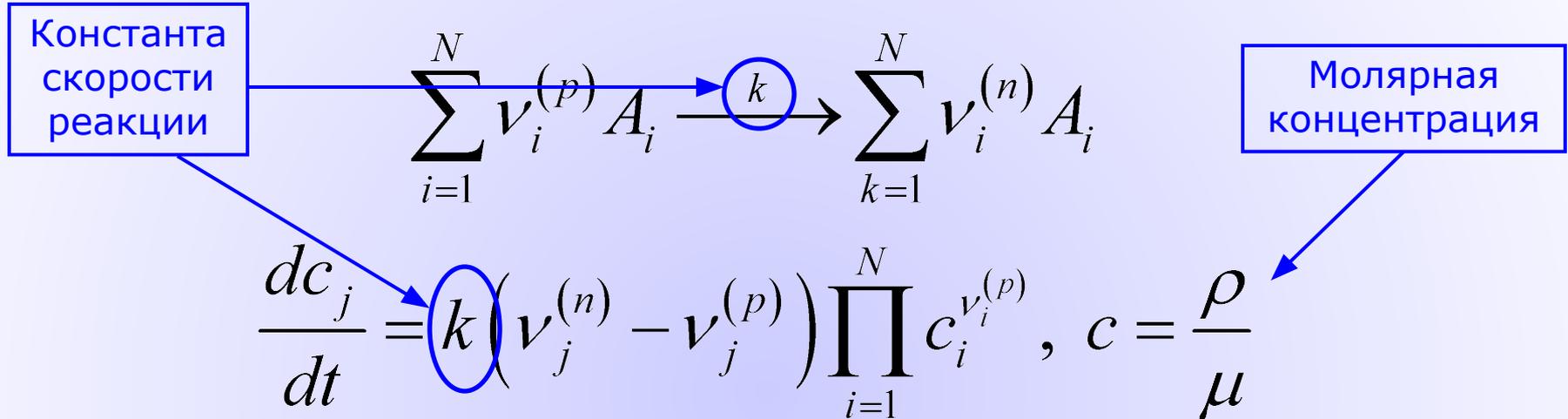
$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{p\eta}{\gamma(T)-1} - \frac{p_0\eta_0}{\gamma_0(T_0)-1} = \frac{1}{2}(p_0 + p)(\eta_0 - \eta) + Q, \\ \frac{p - p_0}{\eta_0 - \eta} = \frac{\gamma(T)p}{\eta}, \quad p = p(\rho, T), \\ D = \eta_0 \sqrt{\frac{p - p_0}{\eta_0 - \eta}}, \quad \nu = (\eta_0 - \eta) \sqrt{\frac{p - p_0}{\eta_0 - \eta}}. \end{array} \right.$$

- Характеристическая форма уравнений газовой динамики
- Волны Римана

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial U}{\partial x} + U \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial U}{\partial t} + U \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial t} + U \frac{\partial S}{\partial x} = 0 \end{cases}$$



Для элементарной реакции:



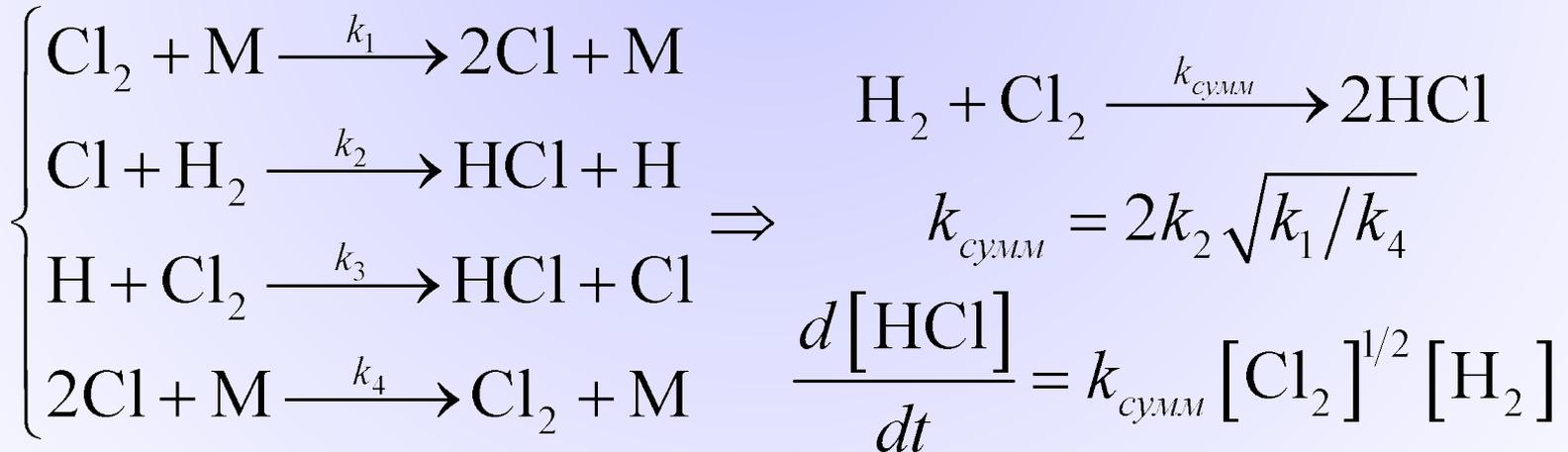
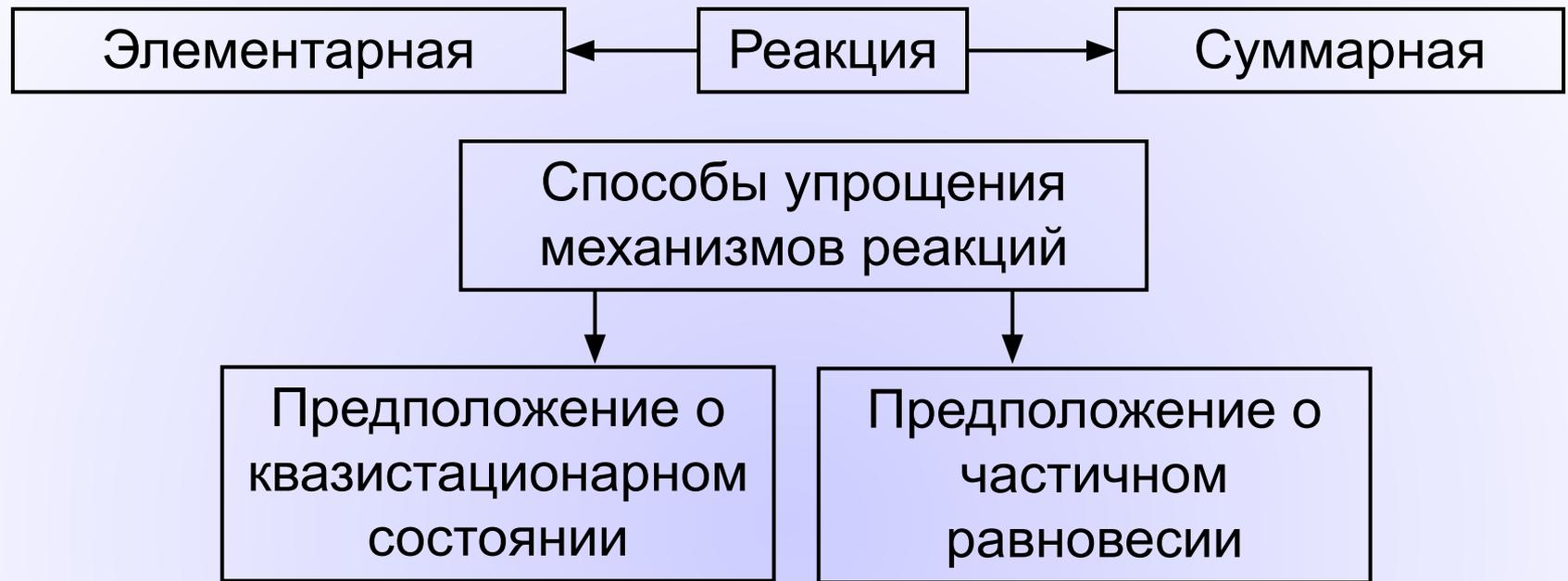
Для химических реакций характерна сильная и нелинейная зависимость констант скорости от температуры (закон Аррениуса, 1889 г.):

Константы

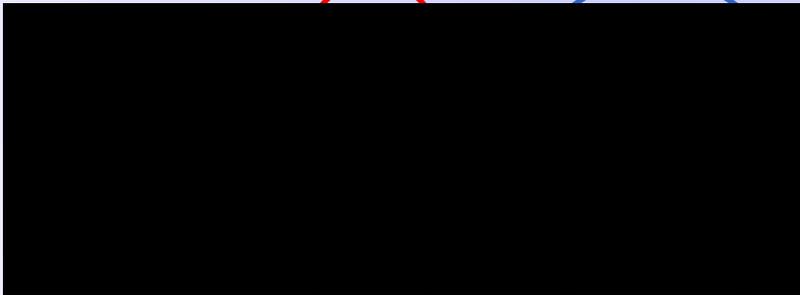
$$k = A T^b \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)$$

Энергия активации

Лекция № 7. Анализ механизмов протекания реакций.



Лекция № 8. Жесткая СОДУ химической кинетики.

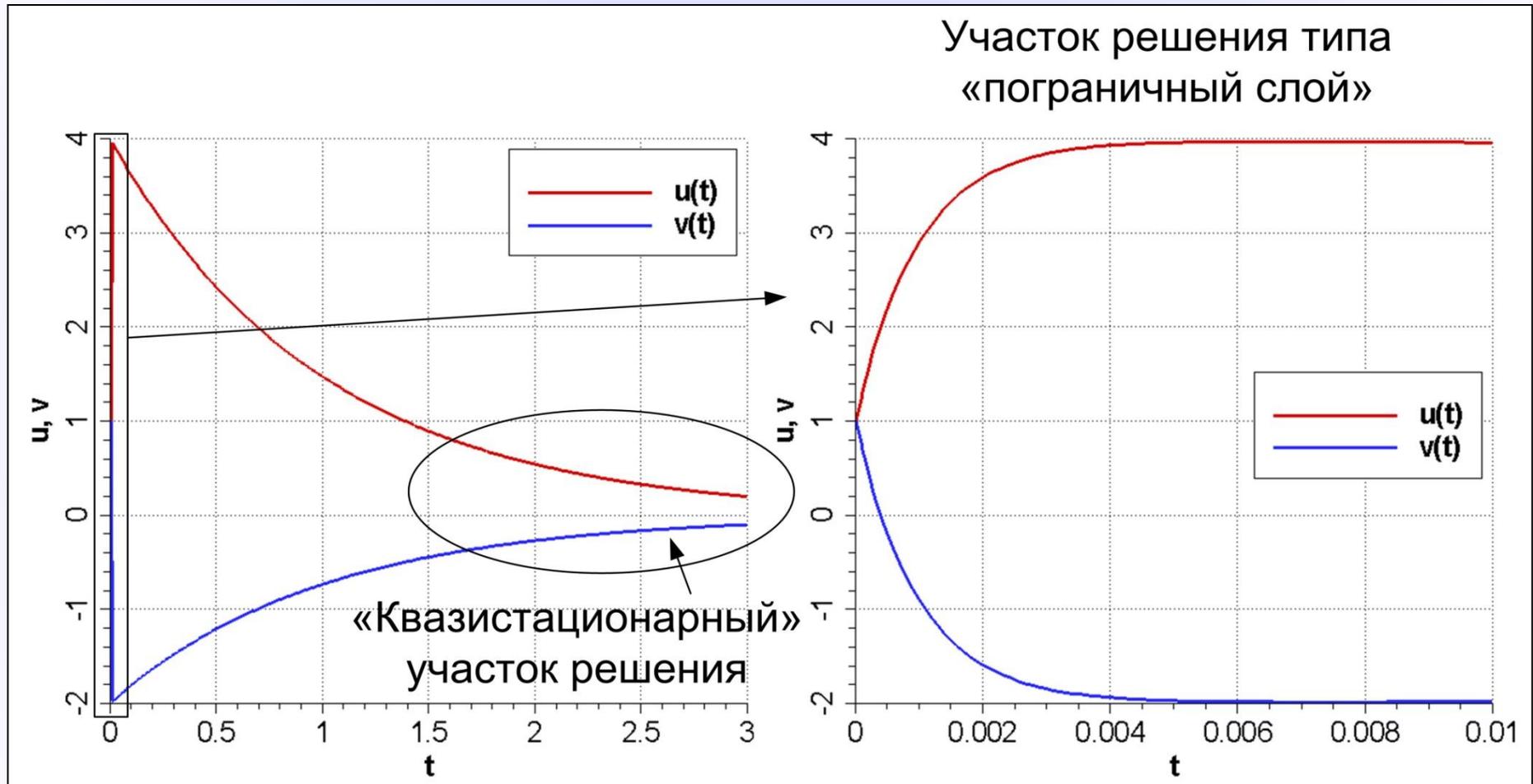


$$\frac{|\lambda_2|}{|\lambda_1|} \gg 1, \lambda_1, \lambda_2 < 0$$

медленно убывает **быстро убывает** **определение жесткости**

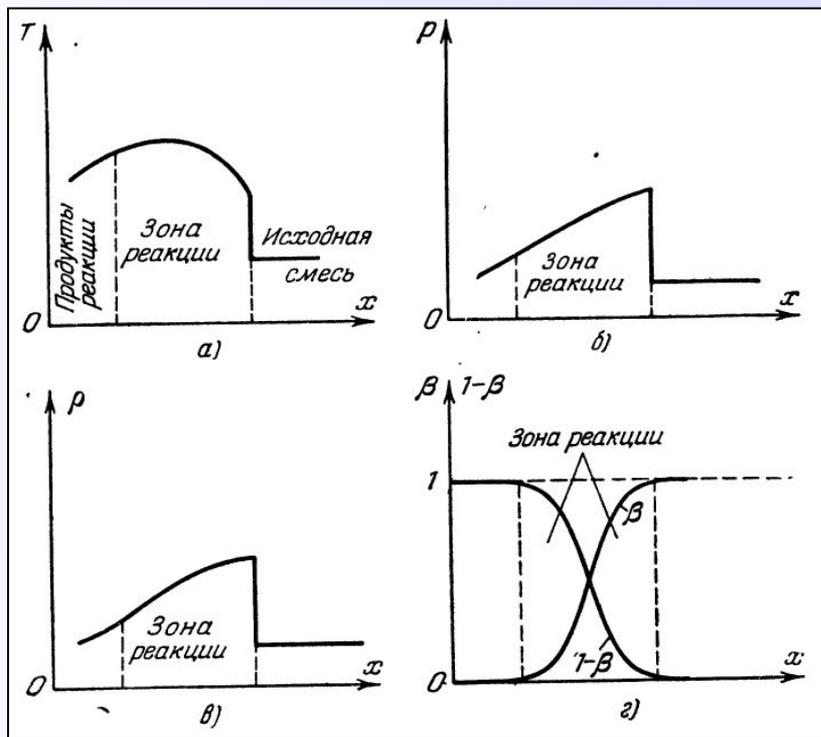
Петров И.Б., Лобанов А.И. Лекции по вычислительной математике: учебное пособие. – М.: Интернет-университет информационных технологий. Бином. Лаборатория знаний, 2006. – С. 218.

Лекция № 8. Жесткая СОДУ химической кинетики.



Этап 3. Модель Зельдовича – Неймана – Деринга.

- Модель обеспечивает существование области повышенного давления во фронте детонационной волны, так называемого «химпика», который наблюдается в опытах.
- Тем не менее, данная модель не в состоянии объяснить многомерные эффекты течений с волнами детонации.



Я.Б. Зельдович, А.С. Компанец Теория детонации. – М.: Госуд. изд-во технико-технич. лит-ры, 1955. – С. 87.

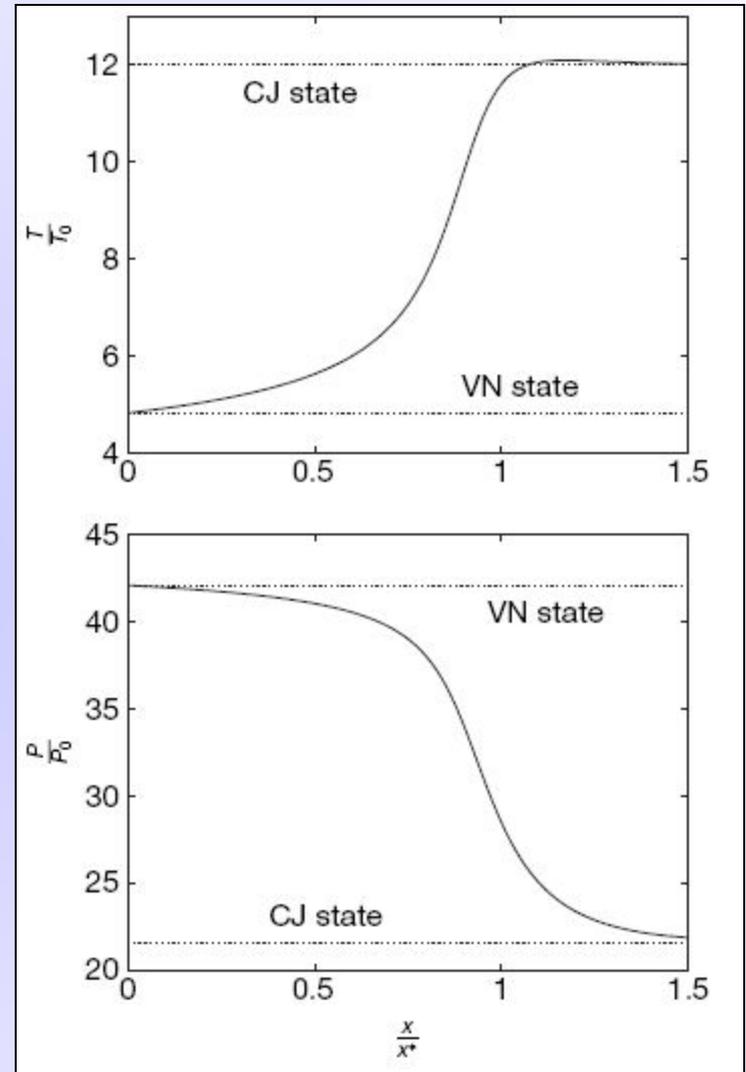


Я.Б. Зельдович (1914 – 1987), Дж. фон Нейман (1903 – 1957) и В. Деринг (1911 – 2006)

Лекция № 9. Модель Зельдовича-Неймана-Деринга.

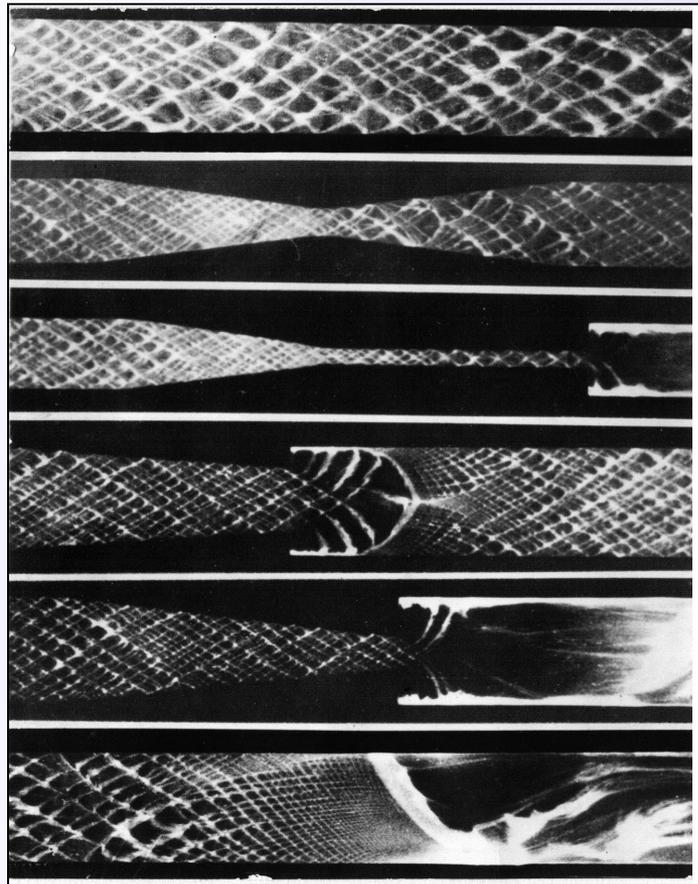
Задание № 2

$$\begin{cases} \frac{d}{dx}(\rho U) = 0 \\ \frac{d}{dx}(p + \rho U^2) = 0 \\ \frac{d}{dx}\left(\frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{p}{\rho} - \lambda Q + \frac{U^2}{2}\right) = 0 \\ \frac{d\lambda}{dx} = k(1-\lambda)e^{-E_a/RT} \end{cases}$$

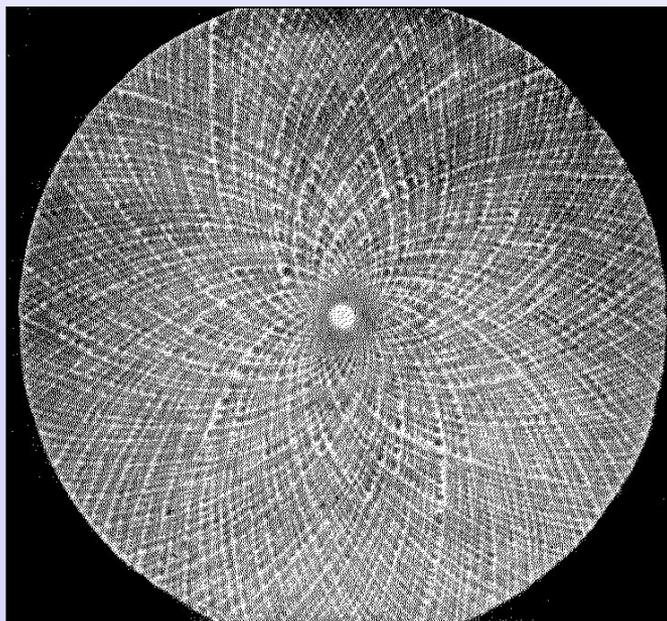


Lee J.H.S. The Detonation Phenomenon. – New York: Cambridge University Press, 2008. – P. 402.

Этап 4. Экспериментальные исследования.

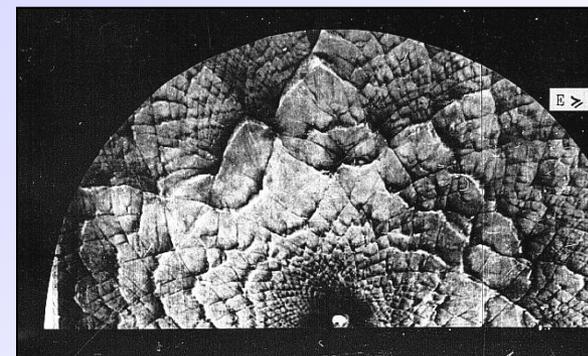
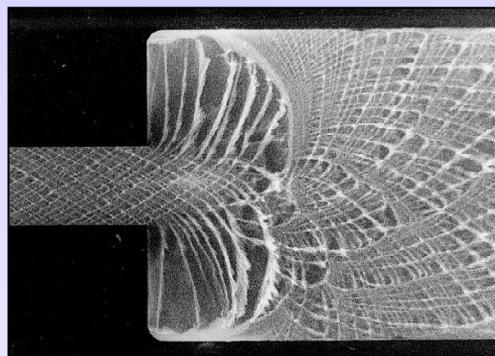


Следовые отпечатки
детонационной волны в плоских
каналах различной
конфигурации
Б.В. Войцеховский (1958 г.)



Опыт с расходящимся
детонационным фронтом.
Детонационная волна
создается в трубке и
выходит затем в центр
плоского круглого канала
малой глубины. По
детонационному фронту в
поперечном направлении
бежит серия светящихся
точек, следы которых
вычерчивают на пленке
траектории в виде
логарифмических
спиралей.
Р.И. Солоухин (1963 г.)

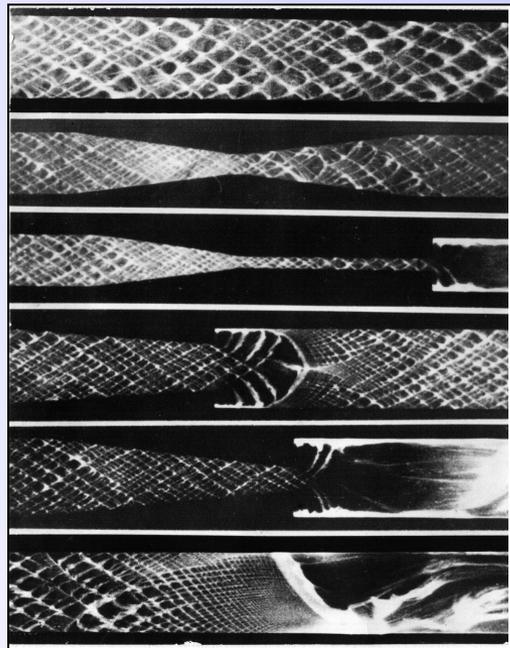
Опыты *А.А. Васильева* (ИГиЛ СО РАН) по дифракции волны
детонации из узкого канала в широкий и по прямому инициированию



Явление газовой детонации

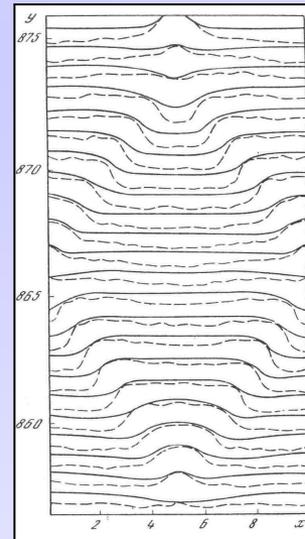
- **Детонация** – это гидродинамический волновой процесс распространения по веществу экзотермической реакции со сверхзвуковой скоростью.
- **Детонационная волна** – самоподдерживающийся ударный разрыв, за фронтом которого непрерывно инициируется химическая реакция вследствие нагрева при адиабатическом сжатии.
- Скорости детонационных волн в газовых смесях при нормальных условиях достигают **1 – 3 км/с**, давления на фронте – **1 – 5 МПа**.

Натурные эксперименты

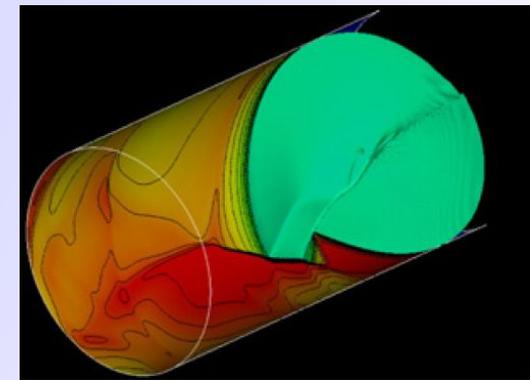


Фотографии детонационной волны в плоских каналах различной конфигурации
Войцеховский (1958 г.)

Вычислительные эксперименты



Многофронтная структура детонационной волны
В.В. Марков (1981 г.)



Структура спиновой детонации в круглой трубе
N. Tsuboi et al. (Japan, 2006)

Актуальность моделирования в задачах горения

Скорости волн быстрого горения в газовых смесях при нормальных условиях достигают **1 – 3 км/с**, давления на фронте – **10 – 50 атм**. Характерные давления в стволе при выстреле из артиллерийской установки достигают **3000 – 5000 атм**, характерное время выстрела составляет **30 – 50 мс**.

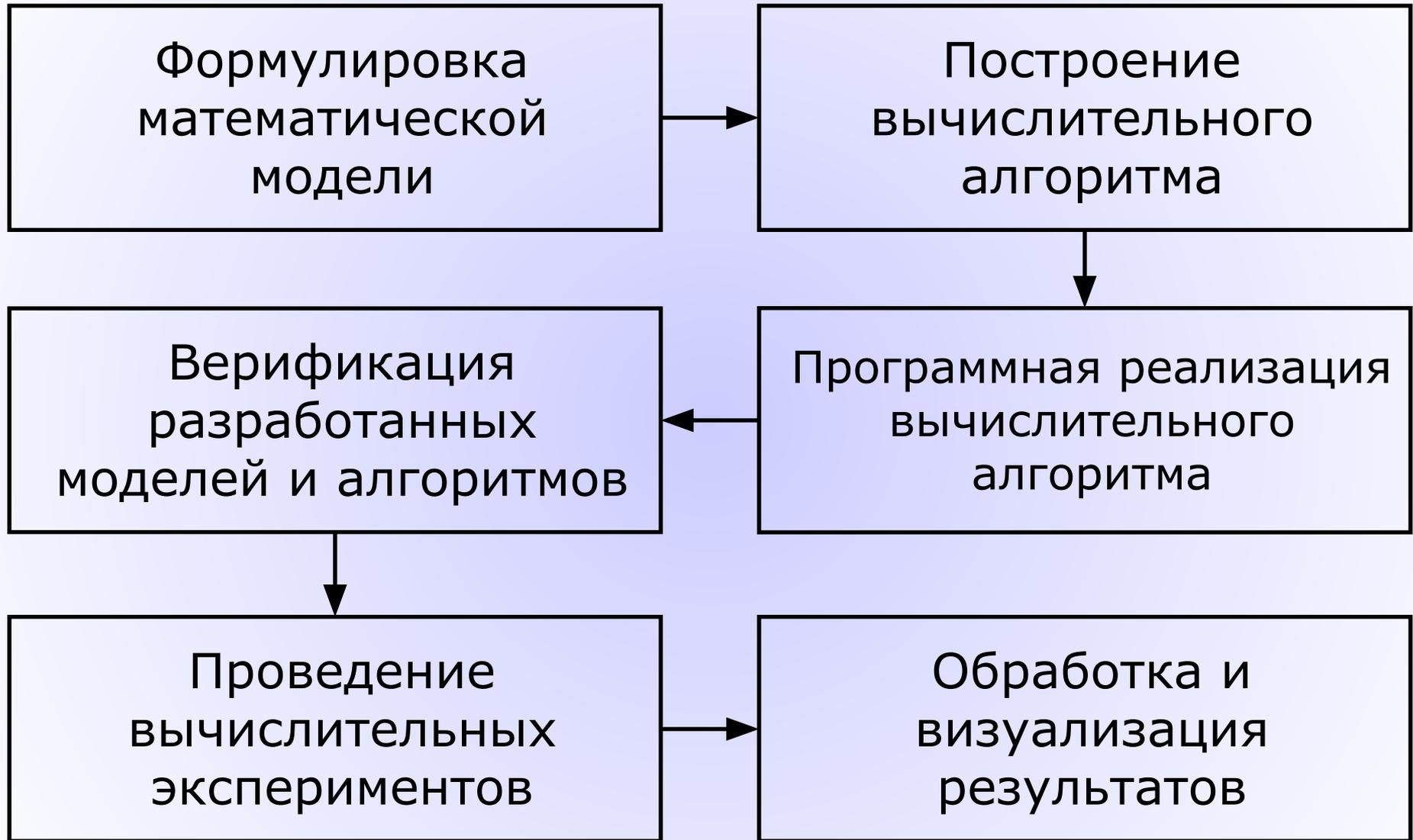


Сложности в проведении натурального эксперимента и принципиальная невозможность получения в натурном эксперименте многих характеристик процесса.



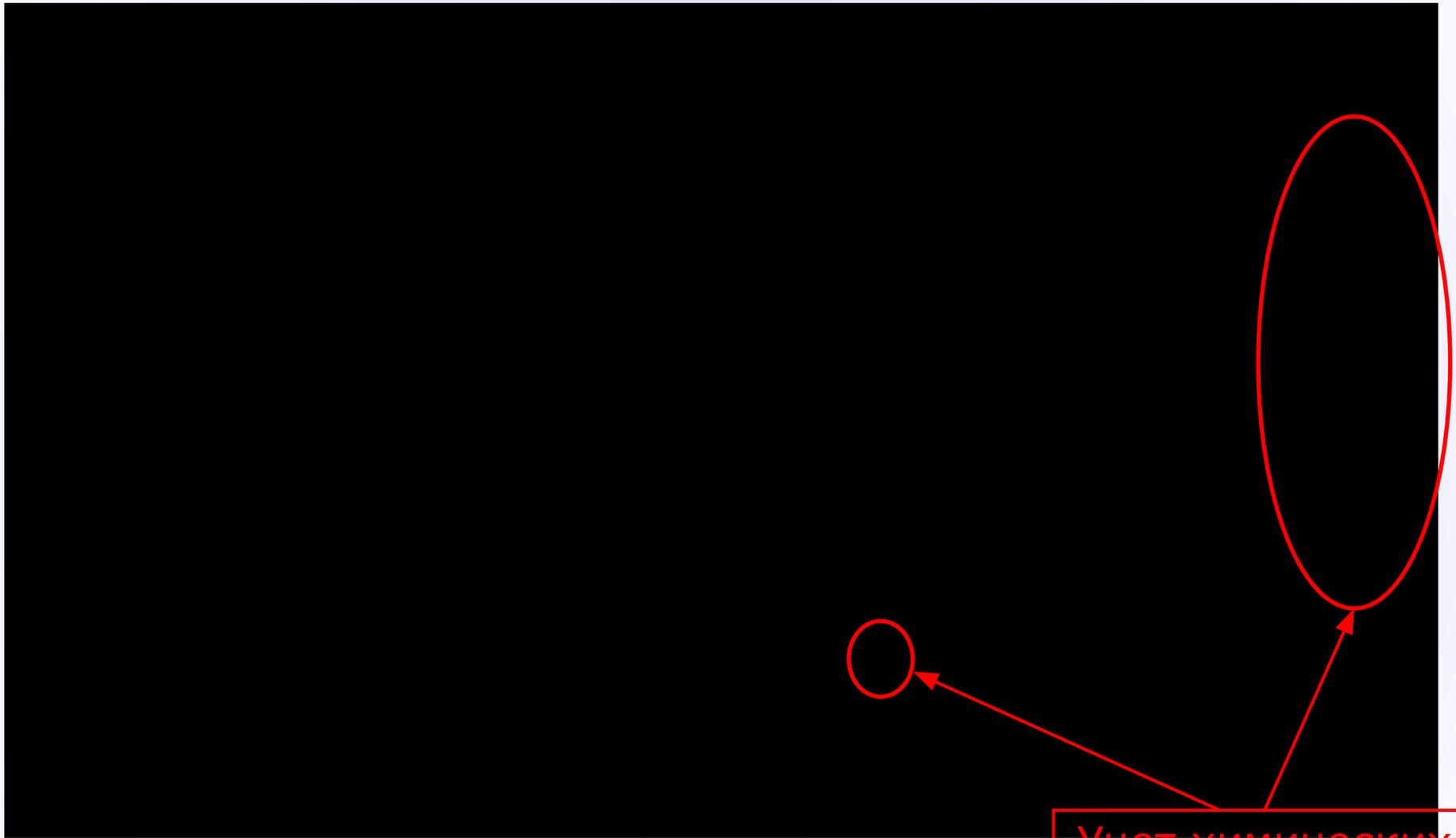
Необходимость построения математической модели явления, ее эффективной численной реализации и проведения **вычислительных экспериментов**.

Основные этапы проведения вычислительного эксперимента



Математические модели детонационных волн

1. Теория экзотермического скачка (алгебраические соотношения) – конец XIX – начало XX в.
2. Модель Зельдовича – Неймана – Деринга (система ОДУ) – 1940-ые годы
3. Многомерные уравнения газовой динамики с моделью кинетики химических реакций (система дифференциальных уравнений в частных производных)
 - Модель В.П. Коробейникова – В.А. Левина – 1970-ые годы
 - Реальная кинетика химических реакций – глобальная и детальная – настоящее время



Учет химических
реакций

Метод конечных объемов

Для произвольной компоненты вектора консервативных переменных:

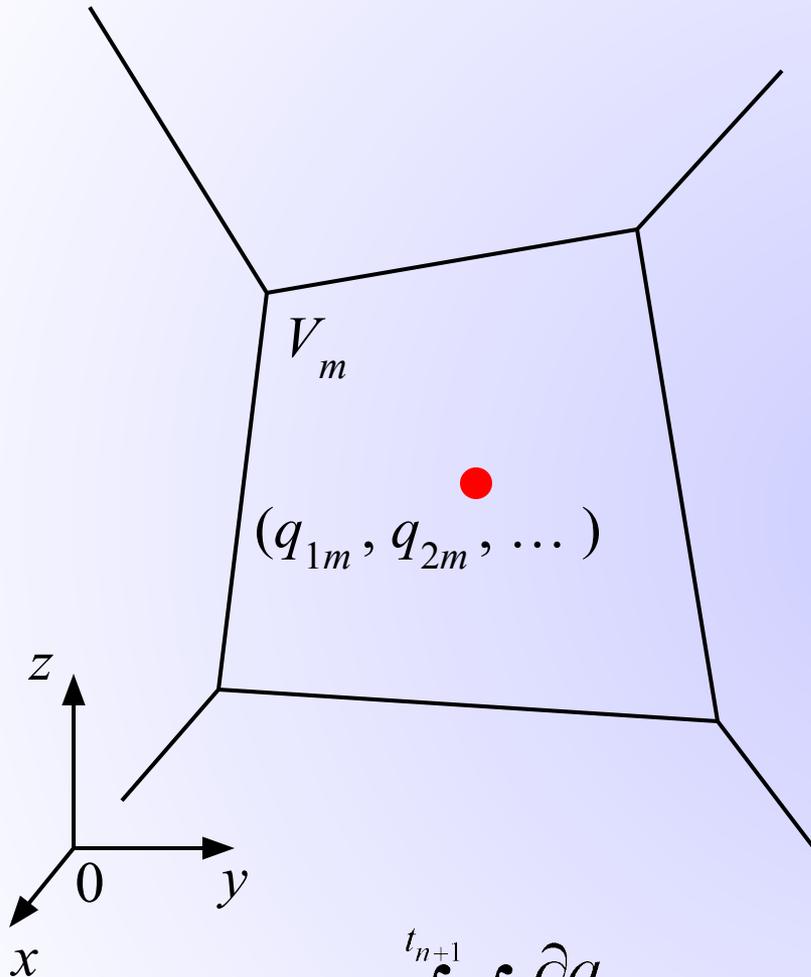
$$\frac{\partial q_m}{\partial t} + \frac{\partial f_{m1}}{\partial x} + \frac{\partial f_{m2}}{\partial y} + \frac{\partial f_{m3}}{\partial z} = 0$$

или

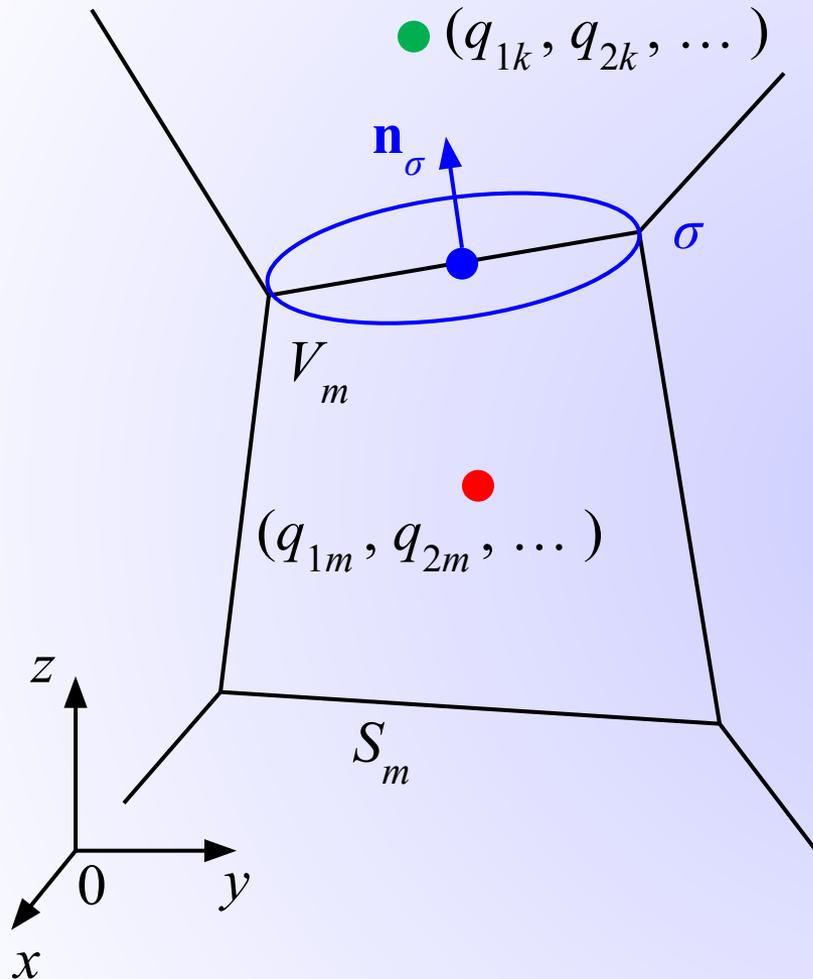
$$\frac{\partial q_m}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{f}_m) = 0$$

Проинтегрируем по объему ячейки расчетной сетки и по времени:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{V_m} \frac{\partial q_m}{\partial t} dt dV + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{V_m} \operatorname{div}(\mathbf{f}_m) dt dV = 0$$



Метод конечных объемов



Возьмем интеграл в первом выражении и применим теорему Остроградского-Гаусса к расчету интеграла во втором:

$$V_m (q_m^{n+1} - q_m^n) + \tau \int_{S_m} (\mathbf{f}_m, \mathbf{n}) dS = 0$$

Аппроксимируем поверхностный интеграл через сумму интегралов по граням ячейки:

$$\frac{q_m^{n+1} - q_m^n}{\tau} + \frac{1}{V_m} \sum_{\sigma} F_{\sigma} S_{\sigma} = 0$$

Основной вопрос – как определять численный поток?

$$F_{\sigma} = F_{\sigma}(\mathbf{q}_m, \mathbf{q}_k)$$

Дивергентная форма записи (в форме законов сохранения)

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial x} = \mathbf{0}$$

Вектор консервативных переменных

$$\mathbf{q} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho U \\ E \end{bmatrix}, \quad \mathbf{f} = \begin{bmatrix} \rho U \\ \rho U^2 + p \\ (E + p)U \end{bmatrix}$$

Вектор потоков

$$E = \frac{\rho U^2}{2} + \rho e, \quad e = \frac{p}{\rho(\gamma - 1)}$$

Полная энергия

Внутренняя энергия (уравнение состояния)

Лекция № 11. Система уравнений газовой динамики.

Матрица
Якоби

Характеристическая
форма

$$\det\left(\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{q}} - \lambda \mathbf{I}\right) = 0 \rightarrow \begin{cases} \lambda_1 = U + c \\ \lambda_2 = U \\ \lambda_3 = U - c \end{cases}$$

Скорость звука

$$c \triangleq \sqrt{p_\rho + \frac{pp_e}{\rho^2}}$$

Куликовский А.Г., Погорелов Н.В.,
Семенов А.Ю. Математические вопросы
численного решения гиперболических
систем уравнений. – М.: Физматлит, 2001.

Задача Коши для системы уравнений газовой динамики с разрывом первого рода в начальных данных

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial x} = \mathbf{0}$$

$$\mathbf{q} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho U \\ E \end{bmatrix}, \quad \mathbf{f} = \begin{bmatrix} \rho U \\ \rho U^2 + p \\ (E + p)U \end{bmatrix}$$

$$E = \frac{\rho U^2}{2} + \rho e, \quad e = \frac{p}{\rho(\gamma - 1)}$$

$$\mathbf{q}(x, 0) = \begin{cases} \mathbf{q}_R & \text{при } x > 0 \\ \mathbf{q}_L & \text{при } x < 0 \end{cases}$$

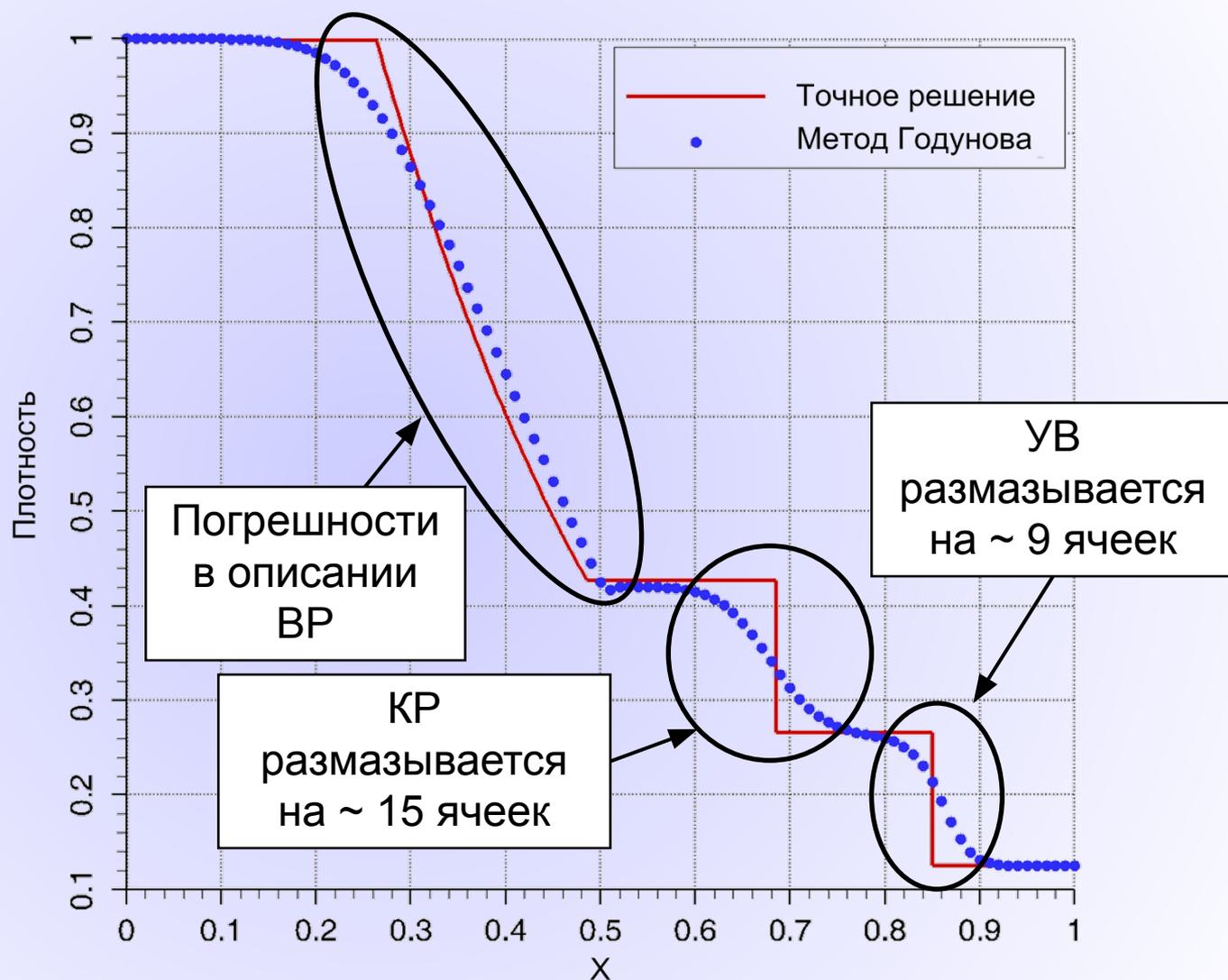
$$\left. \begin{array}{l} \rho_L = 1.0 \\ U_L = 0.0 \\ \rho_L = 1.0 \\ Y_L = 1.4 \end{array} \right| \left. \begin{array}{l} \rho_R = 0.1 \\ U_R = 0.0 \\ \rho_R = 0.125 \\ Y_R = 1.4 \end{array} \right.$$

$$\begin{array}{l} x_0 = 0.5 \\ t = 0.2 \end{array}$$

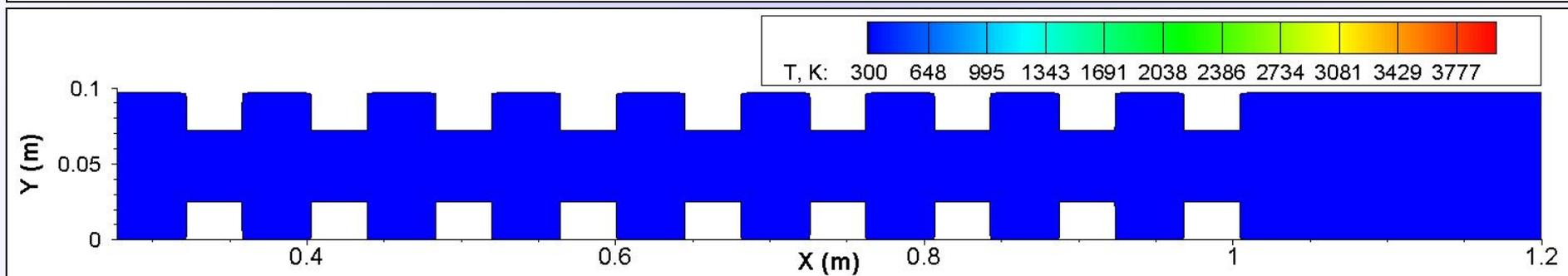
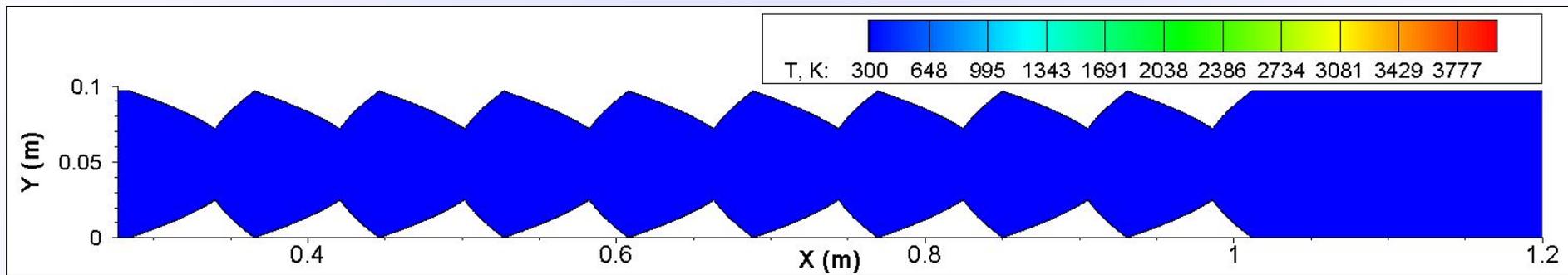
$$\begin{array}{l} \Delta x = 0.01 \\ \Delta t = 0.001 \end{array}$$

Схема С.К. Годунова:

- 1-ый порядок аппроксимации
- Монотонность
- Физичность результатов (есть исключения)

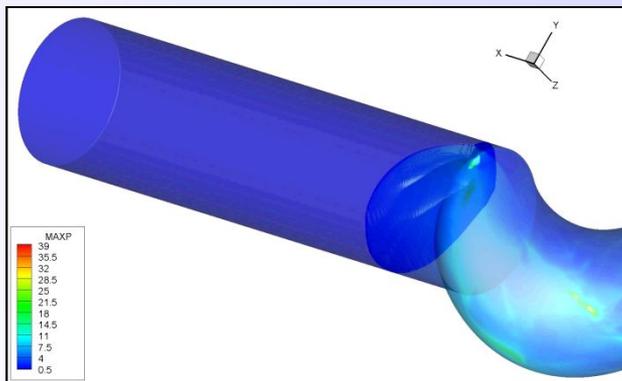


Численное исследование реагирующих потоков



Иницирование детонации в плоском канале с параболическим профилем стенок

Иницирование детонации в винтовой трубе



Semenov, I., Akhmedyanov, I., Lebedeva, A., Utkin, P. Three-dimensional numerical simulation of shock and detonation waves propagation in tubes with curved walls // Science and Technology of Energetic Materials. – 2011. – Vol. 72, No. 4. – P. 116 – 122.

Требования к выставлению оценки по курсу

Максимальный балл за семестр – 100. Из них:

- Первое задание – максимум 35 баллов (+ баллы за дополнительные необязательные задания). Из них: 10 баллов – в срок предоставлена работающая программа, которая «что-то считает, но где-то ошибка»; + 15 баллов – программа выдает правильный результат; + 10 баллов – предоставлен документ с описанием численного метода, анализом сходимости и результатов. Каждая следующая неделя задержки после срока сдачи – уменьшение максимума за задание на 10%. В случае обнаружения плагиата балл за задание будет делиться поровну между выявленными авторами.
- Второе задание – максимум 35 баллов (остальное аналогично первому);
- Ответ на теоретический вопрос на зачете – максимум 30 баллов.

Соответствие баллов и оценки:

80 – 100 – отлично;

50 – 79 – хорошо;

30 – 49 – удовлетворительно.